Практическое занятие в рамках Осенней ИТ-школы ОИЯИ-2024

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

1. Введение: Исследование поведения подынтегральной функции при различных значениях параметров, численное интегрирование и аппроксимация интегралов при различных значениях параметров

Особенности вычисления интеграла:

$$j_s = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos\varphi \exp\left(-\frac{d}{\cos(\varphi)}\right)\cos(r m_x \tan\varphi) d\varphi.$$

Подынтегральная функция на концах интрервала интегрирования не определена, однако

$$\lim_{\varphi \to \pm\frac{\pi}{2}} f(m_x, r, d, \varphi) = 0.$$

Параметры модели:

- d - безразмерная длина контакта, $d \in [0.1, 0.8]$;
- r - безразмерный параметр, определяющий величину спин-орбитального взаимодействия, $r \in [0.1, 2]$;
- G - отношение энергии Джозефсона к энергии магнитной анизотропии, $G \in [0.1, 10]$;
- α - диссипация Гилберта $\alpha \in [0.01, 0.2]$;
- $wF = 1$.

Функция, подлежащая определению, значения которой при вычислении интеграла играет роль параметра: m_x - компонета намагниченности.

Подключение необходимых библиотек

In [1]:
```
import matplotlib as mpl
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import pandas as pd
import seaborn as sns

%matplotlib inline

# use seaborn plotting defaults
sns.set()
sns.set(style="whitegrid")
```

Определим подынтегральную функцию

In [2]:
```
def funct_js(phi, mx, r, d):
    ''' Defines the integrand in the definition of current js,
        mx, r, d - parameters '''
    return (np.cos(phi) * np.exp(-d / np.cos(phi)) * np.cos(r*mx*np.tan(phi)
```

Параметры

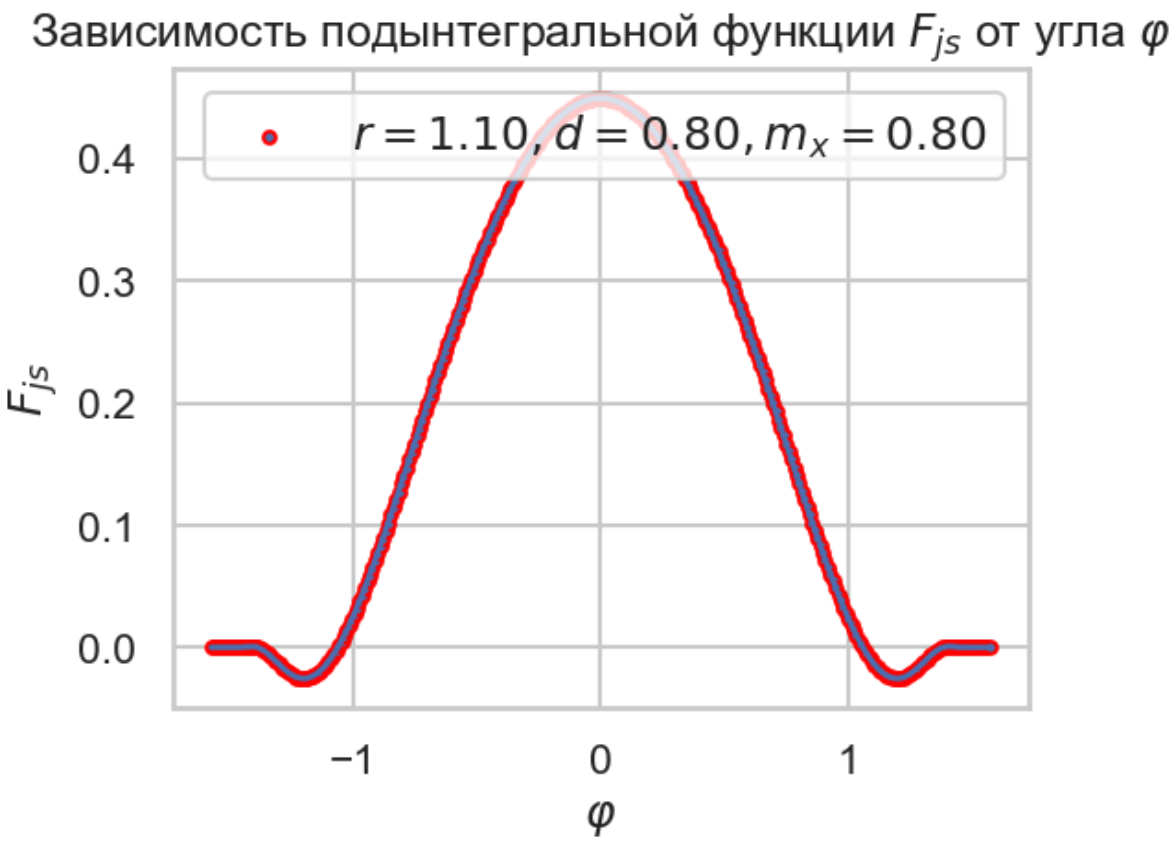
In [3]:
```
d = 0.8
r = 1.1
mx = 0.8
```

In [4]:
```
phi = np.linspace(-np.pi/2, np.pi/2, 300, endpoint=True)
```

In [5]:
```
y = funct_js(phi, mx, r, d)
```

In [6]:
```
# funct_js(phi, mx, r, d)
```

In [7]:
```
plt.figure(figsize=(4, 3), dpi=150)
plt.scatter(phi, y, edgecolor="red", s=10,
            label=r'$r=%6.2f, d=%6.2f, m_x=%6.2f$' % (r, d, mx))
plt.plot(phi, y)
plt.xlabel(r"$\varphi$")
plt.ylabel("$F_{js}$")

plt.title(r"Зависимость подынтегральной функции $F_{js}$ от угла $\varphi$")
plt.legend(loc='upper right', fontsize=12)

plt.show()
```



Численное интегрирование с использованием библиотеки SciPy

Воспользуемся функцией quad:

```
quad(func, a, b, args=(), full_output=0, epsabs=1.49e-08,
epsrel=1.49e-08, limit=50, points=None, weight=None, wvar=None,
wopts=None, maxp1=50, limlst=50, complex_func=False)[source]
```

Compute a definite integral. Integrate func from a to b (possibly infinite interval) using a technique from the Fortran library QUADPACK.

In [8]:
```
from scipy.integrate import quad
```

In [9]:
```
%%time
js = quad(funct_js, -np.pi/2, np.pi/2, args=(mx, r, d))
```

```
CPU times: user 3.52 ms, sys: 103 µs, total: 3.62 ms
Wall time: 4.1 ms
```

In [10]:
```
js
```

Out[10]:
```
(0.5616726952897881, 1.3014932435115616e-08)
```

In [11]:
```
Npoint = 1000
arr_mx = np.linspace(-1, 1, Npoint, endpoint=True)
```

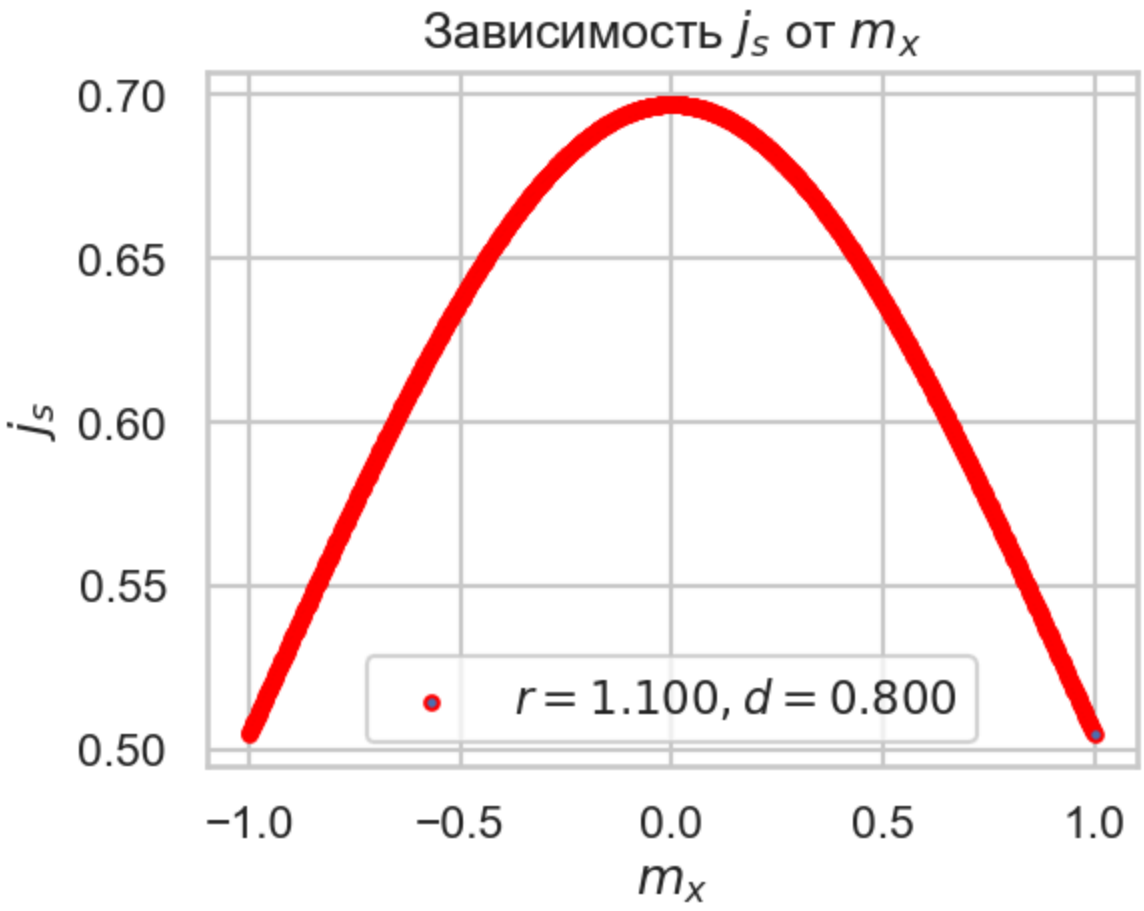
In [12]:
```
arr_js = np.zeros(Npoint, dtype=np.float64)
```

In [13]:
```
arr_err = np.zeros(Npoint, dtype=np.float64)
```

In [14]:
```
%%time
for ind in range(Npoint):
    mx = arr_mx[ind]
    arr_js[ind], arr_err[ind] = quad(funct_js, -np.pi/2, np.pi/2, args=(mx,
```

```
CPU times: user 798 ms, sys: 32.6 ms, total: 831 ms
Wall time: 856 ms
```

In [15]:
```
plt.figure(figsize=(4, 3), dpi=150)
plt.scatter(arr_mx, arr_js, edgecolor="red", s=10,
            label=r'$r=%6.3f, d=%6.3f$' % (r, d))
plt.xlabel("$m_x$")
plt.ylabel("$j_{s}$")

plt.title("Зависимость $j_s$ от $m_x$")
plt.legend()

plt.show()
```



Интерактивное управление в Jupyter Notebooks: библиотека *IPywidgets*

Для решения задач инерактивного управления параметрами воспользуемся библиотекой *IPywidgets* (См. ссылку). С помощью этой библиотеки блокнот Jupyter превращается в диалоговую панель, удобную для визуализации и работы с данными.

Для работа с *IPywidgets* создаем ячейку с:

```
import ipywidgets as widgets
from ipywidgets import interact, interact_manual, Label
```

Список доступных виджетов (*Widget List*) можно найти на сайте библиотеки.

Однако, в библиотеке есть удобная функция (*ipywidgets.interact*), котороя автоматически создает элементы управления пользовательского интерфейса (UI) для интерактивного изучения кода и данных. Это самый простой способ начать использовать виджеты IPython.

Мы воспользуемся конструкцией (декоратор):

@interact

которая автоматически создаёт и текстовое поле и слайдер для выбора колонки и числа. Декоратор смотрит на введённые параметры и создаёт панель диалогового управления, основываясь на типах данных.

Пример

In [16]:
```
import ipywidgets as widgets
from ipywidgets import interact, interact_manual, Label
```

In [17]:
```
%matplotlib widget
```

In [18]:
```
@interact(mx=1.0, r=0.1, d=0.8, phi=np.pi/8)
def funct_js(phi, mx, r, d):
    ''' Defines the integrand in the definition of current js,
        mx, r, d - parameters '''
    return (np.cos(phi) * np.exp(-d / np.cos(phi)) * np.cos(r*mx*np.tan(phi)
```

```
interactive(children=(FloatSlider(value=0.39269908169872414, description='ph
i', max=1.1780972450961724, min=-0…
```

In [19]:
```
@interact
def show_js_mx(mx=(-2.0, 2.0, 0.2), r=(0.1, 2.0, 0.1), d=(0.1, 0.8, 0.1)):
    phi = np.linspace(-np.pi/2, np.pi/2, 300, endpoint=True)
    fig = plt.figure(figsize=(4, 3))
    plt.scatter(phi, funct_js(phi, mx, r, d), edgecolor="red", s=10,
                label=r'$r=%6.3f, d=%6.3f$' % (r, d))
    plt.plot(phi, funct_js(phi, mx, r, d))
    plt.xlabel(r"$\varphi$", fontsize=14)
    plt.ylabel("$j_{s}$", fontsize=14)
    plt.title(r"Зависимость $f$ от угла $\varphi$", fontsize=16)
```

```
    plt.legend(loc='upper right', fontsize=13)
    plt.show()
```

```
interactive(children=(FloatSlider(value=0.0, description='mx', max=2.0, min=
-2.0, step=0.2), FloatSlider(value…
```

Для дальнейших исследований представляет интерес рассмотрение поведения функции тока j_s и интегралов I_x и I_y при различных значениях параметров.

In [20]:
```
@interact
def show_funct_js(r=(0.1, 4.0, 0.1), d=(0.1, 0.8, 0.1)):
    Npoint = 1000  # количество точек (число вызовов функции интегрирования)
    arr_mx = np.linspace(-1, 1, Npoint, endpoint=True)
    arr_js = np.zeros(Npoint, dtype=np.float64)
    arr_err = np.zeros(Npoint, dtype=np.float64)
    for ind in range(Npoint):
        mx = arr_mx[ind]
        # интегрируем для каждого
        arr_js[ind], arr_err[ind] = quad(funct_js, -np.pi/2, np.pi/2,
                                         args=(mx, r, d))

    fig = plt.figure(figsize=(8, 6))
    plt.scatter(arr_mx, arr_js, edgecolor="red", s=10,
                label=r'$r=%6.3f, d=%6.3f$' % (r, d))
    plt.xlabel("$m_x$ ", fontsize=14)
    plt.ylabel("$j_{s}$", fontsize=14)

    plt.title("Зависимость $j_s$  от параметра  $m_x$ ", fontsize=16)
    plt.legend(fontsize=13)

    plt.show()
```

```
interactive(children=(FloatSlider(value=2.0, description='r', max=4.0, min=
0.1), FloatSlider(value=0.4, descri…
```

Поведение интегралов I_x и I_y при различных значениях параметров

In [21]:
```
def funct_Ix(phi, mx, r, d):
    ''' Defines the integrand in the definition of current Ix,
        mx, r, d - parameters'''
    return (np.sin(phi) * np.exp(-d / np.cos(phi)) * np.sin(r*mx*np.tan(phi)
```

In [22]:
```
def funct_Iy(phi, mx, r, d):
    ''' Defines the integrand in the definition of current Iy,
        mx, r, d - parameters'''
    return (np.cos(phi) * np.exp(-d / np.cos(phi)) * np.cos(r*mx*np.tan(phi)
```

In [23]:
```
@interact
def show_funct_Ix(r=(0.1, 2.0, 0.1), d=(0.1, 0.8, 0.1)):
    Npoint = 1000  # количество точек (число вызовов функции интегрирования)
    arr_mx = np.linspace(-1, 1, Npoint, endpoint=True)
    arr_Ix = np.zeros(Npoint, dtype=np.float64)
```

```
    arr_err = np.zeros(Npoint, dtype=np.float64)
    for ind in range(Npoint):
        mx = arr_mx[ind]
        # интегрируем для каждого
        arr_Ix[ind], arr_err[ind] = quad(funct_Ix, -np.pi/2, np.pi/2,
                                         args=(mx, r, d))

    fig = plt.figure(figsize=(8, 6))
    plt.scatter(arr_mx, arr_js, edgecolor="red", s=10,
                label=r'$r=%6.3f, d=%6.3f$' % (r, d))
    plt.xlabel("$m_x$ ", fontsize=14)
    plt.ylabel("$I_{x}$", fontsize=14)

    plt.title("Зависимость $I_{x}$  от параметра  $m_x$ ", fontsize=16)
    plt.legend(fontsize=13)

    plt.show()
```

```
interactive(children=(FloatSlider(value=1.0, description='r', max=2.0, min=
0.1), FloatSlider(value=0.4, descri…
```

In [24]:

```
@interact
def show_funct_Iy(r=(0.1, 2.0, 0.1), d=(0.1, 0.8, 0.1)):
    Npoint = 1000  # количество точек (число вызовов функции интегрирования)
    arr_mx = np.linspace(-1, 1, Npoint, endpoint=True)
    arr_js = np.zeros(Npoint, dtype=np.float64)
    arr_err = np.zeros(Npoint, dtype=np.float64)
    for ind in range(Npoint):
        mx = arr_mx[ind]
        # интегрируем для каждого
        arr_js[ind], arr_err[ind] = quad(funct_Iy, -np.pi/2, np.pi/2,
                                         args=(mx, r, d))

    fig = plt.figure(figsize=(8, 6))
    plt.scatter(arr_mx, arr_js, edgecolor="red", s=10,
                label=r'$r=%6.3f, d=%6.3f$' % (r, d))
    plt.xlabel("$m_x$ ", fontsize=14)
    plt.ylabel("$I_{y}$", fontsize=14)

    plt.title("Зависимость $I_{y}$  от параметра  $m_x$ ", fontsize=16)
    plt.legend(fontsize=13)

    plt.show()
```

```
interactive(children=(FloatSlider(value=1.0, description='r', max=2.0, min=
0.1), FloatSlider(value=0.4, descri…
```

Аппроксимация вычисленных интегралов для $m_x \in [-1, 1]$

Для аппроксимации интеграла воспользуемся модулем *scipy.optimize* библиотеки Scipy, функцией curve_fit:

curve_fit(f, xdata, ydata, p0=None, sigma=None,
absolute_sigma=False, check_finite=None, bounds=(-inf, inf),
method=None, jac=None, *, full_output=False, nan_policy=None,
**kwargs)[source]

❓ Какую функцию выбрать?

Рассмотрим многочлены:

$$P_n(x), n = 2, 4, \ldots.$$

In [25]:
```
from scipy.optimize import curve_fit
```

In [26]:
```
def func_P2(x, a, b, c):
    '''Defines a polynomial of the second degree'''
    return a*x*x + b*x + c
```

In [27]:
```
# область изменения параметра mx
xnew = np.linspace(-1, 1, 2000, endpoint=True)
```

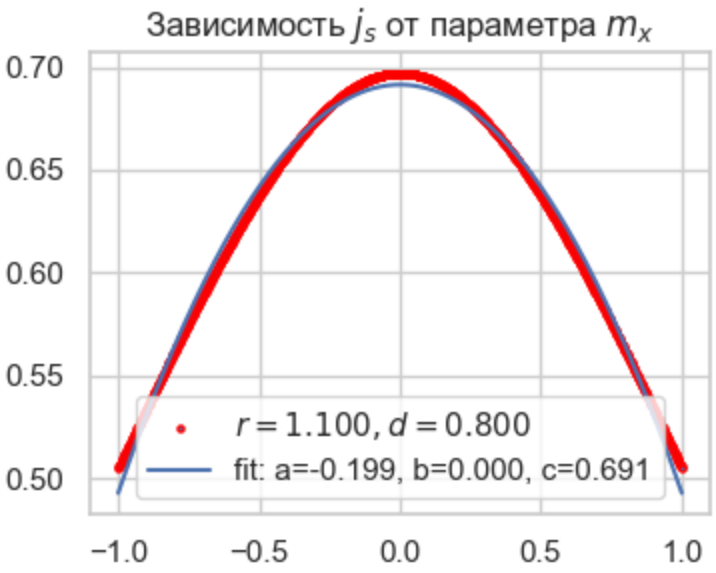
In [28]:
```
# значения параметров
d = 0.8
r = 1.1
# массивы
Npoint = 1000
arr_mx = np.linspace(-1, 1, Npoint, endpoint=True)
arr_js = np.zeros(Npoint, dtype=np.float64)
arr_err = np.zeros(Npoint, dtype=np.float64)
# вычисление интегралов
for ind in range(Npoint):
    mx = arr_mx[ind]
    arr_js[ind], arr_err[ind] = quad(funct_js, -np.pi/2, np.pi/2,
                                     args=(mx, r, d))
```

In [29]:
```
# popt: optimal values for the parameters a, b, c
popt, pcov = curve_fit(func_P2, arr_mx, arr_js)
```

In [30]:
```
# Deviation error on parameters a, b, c
perr = np.sqrt(np.diag(pcov))
```

In [31]:
```
plt.figure(figsize=(4, 3))
plt.scatter(arr_mx, arr_js, edgecolor="red", s=5,
            label=r'$r=%6.3f, d=%6.3f$' % (r, d))
plt.plot(arr_mx, func_P2(arr_mx, *popt), 'b-',
         label='fit: a=%5.3f, b=%5.3f, c=%5.3f' % tuple(popt))
plt.xlabel("$m_x$")
plt.ylabel("$j_{s}$")

plt.title("Зависимость $j_s$ от параметра $m_x$")
plt.legend()

plt.show()
```

Figure



Аппроксимация многочленом степени $n > 2$

Для решения задачи аппроксимации возможно применить различные подходы, например, реализованный в библиотеке Numpy polyfit или подход в библиотеке Scipy: scipy.odr.polynomial, который и применим далее:

```
from scipy import odr
poly_model = odr.polynomial(order)
```
Factory function for a general polynomial model.

Подробнее о методе *ODR* (Orthogonal distance regression) Можно прочитать в документации.

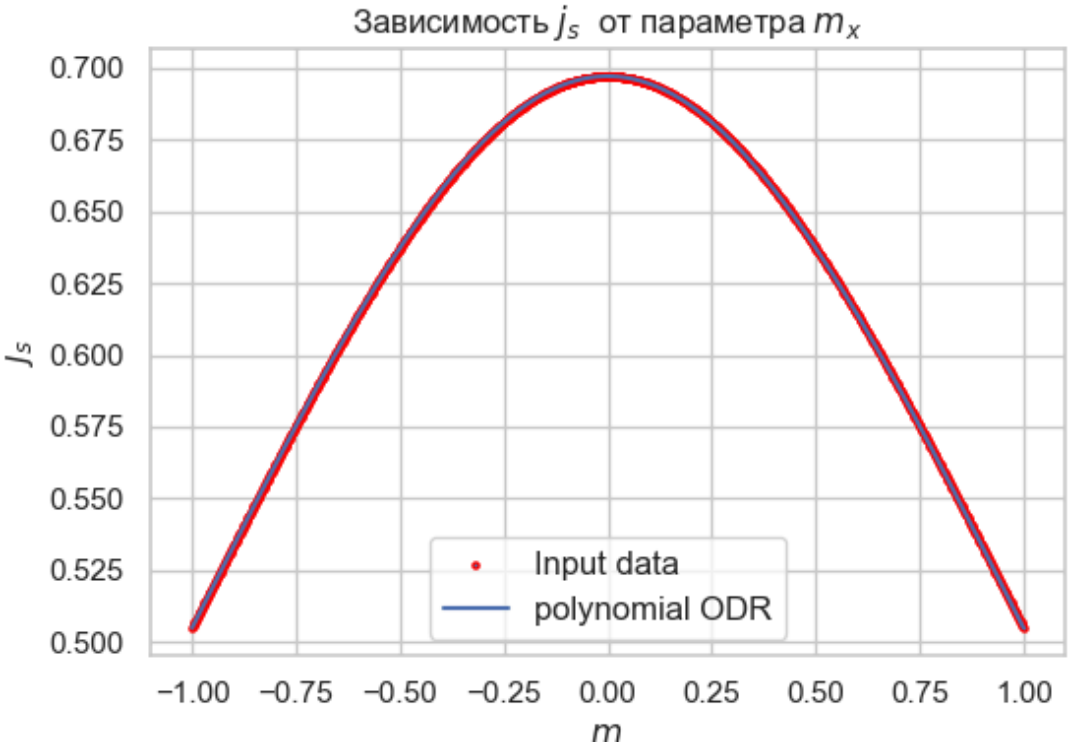
In [32]:
```
from scipy import odr
```

In [33]:
```
# Using the 8th order polynomial model
poly_model = odr.polynomial(8)
data = odr.Data(arr_mx, arr_js)
odr_obj = odr.ODR(data, poly_model)

# Running ODR fitting
output = odr_obj.run()

poly = np.poly1d(output.beta[::-1])
poly_y = poly(arr_mx)
```

In [34]:
```
plt.figure(figsize=(6, 4))
plt.scatter(arr_mx, arr_js, edgecolor="red", s=5,  label="Input data")
plt.plot(arr_mx, poly_y, label="polynomial ODR")
plt.xlabel("$m$ ")
plt.ylabel("$j_{s}$")

plt.title("Зависимость $j_s$  от параметра $m_x$")
```

```
plt.legend(fontsize=12)

plt.show()
```

Figure

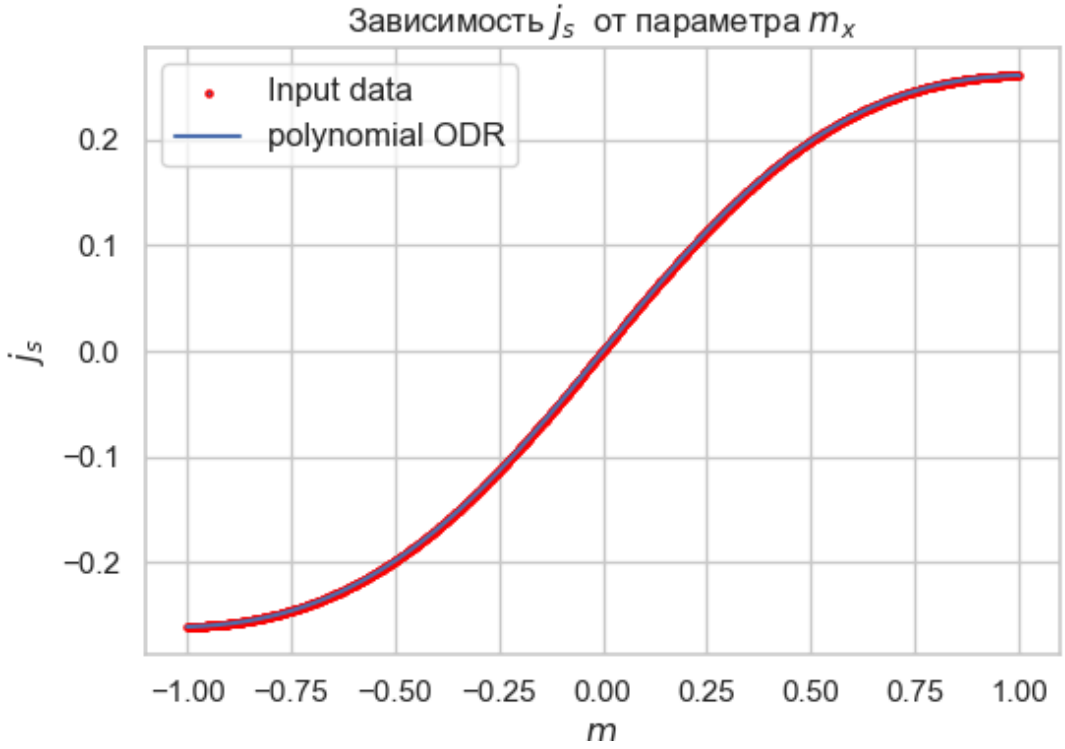


In [35]:
```
Npoint = 1000  # количество точек (число вызовов функции интегрирования)
arr_mx = np.linspace(-1, 1, Npoint, endpoint=True)
arr_Ix = np.zeros(Npoint, dtype=np.float64)
arr_err = np.zeros(Npoint, dtype=np.float64)
for ind in range(Npoint):
    mx = arr_mx[ind]
    # интегрируем для каждого
    arr_Ix[ind], arr_err[ind] = quad(funct_Ix, -np.pi/2, np.pi/2,
                                     args=(mx, r, d))

# Using the 9th order polynomial model
poly_model = odr.polynomial(9)
data = odr.Data(arr_mx, arr_Ix)
odr_obj = odr.ODR(data, poly_model)

# Running ODR fitting
output = odr_obj.run()

poly = np.poly1d(output.beta[::-1])
poly_y = poly(arr_mx)
```

In [36]:
```
plt.figure(figsize=(6, 4))
plt.scatter(arr_mx, arr_Ix, edgecolor="red", s=5,  label="Input data")
plt.plot(arr_mx, poly_y, label="polynomial ODR")
plt.xlabel("$m$ ")
plt.ylabel("$j_{s}$")
```

```
plt.title("Зависимость $j_s$  от параметра $m_x$")
plt.legend(fontsize=12)

plt.show()
```

Figure



2. Численное решение задачи Коши: библиотека SciPy

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

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

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

Пример 1: Численно решить задачу Коши:

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

Для сравнения приведем аналитическое решение задачи (2):

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

Воспользуемся библиотекой SciPy, содержащей функцию для решения начальной задачи:

```
scipy.integrate.solve_ivp(fun, t_span, y0, method='RK45',
t_eval=None, dense_output=False, events=None, vectorized=False,
args=None, **options)[source]
```
Solve an initial value problem for a system of ODEs.

Для этого необходимо задать правые части уравнений (2).

In [37]:
```
from scipy.integrate import solve_ivp
from functools import partial
```

In [38]:
```
def F_right2(t, y, omega):
    '''right-hand part'''
    return y*np.cos(omega*t)
```

In [39]:
```
# Параметр модели
omega = 5.  # np.pi/2
# Параметры численного счета
t0 = 0
tf = 10
nt = 1000
# Массив точек (сетка) в которых будет находится решение
t_e = np.linspace(t0, tf, nt)
# Начальное условие
y0 = np.array([3])
```

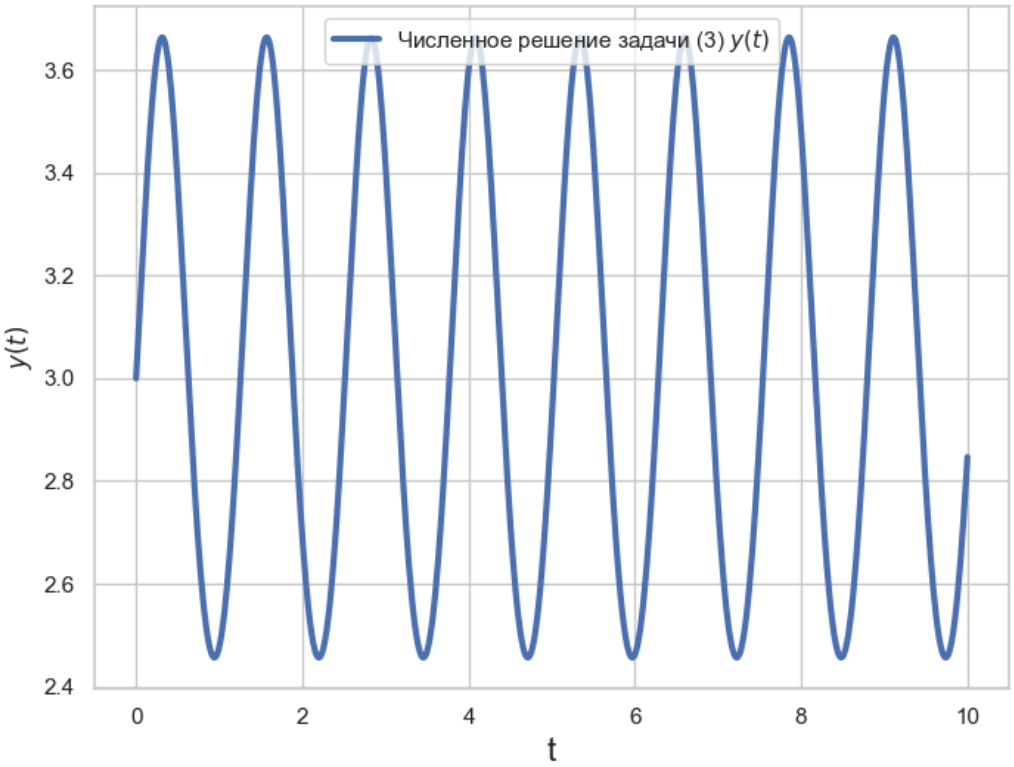
In [40]:
```
f = partial(F_right2, omega=omega)
t_e = np.linspace(t0, tf, nt)
sol_2 = solve_ivp(f, [t0, tf], y0, t_eval=t_e, method='RK45',
                  rtol=1e-8, atol=1e-8)
```

In [41]:
```
sol_2
```

Out[41]:
```
  message: The solver successfully reached the end of the integration inter
val.
  success: True
   status: 0
        t: [ 0.000e+00  1.001e-02 ...  9.990e+00  1.000e+01]
        y: [[ 3.000e+00  3.030e+00 ...  2.819e+00  2.847e+00]]
      sol: None
 t_events: None
 y_events: None
     nfev: 1124
     njev: 0
      nlu: 0
```

In [42]:
```
plt.figure(figsize=(8, 6))
plt.plot(sol_2.t, sol_2.y[0], label='Численное решение задачи (3) $y(t)$',
         linewidth=3.0)
plt.xlabel('t', size=16)
plt.ylabel('$y(t)$', size=12)
plt.legend(loc='upper center', fontsize=11)
plt.show()
```

Figure



Математическое моделирование джозефсоновского перехода сверхпроводник/ферромагнетик/

сверхпроводник на поверхности трехмерного топологического изолятора

Аномальный эффект Джозефсона, который заключается в возникновении фазового сдвига в токфазовом соотношении гибридных джозефсоновских структур, состоящих из сверхпроводников и магнетиков приводит к возникновении конечного сверхпроводящего тока при нулевой джозефсоновской разности фаз. Данный фазовый сдвиг пропорционален намагниченности ферромагнетика и отражает совместное проявление сверхпроводимости и магнетизма.

Одной из возможных подобных гибридных структур является джозефсоновский переход сверхпроводник/ферромагнетик/ сверхпроводник на поверхности трехмерного топологического изолятора, содержащего дираковские квазичастицы, в котором сильная зависимость энергии Джозефсона от ориентации намагниченности открывает новые возможности для контроля намагниченности джозефсоновским током или джозефсоновской фазой. Помимо наличия сдвига фазы, также в этой структуре джозефсоновский критический ток сильно зависит от ориентации намагниченности, а именно от составляющей намагниченности в плоскости вдоль направлении тока. Такая зависимость критического тока может привести к четырехкратному вырожденному состоянию ферромагнетика, которая резко контрастирует с обычным двукратным вырожденным состояниям. Активный интерес к исследованию таких структур вызван возможностью их практического приложения. Возникающая связь между магнитным и сверхпроводниковыми степенями свободы дает возможность взаимного контроля, т.е. управления магнитными свойствами посредством сверхпроводящего тока или наоборот.

Теоретическая модель

Ток-фазовое соотношение этого перехода задается выражением

$$j_s = j_c \sin(\varphi - \varphi_0),$$

где j_c - критический ток, φ - джозефсоновская разность фаз, $\varphi_0 = r m_y$ - аномальный сдвиг фазы, $m_y = M_y/M_s$ - y компонента намагниченности (M_y) нормированная на намагниченность насыщения M_s, $r = 2dh_{\text{exc}}/\upsilon_F$ - безразмерный параметр, определяющий величину спин-орбитального взаимодействия, d - толщина ферромагнитного барьера, h_{exc} - обменное поле, υ_F -скорость Ферми.

Отличительной чертой рассматриваемого джозефсоновского перехода является то, что критический ток сильно зависит от ориентации намагниченности, а именно, от x компоненты намагниченности в плоскости вдоль направления тока и задается выражением

$$j_c = j_b \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos\varphi \exp\left(- \frac{\tilde{d}}{\cos\phi} \right) \cos(r m_x \tan\varphi) d\varphi,$$

где φ - угол между направлением квазичастичного тока и осью x, $m_x = M_x / M_s$ - x компонента намагниченности нормированная на M_s, $j_b = \frac{e \upsilon_F N_F \triangle^2}{\pi^2 T}$, $\triangle$ - сверхпроводящий параметр порядка, T - температура, N_F - концентрация частиц вблизи уровня Ферми, υ_F - скорость Ферми, $\tilde{d}$ - безразмерная длина контакта.

Динамика вектора намагниченности $\mathbf{M}$ ферромагнитного слоя описывается в рамках уравнения Ландау - Лифшица - Гильберта (ЛЛГ):

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = - \gamma \mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}} + \frac{\alpha}{M_s} \mathbf{M} \times \frac{d\mathbf{M}}{dt},$$

где γ - гиромагнитное отношение, α - гильбертовское затухание и $\mathbf{H}_{\text{eff}}$ - эффективное поле. Эффективное поле определяется варьированием полной энергии системы по вектору намагниченности

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = - \frac{1}{V_F} \frac{\delta E_t}{\delta \mathbf{M}},$$

где V_F - объем ферромагнитного слоя. Полная энергия системы состоит из энергии магнитной анизотропии

$$E_M = - K V_F \left(\frac{M_y}{M_s} \right)^2,$$

где K - константа анизотропии, и джозефсоновской энергии

$$E_J = \frac{\Phi_0 j_c S}{2\pi} [1 - \cos(\varphi - r m_y)],$$

где Φ_0 - квант магнитного потока, S - площадь перехода.

Таким образом, компоненты эффективного поля в нормированных единицах могут быть записаны в виде:

$$h_x = \frac{H_{\text{eff,x}}}{H_F} = \frac{GrI_x}{j_{c0}}\left[1 - \cos\left(\varphi - rm_y\right)\right],$$
$$h_y = \frac{H_{\text{eff,y}}}{H_F} = \frac{GrI_y}{j_{c0}}\sin(\varphi - rm_y) + m_y,$$
$$h_z = \frac{H_{\text{eff,z}}}{H_F} = 0,$$

где $G = \Phi_0 j_b S/2\pi K V_F$ - отношение амплитуды джозефсоновской энергии к магнитной, $H_F = \omega_F/\gamma = K/M_s$, ω_F - собственная частота ферромагнитного резонанса, а I_x и I_y интегральные выражения определяемые как:

$$I_x = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \sin\phi \exp\left(-\frac{\tilde{d}}{\cos\varphi}\right)\sin(rm_x\tan\phi)d\varphi,$$
$$I_y = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos\phi \exp\left(-\frac{\tilde{d}}{\cos\varphi}\right)\cos(rm_x\tan\phi)d\varphi.$$

Здесь j_{c0} определяет выражение для критического тока при $m_x = 0$ и записывается как

$$j_{c0} = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos\phi \exp(-\frac{\tilde{d}}{\cos\phi})d\phi$$

Таким образом, в нормированных величинах, получим систему уравнений:

$$\frac{dm_x}{dt} = -\frac{\omega_F}{1+\alpha^2}\left((m_y h_z - m_z h_y) + \alpha[m_x(m_x h_x + m_y h_y + m_z h_z) - h_x m^2]\right),$$
$$\frac{dm_y}{dt} = -\frac{\omega_F}{1+\alpha^2}\left((m_z h_x - m_x h_z) + \alpha[m_y(m_x h_x + m_y h_y + m_z h_z) - h_y m^2]\right),$$
$$\frac{dm_z}{dt} = -\frac{\omega_F}{1+\alpha^2}\left((m_x h_y - m_y h_x) + \alpha[m_z(m_x h_x + m_y h_y + m_z h_z) - h_z m^2]\right).$$

При заданном значении напряжении можно считать разоность фаз φ линейной функцией от времени, т.е. $\varphi = Vt$. Тогда выражения для компонент эффективного поля записываются в виде

$$h_x = \frac{GrI_x}{j_{c0}}\left[1 - \cos\left(Vt - rm_y\right)\right],$$
$$h_y = \frac{GrI_y}{j_{c0}}\sin(Vt - rm_y) + m_y,$$
$$h_z = 0.$$

Постановка задачи

Легкая ось намагниченности в ферромагнитном слое направлена вдоль оси y, т.е. направления $m_y = \pm 1$ являются стабильными. В работе\cite{nashaat19prb} было показано, что в SFS джозефсоновском переходе на поверхности топологического изолятора при определенных значениях параметров модели реализуются четырехкратно вырожденные стабильные состояния намагниченности.

Наша задача заключается, в том чтобы на основе математического моделирования продемонстрировать реализацию этих вырожденных состояний.

Аппроксимация интегралов

Отметим, что при численном решении системы дифференциальных уравнений приходится на каждом шаге по времени вычислить интегралы. Это сильно замедляет процесс решения уравнений. Эту проблему можно решить следующим образом:

1. Вычислить интегралы численно в интервале $m_x \in [-1, 1]$ с определенным шагом
2. Интерполировать полученный результат полиномом определенной степени
3. Затем вставить полученную приближенную формулу в уравнении и решать систему уравнений

In [43]:
```
%matplotlib inline
```

Задаем значения параметров модели для вычисления интегралов

In [44]:
```
d = 0.3
r = 0.5
```

Определяем подынтегральные функции

In [45]:
```
def funct_Ix(phi, mx, r, d):
    '''Defines the integrand in the definition of current Ix,
        mx, r, d - parameters'''
    return (np.sin(phi) * np.exp(-d / np.cos(phi)) * np.sin(r*mx*np.tan(phi)
```

In [46]:
```
def funct_Iy(phi, mx, r, d):
    '''Defines the integrand in the definition of current Iy,
        mx, r, d - parameters'''
    return (np.cos(phi) * np.exp(-d / np.cos(phi)) * np.cos(r*mx*np.tan(phi)
```

Создаем массивы для m_x и соответствующих значений интегралов

In [47]:
```
# массивы
Npoint = 1000
arr_mx = np.linspace(-1, 1, Npoint, endpoint=True)
arr_Ix = np.zeros(Npoint, dtype=np.float64)
arr_Iy = np.zeros(Npoint, dtype=np.float64)
arr_errx = np.zeros(Npoint, dtype=np.float64)
arr_erry = np.zeros(Npoint, dtype=np.float64)
# вычисление интегралов
for ind in range(Npoint):
    mx = arr_mx[ind]
    arr_Ix[ind], arr_errx[ind] = quad(funct_Ix, -np.pi/2, np.pi/2,
                                      args=(mx, r, d))
    arr_Iy[ind], arr_erry[ind] = quad(funct_Iy, -np.pi/2, np.pi/2,
                                      args=(mx, r, d))
```

Аппроксимация интегралов I_x и I_y многочленом девятой P_9 и восьмой P_8 степени соответственно

In [48]:
```
# Using 9th order polynomial model
poly_model = odr.polynomial(9)
data = odr.Data(arr_mx, arr_Ix)
odr_obj = odr.ODR(data, poly_model)

# Running ODR fitting
output = odr_obj.run()

Ixfit = np.poly1d(output.beta[::-1])
```

In [49]:
```
# using 8th order polynomial model
poly_model = odr.polynomial(8)
data = odr.Data(arr_mx, arr_Iy)
odr_obj = odr.ODR(data, poly_model)

# Running ODR fitting
output = odr_obj.run()

Iyfit = np.poly1d(output.beta[::-1])
```

Определение функции для j_{c0}

In [50]:
```
def jc0(d):
    '''Определяет функцию для критического тока при отсутсвии F слоя
    d - параметр модели'''
    result = quad(lambda phi: np.cos(phi)*np.exp(-d/np.cos(phi)),
                  -np.pi/2, np.pi/2)
    return result
```

Вычисление j_{c0}

In [51]:
```
Jc0 = jc0(d)
J0 = Jc0[0]
J0
```

Out[51]: 1.312295858714208

In [52]:
```
Jc0
```

Out[52]: (1.312295858714208, 9.235495215506846e-10)

Определяем правые части системы уравнений

In [53]:
```
def my_sfs(t, S, G, r, alpha, wF, d, V, J0):
    '''Определяет правые части ДУ
    G, r, alpha, wF - параметры модели
    S=[mx, my, mz, ph] - искомая вектор-функция'''
    mx = S[0]
    my = S[1]
    mz = S[2]

    Jx = Ixfit(mx)
    Jy = Iyfit(mx)

    Hx = (G*r*Jx/J0)*(1-np.cos(V*t-r*my))
    Hy = (G*r*Jy/J0)*np.sin(V*t-r*my)+my
    Hz = 0

    H = [Hx, Hy, Hz]
    M = [mx, my, mz]

    m2 = np.dot(M, M)
    HdM = np.dot(H, M)

    ksi = -wF/(1+alpha*alpha*m2)

    dmx = ksi * ((my*Hz-mz*Hy) + alpha * (mx*HdM-Hx*m2))
    dmy = ksi * ((mz*Hx-mx*Hz) + alpha * (my*HdM-Hy*m2))
    dmz = ksi * ((mx*Hy-my*Hx) + alpha * (mz*HdM-Hz*m2))

    dS = [dmx, dmy, dmz]
    return dS
```

In [54]:
```
G = 4.5 # отношение энергии Джозефсона к энергии магнитной анизотропии
r = 0.5 # параметр спин-орбитального взаимодействия
d = 0.3 # безразмерная длина джозефсоновского перехода
wF = 1  # собственная частота ферромагнитного резонанса
alpha = 0.01 # параметр гильбертовского затухания
V = 5  # напряжение в джозефсоновском переходе

t0 = 0
tf = 1500
nt = 15000
```

In [55]:
```
s = np.array([0, 1, 0])
dS = my_sfs(0, s, 4.12, 0.5, 0.01, 1, 0.3, 5, J0)
dS
```

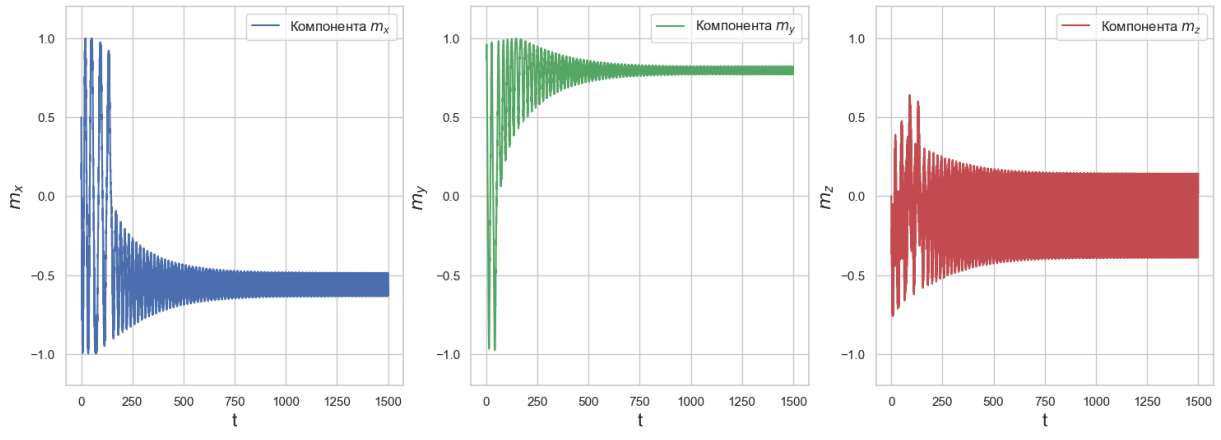
Out[55]: [7.222516384958603e-11, -0.0, 7.2225163849586024e-09]

Задаем начальные условия $m_x = -0.5$, $m_z = 0$, $m_y = \sqrt{1 - m_x^2 - m_z^2}$

In [56]:
```
mx0 = -0.5
mz0 = 0
my0 = np.sqrt(1-mx0*mx0-mz0*mz0)
```

In [72]:
```
f = partial(my_sfs, G=G, r=r, alpha=alpha, wF=wF, d=d, V=V, J0=J0)
t_e = np.linspace(t0, tf, nt)
s0 = np.array([mx0, my0, mz0])
sol_1 = solve_ivp(f, [t0, tf], s0, t_eval=t_e, method='BDF',
                  rtol=1e-8, atol=1e-8)
```

In [73]:
```
%matplotlib inline
plt.figure(figsize=(18, 6))
plt.subplot(1, 3, 1)
plt.ylim(-1.2, 1.2)
plt.plot(sol_1.t, sol_1.y[0], label='Компонента $m_x $', color='b')
plt.xlabel('t', size=16)
plt.ylabel('$m_{x}$', size=16)
plt.legend(fontsize=12)
plt.subplot(1, 3, 2)
plt.ylim(-1.2, 1.2)
plt.plot(sol_1.t, sol_1.y[1], label='Компонента $m_y $', color='g')
plt.xlabel('t', size=16)
plt.ylabel('$m_{y}$', size=16)
plt.legend(fontsize=12)
plt.subplot(1, 3, 3)
plt.ylim(-1.2, 1.2)
plt.plot(sol_1.t, sol_1.y[2], label='Компонента $m_z $', color='r')
plt.xlabel('t', size=16)
plt.ylabel('$m_{z}$', size=16)
plt.legend(fontsize=12)
plt.show()
```



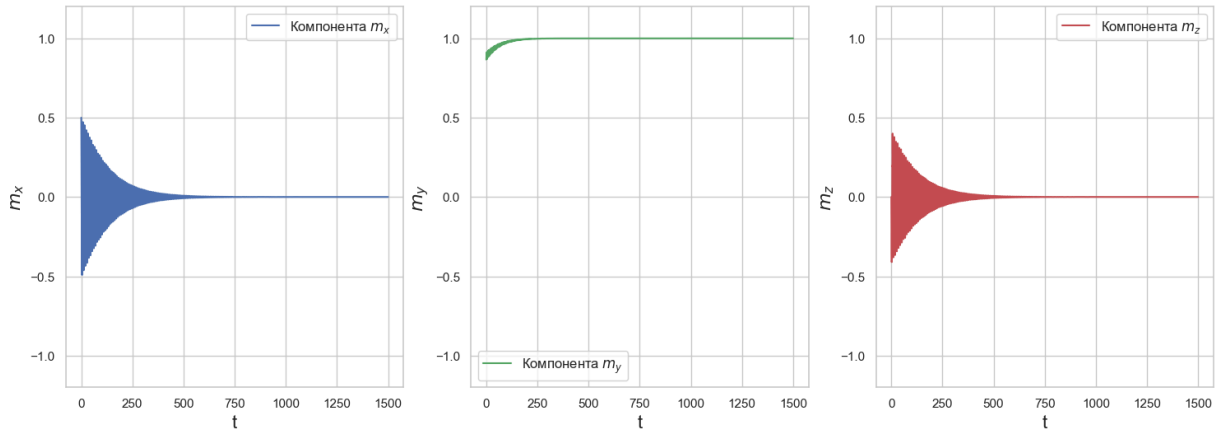
Влияние начальных условий

In [74]:
```
mx0 = 0.5
mz0 = 0
```

```
my0 = np.sqrt(1-mx0*mx0-mz0*mz0)
```

In [281…
```
f = partial(my_sfs, G=1.25, r=r, alpha=alpha, wF=wF, d=d, V=V, J0=J0)
t_e = np.linspace(t0, tf, nt)
s0 = np.array([mx0, my0, mz0])
sol_2 = solve_ivp(f, [t0, tf], s0, t_eval=t_e, method='BDF', rtol=1e-8, atol
```

In [282…
```
%matplotlib inline
plt.figure(figsize=(18, 6))
plt.subplot(1, 3, 1)
plt.ylim(-1.2, 1.2)
plt.plot(sol_2.t, sol_2.y[0], label='Компонента $m_x $', color='b')
plt.xlabel('t', size=16)
plt.ylabel('$m_{x}$', size=16)
plt.legend(fontsize=12)
plt.subplot(1, 3, 2)
plt.ylim(-1.2, 1.2)
plt.plot(sol_2.t, sol_2.y[1], label='Компонента $m_y $', color='g')
plt.xlabel('t', size=16)
plt.ylabel('$m_{y}$', size=16)
plt.legend(fontsize=12)
plt.subplot(1, 3, 3)
plt.ylim(-1.2, 1.2)
plt.plot(sol_2.t, sol_2.y[2], label='Компонента $m_z $', color='r')
plt.xlabel('t', size=16)
plt.ylabel('$m_{z}$', size=16)
plt.legend(fontsize=12)
plt.show()
```



Пример распараллеливания

In [283…
```
import joblib
```

In [284…
```
f"Number of cpu: {joblib.cpu_count()}"
```

Out[284… 'Number of cpu: 8'

In [285…
```
sol_1.y[0][-1]
```

Out[285… -0.5738074502086493

In [286…
```
sol_2.y[0][-1]
```

Out[286… -2.6992362231474343e-06

Mean [750, 1500] mx my

In [287…
```
mx_750_1500 = sol_2.y[0][7500:]
my_750_1500 = sol_2.y[1][7500:]
mz_750_1500 = sol_2.y[2][7500:]
```

In [288…
```
mx_mean = np.mean(mx_750_1500)
mx_mean
```

Out[288… -1.1831645871327533e-06

In [289…
```
my_mean = np.mean(my_750_1500)
my_mean
```

Out[289… 1.000000608633775

In [290…
```
mz_mean = np.mean(mz_750_1500)
mz_mean
```

Out[290… 1.0534689901157607e-06

In [291…
```
my_mean*my_mean + mx_mean*mx_mean + mz_mean*mz_mean
```

Out[291… 1.0000012172704298

In [279…
```
mx_750_1500.shape
```

Out[279… (7500,)

In [280…
```
sol_2.y.shape
```

Out[280… (3, 15000)

In [96]:
```
def get_G_bests(truncated_solutions):

    squared_sums_deviation = []
    best_g_indexes = []

    for s in truncated_solutions:
        mx_mean = np.mean(s.y[0])
        my_mean = np.mean(s.y[1])
        mz_mean = np.mean(s.y[2])

        square_sum = my_mean*my_mean + mx_mean*mx_mean + mz_mean*mz_mean
        absolute_val = abs(1 - square_sum)
```

```
        squared_sums_deviation.append(absolute_val)

    for _ in range(4):
        best_g_index = np.argmin(squared_sums_deviation)
        best_g_indexes.append(best_g_index)
        squared_sums_deviation = np.delete(squared_sums_deviation, best_g_ir

    return best_g_indexes
```

In [325…

```
def truncate_solutions(solutions):

    truncated_solutions = []

    for s in solutions:
        truncation_index = 0

        amplitudes = []
        for i in range(1, len(s.y[0]), 2):
            amplitudes.append(abs(s.y[0][i-1] - s.y[0][i]))

        print(amplitudes[:10])
        mean_amplitude = np.median(amplitudes)
        print(mean_amplitude, "max:", np.max(amplitudes))

        for i in range(1, len(s.y[0]), 2):
            if abs(s.y[0][i-1] - s.y[0][i]) < mean_amplitude:
                truncated_solutions.append(np.array([s.y[0][i:], s.y[1][i:],
                print(i)
                break

    if len(truncated_solutions) == 0:
        print("No stabilization!")

    return truncated_solutions
```

In [326…

```
ts = truncate_solutions(np.array([sol_1, sol_2]))
for i in range(len(ts)):
    print(ts[i].shape)
```

```
[0.000698740403399345, 0.03698506052453965, 0.09762966774257542, 0.060959069
895438034, 0.012751624176249213, 0.03279125123083995, 0.002676170407602624,
0.04769972584034052, 0.0883793003835382, 0.06129564343134597]
0.02197417795938228 max: 0.12823564169670537
1
[0.0017346705592588552, 0.015987141166329433, 0.03396098967622174, 0.0323609
3086673014, 0.016376352435712838, 0.00920415939531416, 0.020450336676087977,
0.04474471851668041, 0.06171455182622179, 0.0522435337786753]
4.070617243467384e-05 max: 0.06171455182622179
813
(3, 14999)
(3, 14187)
```

In [ ]:

In [ ]:

In [ ]: