

SDK визуализации расчетов цепочек Гейзенберга $S=1/2$

Юхновский И.А, Аношкин Ю.И.

Декабрь 2020 Нижний Новгород

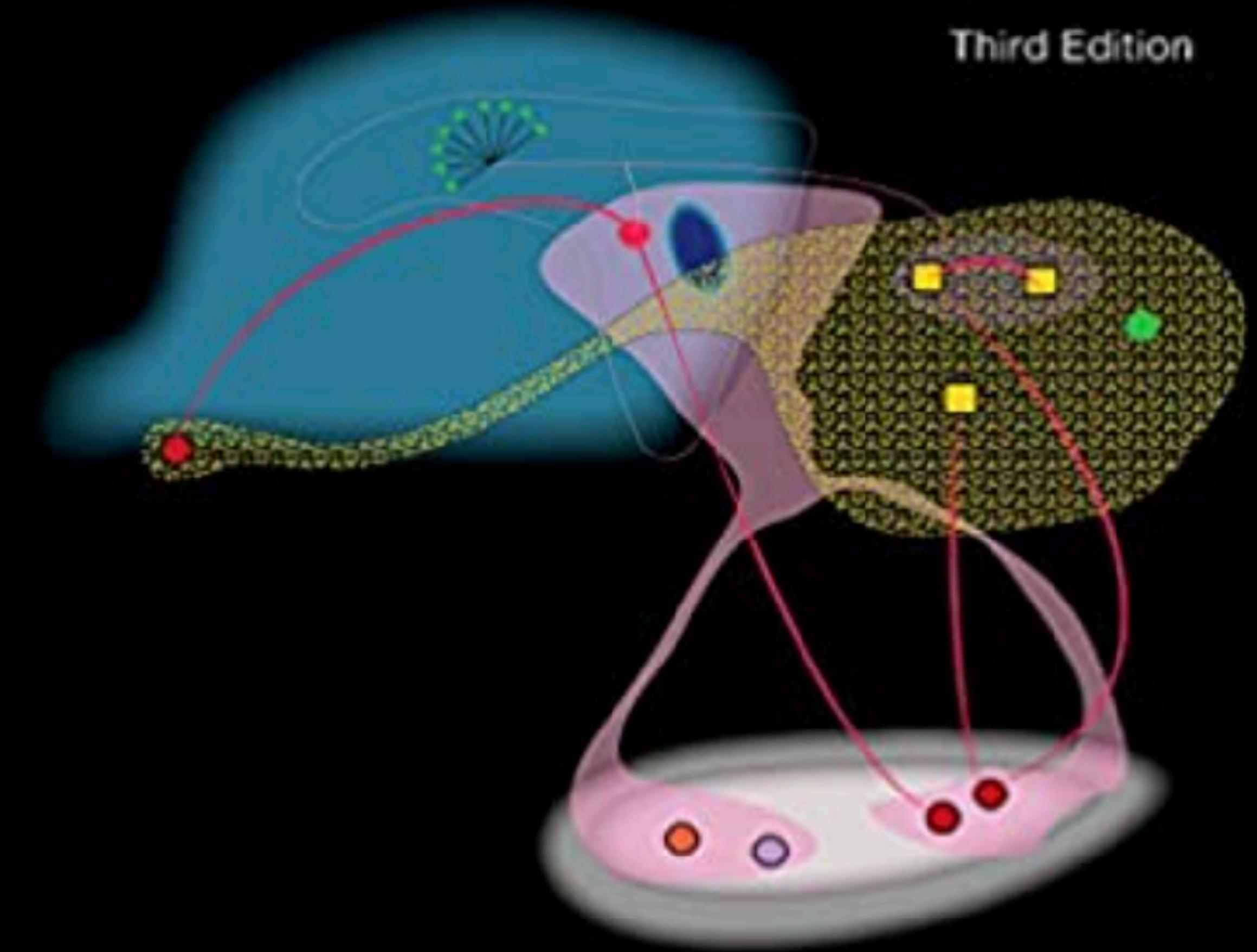
Information Visualization

PERCEPTION FOR DESIGN

Third Edition

DS-Визуализация

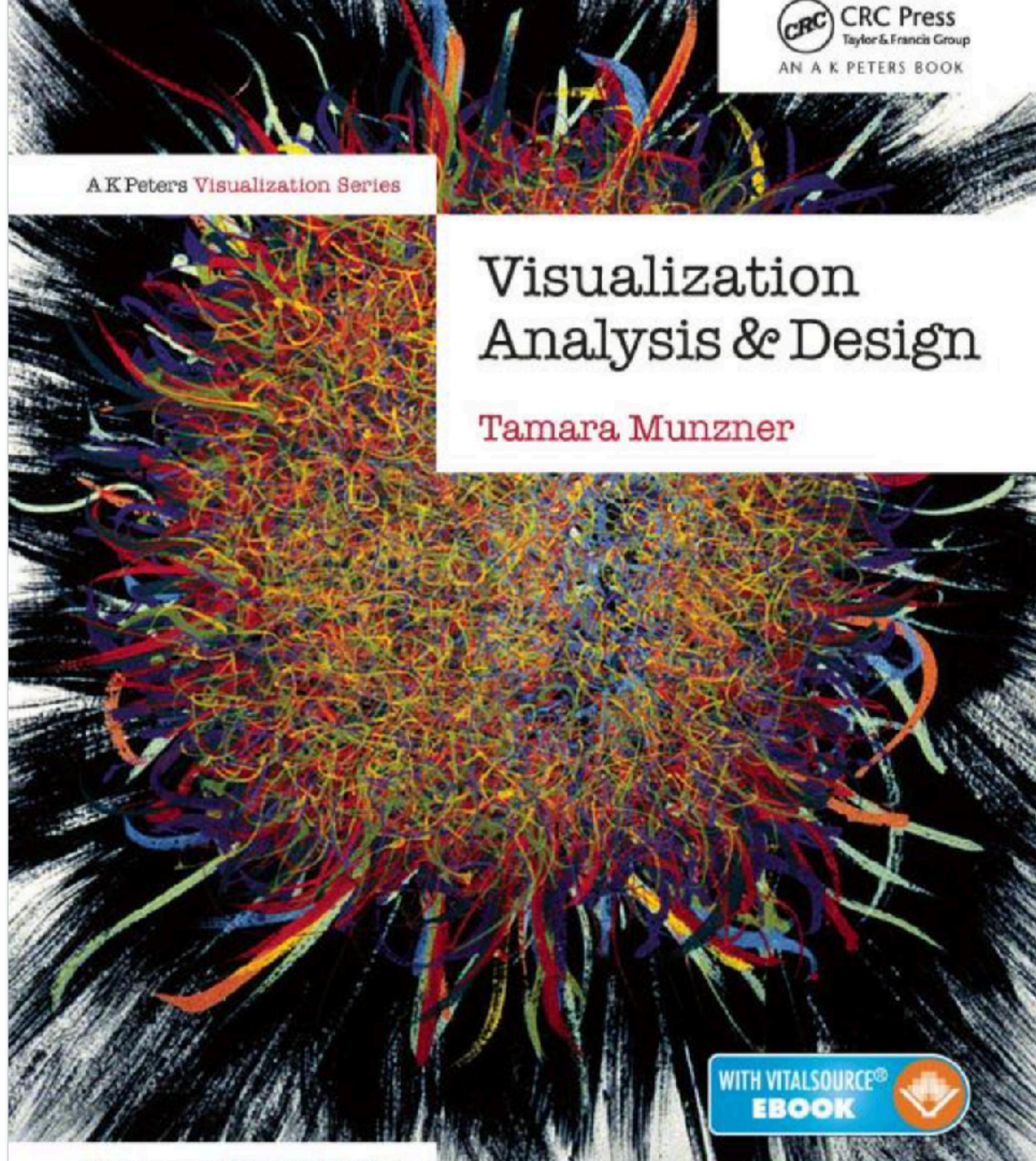
Data Science визуализация - это современное научное направление определяющее, как создавать визуализации, которые эффективно передают значение данных наблюдателю через визуальное восприятие. Изучает, как компьютер отображает информацию с помощью компьютерной графики и как человек воспринимает эту информацию визуально. Также определяет формы данных, включая количественные и не количественные данные, и то, как их правильно отображать, чтобы исследователь мог их хорошо воспринимать.



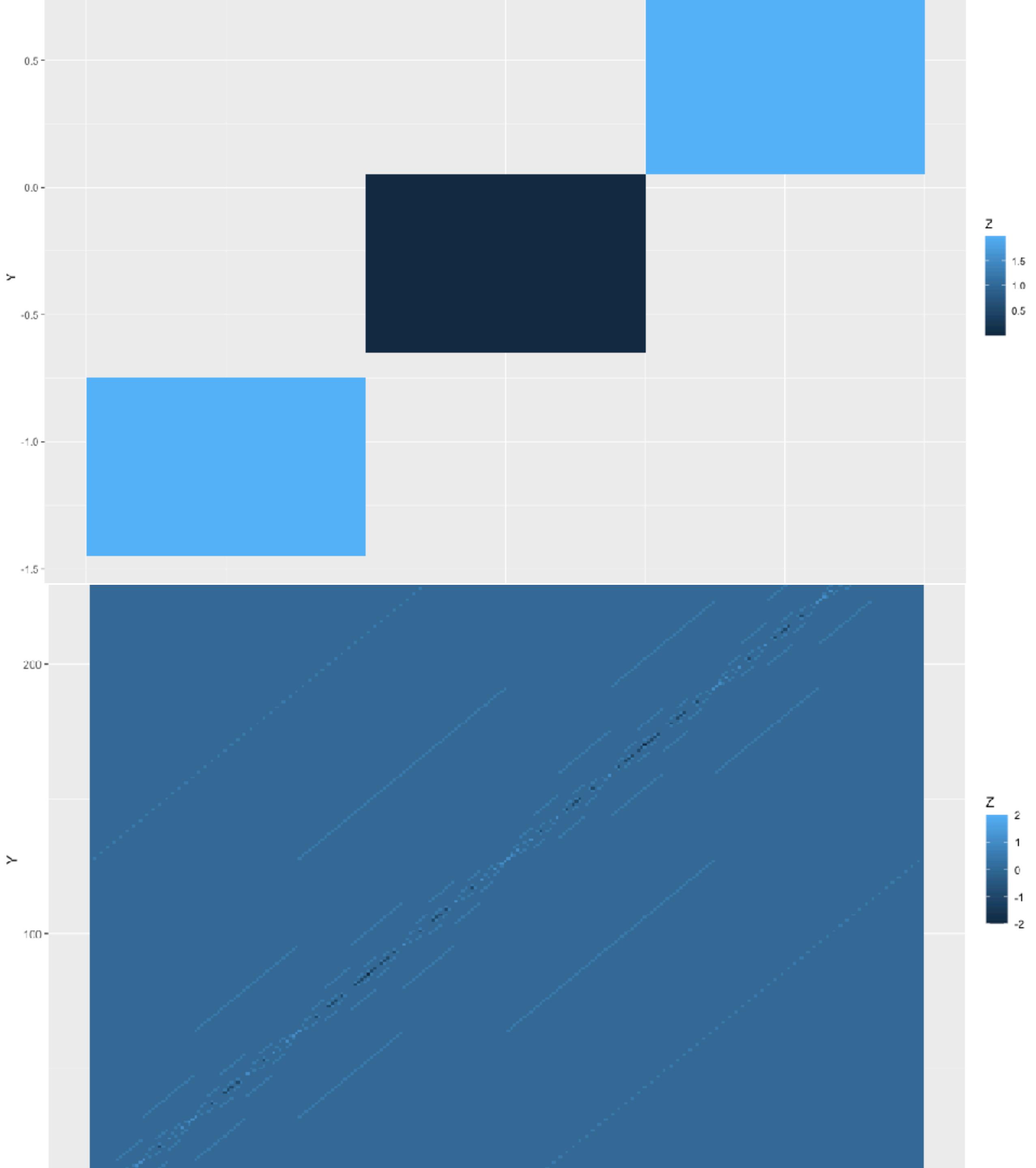
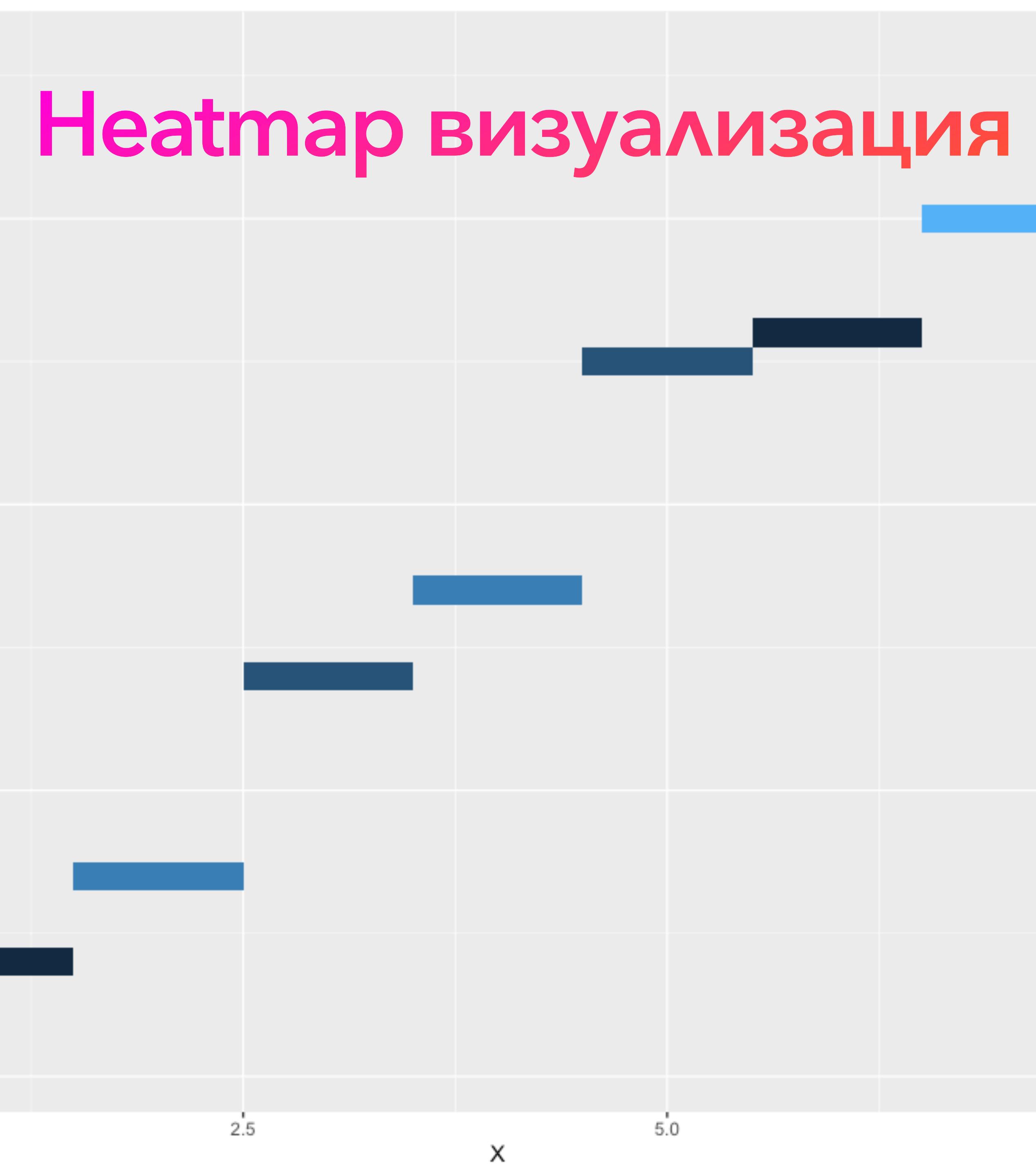
Software

ПО для DS-визуализации

- [Tableau](#)
- [SAP Lumira](#)
- [Microsoft Excel](#)
- [ClearStory](#)
- [Mathematica](#)
- [MATLAB](#)
- [MatPlotLib](#)
- [R Programming Language](#)
- [ggplot2](#)



Heatmap визуализация



Результат расчета 1D цепочки Гейзенберга

Теория - см. Аношкин Ю.И., Юхновский И.А. - Программное моделирование цепочки Гейзенберга S=1/2

- В результате расчета получались матрицы:

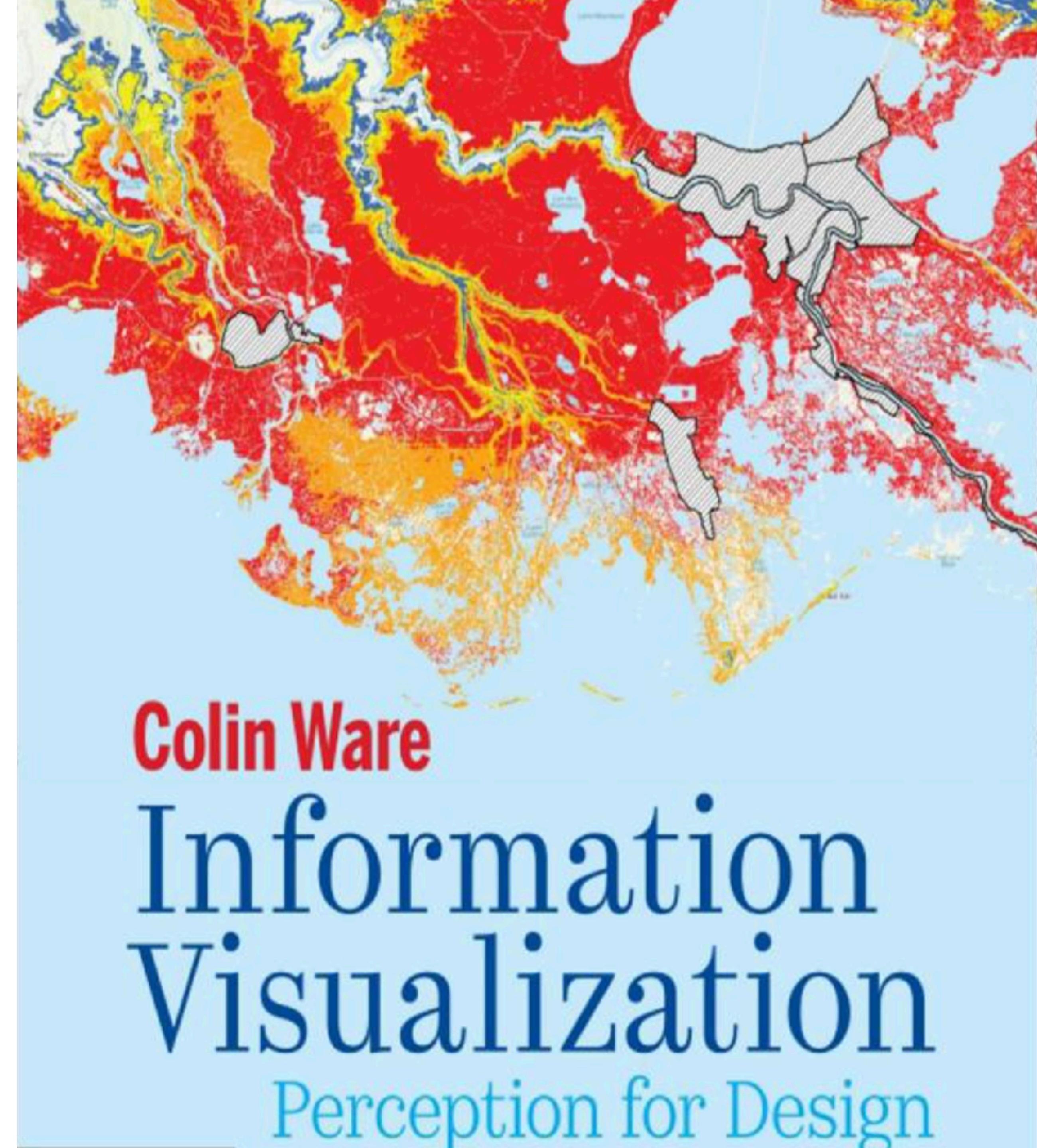
0	-3.6510934089	0.0000000000	0.0000000000
1	-3.1284190638	1.0000000000	-0.0000004494
2	-3.1284190638	1.0000000000	0.5000000000
3	-3.1284190638	1.0000000000	-0.4999995506
4	-2.6996281483	0.0000000000	-0.0000000000
5	-2.4587385089	1.0000000000	0.1092328446
6	-2.4587385089	1.0000000000	-0.3845801332
7	-2.4587385089	1.0000000000	0.4995331837
8	-2.4587385089	1.0000000000	-0.2054335950
9	-2.4587385089	1.0000000000	0.3856269098
10	-2.4587385089	1.0000000000	-0.1013702000

- Минусы такого представления - невозможность увидеть картину целиком
- Невозможность анализа динамики изменений при многопараметрическом расчете
- Вынужденное использование псевдографики для иллюстрации "математики" и "физики" рассчитываемого процесса

Отладка

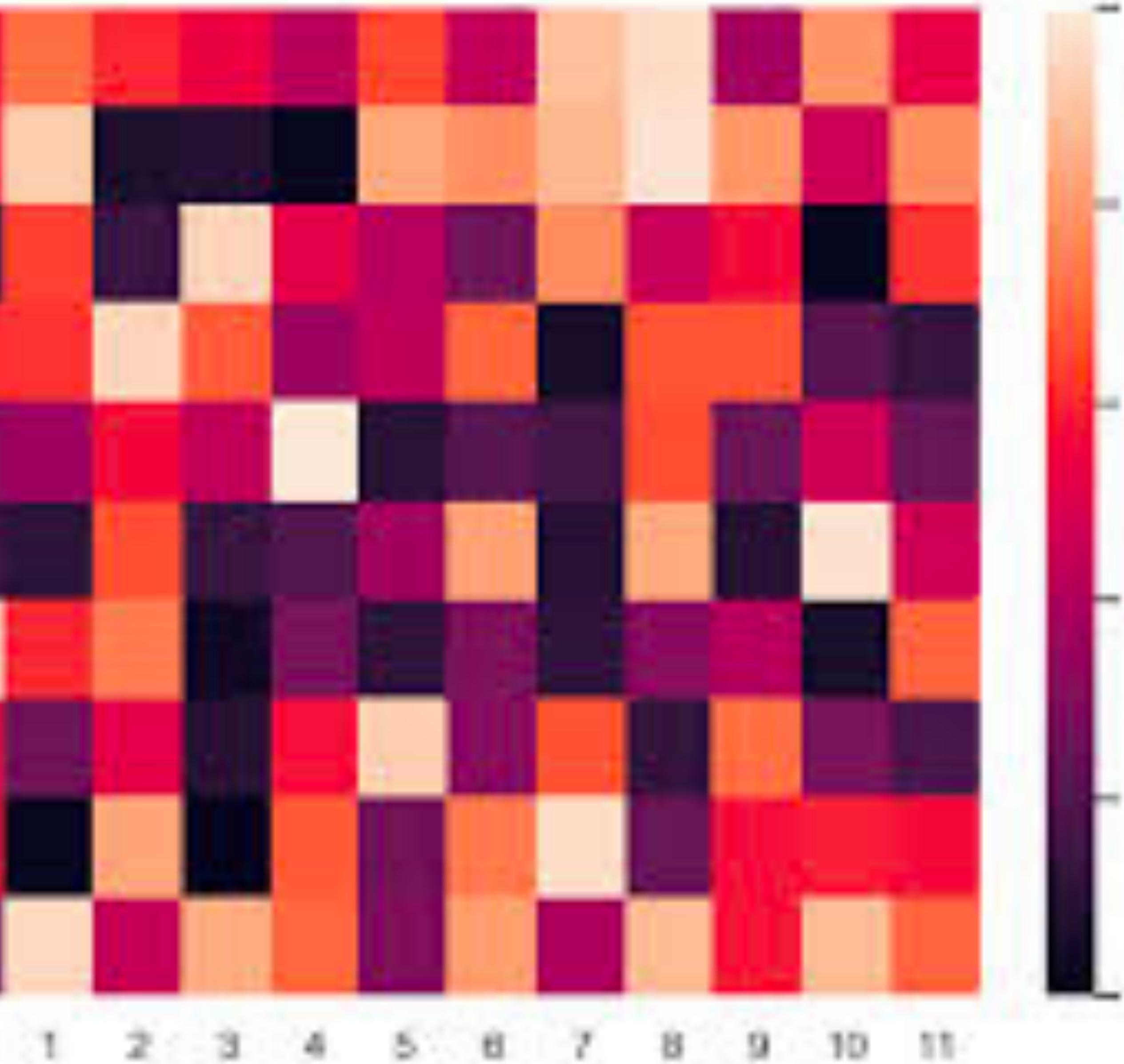
как часть разработки ПО

- В процессе отладки встала необходимость анализа промежуточных результатов
- Было решено визуализировать данные с помощью Heatmap - визуализации



Heatmap

Тепловая карта (англ. *heatmap*) – графическое представление данных, где индивидуальные значения в таблице отображаются при помощи цвета^[1]. Термин «heatmap» изначально был придуман и официально зарегистрирован как товарный знак разработчиком программного обеспечения **Кормаком Кинни**^[en] в 1991 году. Он использовал этот термин, чтобы описать 2D-дисплей, изображающий в режиме реального времени информацию финансового рынка^[2].

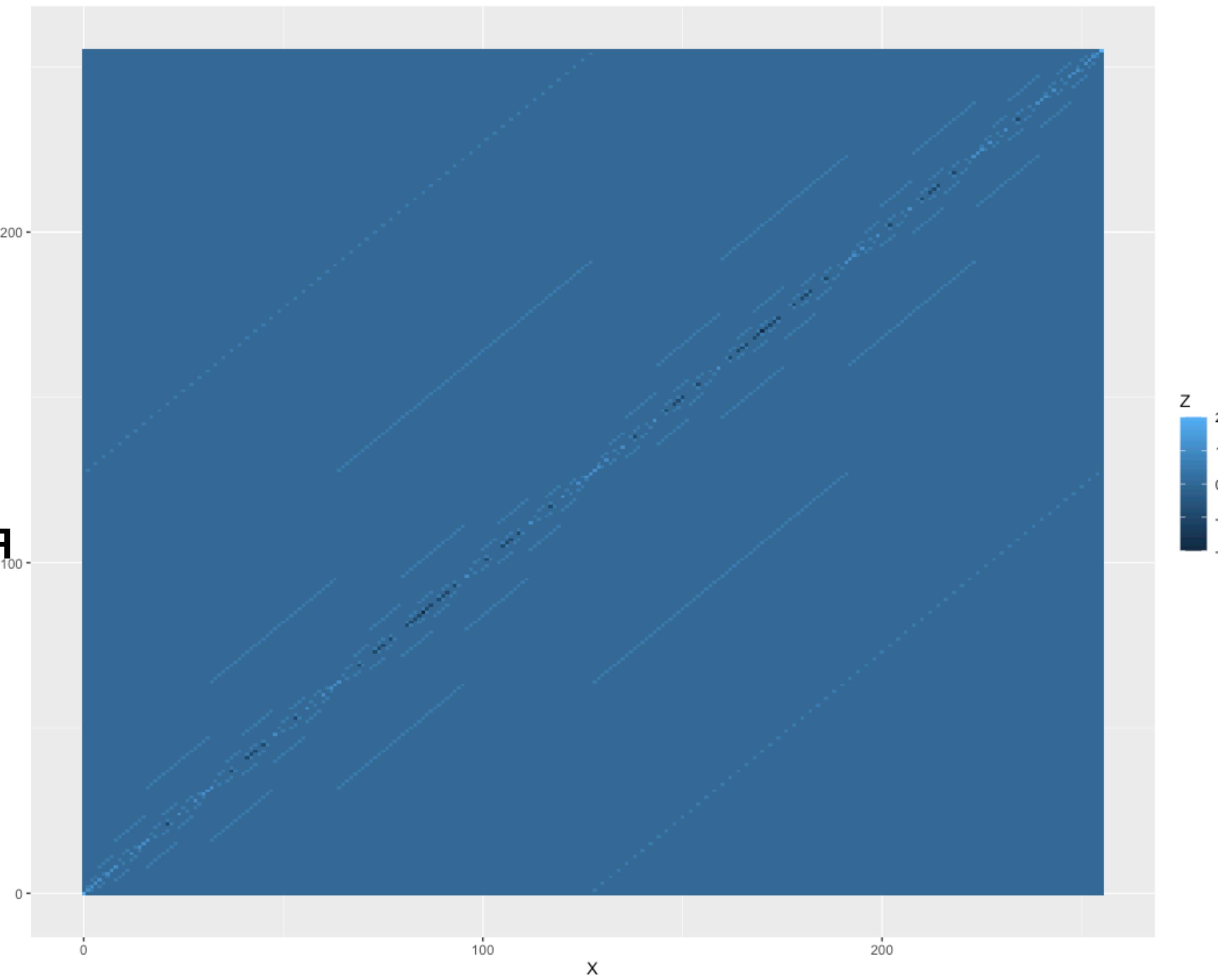


**dia0 - Точная диагонализация;
симметрии не используются**

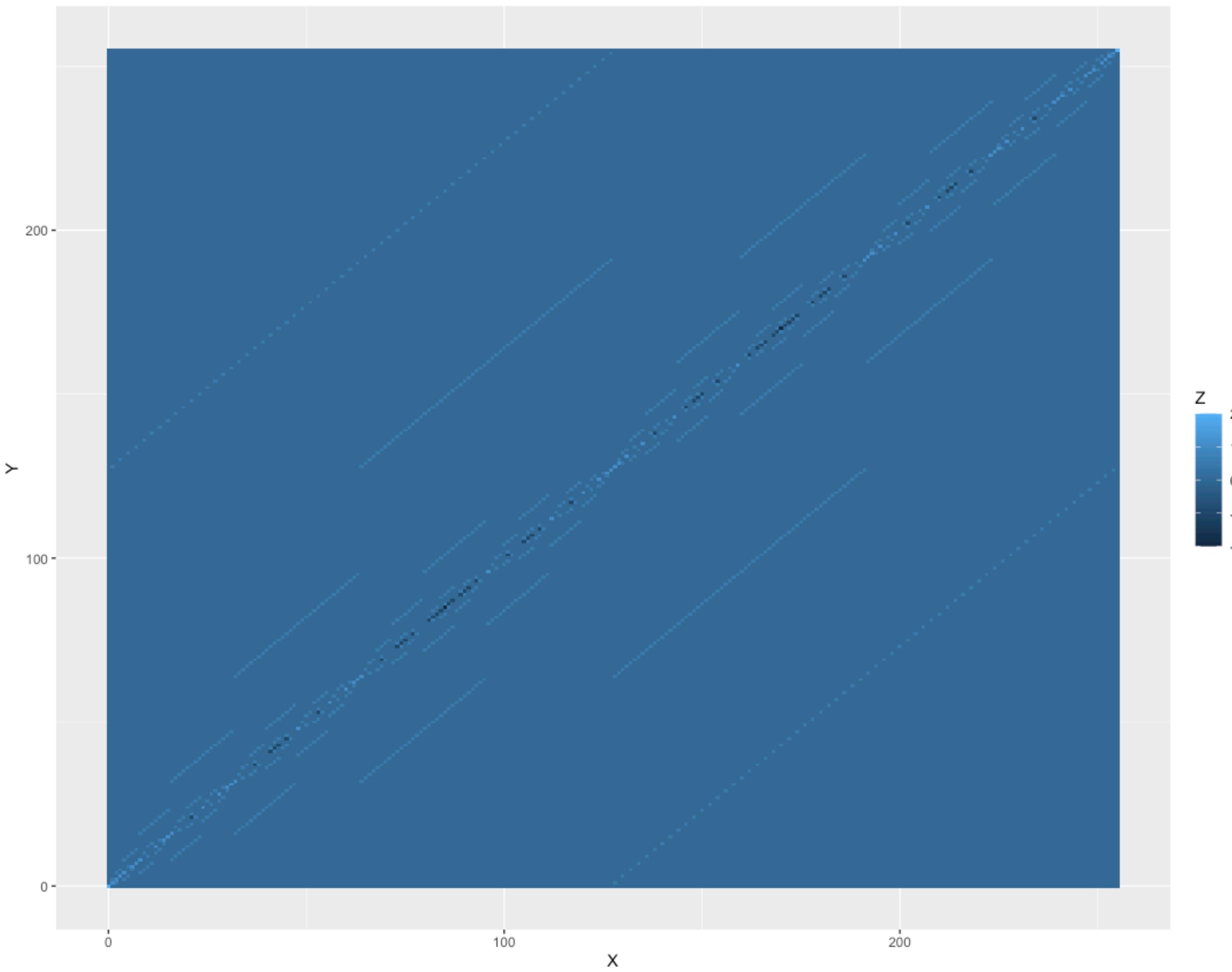


hamiltonian()

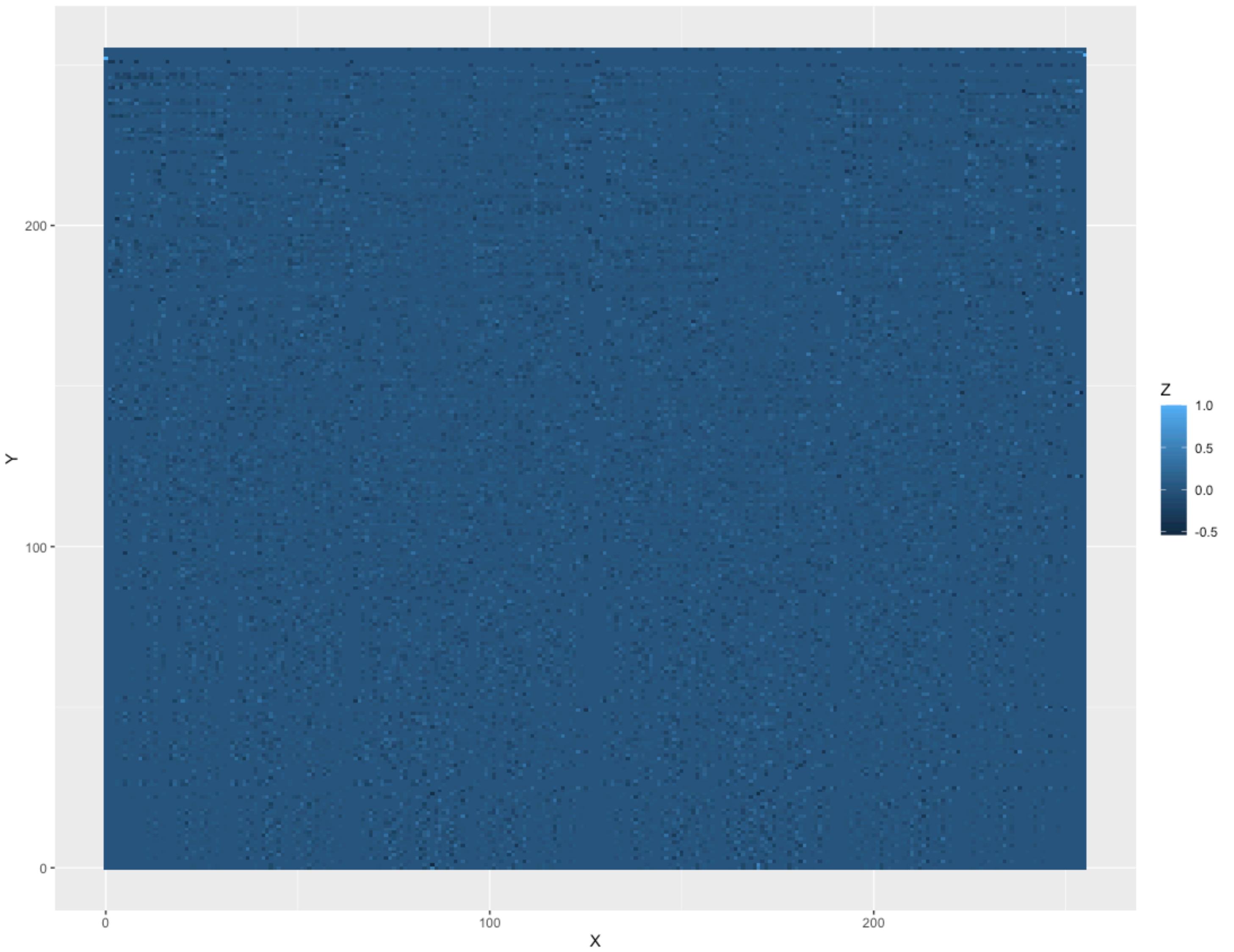
Гамильтониан определяется
матрицей $2^N \times 2^N$
 $N=8$



diagonalize()
Гамильтониан
СПИНЫ

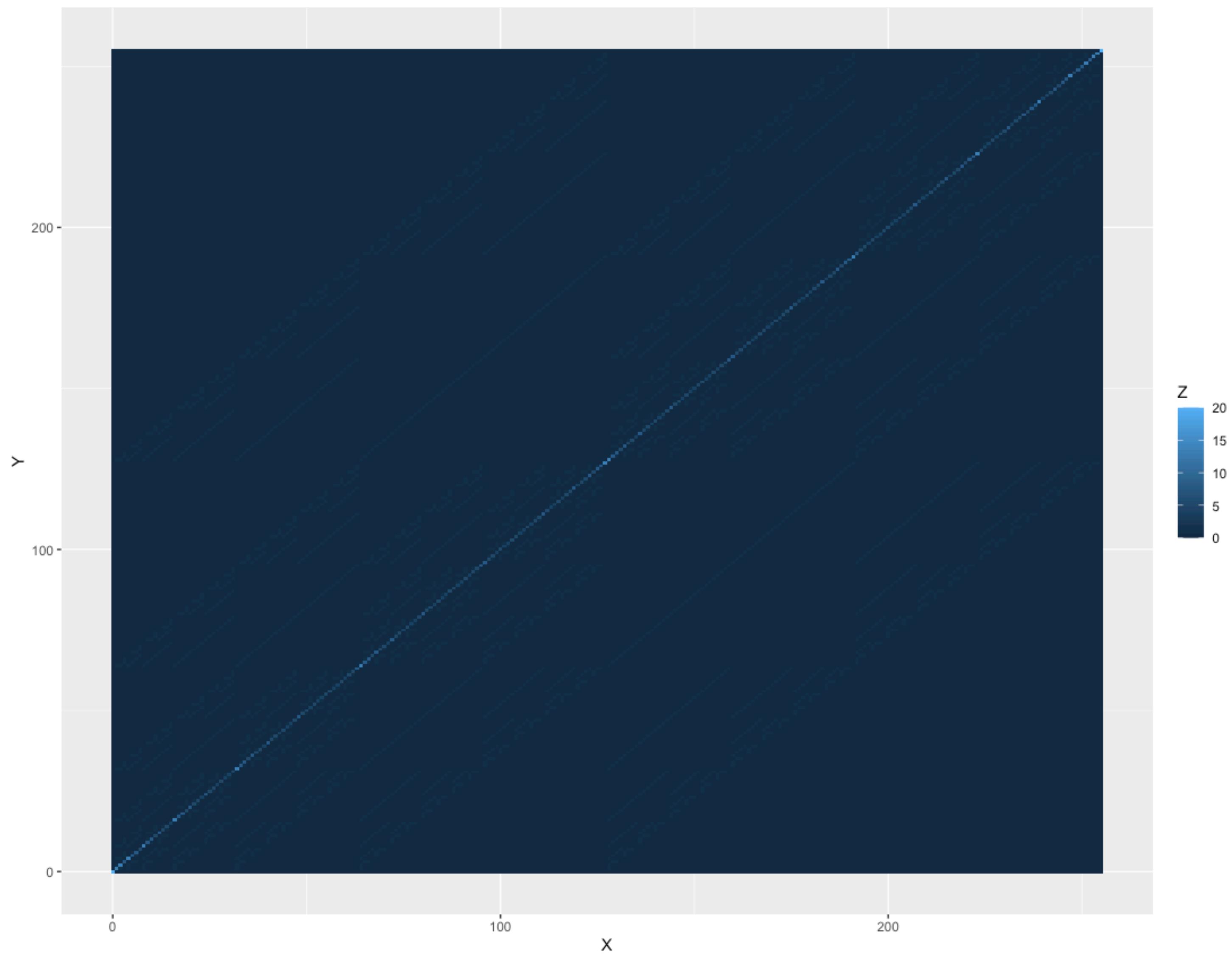


diagonalize()
Гамильтониан
спины



spinsquared()

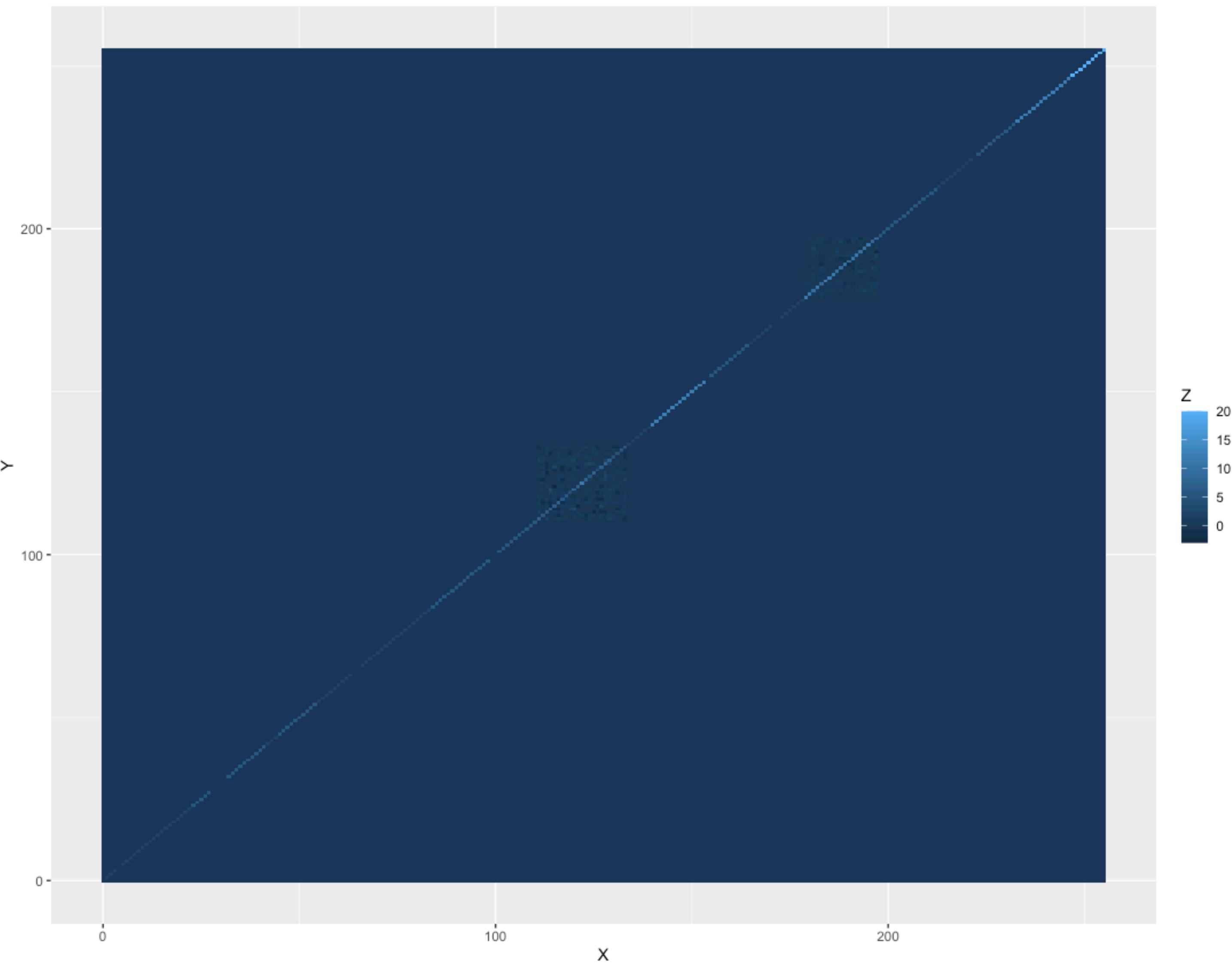
Гамильтониан



transform()

Гамильтониан

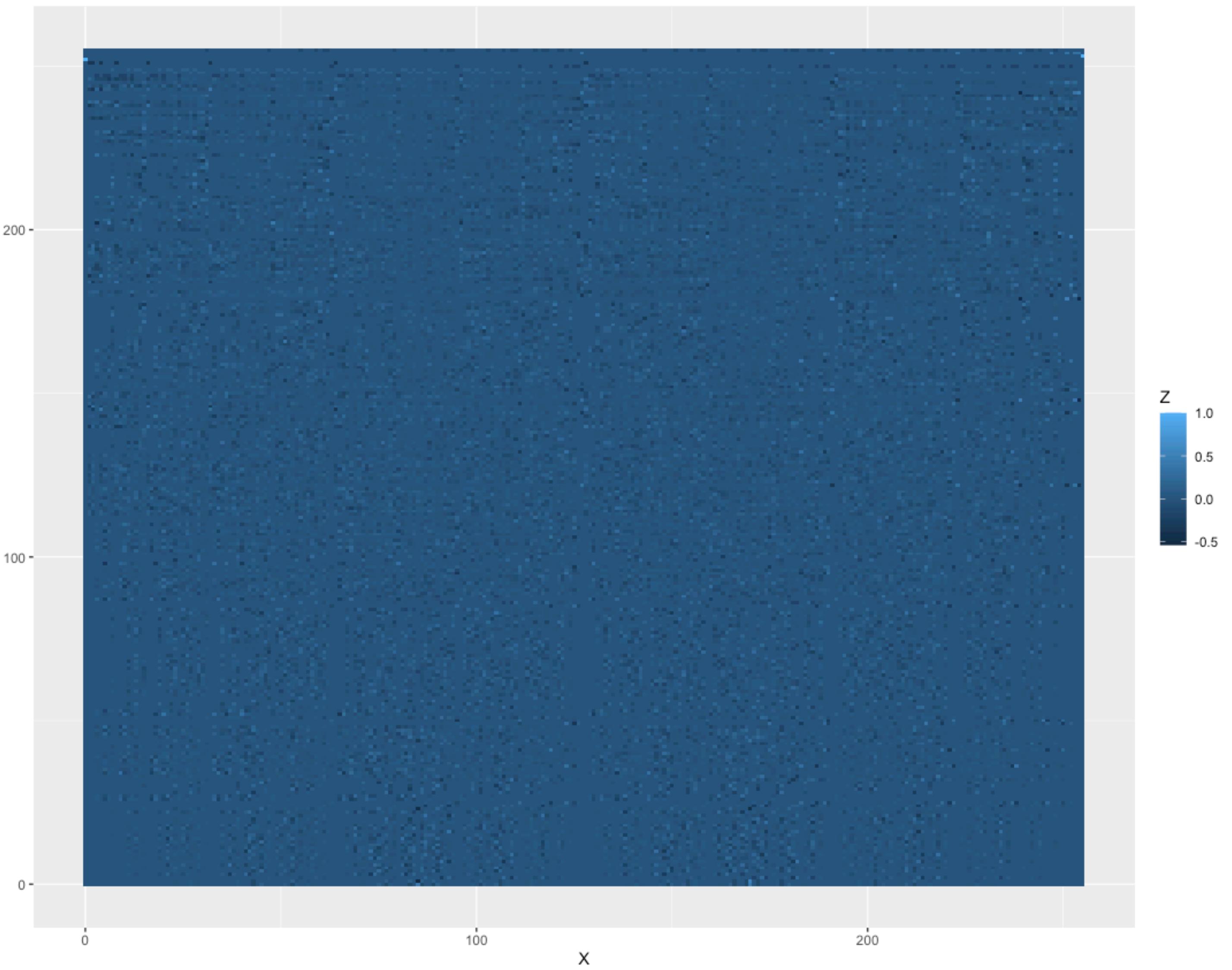
СПИНЫ



transform()

Гамильтониан

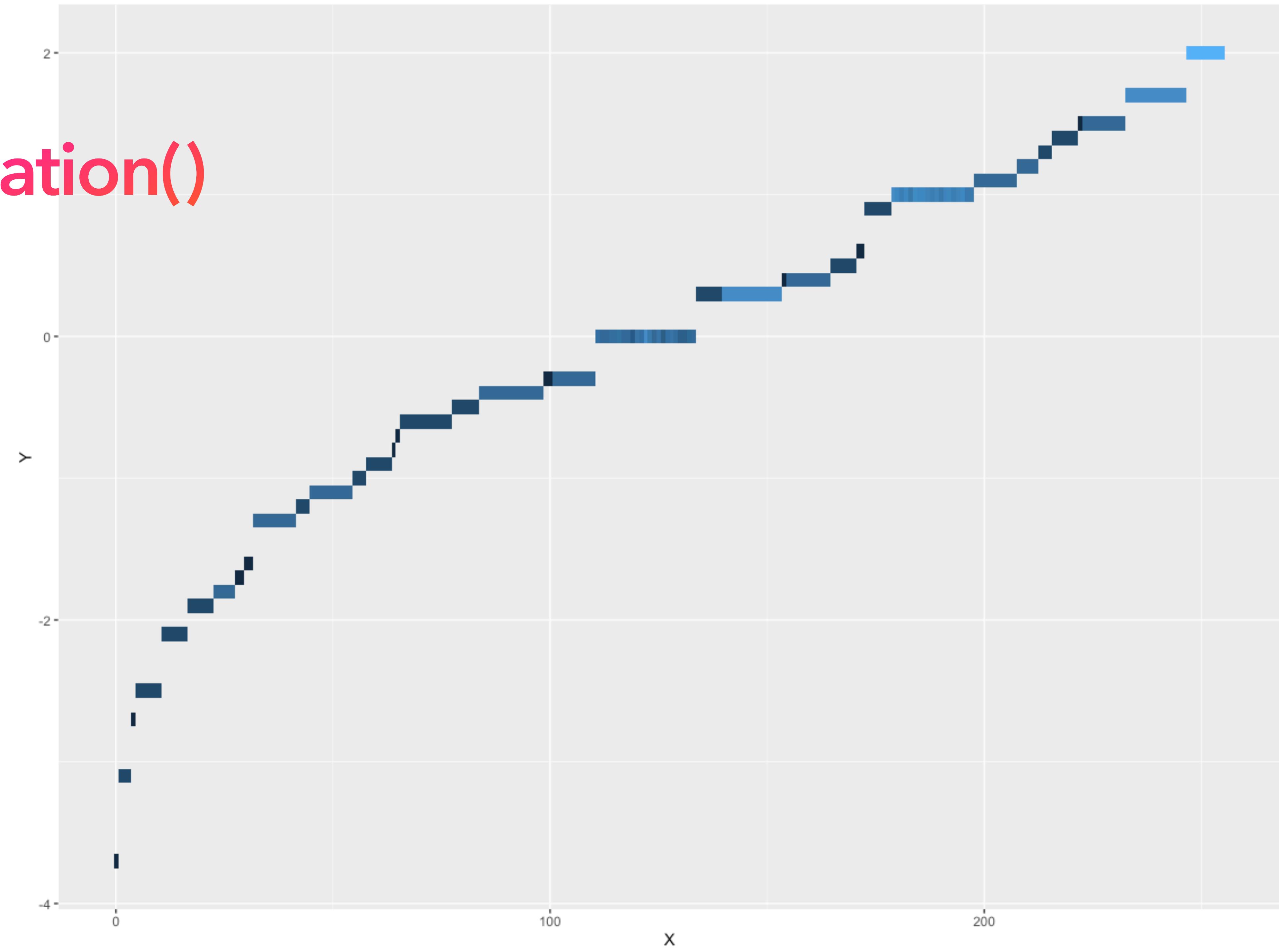
спины



magnetization()

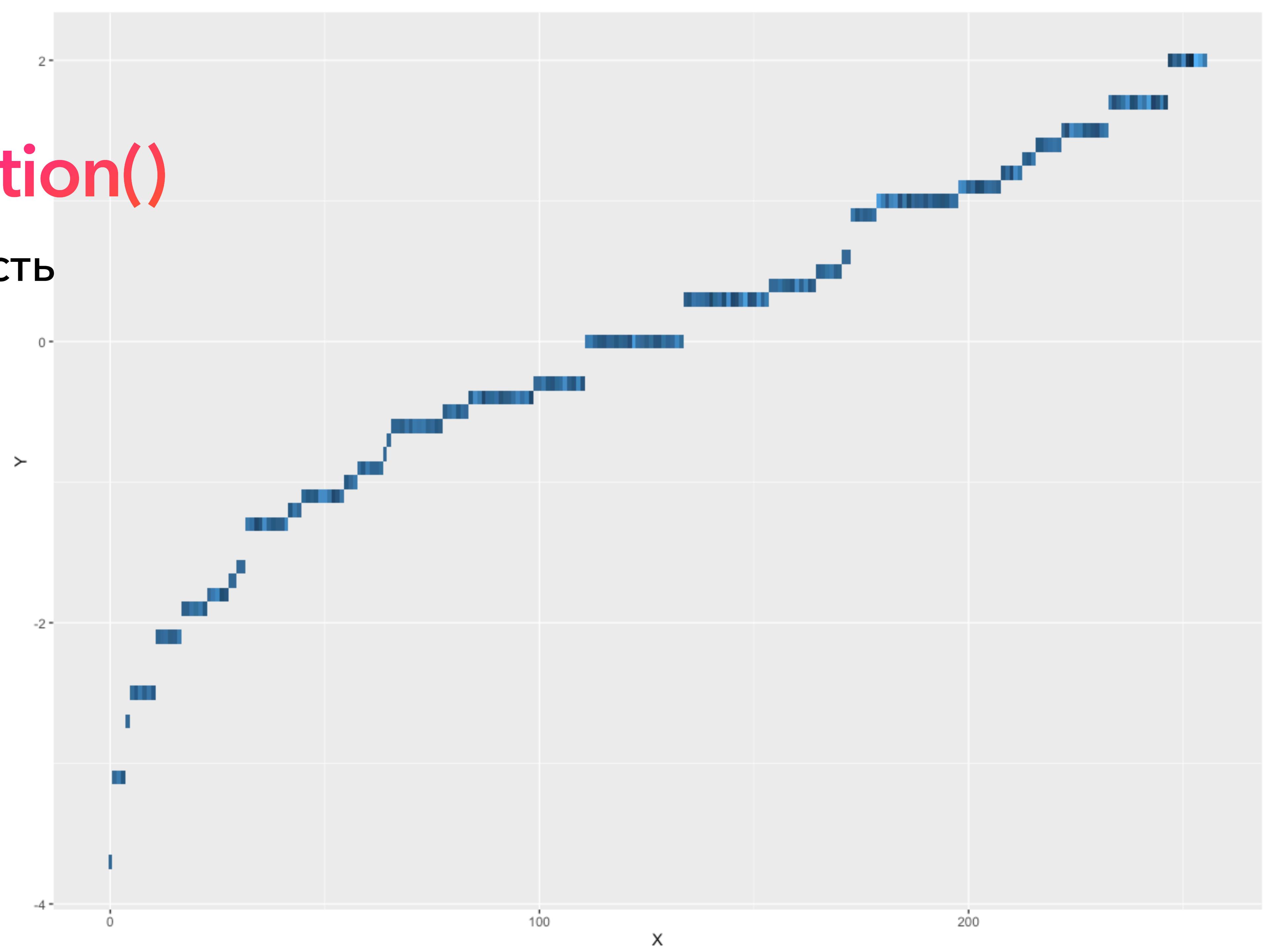
СПИН

Z
4
3
2
1
0

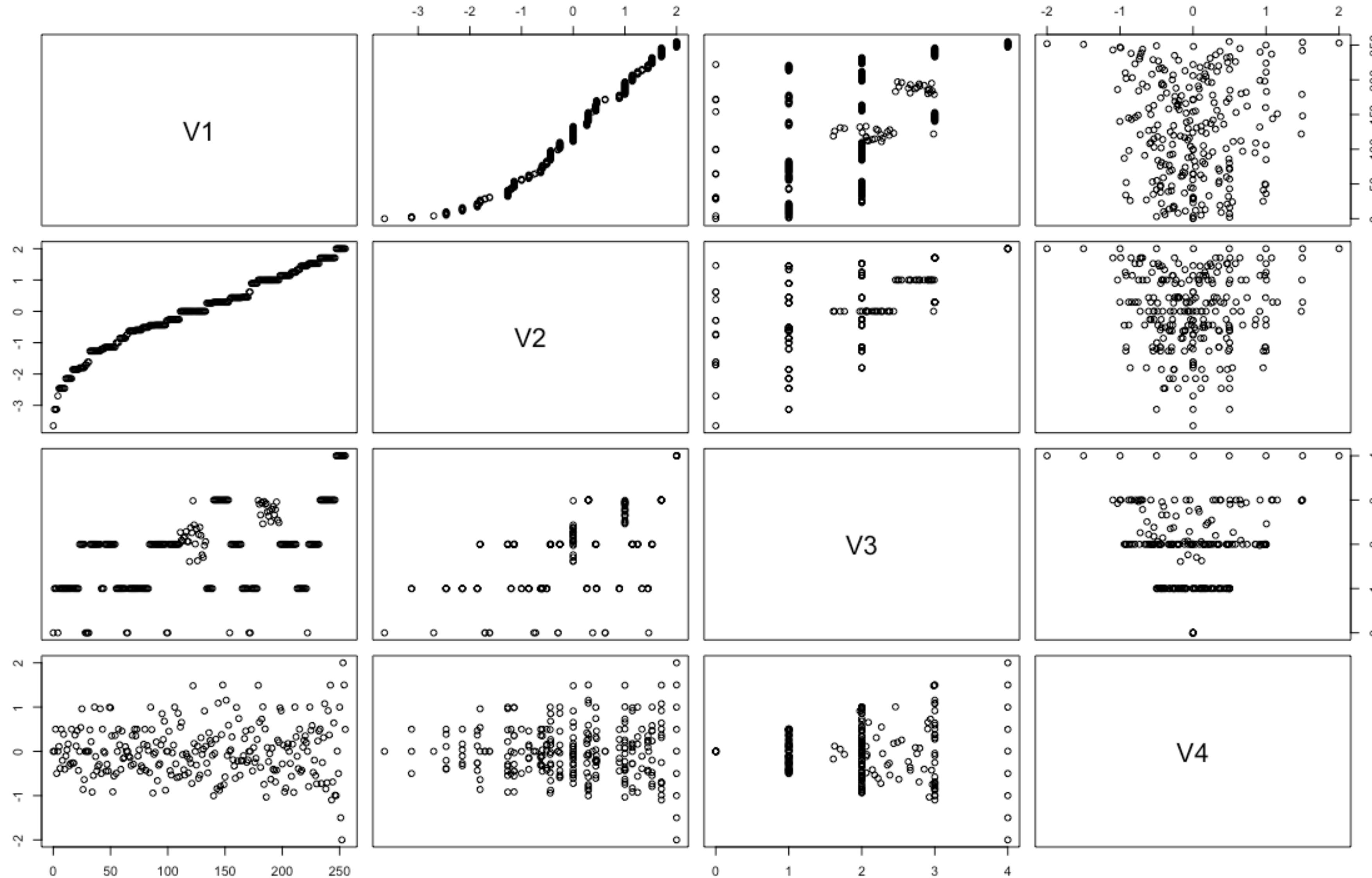


magnetization()

намагниченность



Результат расчета



V1 - матрица узлов цепочки
V2 - энергия
V3 - спин
V4 - намагниченность

Промежуточные результаты

По результатам визуализации отладки dia0 были сделаны выводы:

- удобство визуальной отладки промежуточных результатов
- высокоуровневая абстракция, мотивирующая к вводу DSL^{*}:
 - hamiltonian()
 - diagonalize(nst,mat,vec,enr)
 - spinsquared()
 - transform(nst,mat,vec,spn)
 - magnetization()
- Каждому шагу - соответствует изменение "картины" глобальных данных

*DSL - Domain Specific Language

Гипотеза

SDK по визуальному расчету
будет удобен для
теоретиков



Проверка гипотезы

dia1 - точная
диагонализация с
сохранением
намагниченности

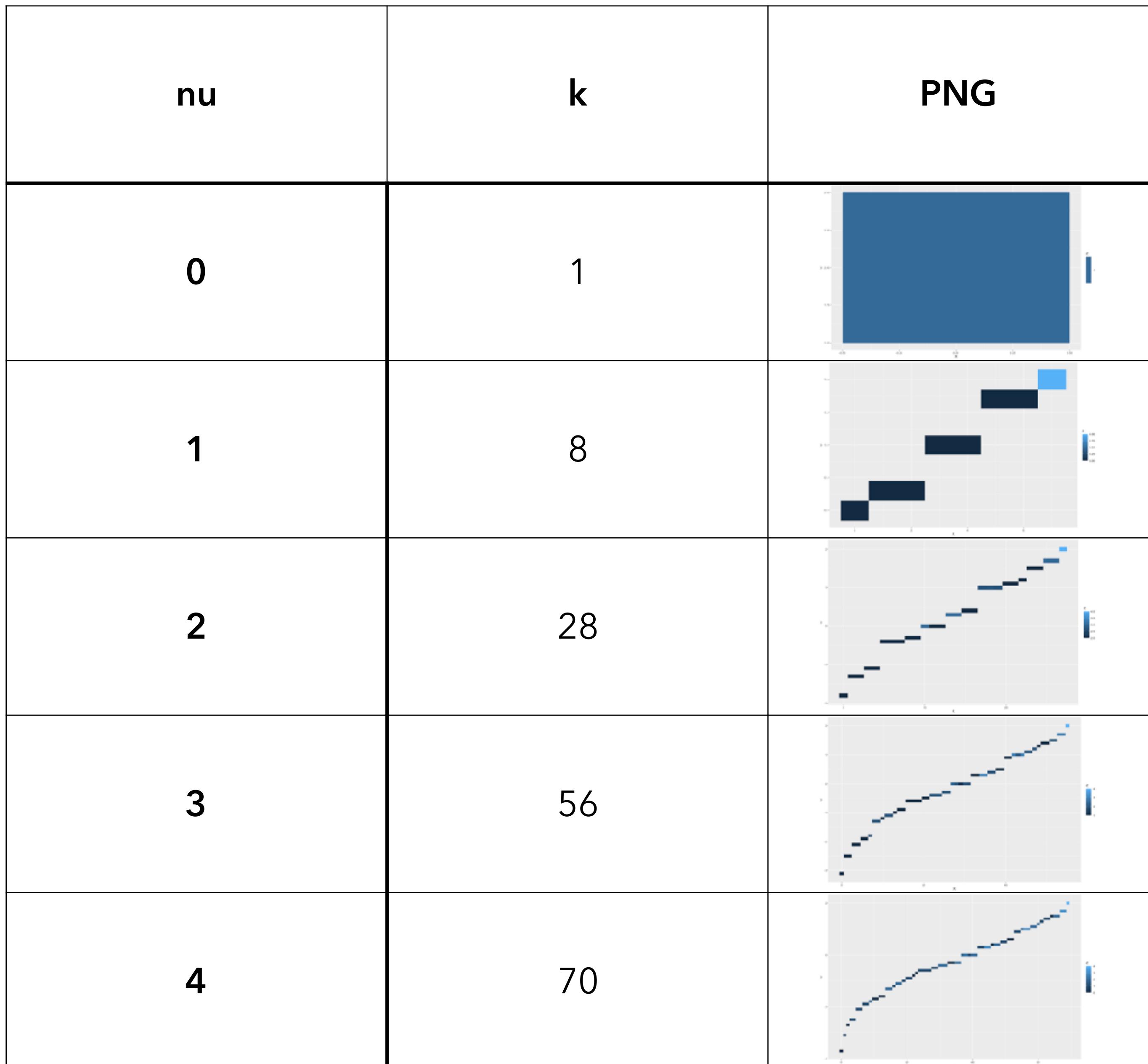


Результат

X - координата узла в решетке

Y - энергия

Z - спин



Проверка гипотезы

dia2 - точная
диагонализация с
использованием
импульсных состояний



Результат

X -координата узла в решетке

Y - энергия

Z - спин

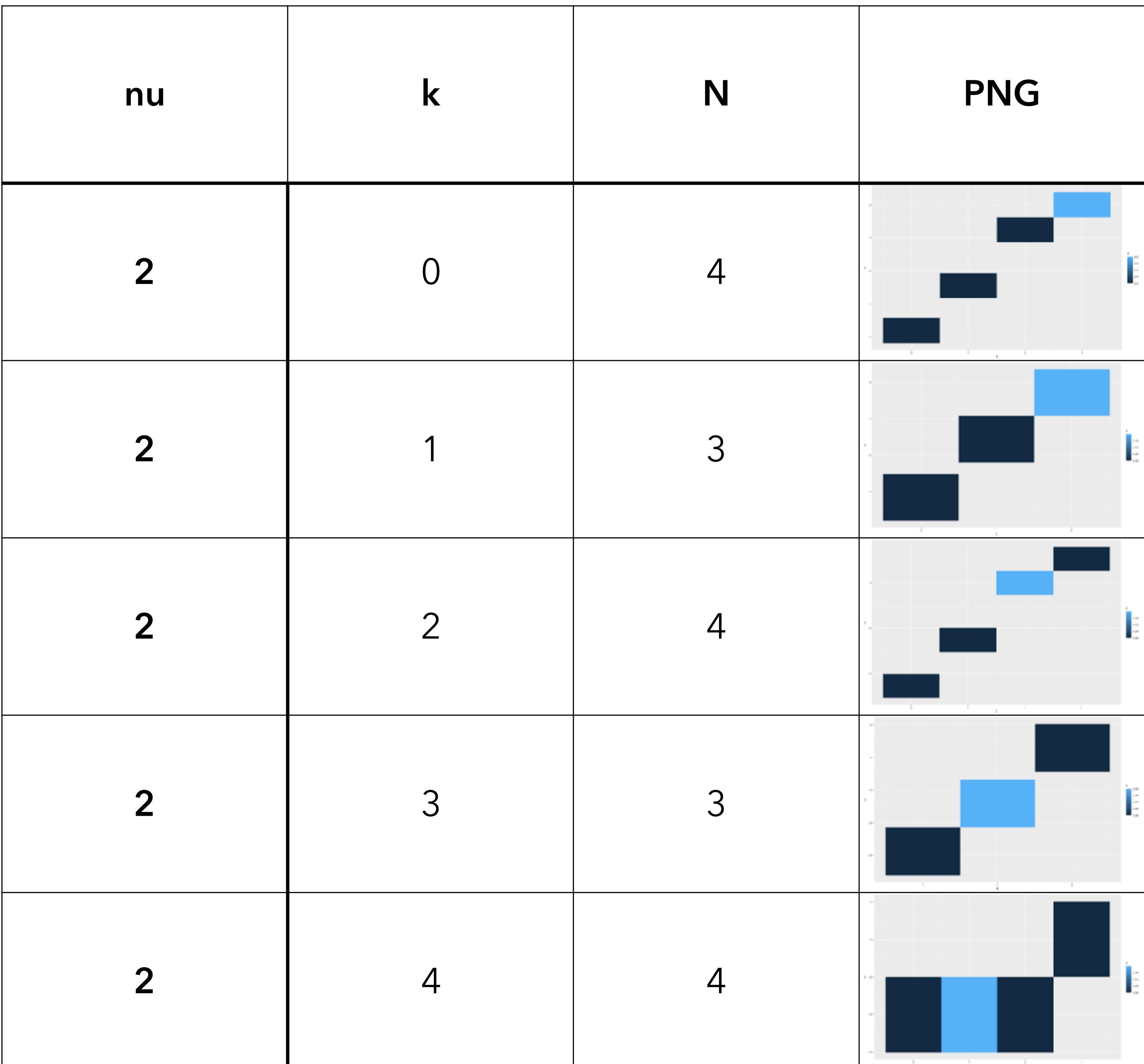
nu	k	N	PNG
0	0	1	
1	0	1	
1	1	1	
1	2	1	
1	3	1	
1	4	1	

Продолжение

X - координата узла в решетке

Y - энергия

Z - спин

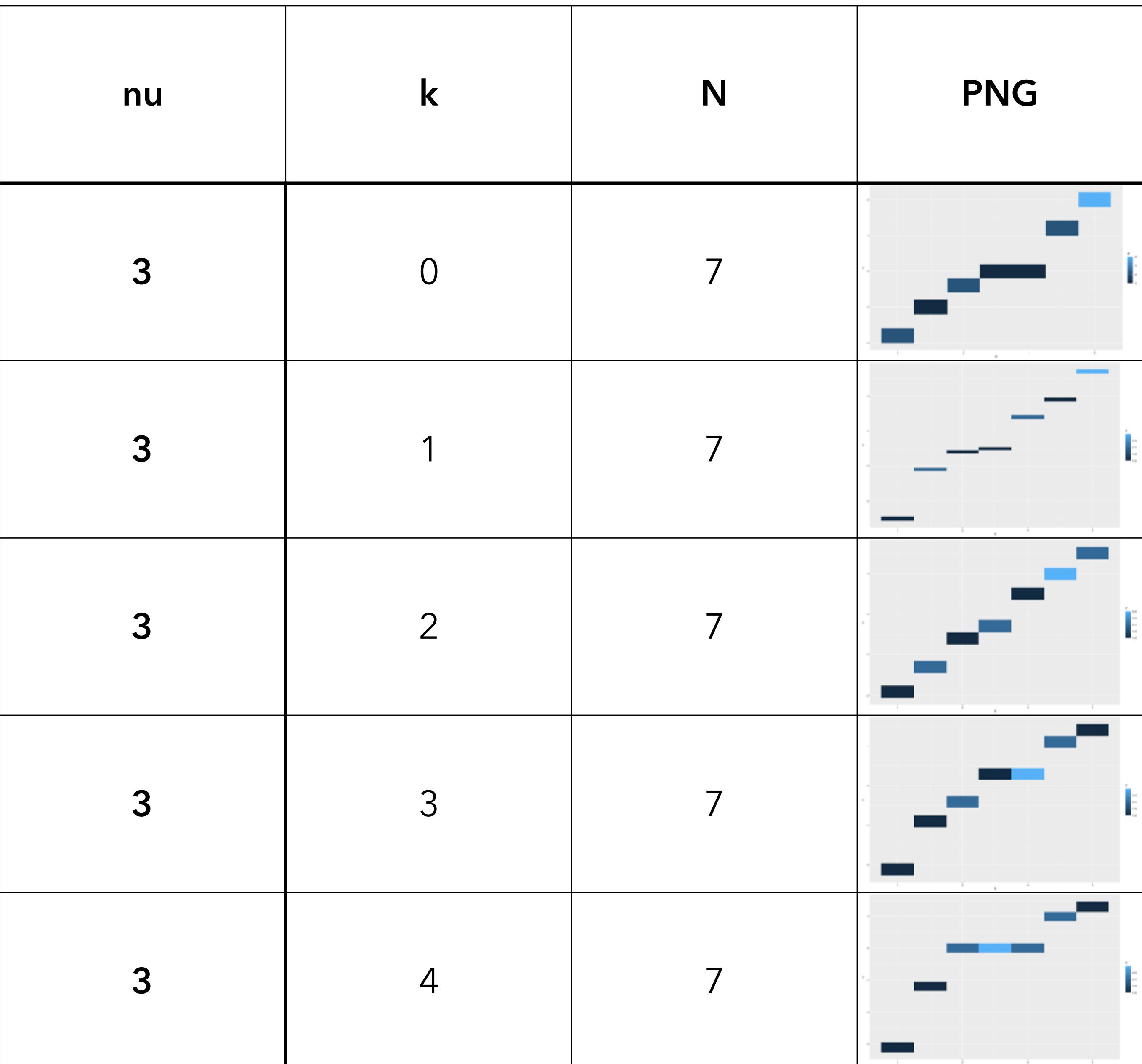


Продолжение

X - координата узла в решетке

Y - энергия

Z - спин

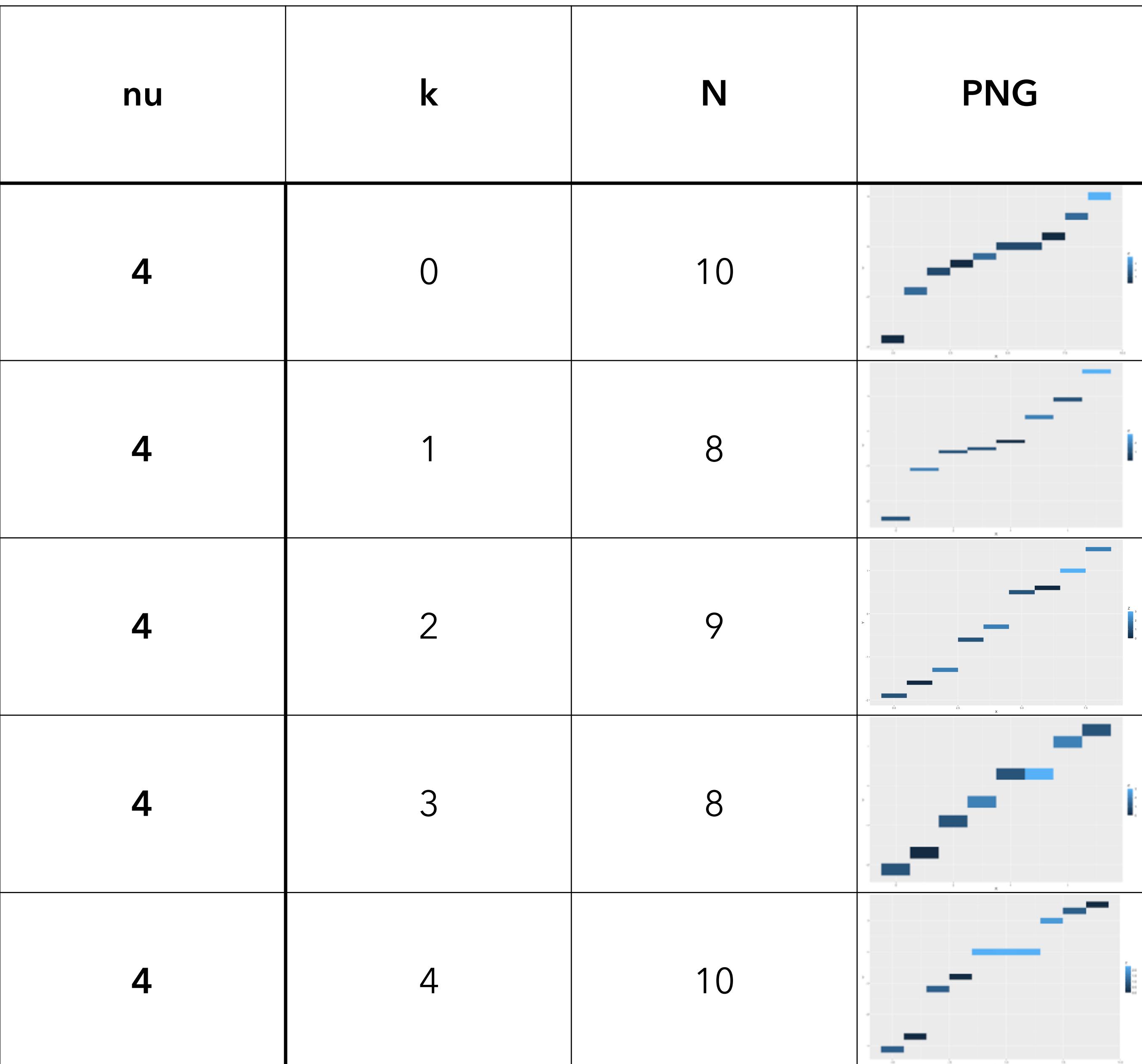


Продолжение

X - координата узла в решетке

Y - энергия

Z - спин



Проверка гипотезы

dia4 - точная
диагонализация с
использованием
полуимпульсных состояний
и симметрии инверсии
спина

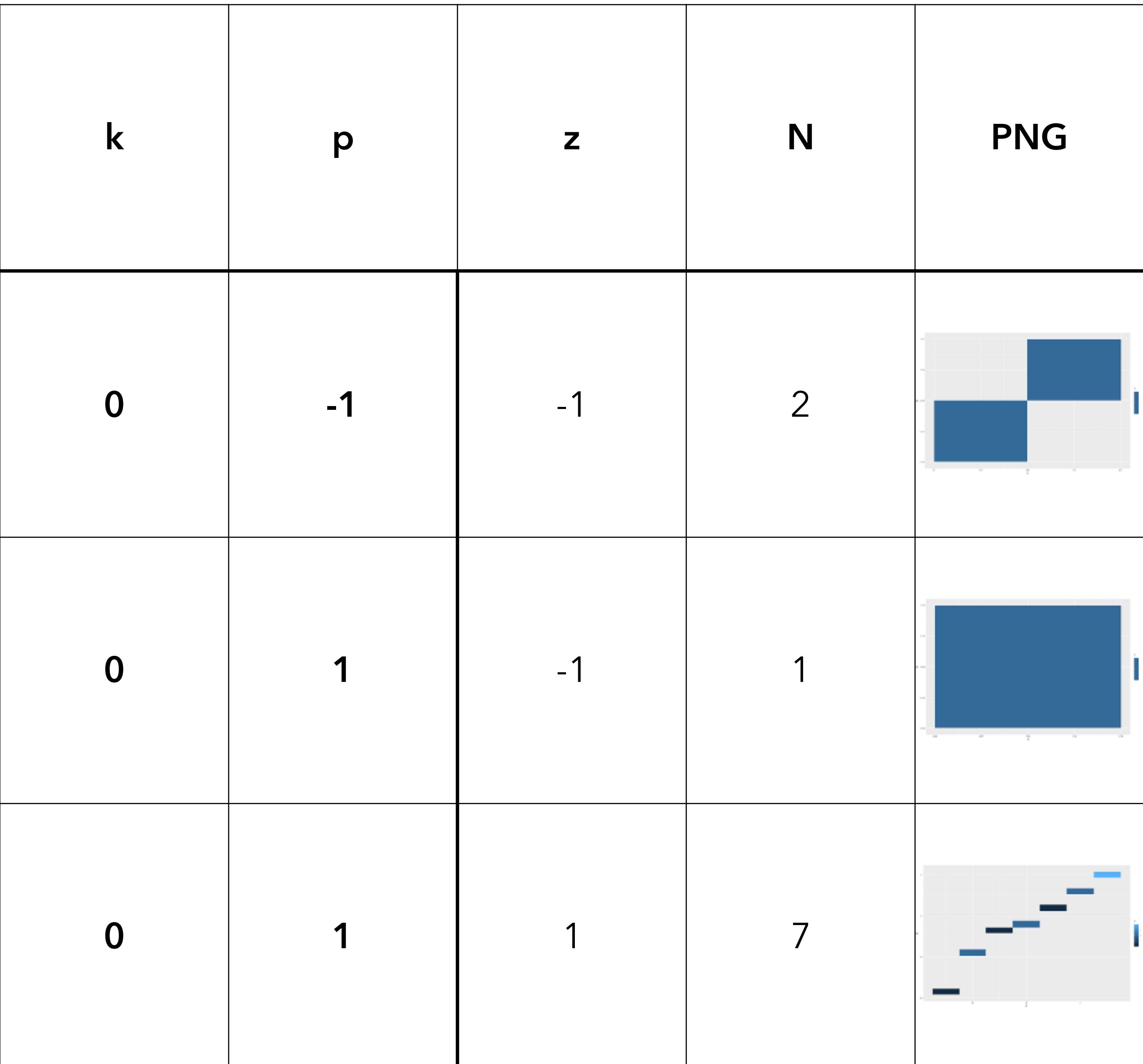


Результат

X - координата узла в решетке

Y - энергия

Z - спин

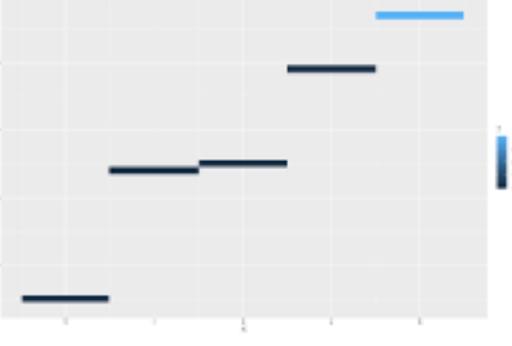


Результат

X - координата узла в решетке

Y - энергия

Z - спин

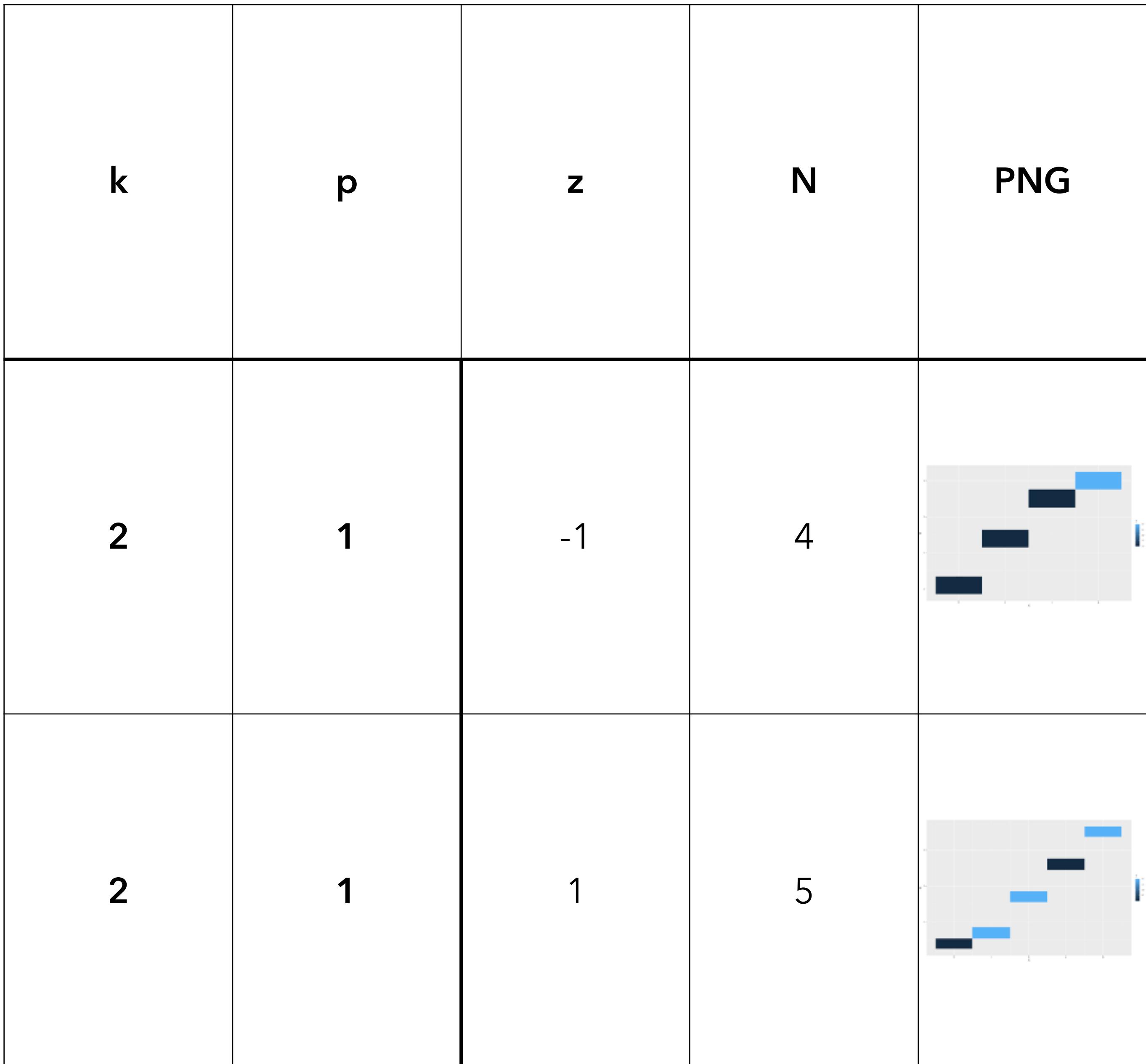
k	p	z	N	PNG
1	2	1	3	
1	1	-1	5	

Результат

X - координата узла в решетке

Y - энергия

Z - спин

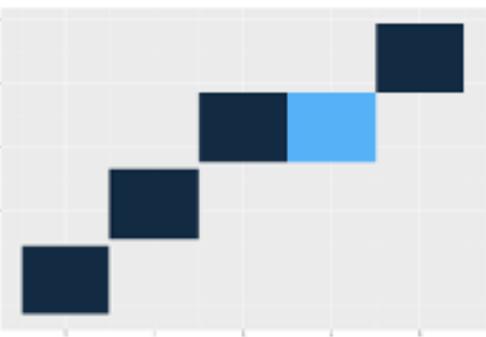
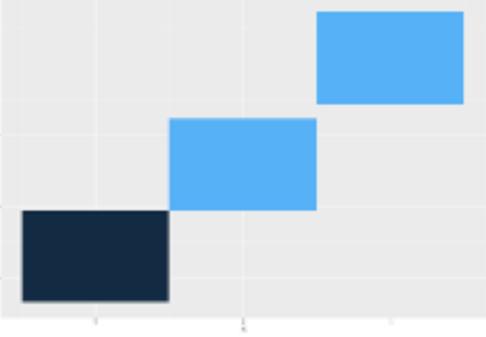


Результат

X - координата узла в решетке

Y - энергия

Z - спин

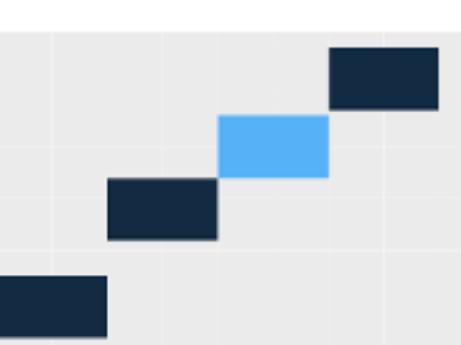
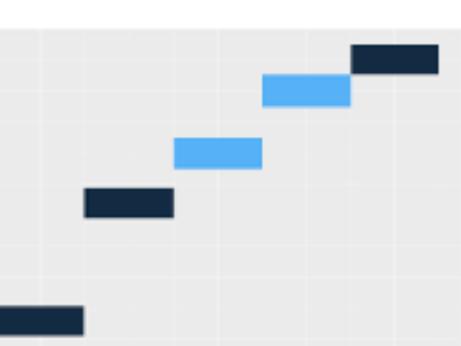
k	p	z	N	PNG
3	1	-1	5	
3	1	1	3	

Результат

X - координата узла в решетке

Y - энергия

Z - спин

k	p	z	N	PNG
4	-1	-1	4	
4	-1	1	1	
4	1	1	5	

ВЫВОД

1. При подтверждении гипотезы были визуализированы многопараметрические расчеты.
2. Наглядность полученных результатов выгодно добавляет ясности в теоретические расчеты, приведенные в предыдущей работе¹, что подтверждает гипотезу о полезности данного SDK и востребованности в теоретических исследованиях





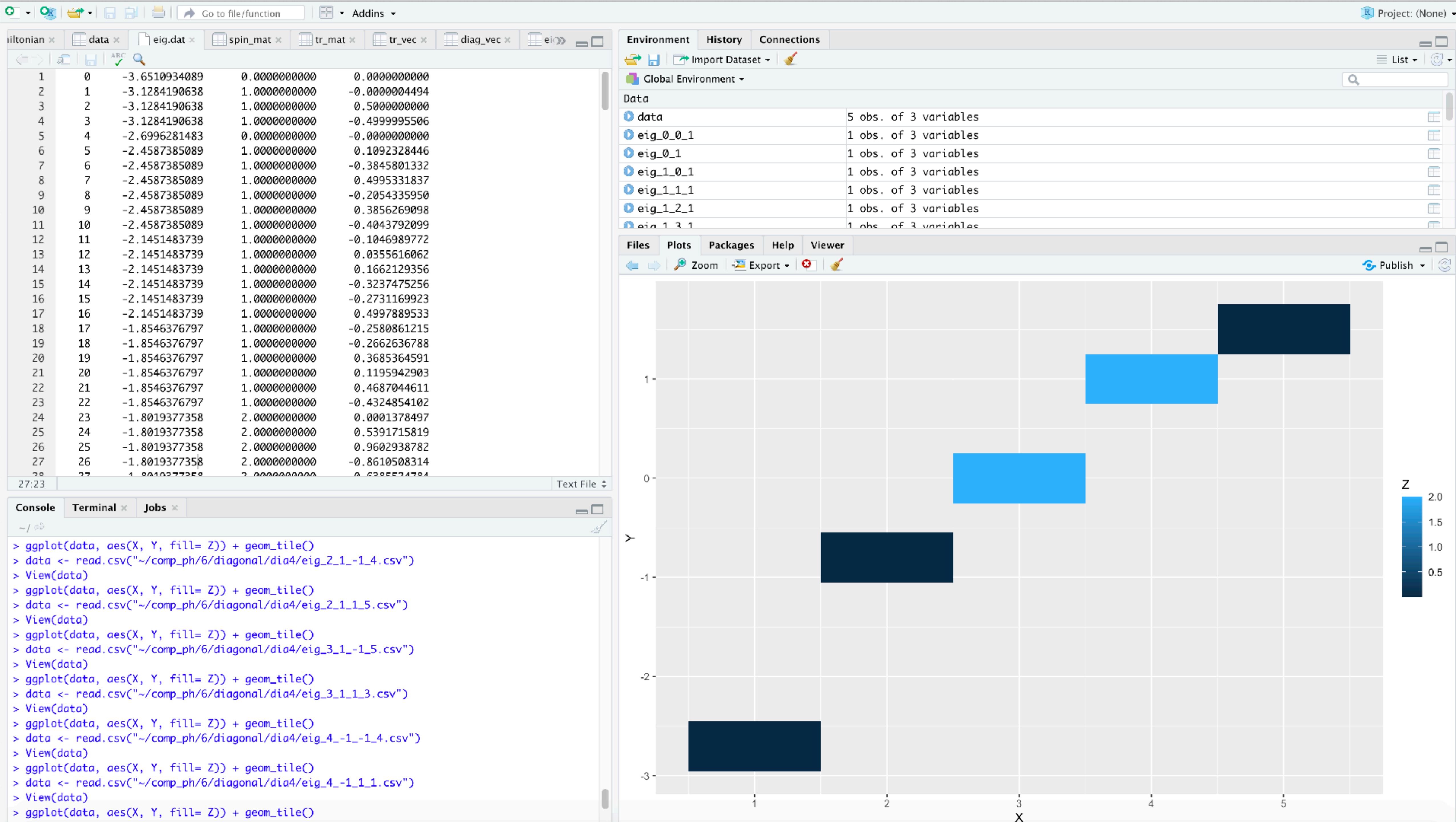
Стек

Fortran - алгоритм расчета
R - визуализация
ggplot2 - heatmap

Варианты использования

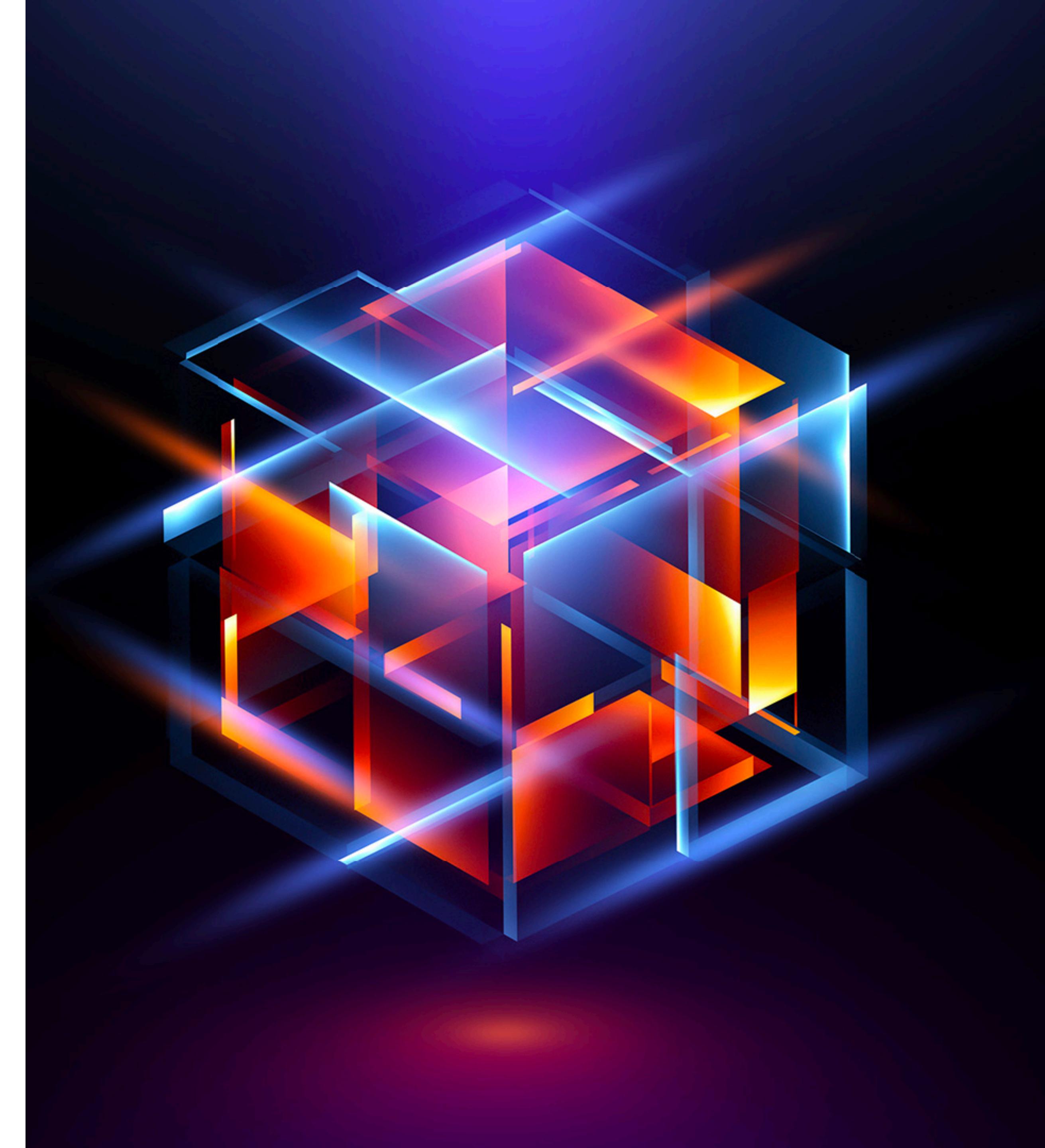
- * Разработанное ПО может быть интегрировано в DS-инструменты в качестве библиотеки
- * Модель расчета может быть расширена для целых спинов





СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ

- juhnowski@gmail.com



Список литературы

1. Tamara Munzner (Author) , Min Chen (Author) , Miquel Feixas (Author) , Ivan Viola (Author) , Anton Bardera (Author) , Han-Wei Shen (Author) , Mateu Sbert (Author) , Christian Tominski (Author) , Heidrun Schumann (Author) , Richard Brath (Author) , Nadieh Bremer (Author) , Shirley Wu (Author) , Nathalie Henry Riche (Editor) , Christophe Hurter (Editor) , Nicholas Diakopoulos (Editor) , Sheelagh Carpendale (Editor) AK Peters Visualization (9 books) https://www.amazon.com/gp/product/B08BHQMY1R?ref_=dbs_dp_rwt_sb_thcv&binding=hardcover - MK, 2020
2. Colin Ware Information Visualization: Perception for Design (Interactive Technologies) 4th Edition - MK, 2020
3. Tableau - www.tableau.com/
4. SAP Lumira - www.sapstore.com/getlumira
5. Microsoft Excel - <https://products.office.com/excel>
6. ClearStory - www.clearstorydata.com/
7. Mathematica - www.wolfram.com/mathematica/
8. MATLAB - www.mathworks.com/products/matlab/
9. Matplotlib - matplotlib.org/
10. R Programming Language - <https://www.r-project.org/>
11. ggplot2 - ggplot2.org/
12. Аношкин Ю.И., Юхновский И.А. - Программное моделирование цепочки Гейзенберга $S=1/2$ - на правах рукописи