

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ

УДК 538.945, 537.624

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕХНОЛОГИЙ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ ДЛЯ РАСЧЕТА ВИХРЕВЫХ СТРУКТУР В ВТСП

© 2026 г. В. И. Герасимова^{а, *}, А. Н. Мороз^{а, **}, А. Н. Максимова^{а, ***}, В. А. Кашурников^{а, ****}

^аНациональный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, 115409 Россия

*E-mail: gerasimova.valya2003@mail.ru

**E-mail: ANMoroz@mephi.ru

***E-mail: ANMaksimova@mephi.ru

****E-mail: VAKashurnikov@mephi.ru

Поступила в редакцию 12.05.2025 г.

После доработки 28.07.2025 г.

Принята к публикации 31.07.2025 г.

Методом Монте-Карло выполнены расчеты намагниченности сверхпроводящего висмутового купрата с различными концентрациями пиннинга. Предложена параллельная вычислительная схема, позволяющая моделировать образцы большого размера путем разбиения их на ячейки и проведения моделирования на нескольких ячейках одновременно. Выполнена валидация получаемых на параллельной схеме результатов путем сравнения с результатами для классической линейной схемы. В рамках разработанной параллельной модели рассчитаны релаксационные кривые образцов сверхпроводника с различными концентрациями пиннинга. Оценена скорость релаксации магнитного потока.

Ключевые слова: высокотемпературный сверхпроводник, намагниченность, пиннинг, вихри Абрикосова, параллельные расчеты

DOI: 10.56304/S2079562926010124

1. ВВЕДЕНИЕ

Современные технологии оказываются все больше заинтересованы в высокотемпературных сверхпроводниках (ВТСП) для создания разнообразных устройств. Одним из актуальных направлений считается разработка сверхпроводящих линейных моторов, в которых ВТСП реализованы в виде обмоток магнитных катушек или псевдо-постоянных магнитов в конструкции ротора [1]. В первом случае ключевым параметром сверхпроводника является критическая плотность тока J_c и ее устойчивость к магнитному полю, а во втором — величина остаточной намагниченности M_{res} . Не менее актуальны и левитационные применения ВТСП, такие как бесконтактные подшипники, кинетические накопители энергии и поезда на магнитной подушке Maglev [2].

Для упомянутых применений определяющую роль в формировании свойств ВТСП играет пиннинг — способность сверхпроводника захватывать магнитный поток на дефектах материала. Для достижения наибольшей эффективности пиннинга применяются различные методы внедрения дефектов в ВТСП. Особую роль в этом играют колончатые дефекты и наностержни, способные за-

хватить большую часть вихревой нити и удерживать на себе магнитный поток при достаточно высоких температурах [3, 4].

Важным параметром сверхпроводника является и скорость магнитной релаксации, характеризующей процесс падения величины остаточной намагниченности ВТСП M_{res} со временем t . На практике ее определяют путем намагничивания образца и оценки величины $S = -d \lg M_{\text{res}} / d \lg t$. Данный параметр зависит не только от концентрации и типа дефектов в сверхпроводнике, но и от температуры и даже от толщины образца, косвенно характеризующей энергию пиннинга вихрей [5]. Похожие данные были получены в [6]. Релаксацию исследуют и в работах, посвященных магнитной левитации: в [2] для стопок из ВТСП-лент второго поколения было показано, что скорость релаксации силы левитации зависит от количества лент в стопке. В работе [7] при исследовании ВТСП-лент различных производителей было показано, что при температурах ниже 20 К скорость релаксации магнитного потока практически не зависит от наличия искусственного пиннинга в образце или от производителя ленты, в то время как выше 30 К колончатые дефекты могут оказывать существенное влияние. В работе [8] проводи-

лись измерения профилей захваченного потока при импульсном намагничивании объемного ВТСП и было показано снижение остаточной намагниченности после выключения внешнего магнитного поля за счет температурной активации вихрей. В работе [9] уделили внимание влиянию наведенного переменного магнитного поля на релаксацию потока из ВТСП и предложили использование экранирующих катушек.

Ввиду достаточно высокой стоимости изготовления ВТСП и создания различных дефектных структур в них большую ценность приобретает численное моделирование, позволяющее предсказать и найти наиболее оптимальные технические важные характеристики сверхпроводника в условиях, реализуемых в конкретном применении. Для моделирования ВТСП применяются различные методы, такие как метод молекулярной динамики [10], численное решение уравнений Гинзбурга–Ландау [11] и метод Монте-Карло [12, 13]. Для моделирования вихревой системы в широком диапазоне магнитных полей, температур и концентраций дефектов и определения магнитных свойств ВТСП целесообразно использовать последний.

На практике ВТСП имеют характерные размеры не менее нескольких миллиметров. Это касается как сверхпроводящих лент второго поколения, обычно имеющих ширину 4 или 12 мм, так и объемных (bulk) поликристаллических сверхпроводников, имеющих форму шайб диаметром от 10 до 100 мм. Для проведения численных расчетов на образцах такого масштаба и предсказания релаксации магнитного потока в них с помощью метода Монте-Карло обычная линейная схема оказывается неприменима ввиду своей высокой вычислительной сложности. В результате появляется необходимость реализации параллельной вычислительной схемы, способной относительно быстро производить расчеты и при этом не допускающей увеличения погрешности метода Монте-Карло. Настоящая работа представляет первые результаты реализации подобной схемы для расчета релаксации магнитного потока в ВТСП.

2. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Моделирование намагниченности рассчитывалось для высокотемпературного сверхпроводника $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ в рамках модели слоистого ВТСП [12–14]. Термодинамический потенциал Гиббса для системы N взаимодействующих вихрей в рамках данной модели может быть представлен в следующем виде:

$$G = N\delta\epsilon + \sum_{ij} U(r_{ij}) + \sum_i U_p(r_{ij}) + U_m + U_{\text{surf}}(r_{ij}^{\text{img}}), \quad (1)$$

где $U(r_{ij}) = U_0 K_0(r_{ij}/\lambda)$ — взаимодействие вихрей друг с другом, K_0 — функция Макдональда, $U_0 = \delta\Phi_0^2/(8\pi^2\lambda^2)$, где Φ_0 — квант магнитного потока, λ — глубина проникновения магнитного поля, δ — толщина образца. Определим остальные слагаемые в потенциале: ϵ обозначает собственную энергию вихревой нити, U_p — взаимодействие вихрей с центрами пиннинга, U_m — с внешним магнитным полем и U_{surf} — с границей образца. Последнее представляется в виде взаимодействия каждого вихря с зеркальными отражениями всех вихрей в образце от границ. На образце действуют жесткие границы по оси x и периодические — по оси y . Потенциал пиннинга имеет вид локальных потенциальных ям вида:

$$U_p(r) = -\alpha \frac{1}{r/\xi + 1} \exp\left(-\frac{r}{2\xi}\right), \quad (2)$$

где α — глубина ямы, r — расстояние между вихрем и дефектом.

Расчеты в рамках настоящей работы проводились при температуре $T = 4.5$ К в магнитных полях до 0.1 Тл. Параметры моделируемого образца были взяты следующими: $\lambda(T = 0) = 180$ нм, $\xi(T = 0) = 2$ нм, $T_c = 84$ К (глубина проникновения магнитного поля, длина когерентности и критическая температура, соответственно). Дефекты добавлялись в образец в виде периодической треугольной решетки, содержащей N_{def} от 90 до 745 точечных дефектов вида (2) с $\alpha = 0.1$ эВ.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

3.1. Расчет намагниченности путем распараллеливания подсчета энергий

Как можно предположить из вида выражения (1), время работы алгоритма Монте-Карло (заключающегося в минимизации потенциала Гиббса вихревой системы за большое количество шагов — около $10^7 - 10^8$) пропорционально второй степени количества вихрей в образце, которое, в свою очередь, пропорционально величине внешнего магнитного поля H и корню квадратному из площади образца. Поэтому при расчете намагниченности для образцов больших размеров имеет смысл прибегнуть к распараллеливанию подсчета парных взаимодействий, т. е. слагаемых $U(r_{ij})$, $U_{\text{surf}}(r_{ij}^{\text{img}})$ и $\sum_i U_p(r_{ij})$ в потенциале (1). Преимуществом такого подхода является применение алгоритма Монте-Карло в его исходном виде без необходимости повторной верификации модели.

На рис. 1 представлены результаты подобного расчета намагниченности образцов размером

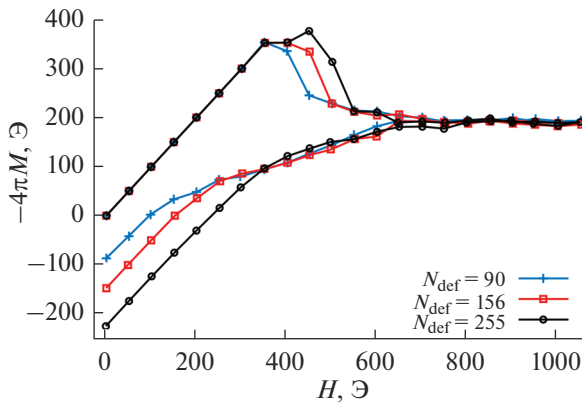


Рис. 1. Полупетли намагниченности для образцов с разным количеством точечных дефектов, полученных путем распараллеливания циклов подсчета энергий вихрей.

5.0 × 4.3 мкм с разным количеством точечных дефектов в треугольной решетке. Полученные точки полностью совпали с результатами аналогичного расчета без распараллеливания. Общее поведение кривых намагниченности также полностью соответствует ожиданиям: с ростом количества дефектов в образце остаточная намагниченность растет, увеличивается ширина петли и поле необратимости.

Стоит отметить, однако, существенный недостаток данного подхода. Такая параллельная схема требует сведения потоков или пересылки данных между ними при каждой попытке выполнения случайного действия (движения, рождения, уничтожения вихря) над вихревой системой, что существенно увеличивает «накладные расходы» на реализацию параллельной схемы. В результате параллельный расчет кривых перемагничивания позволяет добиться ускорения моделирования не более, чем в два раза — даже при использовании относительно большого количества потоков.

На рис. 2 это продемонстрировано в виде зависимости ускорения $s = t_{\text{lapsed}}(N_{\text{threads}})/t_{\text{lapsed}}^{\text{linear}}$ от количества параллельных потоков, на которые разбивается расчет. Здесь t_{lapsed} — общая длительность расчета, N_{threads} — количество потоков, $t_{\text{lapsed}}^{\text{linear}}$ — время расчета без распараллеливания. Из рис. 2 видно, что величина ускорения расчета не зависит от количества дефектов в образце и не достигает идеального предела, при котором увеличение количества потоков пропорционально сокращает время расчета. Поскольку данная схема применялась для образцов, размеры которых на 3 порядка меньше, чем размеры реальных экспериментальных образцов, ее применение в этой связи для более крупных систем кажется нецелесообразным.

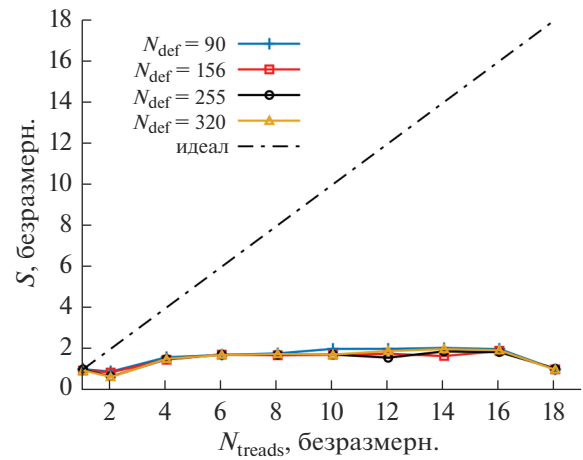


Рис. 2. Зависимость ускорения расчета намагниченности ВСТП с разным числом дефектов от количества потоков для распараллеливания.

3.2. Расчет намагниченности путем разбиения образца на ячейки

Рассмотрим сверхпроводящую пластину размером $L_x \times L_y$ и поделим ее на ячейки размером $d_x \times d_y$. Рассмотрим также слагаемые, входящие в потенциал Гиббса (1). Основной вклад в формирование вихревой плотности в образце вносит слагаемое $U(r_{ij}) = U_0 K_0(r_{ij}/\lambda)$, в состав которого входит функция Макдональда, экспоненциально затухающая на расстояниях $r_{ij} \gg \lambda$. В действительности, при $r \approx 10\lambda$ функция принимает значения, исчезающе малые по сравнению с теми, что справедливы для характерных расстояний между вихрями, поэтому для упрощения и ускорения расчетов можно ввести обрезку $K_0(r/\lambda > 10) = 0$. В результате, если выбрать $d_x, d_y \geq 10\lambda$, то вихри, находящиеся друг от друга через одну ячейку, не будут взаимодействовать. Это позволяет нам реализовать параллельный расчет отдельных участков образца. Принципиальная схема такого подхода приведена на рис. 3. При этом нужно учитывать, что взаимодействием вихрей, находящихся в соседних ячейках, пренебрегать нельзя, поэтому при выполнении расчета для любой ячейки необходимо учитывать и ее ближайшее окружение. Это проиллюстрировано на рис. 4.

Поскольку по оси y в нашей модели действуют периодические граничные условия, размер образца L_y оставим таким же, как в предыдущем параграфе: $L_y = 4.3$ мкм. По оси x зададим размер ячеек $d_x = 2.5$ мкм, что соответствует примерно 14λ и рассмотрим образец, состоящий из 15 таких ячеек. Таким образом, $L_x = 37.5$ мкм. Схема образца приведена на рис. 5. Отметим, что 2.5 мкм

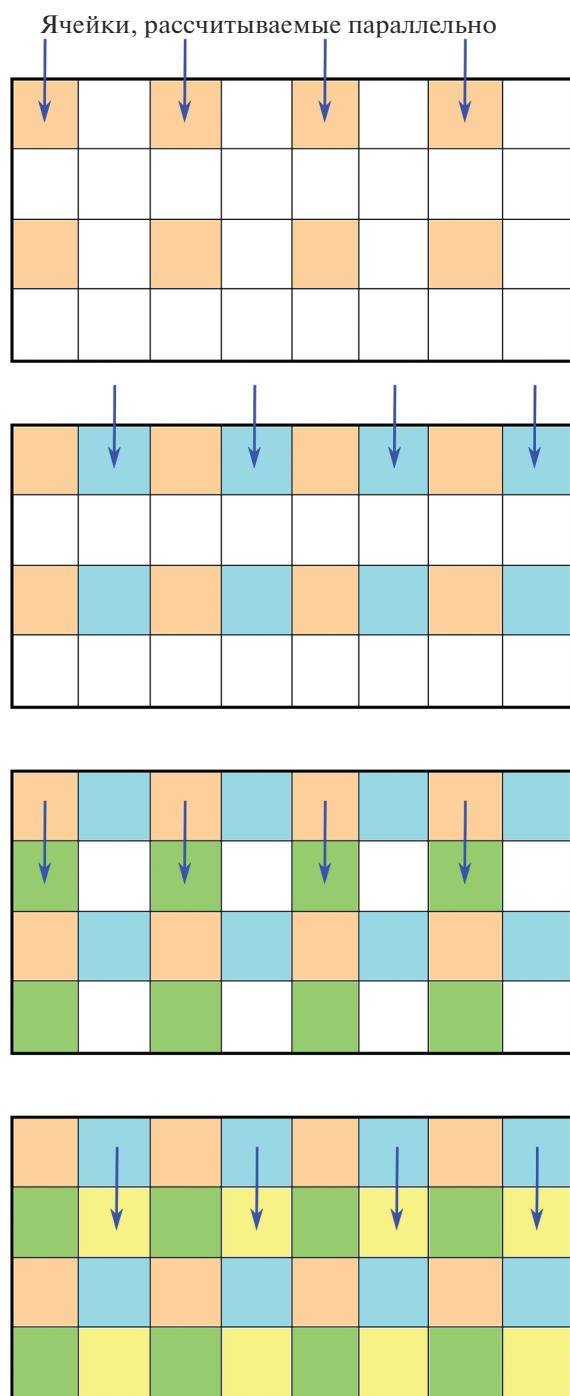


Рис. 3. Схема распараллеливания расчета намагниченности путем разбиения образца на ячейки. Показаны 4 этапа расчета всего образца. Участки, закрашенные одинаковым цветом, рассчитываются параллельно.

составляет половину от размера образца, рассчитанного в предыдущем параграфе.

Преимущество данной схемы заключается в том, что параллельные блоки в этом случае гораздо крупнее (по сравнению с предыдущим парагра-

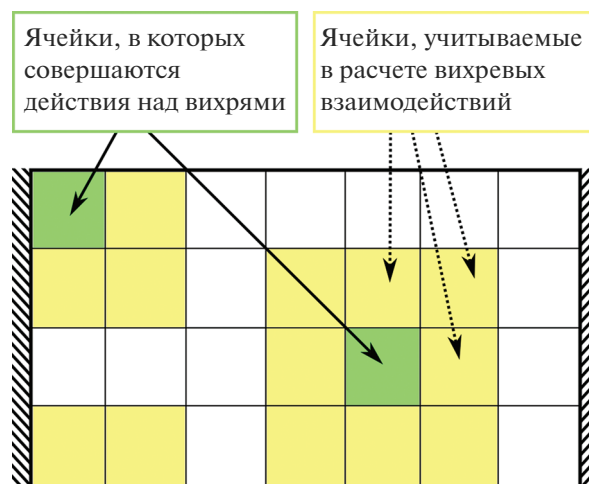


Рис. 4. Схема учета межвихревых взаимодействий при распараллеливании расчета намагниченности путем разбиения образца на ячейки.

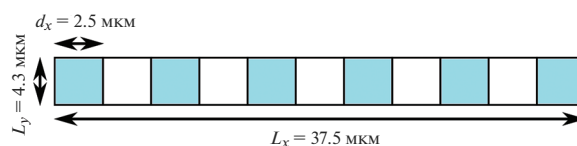


Рис. 5. Геометрия образца, моделируемого путем разбиения на ячейки. Голубым цветом выделены участки, которые рассчитываются одновременно.

фом), и “накладные” затраты на сведение потоков после их завершения оказываются гораздо меньше. Кроме того, эффективность такого расчета с увеличением размера образца будет только расти.

В первую очередь была проведена верификация разработанной модели. Для этого был выполнен расчет намагниченности бездефектного образца в рамках линейной и параллельной схем. Результат приведен на рис. 6. Видно, что кривые практически идеально совпадают, что позволяет говорить о справедливости построенной модели.

На рис. 7 представлены рассчитанные с помощью параллельной схемы релаксационные кривые — зависимости количества вихрей в образце от времени (в шагах алгоритма Монте-Карло) для ВТСП без дефектов и для двух образцов с разными концентрациями центров пиннинга, выстроенных в треугольную решетку. Образцы были намагничены до поля 0.1 Тл, затем поле было выключено, и наблюдался процесс ухода вихрей. Из рисунка видно, что в бездефектном случае вихри полностью уходят из образца примерно за $2 \cdot 10^7$ шагов Монте-Карло (что, по нашим оценкам, соответствует примерно 10 мкс). Образцы с дефектами показывают ненулевую остаточную намагниченность по окончании набора данных, причем количество вих-

рей в обоих образцах в конечных точках релаксационных кривых превышает количество дефектов (соответствующие значения N_{def} обозначены горизонтальными пунктирными линиями), что означает, что в образцах остались свободные вихри, находящиеся в промежутках между дефектами.

На основе полученных данных были оценены значения скорости релаксации S , которые составили около 0.1 для образца с 745 дефектами и 0.16 для образца с 326 дефектами. Данные значения выше, чем приведенные в работе [7] или рассчитанные нами ранее в работе [12], примерно в 5 раз, однако данные расхождения можно объяснить недостаточно длительным расчетом. Из-за очень высокой плотности вихрей на начале расчета участок релаксационной кривой, необходимый для оценки величины S , был едва достигнут (он находится в крайней правой части рисунка 7 в логарифмическом масштабе). Следовательно, истинный линейный участок зависимости $M_{\text{res}}(t)$, по которому следует определять скорость релаксации, не был достигнут. Тем не менее, полученные результаты показывают, что разработанная параллельная схема расчетов пригодна для моделирования намагничивания ВТСП и может быть применена для оценки магнитных свойств сверхпроводников для практических применений.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках настоящего исследования разработана параллельная вычислительная схема для моделирования намагниченности высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) методом Монте–Карло в условиях, приближенных к экспериментальным. Проведенные тестовые расчеты подтвердили корректность алгоритма: результаты полностью согласуются с данными, полученными с использованием существующего линейного метода.

Для образцов размером 4.3×37.5 мкм с различной концентрацией дефектов рассчитаны релаксационные кривые, качественно соответствующие известным литературным данным. Экспериментально оцененные значения скорости магнитной релаксации (порядка 0.1) демонстрируют превышение над ранее опубликованными результатами. Это расхождение, однако, может быть связано с ограниченной продолжительностью моделирования, недостаточной для формирования устойчивого линейного участка в логарифмической зависимости остаточной намагниченности $M_{\text{res}}(t)$.

Несмотря на указанные особенности, работа подтвердила эффективность разработанного параллельного алгоритма для анализа намагниченности ВТСП-материалов. Предложенный подход может быть использован для моделирования магнитных свойств сверхпроводников в прикладных

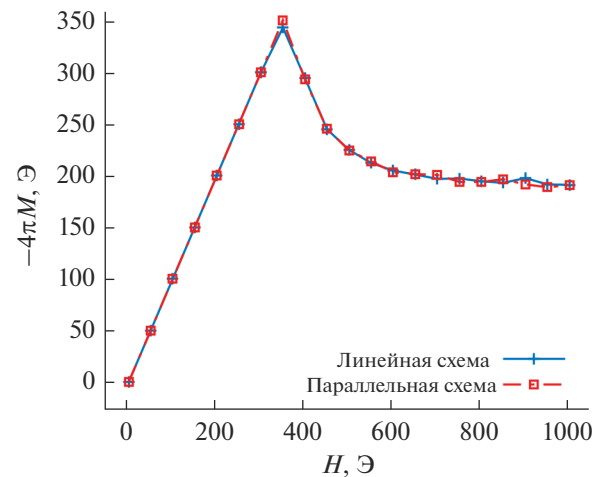


Рис. 6. Намагниченность бездефектного образца, рассчитанная в рамках линейной и параллельной схем.

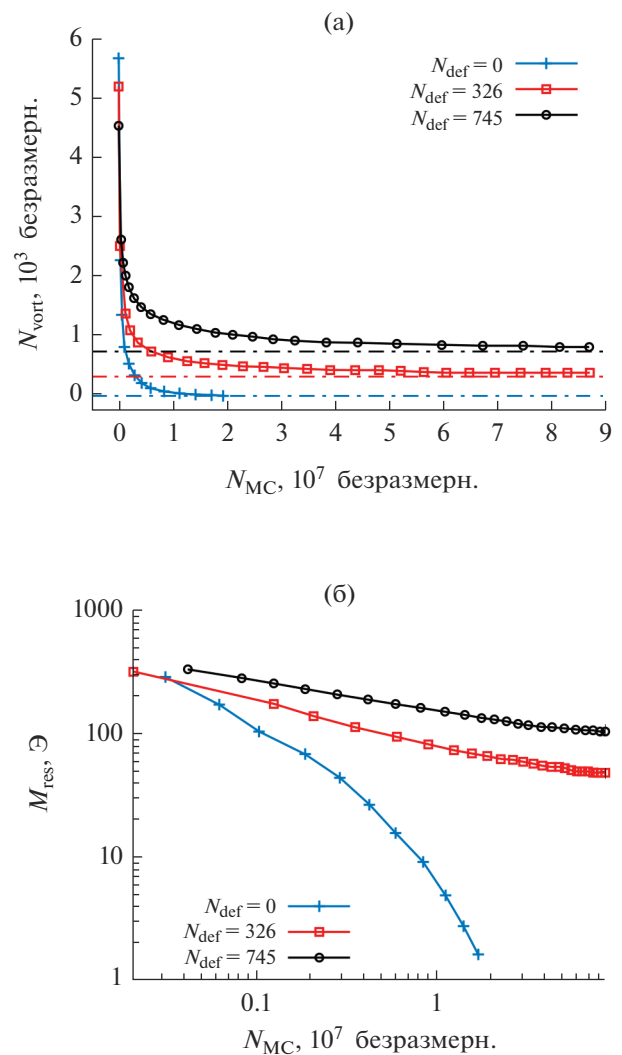


Рис. 7. Релаксационные кривые трех образцов, рассчитанные с помощью параллельной схемы; приведены в обычном (а) и двойном логарифмическом (б) масштабах.

задачах, включая оптимизацию их рабочих характеристик в реальных устройствах.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект государственного задания FSWU-2023-0031).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. Desikan A., de Bruyn B.J.H., Krop D.C.J., Lomonova E.A. // IEEE Trans. Appl. Supercond. 2023. V. 33 (5). P. 5203009. <https://doi.org/10.1109/tasc.2023.3262625>
2. Abin D., Osipov M., Pokrovskii S., Rudnev I. // IEEE Trans. Appl. Supercond. 2016. V. 26 (3). P. 8800504. <https://doi.org/10.1109/tasc.2016.2525924>
3. Vaimala T., Aye M.M., Rivasto E., Zhao Y., Huhtinen H., Paturi P. // Phys. C (Amsterdam, Neth.). 2024. V. 624. P. 1354565. <https://doi.org/10.1016/j.physc.2024.1354565>
4. Medema A.R., Ghigo G., Remillard S.K. // Phys. C (Amsterdam, Neth.). 2021. V. 583. P. 1353849. <https://doi.org/10.1016/j.physc.2021.1353849>
5. Polat O., Sinclair J.C., Zuev Y.L., Thompson J.R., Christen D.K., Cook S.W., Kumar D., Chen Yi., Selvamanickam V. // Phys. Rev. B. 2011. V. 84 (2). P. 024519. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.024519>
6. Miu L., Ivan I., Badica P., Jakob G., Miu D., Mele P., Matsumoto K., Mukaida M., Yoshida Y., Horide T., Ichinose A., Horii S. // Phys. C (Amsterdam, Neth.). 2010. V. 470 (20). P. 1126. <https://doi.org/10.1016/j.physc.2010.05.054>
7. Tsuchiya Y., Funaki S., Ozaki T., Kiuchi M., Yoshida Y. // IEEE Trans. Appl. Supercond. 2022. V. 32 (6). P. 4604405. <https://doi.org/10.1109/tasc.2022.3171190>
8. Kawasumi N., Imamichi H., Tsuchiya M., Yanagi K., Ida T. // IEEE Trans. Appl. Supercond. 2024. V. 34 (3). P. 6800604. <https://doi.org/10.1109/tasc.2024.3365449>
9. Yamagishi K., Tsukamoto O., Ogawa J., Miyagi D. // IEEE Trans. Appl. Supercond. 2010. V. 21 (3). P. 3320. <https://doi.org/10.1109/tasc.2010.2093111>
10. Verga L.G., Vizarim N.P., Carlone M., Venegas P.A. // J. Supercond. Novel Magn. 2019. V. 32. P. 1179. <https://doi.org/10.1007/s10948-018-4821-6>
11. Xue C., Wang Q.-Y., Ren H.-X., He A., Silhanek A.V. // Electromagnetic Science. 2024. V. 2 (2). P. 0060121. <https://doi.org/10.23919/emsci.2024.0012>
12. Maksimova A.N., Gokhfeld D.M., Moroz A.N., Kashurnikov V.A. // Chin. J. Phys. 2024. V. 88. P. 493. <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2023.11.030>
13. Moroz A., Kashurnikov V., Rudnev I., Maksimova A. // J. Phys.: Condens. Matter. 2021. V. 33 (35). P. 355901. <https://doi.org/10.1088/1361-648x/ac0be9>
14. Lawrence W., Doniach S. Proc. 12th Int. Conf. Low Temperature Physics. Kyoto, Japan. 1970. Kanda E. (Ed.). 1971. Tokyo: Keigaku. P. 361.

Application of Parallel Programming Technologies for Calculating Vortex Structures in High-Temperature Superconductors

V. I. Gerasimova¹, *, A. N. Moroz¹, **, A. N. Maksimova¹, ***, and V. A. Kashurnikov¹, ****

¹National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia

*e-mail: gerasimova.valya2003@mail.ru

**e-mail: ANMoroz@mephi.ru

***e-mail: ANMaksimova@mephi.ru

****e-mail: VAKashurnikov@mephi.ru

Received May 12, 2025; revised July 28, accepted July 31, 2025

Abstract—The Monte Carlo method is used to calculate the magnetization of the superconducting bismuth cuprate with different pinning concentrations. A parallel calculation scheme is proposed that allows modeling of large-size samples by dividing them into cells and performing modeling on several cells simultaneously. The results obtained in the parallel scheme are validated by comparing them with the results for the classical linear scheme. Relaxation curves of superconductor samples with different pinning concentrations are calculated within the framework of the developed parallel model. The relaxation rate of the magnetic flux is estimated.

Keywords: high-temperature superconductor, magnetization, pinning, Abrikosov vortices, parallel computations