

11. Cohen M. H. Simple band model for amorphous semiconducting alloys / M. H. Cohen, H. Fritzsche, S. R. Ovshinsky // *Phys. Rev. Lett.* – 1969. – Vol. 22, № 20. – P. 1065–1068.
12. Electronic structure of crystalline and amorphous As_2S_3 and As_2Se_3 / R. Zallen, R. E. Drews, R. L. Emerald, M. L. Slade // *Phys. Rev. Lett.* – 1971. – Vol. 26, № 25. – P. 1564–1567.
13. Kostadinov I. Z. The Urbach tail in amorphous semiconductors / I. Z. Kostadinov // *J. Phys. C: Solid State Phys.* – 1977. – Vol. 10, № 9. – P. L263–L266.
14. Munzar M. Far-infrared spectra and bonding arrangement in Ge–As–S–Se glasses / M. Munzar, L. Tichy // *J. Phys. Chem. Solids.* – 2000. – Vol. 61, № 10. – P. 1647–1652.
15. Optical properties of the As-Ge-Se chalcogenide glass system / A. A. Abd El-Rahman, A.M. Eid, M. Sanad, R.M. El-Ocker // *Journal of Physics and Chemistry of Solids.* – 1998. – Vol. 59, № 5. – P. 825–829.
16. Redfield D. Electric fields of defects in solids / D. Redfield // *Phys. Rev.* – 1963. – Vol. 130, № 3. – P. 914–915.
17. Toyozawa Y. The Urbach rule and exciton-lattice interaction / Y. Toyozawa // *Techn. Report. ISSP A.* – 1964. – Vol. 119. – P. 1–68.
18. Urbach F. The long-wavelength edge of photographic sensitivity and of the electronic absorption of solids / F. Urbach // *Phys. Rev.* – 1953. – Vol. 92, № 5. – P. 1324–1326.

Кевшин Андрей. Особенности оптических свойств халькогенидных стекол и сильно дефектных монокристаллических халькогенидных соединений $A^{IV}B^{VI}$. В статье исследованы особенности оптических свойств халькогенидных стекол и сильно дефектных монокристаллических халькогенидных соединений $A^{IV}B^{VI}$, к которым относится CdS, облученный быстрыми реакторными нейтронами. Показано, что, несмотря на разную природу нарушения периодичности потенциальной энергии электрона в дефектных кристаллических телах и стеклах, характер оптических электронных переходов в области собственного поглощения света одинаковый, о чём свидетельствует выполнение правила Урбаха для этих двух систем. Но при этом в стеклообразных веществах параметр Δ , определяющий размытие и наклон края поглощения, не зависит от температуры, тогда как в дефектных кристаллах он растёт с увеличением температуры ($\sim 7 \cdot 10^{-5}$ эВ / К для CdS облученного нейтронами дозой $\approx 3 \cdot 10^{18}$ см⁻²). Такой рост обусловлен дополнительной ионизацией дефектных центров и, соответственно, изменением величины случайного электрического поля и связанного с ним потенциала в дефектных кристаллических полупроводниках.

Ключевые слова: стеклообразные сплавы, оптическое поглощение, правило Урбаха.

Kevshyn Andriy. Features of the Optical Properties of Chalcogenide Glasses and Highly Defective Monocrystalline Chalcogenide Compounds $A^{IV}B^{VI}$. In this paper investigation of peculiarities of the optical properties of chalcogenide glasses and highly defective monocrystalline chalcogenide compounds $A^{IV}B^{VI}$ which include CdS irradiated with fast reactor neutrons is presented. It has been shown that despite the different nature of the disruption of periodicity of the potential energy of electron in defective crystalline solids and glasses, character of optical electronic transitions in the intrinsic absorption region is the same, as evidenced by the realization of Urbach's rule for these two systems. However, in the glassy substances characteristic energy, which determines the blur and the slope of the absorption edge is independent of temperature, whereas it increases with increasing temperature for the defective crystals ($\sim 7 \cdot 10^{-5}$ eV/K for CdS irradiated with neutrons, dose of $\approx 3 \cdot 10^{18}$ cm⁻²). This increase is due to the additional ionization of the defect centers and thus the change of value of the random electric field and the associated potential in the defective crystalline semiconductors.

Key words: glassy alloys, optical absorption, Urbach's rule.

Стаття надійшла до редколегії
17.05.2013 р.

УДК 004.942

Леся Булатецька

Проблеми моделювання неоднорідних систем у теорії перколяцій

У роботі подано базові поняття теорії перколяцій. Розглянуто проблеми комп'ютерного моделювання перколяційних задач для решіток великих розмірів. Досліджено розв'язання проблеми прискорення роботи

алгоритмів пошуку порога протікання та моделювання нескінченного кластера через застосування паралельних обчислень засобами багатоядерних графічних процесорів і технології CUDA.

Ключові слова: перколяція, поріг протікання, нескінченний кластер, графічний процесор, технологія CUDA.

Постановка наукової проблеми та її значення. Аналіз досліджень цієї проблеми. Теорія протікання (перколяції) вивчає утворення нескінченних зв'язаних об'єктів, що складаються з окремих елементів, у неупорядкованих середовищах. Моделі перколяційного типу використовують для опису різних систем. Теорію успішно застосовували для опису процесів розповсюдження рідин і газів у пористих середовищах [11], зміни властивостей провідності шару (перехід діелектрик-провідник), фазового переходу парамагнетик-ферромагнетик, поширення мікротріщин у матеріалі [9], зміни властивостей напівпровідників при їх легуванні, теорії стрибкової провідності [8], якості високотемпературних надпровідників [3] та ін. Будучи досить загальною математичною моделлю неупорядкованих середовищ, теорія перколяції являє собою потужний та універсальний математичний апарат. Водночас не всі задачі теорії перколяції розв'язано. Багато результатів тяжко отримати з експерименту, тому в цьому випадку проводять комп'ютерне моделювання, що призводить до пошуку та дослідження нових алгоритмів.

Формулювання мети та завдань статті. Мета роботи – розглянути деякі проблеми, які виникають при комп'ютерному моделюванні процесів перколяції, запропонувати методи їх розв'язання.

Виклад основного матеріалу й обґрунтування отриманих результатів дослідження.

У найбільш простому формулюванні задачі теорії перколяції є просторова структура (решітка), вузли або зв'язки якої можуть перебувати у двох станах – зайнятому й вільному. Наприклад, розглянемо квадратну сітку 3×3 (рис.1). Зафарбуємо частину квадратів чорним кольором. У нашому випадку їх три. Частка зафарбованих квадратів становить $p = 1/3$. Можна вибирати квадратики випадково та незалежно, а можна ввести які-небудь правила. У першому разі говорять про випадкову перколяцію (математики називають її ще перколяцією Бернуллі), у другому – про корельовану. Одне з основних завдань, яке розв'язує теорія перколяції, – визначити, при якій частці p_c зафарбованих квадратів виникає ланцюжок чорних квадратів, що з'єднує верхню й нижню сторони нашої сітки. Легко здогадатися, що для сітки кінцевого розміру такі ланцюжки можуть виникати при різних концентраціях (рис. 2). Однак якщо розмір сітки L спрямувати до нескінченності, то критична концентрація стане цілком визначеною (рис. 2). Це строго доведено рис. 3. Таку критичну концентрацію називають порогом протікання [7].

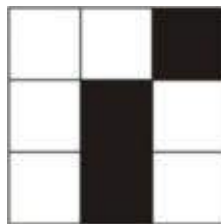


Рис.1. Перколяція на квадратній решітці 3×3



Рис. 2. Різні варіанти заповнення решітки

У випадку, коли чорні квадрати – це провідник, а білі – ізолятор, то до тих пір, доки не виникне ланцюжок провідних ділянок, що зв'яже верх і низ зразка, той буде ізолятором. Якщо розглядати чорні квадрати як молекули, то створення ланцюжка молекул, який пронизує всю систему, відпо-

відає утворенню гелю. Якщо чорні квадрати – це мікротріщини, то утворення ланцюжка таких тріщин призведе до руйнування, розколонування зразка. Отже, теорія протікання дає змогу описати процеси різної природи, коли при плавній зміні одного з параметрів системи (концентрації чогось) властивості системи змінюються стрибком. Навіть такої простої моделі виявляється достатньо, щоб описати, наприклад, фазовий перехід парамагнетик-феромагнетик, процес поширення епідемії або лісової пожежі.

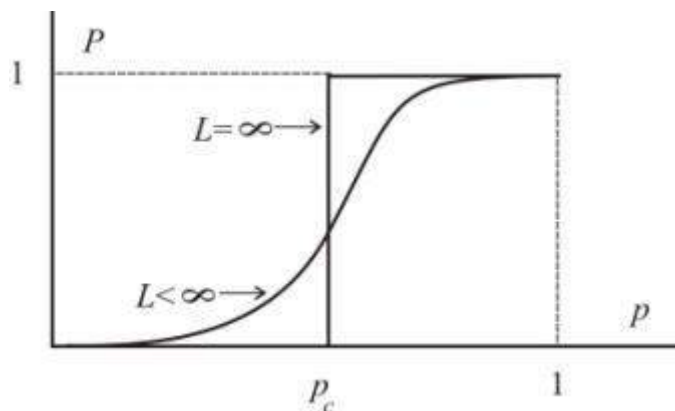


Рис. 3. Імовірність виникнення перколяції P залежно від частки заповнених вузлів p . Плавна крива відповідає решітці скінченного розміру, ступінчаста – нескінченно великого

Ланцюжок зв'язаних об'єктів, наприклад чорних квадратів, у теорії протікання називається кластером (cluster (англійською) – *гроно*). Кластер, який з'єднує дві протилежні сторони системи, називається перколяційним (percolating) або нескінченним (infinite). Перколяційний перехід – геометричний фазовий перехід. Поріг протікання, або критична концентрація, розділяє дві фази: в одній існують кінцеві кластери, в іншій – один нескінченний кластер.

Завдання теорії протікання полягає в описі кореляцій між відповідними фізичними та геометричними характеристиками аналізованих середовищ. Найпростішими й, відповідно, найбільш вивченими є структури, що ґрунтуються на постійних решітках. Для них зазвичай розглядають завдання вузлів і зв'язків (рис. 4), які виникають коли описуються фізичні властивості, наприклад електропровідності решіток, із яких видалено певну частку $(1-p)$ випадково вибраних вузлів (рис. 4, *a*) або частку обраних випадковим чином зв'язків (рис. 4, *b*). У задачі зв'язків розв'язується питання: яку частку зв'язків потрібно видалити (перерізати), щоб сітка розпалася на дві частини? У задачі вузлів блокують вузли й шукають, при якій частці блокуваних вузлів сітка розпадеться. Квадратна сітка є тільки однією з можливих моделей. Можна розглядати перколяції на трикутній, шестикутній сітках, деревах, тривимірних решітках. Сітка не обов'язково повинна бути постійною. Розглядаються процеси й на випадкових решітках.

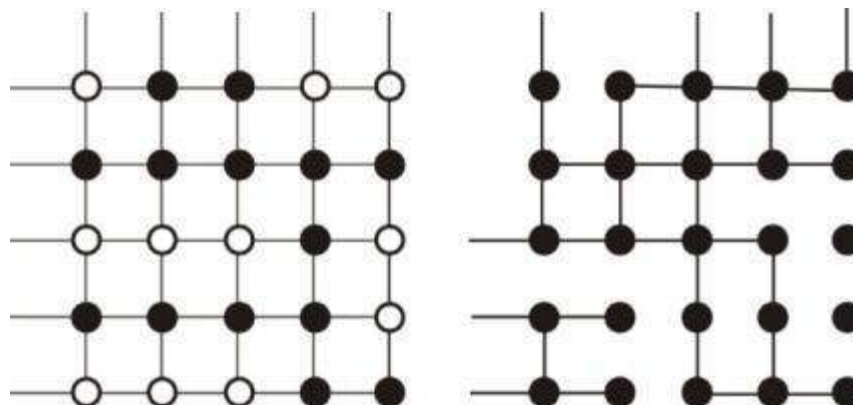


Рис. 4. Задача вузлів (ліворуч) і зв'язків (праворуч) на квадратній решітці

Наприклад, експериментальні результати, отримані при дослідженні впливу легування на електричні властивості керамік ZnSe [4; 5], можна пояснити, виходячи з теорії протікання. Дані кераміки – це неоднорідні системи, які складаються із монокристалічних зерен ZnSe, розділених приповерхневими багатими дефектами областями. Спеціально нелеговані зразки, або зразки з малою концентрацією легуючої домішки, наприклад міді, $N_{Cu} 3 \cdot 10^{-6} \text{гCu/гZnSe}$ мають малу питому електропровідність ($\sigma < 10^{-10} \text{См/см}$) (рис. 5). При збільшенні концентрації міді провідність керамік зростала й при концентрації Cu \sim від 10^{-5} до 10^{-4}гCu/гZnSe відбувається різке зростання (у 10^7 разів) (рис. 5). При збільшенні концентрації міді в ділянці міжзернових границь із великою концентрацією дислокацій випадає фаза Cu_2Se . Монокристали Cu_2Se мають значно менший опір, ніж ZnSe. При невеликому вмісті міді внаслідок флуктуації розподілу її концентрації низькоомні включення із Cu_2Se , які є напівпровідниками *p*-типу провідності, утворюються лише між окремими зернами або зовсім не утворюються, і в цьому випадку струм через зразок контролюється монокристаликами ZnSe кераміки. При збільшенні ступеня легування кількість низькоомних міжзернових включень зростає і при деякому пороговому значенні концентрації міді (що визначається розчинністю Cu в ZnSe) вони перекриваються й утворюють нескінченний кластер, який у вигляді сітки пронизує весь зразок і контролює провідність кераміки. Тобто в цьому випадку маємо типову задачу теорії протікання неоднорідних систем із добре вираженим порогом протікання [4]. Судячи з рис. 5, початок порога протікання для керамік ZnSe, легуваних міддю лежить при концентрації $N_{Cu} 5 \cdot 10^5 \text{гCu/гZnSe}$ [4]. Також при концентрації міді $N_{Cu} 3 \cdot 10^{-4} \text{гCu/гZnSe}$ характер температурної залежності електропровідності змінюється й вона набуває властивостей металічної провідності, що описується зменшенням електропровідності з підвищенням температури [4]. Слід зазначити, що для керамік ZnSe:Li поріг протікання настає при концентрації літію приблизно на порядок меншій [5].

Для опису електричних властивостей керамік ZnSe найбільш підходить перколяційна задача, сформульована для неперервного середовища [9]. Зазвичай, кількісний склад матеріалу не дає уявлення про його структуру й властивості, але, коли концентрація деякої речовини має значення, близьке до критичного, саме кількість починає відігравати визначальну роль, радикально змінюючи геометричні та фізичні параметрами матеріалу. Вивчення кореляцій між ними зручно здійснювати використовуючи комп'ютерне моделювання з урахуванням особливостей досліджуваних матеріалів.

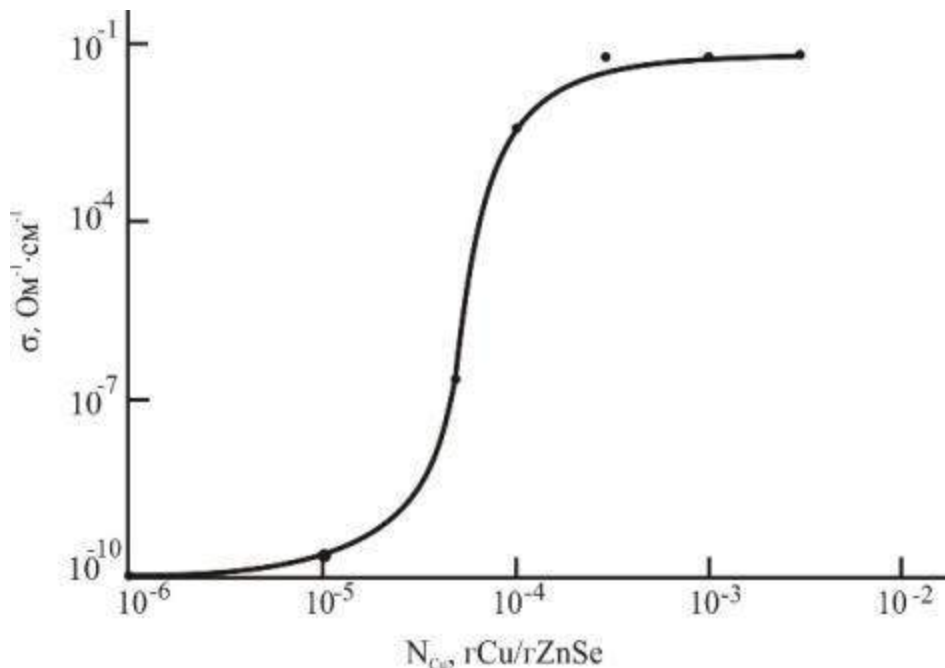


Рис. 5. Залежність питомої електропровідності зразків ZnSe:Cu від концентрації міді; температура вимірювання $\sim 293\text{K}$ [3]

При розв'язанні перколяційних задач за допомогою ЕОМ здебільшого застосовують метод Монте-Карло, який дає змогу моделювати будь-який процес, на протікання якого впливають

випадкові фактори [7; 9]. При цьому проводять велику кількість статистичних дослідів на великих об'єктах, що вимагає ефективних алгоритмів для обробки результатів. Чим більше число дослідів, тим точніший результат ми отримаємо, але проведення великої кількості експериментів вимагає великих часових затрат. Точність результатів моделювання залежить також і від розміру модельованої ділянки, а збільшення розмірів решітки призводить до збільшення часу обчислення. Автори роботи [10], вивчаючи чисельне моделювання процесів перколяції з витисненням, зробили розпаралелення своєї програми за дослідом засобами OpenMP на чотириядерній системі. OpenMP (Open Multi-Processing) являє собою набір директив, процедур і функцій, призначених для програмування багатопотокових програм на багатопроцесорних обчислювальних системах із спільною пам'яттю. Усі обчислення проводяться на центральних процесорах CPU (Central Processing Unit). В OpenMP паралельні обчислення реалізуються за допомогою багатопоточності, у якій головний потік (master) створює набір підлеглих потоків (slave) і задача розподіляється між усіма даними потоками. Ці потоки виконуються паралельно на обчислювальній системі з декількома процесорами, при цьому не обов'язково, щоб кількість потоків збігалася з числом процесорів [1]. Розпаралелювання за статистикою дає лінійний ріст прискорення роботи програми, що перевірено й, очевидно, це повинно виконуватись і для систем із великою кількістю ядер. Аналіз прискорення та ефективності засвідчив, що розпаралелювання за кількістю статистичних випробувань вигідно здійснювати, коли $N_{MC}/L \geq 10$, де N_{MC} – число експериментів, L – кількість вузлів. Починаючи з $L=256$, коли умова $N_{MC}/L \geq 10$ порушується, розпаралелювання тільки за статистикою вже не вигідне, оскільки розрахунок одного експерименту займає тривалий час [10].

Одним із найбільш відомих алгоритмів із розподілу кластерів та пошуку порога протікання є алгоритм Хошена-Копельмана [7]. Результатом реалізації алгоритму Хошена-Копельмана є сформований масив, що відображає розподіл кластерів і з наявних виділяє нескінченний кластер, якщо такий є. За допомогою нескінченного кластера можливий підрахунок порога перколяції, який, зі свого боку, пов'язаний із різними характеристиками фазового переходу I-роду. Обробка великих обсягів даних із використанням алгоритму Хошена-Копельмана – дуже ресурсомістке завдання відносно часу виконання. Виходячи з цього, стверджуємо, що однозначно необхідна його оптимізація. Застосування паралельних обчислень, імовірно, є одним із методів прискорення роботи цього алгоритму. Автори роботи [10] розв'язували цю проблему з використанням на кожному кроці росту кластера паралельної реалізації алгоритму Хошена-Копельмана. При цьому вони ділили решітку на смуги й кожен процесор досліджував свою смугу. У кінці роботи здійснювався обмін граничними даними між процесорами. Автори отримали лінійну залежність росту прискорення для чотириядерної системи, яке виявилось дещо меншим, ніж при розпаралелюванні за статистикою. Слід очікувати, що прискорення лінійно зростатиме при збільшенні кількості ядер у процесорі.

На сьогодні інтерес викликають переважно властивості решіток, які мають дуже велике число вузлів (наприклад 10^{15}). Такі решітки можуть слугувати моделлю плівки, що складаються з атомів. Дійсно, зазвичай, відстань між атомами в конденсованих речовинах (рідинах, кристалах) порядку $3 \cdot 10^{-8}$ см. Тому плівка площею 1 см^2 така тонка, що атоми займають лише один шар, який складається з 10^{15} атомів. Задача визначення ймовірності того, що поріг протікання для сітки з дуже великого числа вузлів N приймає те чи інше значення, є основною в теорії протікання. Змоделювати такі решітки за допомогою ЕОМ дуже складно, оскільки це вимагає багато ресурсів. У зв'язку з цим великий інтерес викликає використання нових технологій – графічних процесорів (ГП, англ. Graphics Processing Unit, GPU) і технології CUDA [2]. Технологія CUDA (Compute Unified Device Architecture), розроблена компанією Nvidia, являє собою мову програмування зі своїм компілятором та бібліотеками для програмування ГП GPU (Graphics Processing Unit) фірми Nvidia. Нині архітектура ГП така, що вони дають змогу одночасно обробляти велику кількість даних (не обов'язково графічних), і тим самим проводити чисельні розрахунки великих обсягів. Застосування технології CUDA доповнить наявні технології розпаралелювання. Підвищення продуктивності графічних процесорів призвело до того, що на сьогодні кількість ядер у ГП сягає декількох тисяч. На цих ядрах можна запустити кілька тисяч паралельних ниток [2]. У роботі [6] показано, що використання графічних процесорів дає змогу значно прискорити виконання розрахунків задач газодинаміки. У двовимірному випадку для 2000 вузлів прискорення обчислень задачі газової динаміки, проведеної на графічному процесорі, у 10 разів більші, порівняно з розрахунками, здійсненими за допомогою технології OpenMP на чоти-

рьох ядрах процесора [6]. Використання графічних процесорів дасть змогу розробляти нові паралельні алгоритми для проведення інтенсивних математичних розрахунків.

Висновки та перспективи подальшого дослідження. Отже, розвиток сучасних технологій, зокрема створення більш продуктивних багатоядерних процесорів та вдосконалення засобів паралельного програмування, дасть змогу оптимізувати моделі й алгоритми перколяційних задач, збільшити точність результатів за рахунок можливості моделювання об'єктів більшої розмірності.

Джерела та література

1. Антонов А. С. Параллельное программирование с использованием технологии OpenMP / А. С. Антонов. – М. : Изд-во МГУ, 2009. – 77 с.
2. Боресков А. В. Основы работы с технологией CUDA / А. В. Боресков, А. А. Харламов. – М. : ДМК-Пресс, 2010. – 232 с.
3. Донцова Е. С. Компьютерное моделирование качества высокотемпературных сверхпроводников / Е. С. Донцова // Вестник МГТУ им. Н. Э. Баумана. Машиностроение. – 2012. – № 88. – С. 206–213.
4. Оптические и электрические свойства ZnSe:Cu / В. В. Булатецкий, Г. Е. Давыдюк, В. С. Манжара, О. И. Проскура // Неорганические материалы. – 2001. – Т. 37, № 3. – С. 283–287.
5. Оптические и электрические свойства поликристаллического ZnSe:Li // В. В. Булатецкий, Г. Е. Давыдюк, В. С. Манжара, О. И. Проскура // Неорганические материалы. – 2002. – Т. 38, № 6. – С. 669–673.
6. Рыбакин Б. П. Применение графических процессоров для решения задач газовой динамики с учётом уравнений химической кинетики / Б. П. Рыбакин, Е. В. Егорова, Л. И. Стамов // Вычислительные методы и программирование. – 2013. – Т. 14. – С. 31–37.
7. Тарасевич Ю. Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы / Ю. Ю. Тарасевич. – М. : Наука, 2002. – 112 с.
8. Шкловський Б. И. Электронные свойства легированных полупроводников / Б. И. Шкловський, А. Л. Эфрос. – М. : Наука, 1979. – 416 с.
9. Эфрос А. Л. Физика и геометрия беспорядка / А. Л. Эфрос. – М. : Наука, 1997. – 200 с.
10. Яппарова А. А. Распараллеливание алгоритмов численного моделирования процессов перколяции с вытеснением / А. А. Яппарова, С. А. Маякова // Вестник УГАТУ. Управление, вычислительная техника и информатика. – 2010. – Т. 14, № 4 (39). – С. 160–165.
11. Koplik J. Percolation and capillary fluid displacement / J. Koplik, D. Wilkinson, J. F. Willemsen // The Mathematics and Physics of Disordered Media. – 1983. Vol. 1035/ – P. 169–183.

Булатецкая Леся. Проблемы моделирования неоднородных систем в теории перколяций. В работе представлены базовые понятия теории перколяций. Рассмотрены проблемы компьютерного моделирования перколяционных задач для решёток больших размеров. В работе изучаются пути решения проблемы ускорения работы алгоритмов поиска порога протекания и моделирования бесконечного кластера методом применения параллельных вычислений. Для ускорения расчётов предлагается использовать возможности современных графических карт и технологии CUDA, которые реализуют массово параллельные вычисления общего назначения на мощных графических процессорах. Архитектура графических карт такова, что они позволяют одновременно обрабатывать большое количество данных и тем самым проводить численные расчёты больших объёмов. Использование графических процессоров позволит оптимизировать модели и алгоритмы перколяционных задач, увеличить точность результатов за счёт возможности моделирования объектов большей размерности.

Ключевые слова: перколяция, порог протекания, бесконечный кластер, фазовый переход, графический процессор, технология CUDA.

Bulatetska Lesiya. V. Problems of Modeling of Heterogeneous Systems in Percolation Theory. The paper presents the basic concepts of percolation theory considers the problem of computer simulation of percolation problems for large grilles. We consider ways to address the acceleration of the search algorithms and modeling of the percolation threshold of the infinite cluster method of application of parallel computing. To speed up the calculations are encouraged to use the capabilities of modern graphics cards and Technology CUDA, which implement massively parallel computing on general-purpose high-end graphics processors. The architecture of graphics cards is that they allow you to simultaneously process large amounts of data, and thus carry out numerical calculations of large volumes. The use of graphics processors will optimize the models and algorithms for percolation problems, to increase the accuracy of the results due to the possibility of modeling objects of higher dimension.

Key words: percolation, percolation threshold, an infinite cluster, phase transition, graphics processing unit (GPU), Technology CUDA.

Стаття надійшла до редколегії
25.04.2013 р.