M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Szélessávú Hírközlés és Villamosságtan Tanszék

AFM-es felületi töltéssűrűség mérésének szimulációja

TDK DOLGOZAT

Készítette
Bakró Nagy István

Konzulens
Reichardt András

2014. október 22.

Tartalomjegyzék

Kivonat

Atomerő mikroszkóppal való fémezett felületű minta felületi töltéssûrûségének mérése során kritikus a tû és a minta közötti kapacitás ismerete. A kapacitás értékét közelítések mellett lehetséges analitikusan kifejezni. Numerikus szimulációval pontosabban ismerhetjük az értékét, ezáltal a felbontás nõ és a mérési zaj csökken.

A szimuláció során a lehetséges párhuzamosításokat felhasználva a számítási idõt elfogadhatóra csökkentettük, ami akár online feldolgozást is lehetõvé teszi.

Atomerő mikroszkóppal való fémezett felületű minta felületi töltéssűrűségének mérése során kritikus a tű és a minta közötti kapacitás ismerete. A kapacitás értékét közelítések mellett lehetséges analtikusan kifejezni. Numerikus szimulációval pontosabban ismerhetjük az értékét, ezáltal nagyobb felbontás is érhető el. A szimuláció során a lehetséges párhuzamosításokat felhasználva a számítási időt elfogadhatóra csökkentettük.

Az eredmények egy részét korábbi dolgozatomban [1], illetve nemzetközi konferencián [2] ismertettem.

Abstract

The measurement of the surface charge density can be achived by Atomic Force Microscope (AFM). The common method is the two-pass technic, which main goal is to seperate the net force acting upon the tip into components. To do so we have to express the tip-sample capacitance, which is critical respectivly to the measurements accuracy.

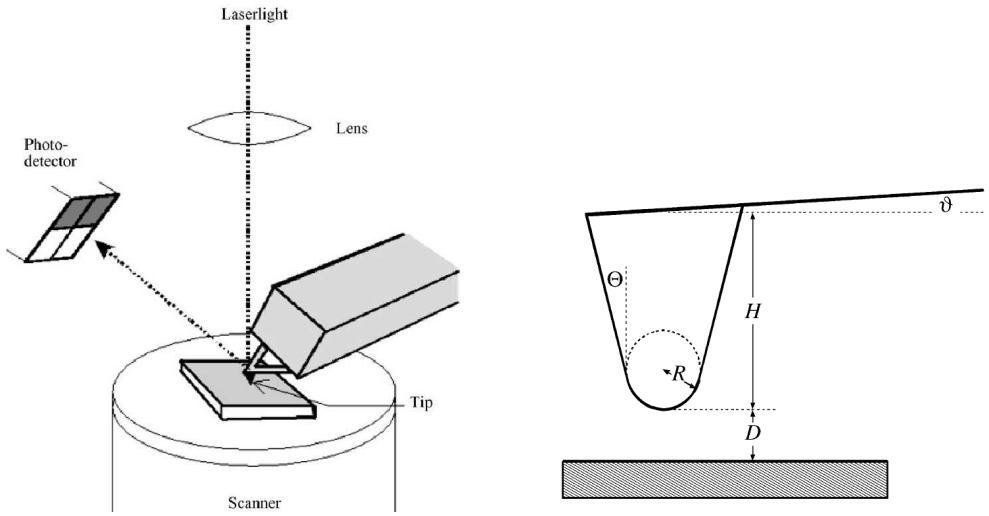
The value of the capacitance can be expressed analitically, but with some strong neglecting.

We are presenting the accelerated simulation of this capacitance using GPU's programmed in OpenCL's parallel framework.

1. fejezet

Bevezetés

1986-ban Binning demonstrálta az atomerő mikroszkóp (AFM) ötletét [3], ami mára a nanotechnológia egyik legfontosabb eszköze lett. Felhasználható képalkotásra, nanolitográfiára és adott anyag alakítására [4]. Az AFM apparátusa az adott minta felülete és a felette pásztázó kantilever végére erősített tű kölcsönhatásának vizsgálatát végzi. (lásd 1.1b. ábra) A felület és a tű közötti domináns kölcsönhatás határozza meg, hogy az anyag melyik fizikai mennyiségét kaphatjuk meg.



(a) Az AFM apparátusa **(b)** A tű és minta modellje

1.1. ábra. *Az AFM apparátusa látható az (a) ábrán. A lázernyaláb a tű felületéről tükröződve egy fotódetektorra irányul. A tű pozícióját ez alapján nagy pontossággal ismerjük. A (b) ábrán a minta és a felette lévő tű modellje látható a kapacitás analitikus számításához. A tű R sugarú H magasságú és D távolságra van a mintától. (Forrás: [5])*

Az AFM felhasználása kontakt illetve kopogtató üzemmódú lehet. A kontakt mód során a felületen végighúzzuk a tűt és mérjük a z irányú elmozdulását. Így képesek vagyunk a minta felületén lévő atomok elrendezéséről magasságtérképet adni. Kopogtató mód [6] során a tűt elemeljük a mintától és f frekvenciával rezegtetjük. A letapogatás során az átlagos minta-tű távolságot a kontakt módú magasságtér-

kép felhasználásával konstans értéken tartjuk. A kantilever dinamikáját ismerve az amplitúdójának és a frekvenciájának eltéréséből számítható a tűre ható erő. Ezen erő nagyságát befolyásoló tényezők:

a) a minta és a tű közé kapcsolt feszültség okozta villamos tér,

b) a minta felületi töltéssűrűség eloszlása,

c) Van der Waals erő.

A dolgozatban a felületi töltéssűrűség mérését tekintem célnak.

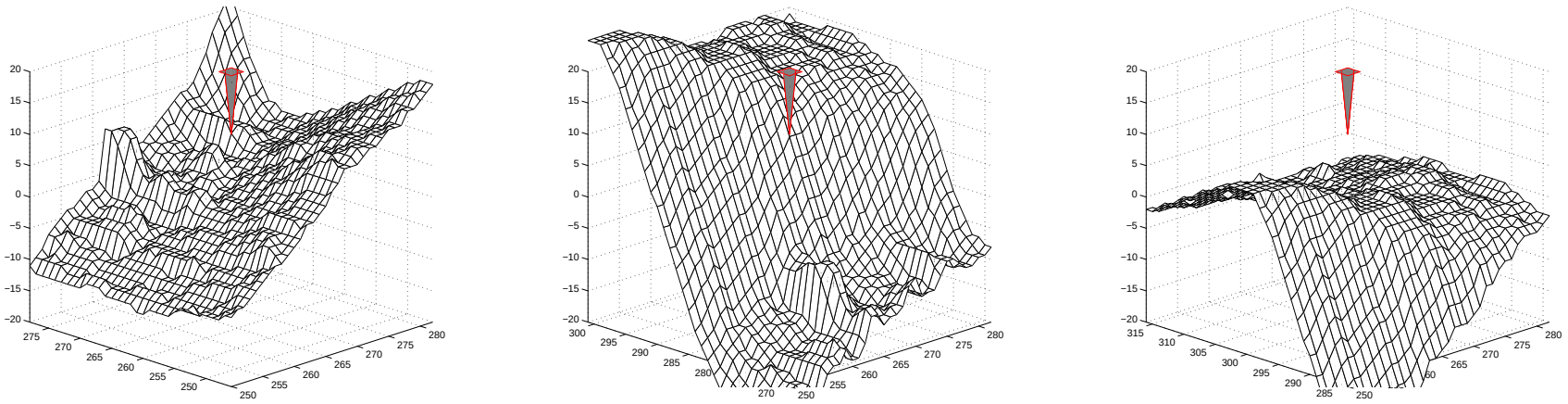
Az [7, 5] szerint az erő a) komponensét a minta és a tű közötti kapacitásból az (1.1) szerint származtathatjuk.

$$F_s = -\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}D} = -\frac{\mathrm{d}(CV^2/2)}{\mathrm{d}D} = -\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}D}V^2 \tag{1.1}$$

Ha a minta pásztázása során ezen a erőkomponens konstansnak mondható, tehát a felületi érdesség és a távolság pontatlansága elhanyagolhatóan kicsi, akkor a töltéssűrűség mérésében ez állandó hibát okoz. ami eliminálható.
Az (1.1) számításában a kritikus elem a kapacitás értéke, amit numerikus számítás mellőzése esetén a [8] szerinti analitikus eredményt használhatjuk fel. A tű formáját a 1.1b ábra szerintinek veszi és a mintát sík felületnek feltételezi. A tűre vonatkozó feltételezés legtöbb esetben helyénvaló, viszont a minta nagyfokú érdessége és változatossága végett érvényét veszti. Szemléltetését a 1.2 ábrán lehet látni. Ilyen esetben a kapacitás értéke mintáról mintára változik és állandó hiba helyett, a mérést zajként terheli.

Ezen zaj kiküszöbölése a kapacitás numerikus szimulációjával lehetséges.

A probléma ezzel, hogy ezen szimulációt minden egyes mérési pontban el kell végezni, aminek a kivitelezése csak multiprocesszoros környezetben lehetséges elfogadható idő alatt.



(a) 1. pillanat **(b)** 2. pillanat **(c)** 3. pillanat

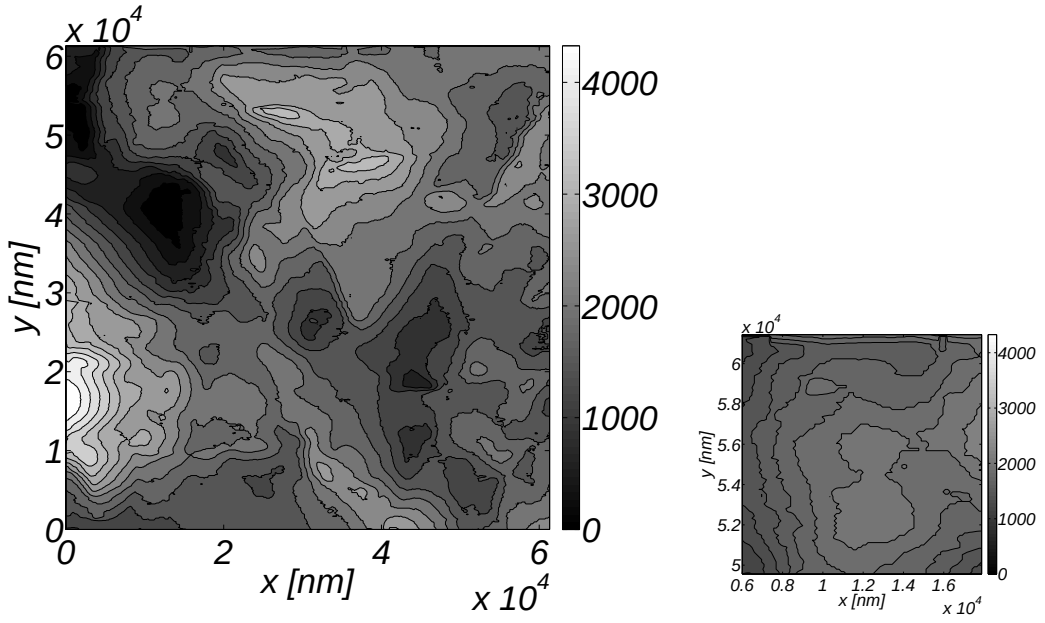
1.2. ábra. *A magasságtérkép változása a második mérés során fix pozíciójú tű esetén.*

2. fejezet

A feladat

A minta egy fémezett felület, aminek magasságtérképét mérések eredményeként adott pontossággal ismerjük. A magasságmérések egy négyzetes háló felett történtek, amelynek mindkét irányában $\delta_x = \delta_y \simeq 120nm$ azonos a felbontása A magasságmérés függőleges pontossága $\delta_z \simeq 2nm$ volt. A töltéssűrűség méréséhez szükséges második pásztázás során a tűt a mintához képest $V_{tu} = 500mV$ potenciálra kapcsoljuk. Illetve a fémezett felülettől közel azonos távolságra rezegtetjük és a tűre ható erőt mérjük.

A dolgozatban felhasznált magasságtérkép-mérési eredmény (5.1. ábra) egy 512×512 méretű szürkeárnyalatos *.tiff állomány, amely értéke $0 - 255$-ig terjed. A mérőberendezés adatlapja alapján és a mérés végén megjelenített konstansokkal lehetséges a kép skálázása.



(a) Mérési eredmény **(b)** Mérés részlete

2.1. ábra. *Méréssel kapott magasságtérkép. Felbontás* $d_x = d_y = 120nm$ $d_z = 18.03nm$

A dolgozat céljául egy olyan szimulátor építését tűztem ki, amely segítségével közel valós időben lehetséges a mérés alapján a felületi töltéseloszlásról a mérőeszköz pontosságánál finomabb felbontást elérni.

2.1. Fizikai probléma matematikai formalizálása

A megoldandó feladat egy elektrosztatikus feladat. A minta és a tű közötti térben nincsenek töltések, így itt a Poisson egyenlet helyett a Laplace-egyenlet 2.1 érvényes.

$$\Delta V(x, y, z) = 0 \tag{2.1}$$

Az egyenletet a következő részben (2.2) ismertetett megfontolások végett egy redukált 3D-s térfogatban oldom meg. Ezen 3D-s térfogatra egy inhomogén ponthálót illesztek, amelynek vízszintesen $d_{ax} = d_{ay}$, függőlegesen d_z a felbontása, ami a használt AFM apparátus felbontásával $d_z = \delta_z$ egyezik meg. Az így kapott térbeli háló minden pontjához hozzárendeljük az $V_{i,j,k} \simeq V(id_x, jd_y, kd_z)$ potenciált. Dirichlet peremfeltételek a minta felület fémezése, amely zérus potenciálú és az adott ($V_{tu} = 500mV$) potenciálú tű fémes felülete. A térnek a minta és a tű felületétől különböző határfelületén homogén Neumann feltételt alkalmazok az elhanyagolások (végtelen tér) és a töltésmentesség miatt.

Az így adódó lineáris egyenletrendszer megoldására lehetséges direkt és iteratív megoldó algoritmusokat alkalmazni. A párhuzamosítási szándékok miatt az iteratív megoldást választottam, mivel kevesebb a memóriaigénye. Ekkor nem teljesen pontos megoldást kapunk, de elfogadható eredményhez jutunk. A számítási pontosság növelhető az iterációt leállító konvergencia követelmény keményebb megszabásával, ami persze több iterációt jelent.

Az iteratív megoldás során a megoldás aktuális értékének kiszámításához az előző megoldásból indulunk ki. A (2.1) egyenletben szereplő deriválást az elsőrendű Taylor közelítés alkalmazásával a (2.2) szerinti 6-pontos sémát kapjuk.

$$V_{ijk}^{n+1} = \Delta_1 \cdot \left(V_{i-1,j,k}^n + V_{i+1,j,k}^n + V_{i,j-1,k}^n + V_{i,j+1,k}^n\right) + \Delta_2 \cdot \left(V_{i,j,k-1}^n + V_{i,j,k+1}^n\right) \tag{2.2}$$

ahol $V_{i,j,k}^n$ az az n-dik iterációs lépésben az i, j, k indexű pontban mérhető potenciált jelöli, Δ_1 a vízszintes felbontásból, Δ_2 a függőleges felbontásból adódó állandó.

2.2. Szimulálandó térfogat

2.2.1. Szimulálandó térfogat alapja

A felületmérés során a minta-tű távolsága jóval kissebb a mérési pontok vízszintes távolságánál (jelöléseket lásd a 1.1a. ábrán).

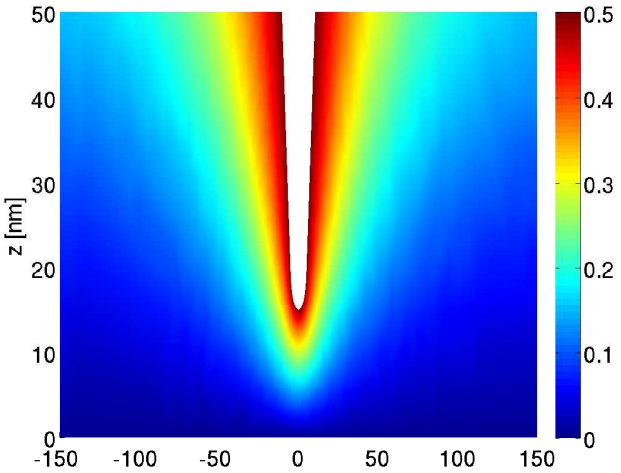
$$D = [5, 50]\ nm \quad \ll \quad \delta_x = \delta_y = 120nm \tag{2.3}$$

A Coulomb-kölcsönhatás a távolság négyzetével fordítottan arányos, így az előbb említettek értelmében egy mérési pont néhány szomszédjáig, pontosabban a mérési pont egy redukált környezetét szükséges szimulálni. Hiszen azon kívül már elhanyagolható a villamos térerősség. (Másképpen megfogalmazva a vízszintes mérési pontok távolsága jóval nagyobb mint a Coulomb-kölcsönhatás effektív távolsága).

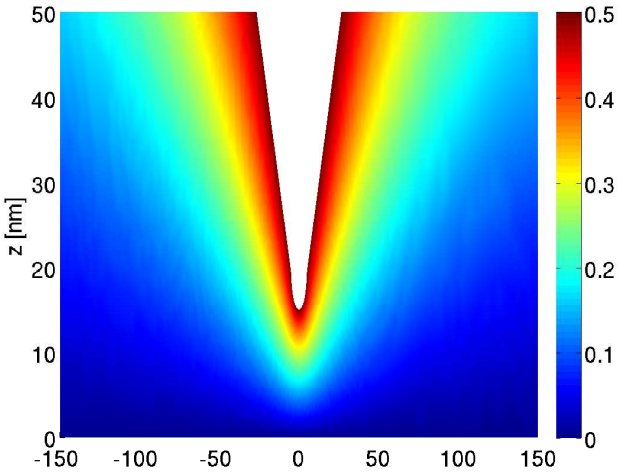
A tipikus AFM tűk terét a MATLAB Partial Differential Equiation Toolbox-al szimuláltam. A szimulációt $1000 \times 1000 \times 1000$ nm-es térfogaton ~ 5000 elemmel végeztem, a tű $V_{tu} = 500mV$ potenciálja esetén.

- A minta-tű távolság: $D = 20\ nm$,
- tű sugara $R = 5\ nm$,
- kúp fél nyílásszöge hegyes A típusú Si esetén $\Theta = 10°$,
- kúp fél nyílásszöge B típusú Si_3N_4 esetén $\Theta = 35°$.

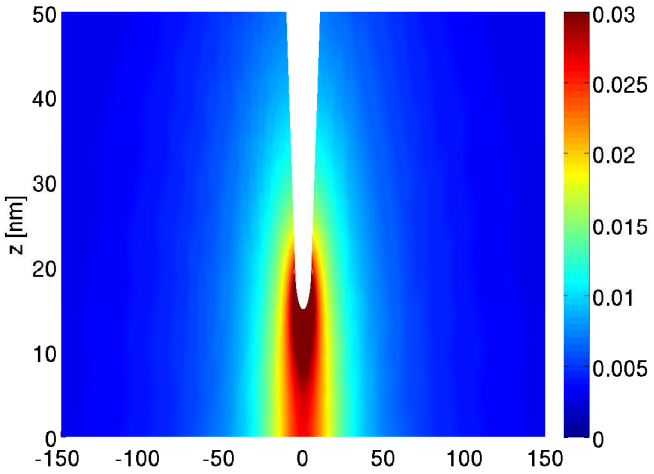
A szimulációk eredményei a 2.2. ábrán látható.



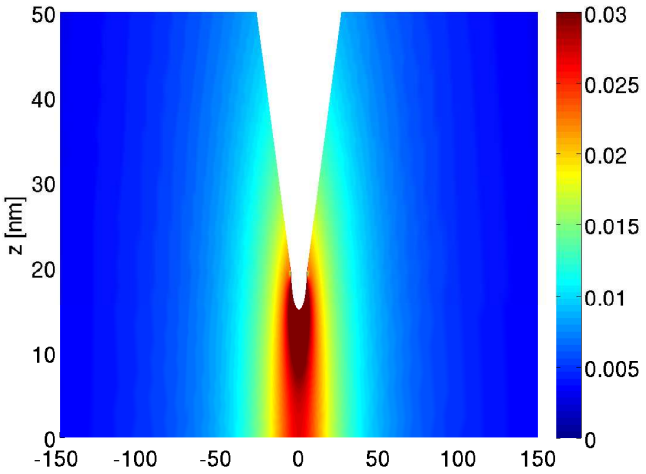
(a) $R = 5nm$, $\Theta = 10°$



(b) $R = 5nm$, $\Theta = 35°$

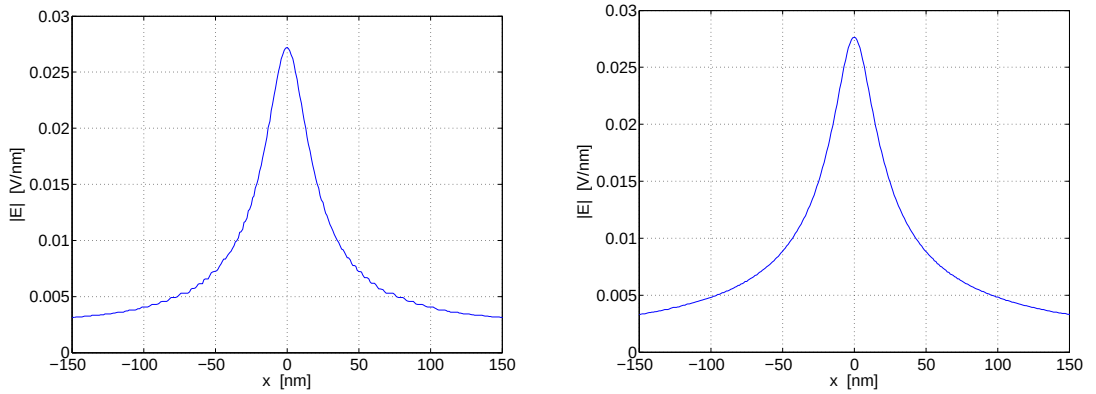


(c) $R = 5nm$, $\Theta = 10°$



(d) $R = 5nm$, $\Theta = 35°$

2.2. ábra. *Minta-tű közötti tér végeselemes szimulációjának lényeges részlete a szimulációs térfogat meghatározásához. Bal oldali oszlopban a potenciál eloszlás látható V-ban mérve, jobb oldalt a villamos térerősség nagysága V/nm mérve.*



(a) $R = 5nm$, $\Theta = 10°$, $E(x = 120) = 0.129 \cdot E_{max}$

(b) $R = 5nm$, $\Theta = 35°$, $E(x = 120) = 0.148 \cdot E_{max}$

2.3. ábra. *Villamos térerősség nagysága a a felülettől* 1 nm*-re.*

A 2.2; 2.3. ábrákon megfigyelhető, hogy a villamos tér a kis-sugarú vég körül koncentrálódik és a következő mérési pontra (120 nm-re) már elhanyagolható nagyságú ($< 15\%$) lesz. Ennek megfelelően egy mért pont 3×3-as azaz (240×240 nm^2)-es alapterületű térfogatot szükséges szimulálni.

Ezzel az elhanyagolással a feladat már numerikusan kezelhető méretűre csökken.

2.2.2. Szimulálandó térfogat alapjának interpolációja

A térfogatra illeszkedő inhomogén pontháló függőleges felbontása illeszkedik az AFM felbontására ($d_z = \delta_z = 2\ nm$). A pontháló alapja a korábban említettek szerint 3×3 pontból állna. A térfogati ponthálónk így erősen inhomogén lenne, ami a konvergenciát lassítaná és a Taylor soros közelítés során nem csak elsőrendű hibát okozna. Mivel a 3×3 pontokra úgy is tekinthetünk, mint a minta magasság-függvényének mintavételezésével kapott mintáira, így a közbeeső pontokat interpolációval (bilineáris interpolációval, aluláteresztéssel, mozgó átlagolással) lehet becsülni. Az eddigi vizszíntes felbontás $\delta_x = \delta_y = 120\ nm$ volt, ezt N_{ip} pontra interpolálom. Ezzel a mesterséges vizszíntes felbontása a következőre sűrűsödött.

$$d_{ax} = d_{ay} = 120 \cdot \frac{3}{N_{ip}} \tag{2.4}$$

Az interpoláció foka ideálisan $N_{ip} = 180$ esetén lenne, viszont a későbbiekben (4.2 rész) ismertetett megfontolások végett $N_{ip} = 31$-re választom meg.
Ekkor $d_{ax} = d_{ay} = 11.61\ nm$ lesz.

2.2.3. Szimulálandó térfogat magassága

A szimulálandó tér (hasáb) alapja adott az előzőleg említett interpolált felületként, míg a magassága nem. Ezt N_h-nak elnevezve a következő két mennyiség közül a nagyobbikkal határoztam meg:

- Középső pont és a fölötte lévő tű közepének magassága,
- A (3×3) környezet legalacsonyabb és legmagasabb pontjának különbsége hozzáadva a tű magasságának felét.

2.3. Szimuláció felépítése

A mérési pontokhoz tartozó szimulációk során a felület magasságának mérési adatait már ismertnek feltételezem. A teljes magasságtérkép pontjait külön-külön vizsgáljuk. Egyetlen pontban a mérési eredmény kiszámításának lépései az alábbiak :

1. A mérési pont körüli 3×3-as felület részének megállapítása,
2. közbeeső (mesterséges) mérési pontok interpolációval történő generálása a felbontás növelése végett,
3. szimulálandó térfogat méretének számítása,
4. direkt/iteratív megoldó algoritmussal a tér meghatározása, a tűre ható erő számítása illetve a tű alatti töltésmennyiség számítása,
5. adatok exportálása.

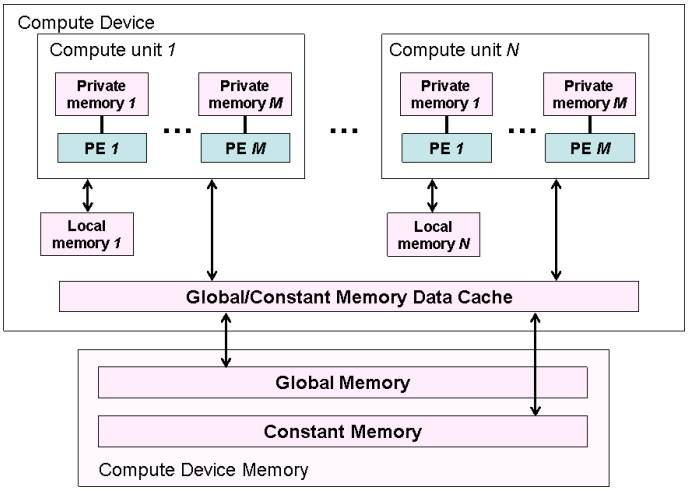
3. fejezet

A multiprocesszoros OpenCL környezet

3.1. OpenCL architektúrája

Az Open Computing Language (OpenCL) keretrendszer [9] általános modellt, magas szintű programozási interfészt és hardware absztrakciót nyújt a fejlesztőknek adat- vagy feladat-párhuzamos számítások gyorsítására különböző számítóegységen (CPU, GPU, DSP, FPGA, ...). A hárdvergyártók implementálják az OpenCL szabványban írtakat, ami által saját platformot hoznak létre. Egy ilyen platformon belüli eszközök alatt a korábban említett számítóegységeket értjük. OpenCL keretrendszerben történő programozás során két programot kell írni Az egyik a kernel, ami az eszközön (device-on) futatott szálra fog leképeződni. A másik a gazda processzoron (host-on) futó host-program, ami elvégzi az I/O műveleteket, a probléma összeállítását, a memória allokálást, az allokált terület inicializálását, a kernel argumentumainak beállítását, illetve a kernel meghívását az eszközön. A kernel futása végeztével a host-program kiolvassa az eszközből a kívánt eredményt.

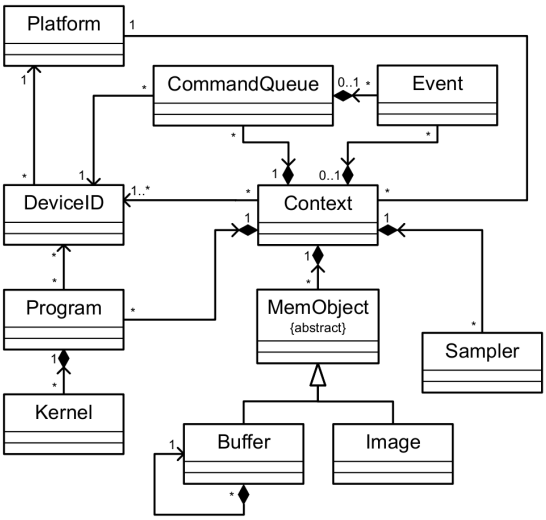
Az eszközök multiprocesszoros architektúrával és ezek kiszolgálására képes memória architektúrával rendelkeznek. Az architektúra heterogén való kezelésére a 3.1. ábrán vázolt modelljét nyújtja. Egy eszköz több compute unit-ot (processzormagot) tartalmazhat, amikhez lokális memória tartozik és elérése van az eszköz globális memóriájához.



3.1. ábra. *OpenCL device architektúra (forrás: [9])*

3.2. OpenCL programozási modell

A programozási modell a hozzá tartozó osztálydiagrammon (3.2. ábra) figyelhető meg.



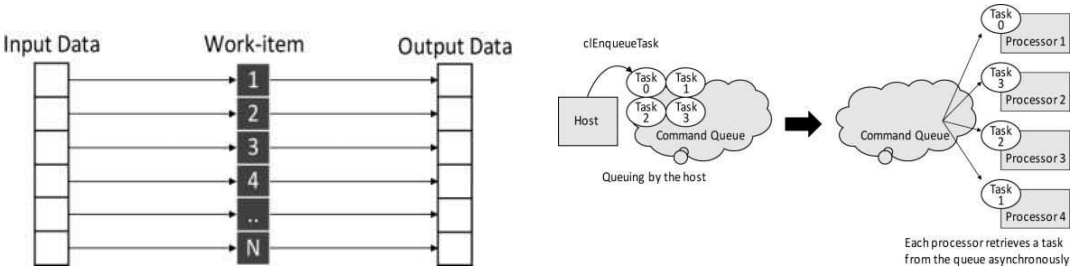
3.2. ábra. *OpenCL context osztálydiagrammja (forrás: [9])*

A futtatáshoz szükséges, hogy a kontextushoz platformot, majd azon belül eszközt, az eszközhöz programot (kernelt) és memóriát rendeljünk. Figyelembe kell vennünk azt a megkötést, hogy egyszerre csak az egy platformon belüli eszközök programozhatóak heterogén módon. Például: Intel platform esetén lehetséges CPU-t, processzorkártyát és Intel-es GPU-t programozni, viszont nVidia kártyákat már nem.

A programozással megoldandó problémát kétféleképpen lehetséges a feldolgozó egységekhez (work-item) avagy processzorokhoz rendelni: adat parallel módon vagy taszk parallel módon.

Adat parallel módon (3.3a. ábra) a feldolgozandó adat egy részéhez rendelünk egy feldolgozó egységet. Fontos figyelembe venni az eszköz korlátos számú feldolgozó egységének számát. Ha nem elég a feldolgozó egysége akkor a feladat megfelelő partícionálásával lehetséges kordában tartani a szükséges erőforrás számát.

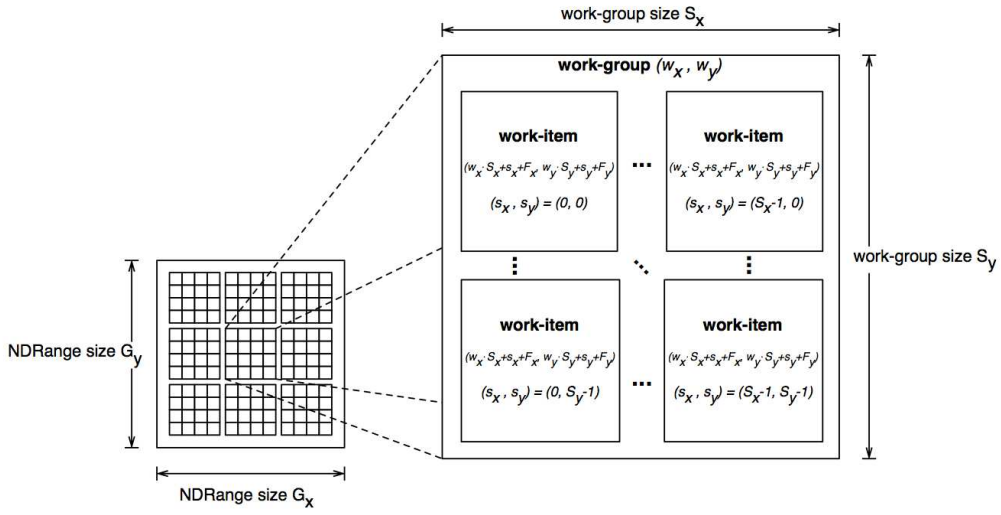
Taszk parallel módot (3.3b. ábra) olyan esetben célszerű használna, ha a bemenet dinamikus mérete a futási időben rendkívül változik illetve a végrehajtandó feladat lazán függenek össze.



(a) Adat parallel **(b)** Taszk parallel

3.3. ábra. *Feladat hozzárendelése work-item-hez (processzorhoz)*

A processzor-magok megfelelő kihasználtságának elérése végett több ezer work-item virtuálisan osztozik rajta. Ezen work-item-eket work-group-okba rendezzük, ennek a célja a párhuzamos architektúrák Single Instuction Multiple Data (SIMD) képességének szoftveres kiaknázása. Az Intel Xeon Phi processzorkártyája erre hárdveres támogatást a vektoros adattípusával nyújt. A work-itemeket jelen pillanatban az OpenCL specifikációja [9] szerint 3 dimenziós work-group-ba tudjuk rendezni. Egy példát láthatunk egy work-item indexének a globális és lokális megfelelőjére a következő 3.4. ábrán.



3.4. ábra. *2D-s work-item-ek work-group-ba rendezése és indexelése (forrás: [9])*

Az OpenCL a fizikailag kialíkított memóriákat négy kategórába sorolja a tipikus memóriák kategorizálása a következők:

- *Regiszterek:* Private memory,
- *Chipen belüli memória (cache):* Local memory,
- *Chipen kívüli memória:* Global memory és Constant Memory.

A privát és a lokális memória kis méretűnek és gyors elérésűnek mondható, míg a globális és konstans memória nagynak, de lassú elérésűnek. A definiált memória szintek tipikus paraméterei a következők:

- *Privát memória:* minden szálnak külön van, amit a compiler menedzsel.
- *Globális és konstans memória:* Bank szervezés jellemző rá, gyors, de nagy késleltetéssel bír. 8 műveletet tud egy ciklus alatt végrehajtan, de csak a parancs kiadása után 400-800 ciklus késleltetéssel. Ha az adaton végrehajtandó műveletek ideje ennél jóval nagyobb, akkor ezt a késleltetést el lehet rejteni.
- *Lokális memória:* Minden work-group-nak sajátja van. Minimális a késletetés, sebessége nagy (38-44 Gb/s).
- *Host memória:* Nagy méretű, közepes sebességű, de sebességét a host-ot és a device-t összekötő PCIe interfész korlátozza.

A memóriákra megkötésként szolgál, hogy ki allokálhat, írhat és olvashat belőle. A 3.1. táblázatban látható ezen jogosultságokat és a főbb tulajdonságokat.

3.1. táblázat. *OpenCL memória szintek*

	Host memory	Global memory	Local mem.	Private mem.
Host	Dinamikusan R/W	Din. R/W	Din. R/W	-
Kernel	-	R/W	Satik. R/W	Statik. R/W
Sebesség	Lassú	Közepes	Gyors	Regiszter
Méret	4 Gb $\leq$	1 Gb $\leq$	16, 32 Kb	$<$ 1 Kb

A work-group-okba rendezés a lokális memória jogusultsága miatt érdekes. Konkrétan az egy work-group-ba tartozó összes work-item azonos lokális memórián osztozik. Ennek a következménye az, hogy adat parallel módú feldolgozás esetén az egymásra ható adatokhoz tartozó work-item-eket egy work groupba kell rendelnünk. Ha ez nem lehetséges, akkor a globális memóriához kell fordulnunk. A globális memória avagy a bank szervezésű külső (off-chip) memóriák hozzáférési ideje relatíve

nagy így ezek használatát lehetőleg el kell kerülni és a programozónak kell „cachelni" a lokális memóriába.

Mivel a work-item-ek konkurrensen hajtódnak végre, így az általuk közösen elérhető memóriákra (globális, lokális) nézve versenyhelyzetben vannak. Az OpenCL ezt a problémát a laza memóriamodell használatával oldja meg. Work-item-ek közötti szinkronizációra egy korlátot alkalmaz a programban, amit csak akkor léphet át, ha az összes többi work-item (az azonos work-group-ban) ezt a korlátot már elérte. Erre a `barrier(FLAG)` függvényhívás szolgál. Fontos megjegyezni, hogy ez a szinkronizáció csak egy adott work-group-on belül történik, a work-group-ok közötti és akülönböző work-group-okon belüli work-item-ek szinkronizációra nincs lehetőség.

Összefoglalva: nagy hangsúlyt kell a memóriaszervezésre fordítani, hogy a processzormagok megfelelően legyenek az adatokkal táplálva az elérhető számítási kapacitás kiaknázása végett.

4. fejezet

Multiprocesszoros program

A prototípus algoritmus fejlesztése MATLAB környezetben történt, ami a későbbi referenciaként szolgál. Alap utasításokat használva több órát vesz igénybe a szimuláció futtatása. A MATLAB Parallel Toolbox-nak segítségével a szimulációt lehetséges párhuzamosan több processzormagon futtatni. Ezzel csupán párszoros sebesség növekezés érhető el a MATLAB magas szintű programnyelve végett. A következőkben magát az algoritmust és az OpenCL keretrendszerben történő implementációját mutatom be. Majd az eredmények bemutatása során összevetésre kerül a MATLAB Parallel Toolbox segítséggel és az OpenCL GPU-n való futási ideje.

4.1. Futási környezet bemutatása

A következő eszközök teljesítményét vizsgálom:

- A laptopomban található **Intel Core i5 M520** processzor,
- A laptopomban található (kis teljesítményű) **nVidia GT330M** videókártya,

Ezen eszközök legjelentősebb paraméterei a 4.1 táblázat tartalmazza.

4.1. táblázat. *Vizsgált eszközök összehasonlítása*

	Intel Core i5 M520	nVidia GT330M
MAX COMPUTE UNITS	4	6
MAX CLOCK FREQUENCY	2400 MHz	1265 MHz
MAX WORK GROUP_SIZE	8192 8192 8192	512 512 64
GLOBAL MEM SIZE	$4Gb$ ($2Gb$)	$1Gb$ ($768Mb$)
LOCAL MEM SIZE	$32Kb$	$16Kb$

Az összehasonlíthatóság végett a legkissebb memóriájú eszközre skálázom a szimulátort, ami a GT330M videókártya. A CPU memóriája jóval nagyobb, így a kód mindegyiken tud futni.

4.2. Az implementációhoz szükséges megfontolások

Ha a tér, ahol a laplace egyenletet meg kell oldanunk nagyon nagy, akkor érdemes szétbontani kissebb alterekre és azokhoz rendelni egy-egy work-item-et. Mivel a diszkrét Laplace egyenlet egy pontja a szomszédos pontokkal szoros kapcsolatban van, így az összefüggő work-item-eket egy work-group-ba érdemes szervezni, mivel így az átlapolódó pontok értékét a szomszédos work-item-ek is tudják írni és olvasni. Az ilyen típusú problémának méretét a MAX_WORK_GROUP_SIZES tulajdonság korlátozza.

Jelen esetben a mérési eredmény egy pontjához tartozó tér átlagosan $31 \times 31 \times 35$ pontból áll. Tehát a korábbi nem áll fenn és egyszerű megfeleltetéssel szétoszthatjuk a feladatot. A teljes tér $512 \times 512 \times 31 \times 31 \times 30$ méretű, ami $\sim 951M$ pont. A tárolásához single-precision mellett ennek a számnak a 4-szerese szükségeltetik byte-okban mérve. Mivel ez a videókártyán nem áll rendelkezésre, így szétbontjuk kissebb feladatrészekre.

Ezen feladatrészek méretét egy paraméter állításával lehet változtati és az implementált algoritmus ettől generikusan függ. Emellett az interpoláció mértéke N_{ip} is paraméterrel generikusan állítható. Az algoritmus generikusságát csupán a futási időben történő dinamikus memória allokációval lehetséges megvalósítani. A korábban említettek végett (3.1 táblázat) az allokáció csak a host programban történhet. Ennek megfelelően a szimulálandó térfogat nagyságát előre ki kell számolni.

4.3. Memória szervezés

Csak globális memória használata

Az algoritmus pszeudó kódjának direkt leképezése esetén a „host”-on allokálunk memóriát a „device” globális memóriájában, majd a megfelelő adatokat ide másoljuk és a kernel is itt ír és olvas. A problémát a globális memória nagy hozzáférési ideje jelenti, ami miatt sok work-item kiéhezve (tétlenül) a memóriára fog várakozni. Ilyenkor az egy mérési pontra vonatkoztatott szimulációs idő a referenciánál is lassabb.

Globális memória és adott esetben lokális memória használata

Kis erőfeszítéssel nagy javulást lehet elérni, ha a mérési ponthoz tartozó szimulációs tér éppen belefér a lokális memóriába. Tehát, mielőtt az (2.2) szerinti iteratív megoldót futtatnánk először a globális memóriából a lokális memóriába töltjük át a kérdéses pontokat, majd számolunk rajta és a végén visszatöltjük a globális memóriába. E javítással a referenciával azonos sebességet tudunk elérni.

Globális memória és minden adódó alkalomkor a lokális memória használata

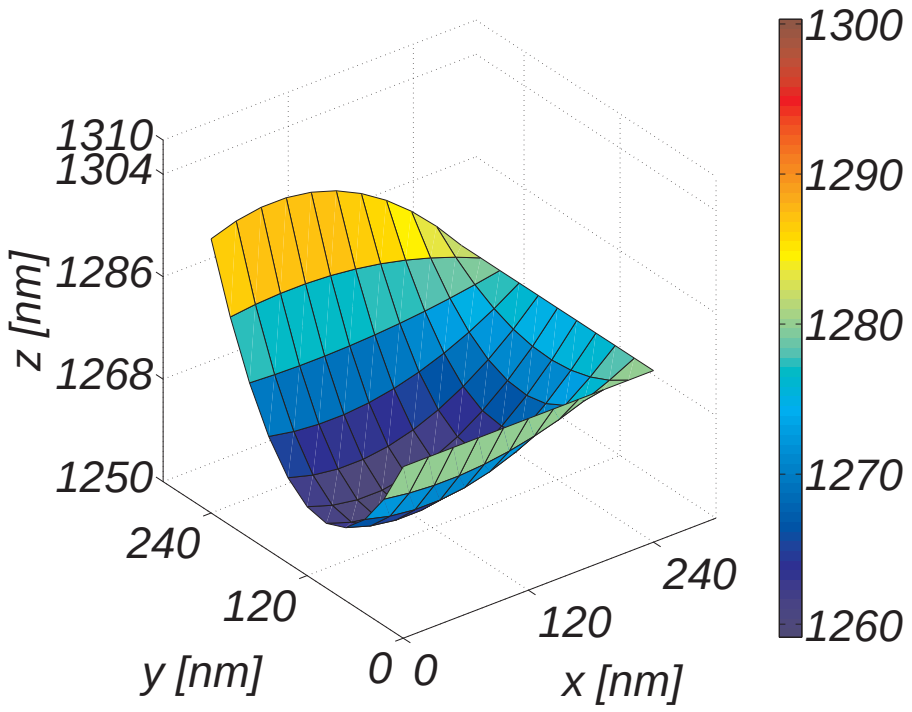
Nagyobb erőfeszítést igényel, hogy minden alkalommal a globális memóriával való kommunikációt a lokális memória közbeékelésével tegyük. Ezt úgy lehet felfogni, mintha a globális memóriát lokális memória méretű kvantumokban tudnám csak cachelni/elérni. Ekkor nagy odafigyelést kíván a memóriacímzés megfelelő prgramozása, de eredményképp gyorsulás érhető el.

Összegezve elmondható, hogy az aktuálisan használt adat tárolását a lehető legközelebb kell tartani a compute-unit-hoz.

4.4. A lépések részletezése

4.4.1. Interpoláció

A korábban elmondottak alapján a felületet további virtuális pontokkal egészítem ki. Az virtuális mérési pontokat a legegyszerűbben bilineáris interpolációval (síklapos közelítéssel) becsülhető. A szimulátorban emelett még egy általánosabb módszert is alkalmazok, ami egy 2D-s mozgó átlagoló szűrővel való simítás. A szűrővel aluláteresztést elek el, ami a minta magasságának mintavételezése utáni rekonstrukcióját jelenti. Egy ilyen interpoláció eredményét láthatjuk a 4.1. ábrán.



4.1. ábra. 3×3 *mérési pont* 11×11 *pontba való interpolációja*

4.4.2. Szimulálandó térfogat méretének számítása

A szimulálandó tér (hasáb) alapja adott az előzőleg említett interpolált felületként, míg a magassága nem. Ezt a következő két mennyiség közül a nagyobbikkal határoztuk meg:

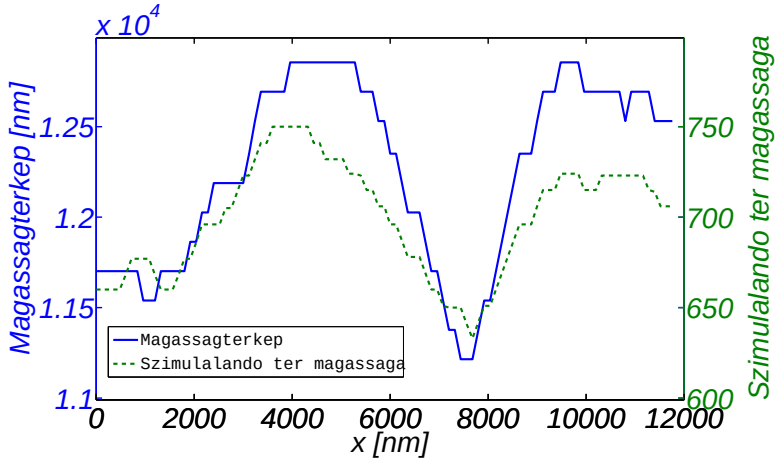
- Középső pont fölött lévő tű közepének magassága,
- A (3×3) környezet legalacsonyabb és legmagasabb pontjának különbsége hozzáadva a tű közepének magassága.

A magasságtérkép egy vonalának részlete és a szimulálandó tér (hasáb) magassága látható a 4.2. ábrán.

4.4.3. Iteratív megoldó algoritmus

Az iterációhoz a térháló pontjaihoz két mátrixot (tömbböt) rendelek, ami a pontok potenciáljának aktuális ($\mathbf{V_{now}}$) és előző ($\mathbf{V_{prev}}$) értékeit tartalmazza. Ezek nagy mérete végett az eszköz globális memóriájában foglalnak helyet.

Az aktuális értékeket a (2.2) szerint számítom az egész térfogatra. A számítást vízszintes síkonként végzem. A számítás előtt az adott sík és az alatta, felette szomszédos síkok előző értékét bemásolom a lokális memóriába. Az új értéket először lokális tömbbe tárolom el, majd kimásolom a globális memóriába. Eközben az egész



4.2. ábra. *A mérési eredmény egy vonal menti részlete (folytonos vonal) és az ezen mérési pontokhoz számított szimulációs tér magassága (szaggatott-vonal)*

térfogatra számítom az előzővel vett különbségének négyzetösszegét (normáját). E mérték képviseli a konvergencia szintjét, ami az iteráció során vizsgálva jut(hat) el a kívánt konvergencia szintre. Ha nem érte el a konvergencia szintet, akkor az előző két mátrixot felcserélve iterál tovább.

4.4.4. Adatok mentése

Tesztelhetőségi megfontolások végett nem csak a tűre ható erőt (villamos térerősséget) exportálom, hanem a konvergencia szintjének változását és az interpolált felületet is. Az exportálandó menyiségek „kis" mérete miatt egyszerű *.csv fájlként kerülnek mentésre. Ezen fájlok további poszt-processzálása MATLAB vagy munkalap kezelő szoftverrel is elvégezhető.

5. fejezet

Konvergencia vizsgálata

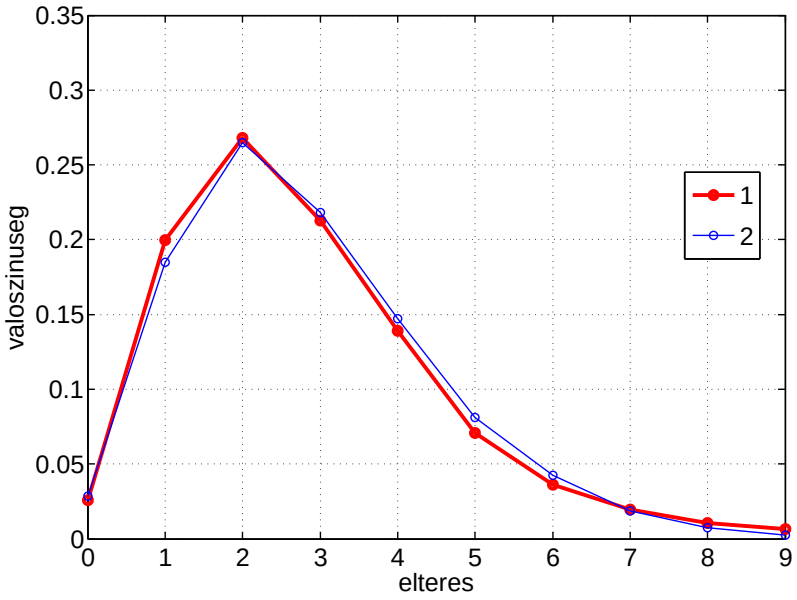
5.1. Az interpoláció fokának hatása

Az egyes mérési pontokhoz tartozó szimulációs térfogat a 2.2.3 részben ismertetettek szerint pontról-pontra változik. Ennek megfelelően a kívánt konvergenciaszinthez tartozó iterációszámokat nem hasonlíthatom össze.
Gondolatkísérletben kövessük a (2.2) szerinti véges differenciák iterációs sémájának hatását a pontháló azon pontjaira, amihez előírt peremfeltétel kapcsolódik. Az első iteráció után a pont első szomszédjainak értékére lesz csupán hatása. A második után ezeknek az első szomszédjaira és így tovább. E hatás hullámszerűen terjed a térfogat pontjain végig. A „terjedés"-hez szükséges iteráció száma a térfogat nagyságától függ. Adódik az ötlet, hogy a iteráció fajlagos számát a pontháló legnagyobb ilyen útjának hosszába mérjem.
Jelen esetben a szimulációs térfogat egy hasáb, aminek legnagyobb kiterjedése a testátlójának mentén van. Ennek az értéke:

$$IT = \sqrt{N_{ip}^2 + N_{ip}^2 + N_h^2} \tag{5.1}$$

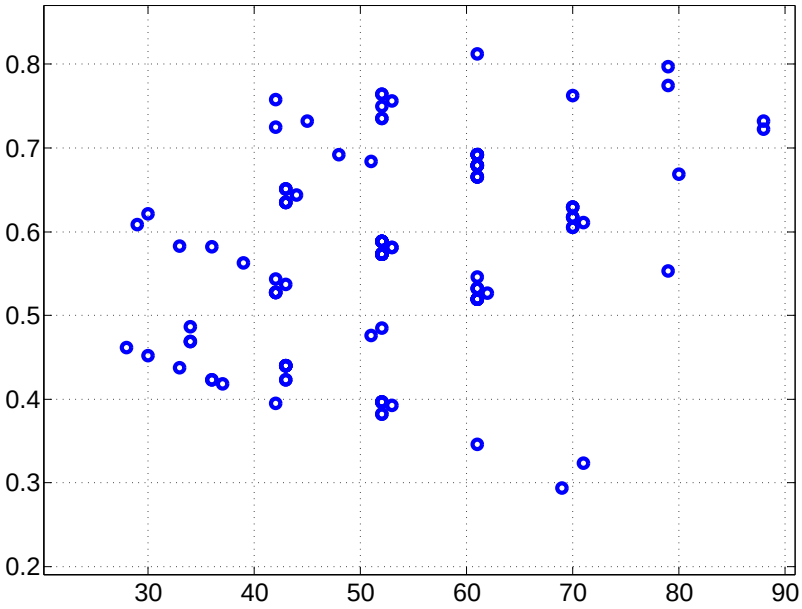
5.2. Különböző alap formák esetén

A konvergencia iterációszámának a felület egyenletlenségétől való függésének a vizsgálatához véletlen felületeket generáltam. A felületek a magasság mérési eredmények statisztikai jellemzőinek számítása után azok felhasználásával készült két mérési eredményből. Az egyes pontokhoz tartozó szimulációs térfogat magasságának eloszlása a következő ábrán látszik. A két mérési eredmény statisztikailag azonos eloszlásúnak modható, mivel a minták azonos technológiával készült. Megfigyelhető, hogy két mérési ponthoz tartozó magasság legvalószínűbb eltérése a $2 \cdot d_z = 4\ nm$, várható értéke 2.9.



5.1. ábra. *Két mérési kép 3×3-al részleteinek dz léptékben vett eltérésének/differenciájának elsozlása.*

Az 5.2 ábrán a szimulációk azonos konvergencia szintet értek el. Az ehhez tartozó iterációs lépés a szimulációs térfogat változásától függetlennek mondható. Ami azt jelenti, hogy a nagyobb térogat esetén is konvergálni fog a szimulátor.



5.2. ábra. *Azonos konvergencia szinthez tartozó fajlagos iterációs lépések száma a szimulációs magasság függvényében.*

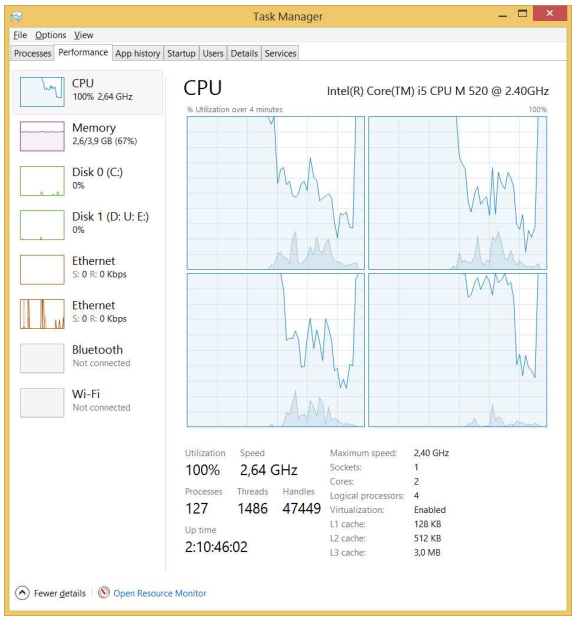
6. fejezet

Eredmények

6.1. MATLAB implementációk

A referenciaként szolgáló MATLAB algoritmus lineáris programszervezést alkalmazva az elérhető fajlagos futási idő $\sim 100ms$.

A kód minimális változtatásával elérhető a párhuzamos végrehajtás. Ezt a `for` ciklusok Parallel Toolbox beli `parfor` utasítására cserélve érhetjük el. A 4 szálat futtatni képes processzoron a legjobb esetben a negyedére csökkenhet a futási idő. Valójában ez sose történik meg. A MATLAB Parallel Toolbox-a az egyes szimulációkat adott szálra osztja el. Korábban láttuk, hogy ezen szimulációk lépésigénye a szimulációs térfogat változatossága miatt nagyban eltér egymástól, így előáll az a sajnálatos eset, hogy 3 mag tétlenül a negyedikre vár, ami miatt a processzor kihasználtsága messze nem teljes.



6.1. ábra. *MATLAB erőforrás kihasználtság `parfor` használata esetén, jelzett tartomány felétől kezdve csak a 4. mag dolgozik.*

6.2. OpenCL implementációk

OpenCL keretrendszer segítségével írt programot a GPU-n futtatva az 6.1. táblázatban látható eredményeket kaptam. Csupán a globális memóriát használva a referenciához képest romlik a teljesítmény. Ezt a videókártya prediktív cache nélküli kialakításának és a globális memória késleltetése okozta kiéheztetés folyamatának hatása. A lokális memória használata a futási időt drasztikusan le tudja csökkenteni, ami a korábban ismertetett memória szervezési megfontolások helyességét igazolja. Látható, hogy az OpenCL implementáció közel $5-8\times$ gyorsulást jelent a MATLAB-hoz képest. Ezt két dolognak tudom be:

- *Memória:* A CPU memóriája DDR3 @ 1066 MHz 64 bites busz szélességgel, míg a GPU memóriája GDDR3 @ 1066 MHz 128 bites busz szélességgel rendelkezik,
- *Processzor mag:* A CPU 4 compute unit-al rendelkezik, ami 4 szálra, ami Intel HyperThread technológiájának segítségével 2 processzormagra képződik le, míg a GPU 6 compute unit-al rendelkezik, ami 48 CUDA core-ra képeződik le.

Továbbá figyelembe kell venni, hogy a szimulátor futása a többi programmal konkurrensen történik, CPU esetén az operációs rendszerrel, GPU esetén a megjelenítéssel.

6.1. táblázat. *Szimulátor futási idő eredmények* 5×5 *mérési pontra*

	MATLAB	Intel i5	nVidia 330M
Futási idő	5990 ms	2530 ms	510 ms
Egy pont-hoz tartozó futási idő	410 ms	17.56 ms	35 ms
Teljes méréshez tartozó idő	$\sim 29h$	$\sim 12h$	$\sim 2h$

7. fejezet

Összegzés

A cikkben összefoglaltam az AFM felületi töltéssűrűség méréstechnikáját, amiben azonosítottam a kapacitás értékének kritikus voltát. Ezidáig a kapacitás értékének a [8, 5] szerinti közelítéseket tartalmazó analitikus eredményt lehetett felhasználni.

Feladatként ezen kapacitás értékét számító szimulátor építését tűztem ki, aminek elfogaható időn belül kell eredményt szolgáltatnia. A párhuzamosítás lehetősége triviálisan adódott. A hordozhatóság és a gyorsabb végrehajtás végett a szimulátort OpenCL környezetben implementáltam, ami a szimulátor heterogén multiproszesszoros környezetben való futtatását teszi lehetővé.

A szimulátor közel online futási idejének eléréséhez a szükséges elhanyagosásokat javasoltam és érvényességüket is megvizsgáltam. Az eredményeket ismertetve a szimulátor futási idejében látványos gyorsulást tapasztaltam, ami az érdesebb felületek esetén is elfogadhatóan pontos eredményt tud szolgáltatni.

A konvergecia tulajdonságát

Végül az elkészült programot CPU-n és GPU-n is futtatva a futási idejüket összevetettem és azonosítottam a gyorsulás forrását kitérve a processzormagra és a memóriájára.

További feladatok:

- A szimuláció felhasználásával történő töltéssűrűség származtatása még várat magára, ugyanígy ezen származtatás validálására való mérési összeállítás kidolgolgozása.
- Amorf formájú tű szimulációja.
- A szimulátor magját képező lineáris egyenletrendszer iteratív helyett direkt megoldó implemetációjának vizsgálata.
- Intel Xeon processzorkártya által nyújtott vektor adattípusok alkalmazása.

Ábrák jegyzéke

Táblázatok jegyzéke

Irodalomjegyzék

[1] B. N. István, „Elektrosztatikus mérés szimulációja multiprocesszoros környezetben," 2014. (Mesterpróba, Budapest).

[2] I. B. Nagy, A. Reichardt, and Z. Szabo, „Simulation of afm's surface charge measurement," 2014. (16th IGTE Symposium, Graz Austria).

[3] G. Binnig, C. F. Quate, and C. Gerber, „Atomic force microscope," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 56, pp. 930–933, Mar 1986.

[4] B. Vasić, M. Kratzer, A. Matković, A. Nevosad, U. Ralević, D. Jovanović, C. Ganser, C. Teichert, and R. Gajić, „Atomic force microscopy based manipulation of graphene using dynamic plowing lithography," *Nanotechnology*, vol. 24, no. 1, p. 015303, 2013.

[5] H.-J. Butt, B. Cappella, and M. Kappl, „Force measurements with the atomic force microscope: Technique, interpretation and applications," *Surface Science Reports*, vol. 59, no. 1–6, pp. 1 – 152, 2005.

[6] Y. Martin, C. C. Williams, and H. K. Wickramasinghe, „Atomic force microscope–force mapping and profiling on a sub 100 a scale.," *Journal of Applied Physics*, vol. 61, no. 10, pp. 4723–4729, 1987.

[7] H.-J. Butt, „Measuring electrostatic, van der waals, and hydration forces in electrolyte solutions with an atomic force microscope," *Biophys J.*, vol. 60(6), p. 1438–1444., 1991.

[8] S. Hudlet, M. Saint Jean, C. Guthmann, and J. Berger, „Evaluation of the capacitive force between an atomic force microscopy tip and a metallic surface," *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, vol. 2, no. 1, pp. 5–10, 1998.

[9] The Khronos OpenCL Working Group, *The OpenCL Specification, version 1.0*, 6 August 2010.