

# Simulação computacional da deposição de filmes finos usando código PIC-MC paralelizado

Elizabeth B. L. Gomes<sup>1</sup>, Gesil S. A. Segundo<sup>2</sup>

<sup>1</sup>PROCIMM – Universidade Estadual de Santa Cruz (UESC) – Ilhéus, BA

<sup>2</sup>Universidade Estadual de Santa Cruz (UESC) – Ilhéus, BA

eblgomes@hotmail.com, gesil.amarante@gmail.com

*Resumo. Paralelização do código planar unidimensional de simulação de partículas para deposição assistida a plasma denominado XPDPI.*

## 1. Introdução

Plasmas (gases ionizados que apresentam comportamento coletivo e neutralidade macroscópica) são cada vez mais utilizados em diversos processos industriais, e a simulação computacional destes constitui uma poderosa ferramenta no estudo e conseqüente evolução destes processos, que ainda não são completamente dominados e apresentam grandes oportunidades de novas aplicações e otimização. Uma das grandes diferenças com relação a gases em temperatura ambiente é a interação à distância entre as partículas, devido à carga elétrica que contém, o que resulta em comportamento muito mais complexo e demanda computacional extra para a simulação, especialmente quanto aos métodos do tipo Particle-in-Cell (PIC) [1], caracterizados pelo acompanhamento, a cada pequeno intervalo de tempo, das equações de movimento de um grande número de macropartículas (que representam estatisticamente um grande grupo de partículas reais). A adição de métodos de Monte-Carlo [7] para o tratamento das colisões torna estes códigos não-determinísticos.

O processamento seqüencial destes códigos muitas vezes inviabiliza uma série de aplicações, tanto de motivação científica quanto tecnológica, pois o cálculo das interações e acompanhamento da evolução e colisões exige um tempo de execução muito longo (freqüentemente vários dias, mesmo para moléculas relativamente simples). Estas aplicações possuem fortes requisitos computacionais, o que constitui numa importante aplicação do processamento paralelo.

## 2. Deposição de Filmes Finos

Filmes finos podem ser definidos como películas de determinados materiais, geralmente metálicos, podendo ser também poliméricos ou cerâmicos, depositadas sobre um substrato (amostra), com espessura muito menor que a do substrato, geralmente variando de alguns nanômetros até micrometros.

Os filmes finos são utilizados para revestir materiais com a finalidade de melhorar suas propriedades físicas, químicas e mecânicas, tais como, aumento de dureza, resistência a desgaste mecânico e abrasivo, proteção à corrosão, aumento da biocompatibilidade, entre outros. O material revestido assume as mesmas propriedades do revestimento.

Existem diversas técnicas de deposição de filmes finos. As técnicas de deposição por vapor podem ser divididas em dois tipos: *Physical Vapor Deposition* (PVD) e *Chemical Vapor Deposition* (CVD). No processo de PVD, a deposição do material, inicialmente na fase sólida, é obtida por meio da evaporação deste, em unidades atômicas como partículas e moléculas, e subsequente condensação sobre o substrato para formação de um filme. Um aspecto importante, é que o transporte dos vapores a partir do alvo ocorre através de um processo físico, e em um ambiente gasoso de baixa pressão (ou plasma) ou em um vácuo. Uma maneira de vaporizar o material do alvo, é por arranque de átomos ou moléculas por transferência de momentum de partículas com alta energia incidentes no alvo, chamada de sputtering [4].

### 3. Método Partícula na célula (PIC) e Colisão de Monte Carlo (MCC)

As simulações PIC e método MCC têm sido uma excelente ferramenta para se explorar processos de plasma, em particular, descargas de RF capacitivas. Neste tipo de simulação, considera-se uma super-partícula representando um grande número de partículas numa região preestabelecida. Devem ser consideradas todas as possibilidades de colisões que envolvem os elétrons com as partículas neutras e com as espécies metaestáveis. Na figura 1 é apresentado um fluxograma desse tipo de simulação [3].

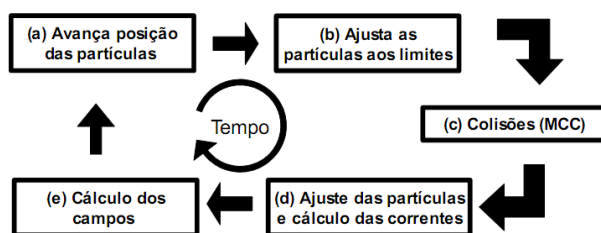


Figura 1 – Esquema resumido do funcionamento do método PIC

### 4. XPDP1

XPDP1 (X Plasma Device Planar 1 Dimensional) é um código computacional que executa em plataformas Unix com X-Windows e em PC's com emuladores de X-Windows, utilizando para isso o método PIC/MCC. Ele simula um plasma contido entre dois eletrodos conectados por um circuito externo. Este circuito inclui resistência (R), indutância (L) e capacitância (C), e também possui fontes de corrente e voltagem, (Figura 2). O XPDP1 foi desenvolvido pelo Grupo de Teoria e Simulação do Plasma da Universidade da Califórnia em Berkeley, em 1993, na linguagem C [5].

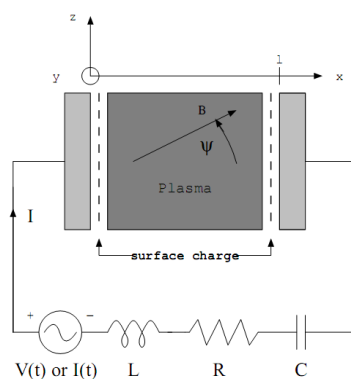


Figura 2 – Modelo usado no XPDP1

O XPDP1 usa a biblioteca gráfica Xgrafx, também desenvolvida em Berkeley, que é um ambiente de janelas para a visualização interativa de quaisquer simulações de fenômenos físicos. É esta biblioteca que controla a execução e visualização da simulação, e também cria e atualiza as janelas de diagnóstico. Já o XPDP1 é responsável pelos cálculos, pelos detalhes da parte física do problema, e por fornecer ao Xgrafx as variáveis a serem plotadas. A simulação prossegue em tempo real, com saídas gráficas de vários diagnósticos especificados pelo usuário, que são atualizados a cada passo no tempo [5].

## 5. Padrão OpenMP

OpenMP não é uma nova linguagem de computador, mas sim, trabalha em conjunto com o Fortran ou C/C++. É composto de um conjunto de diretivas de compilador que descrevem o paralelismo no código fonte, juntamente com uma biblioteca de sub-rotinas de apoio disponíveis para as aplicações [2].

A paralelização, em OpenMP, é realizada explicitamente com múltiplas *threads* dentro de um mesmo processo. O processo é dividido em tarefas que podem ser executadas simultaneamente e distribuídas pelas *threads*. O programa inicia com a *thread* mestre executando as instruções até encontrar a diretiva de região paralela, então ela cria um grupo de *threads*, que juntas executam o código dentro dessa região. Quando elas terminam suas execuções, elas sincronizam-se e somente a *thread* mestre segue na execução do código até que uma nova diretiva seja encontrada ou o programa encerre. Esse modelo de programação é conhecido como *fork-join* [6].

## 6. Resultados Preliminares

O programa original foi alterado para rodar sem a interface gráfica, e foi paralelizado utilizando o padrão OpenMP, seguindo as prioridades ditadas pelo profiling que identificou as estruturas que mais demandam tempo de execução (Figura 3).

As simulações foram executadas com 1, 2, e 4 threads. Elas iniciaram com 10.000, 20.000, 30.000, 40.000 e 50.000 partículas. E foram executadas até 24.000.000 de ciclos, para todas as situações.

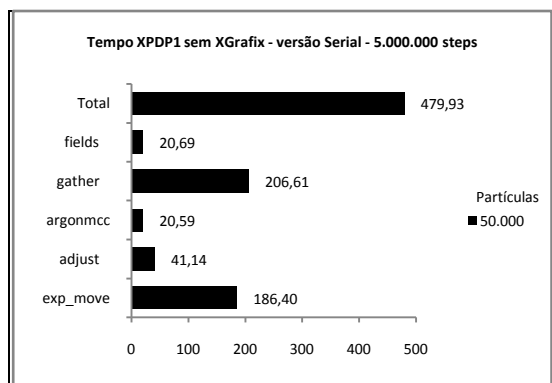


Figura 3 – Profiling XPDP1 serial

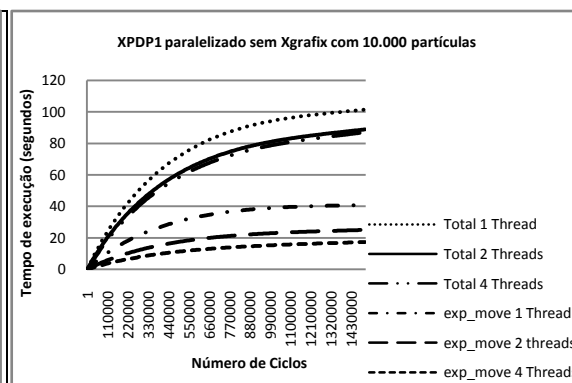


Figura 4 – Tempo de execução do XPDP1

A Figura 4 mostra que a paralelização tem um ganho considerável de tempo de execução.

A Tabela 1 mostra os resultados da paralelização para 1 ciclo de execução, e podemos observar que para 2 e 4 threads os resultados estão dentro do esperado.

**Tabela 1 – XPDP1 paralelizado executado com 1 ciclo e com 10.000 partículas iniciais**

Threads	Tempo de execução (seg.)	Tempo esperado (seg.)	Speed-up
1	0,020021	–	
2	0,014813	0,010011	1,351583 – Sublinear
4	0,016916	0,005005	1,183554 – Sublinear

## Discussões

Quando a função *gather* foi paralelizada, foi necessário colocar a diretiva de sincronização *atomic* para evitar que ocorresse perda de partículas, por causa da condição de corrida, e com isso o tempo de execução ficou maior em relação à versão serial. Então optamos por retirar a paralelização desta função. O próximo passo é paralelizar o XPDP1 com o Padrão MPI, para avaliarmos os resultados.

## Referências

- [1] Birdsall, C. K.; Langdon, A. B. Plasma Physics via Computer Simulation. 2005.
- [2] Chandra, Rohit; Dagum, Leonardo; Kohr, Dave; Maydan, Dror; McDonald, Jeff; Menon, Ramesh. Parallel Programming in OpenMP. 2001.
- [3] Cizzoto, Elias R.; Roberto, Marisa; Verdonck, Patrick B. Simulações de descargas de rf capacitivas modeladas pelo método PIC – MCC.
- [4] Feil, Adriano F. Deposição e caracterização de filmes finos de TiOx formados por dc magnetron sputtering reativo: transição estrutural. Dissertação de Mestrado, PUCRS, Porto Alegre 2006.
- [5] Plasma Theory and Simulation Group. PDP1 Plasma Device 1 Dimensional Bounded Electrostatic Code. EECS Department, University of California, Berkely
- [6] Sena, Maria Cecília R.; Costa, Joseaderson A. de C. Tutorial OpenMP C/C++. Maceió, 2008.
- [7] Vahedit, V.; DiPeso, G.; Birdsall, C. K.; Lieberman, M. A.; Rognlien, T. D. Capacitive RF discharges modelled by particle-in-cell Monte Carlo simulation. I: analysis of numerical techniques. 1993.