

Calcul intensif à l'INSA

Bilan - état des lieux

Exemple : simulation des transferts
thermiques à l'échelle atomique

Bilan - Etat des Lieux

Trois laboratoires de l'INSA acteurs au sein de la FLCHP

- le CETHIL, UMR 5008 CNRS INSA UCBL1,
- le LaMCoS, UMR 5259 CNRS INSA,
- le MATEIS, UMR 5510 CNRS INSA.

Implication financière pour la FLCHP :

INSA 15 kEuros / an
+ contribution du LAMCOS

Domaines d'applications

Mécanique des fluides
Mécanique des solides
Matériaux (métalliques, polymères, cristaux diélectriques)

Méthodes

Eléments finis, différences finis, volumes finis
Dynamique moléculaire

Bilan - Etat des Lieux

Utilisation des moyens de la FLCHP sur les trois sites : UCBL1, ECL, ENS

En complément des moyens

- nationaux (IDRIS CINES ...) et
- locaux (achats clusters au sein des laboratoires)

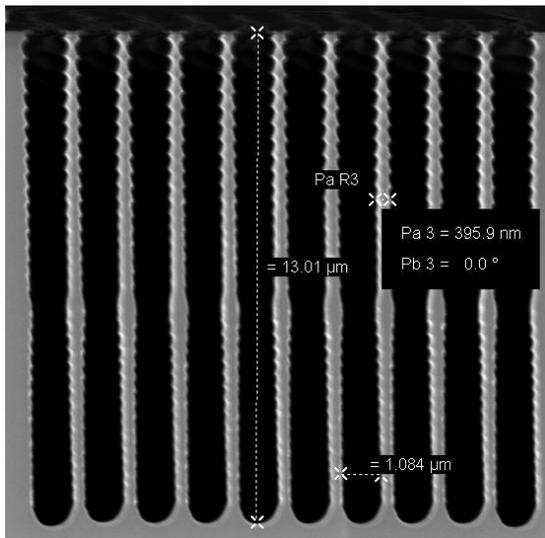
Quelques difficultés rencontrées:

- disponibilités du matériel
améliorations prévues sous peu avec les achats récents
- apprentissage, mise en oeuvre
essentiellement liées à un manque de communication des utilisateurs

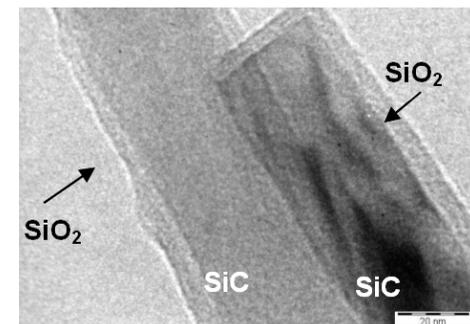
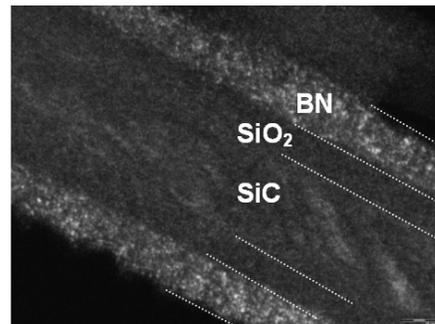
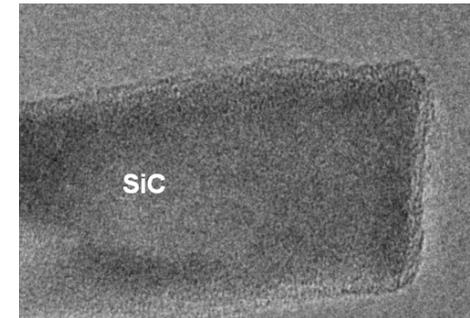
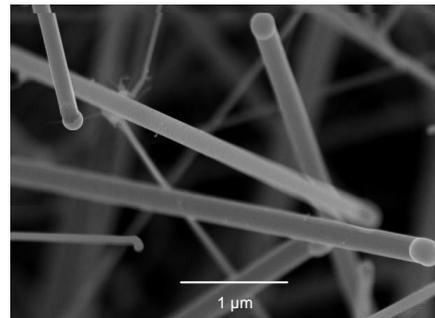
Les apports de la FLCHP

- support efficace
- collaboration entre laboratoires MATEIS CETHIL LAMCOS LPMCN LMFA...
- existence d'une véritable émulation (projets, publications)

Objectif : prédire la conductivité thermique de nanostructures et matériaux nanostructurés pour caractériser et/ou optimiser



Nanotranchées rugueuses servant de base à la réalisation de super réseaux

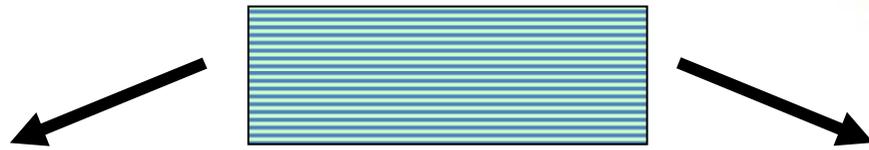


Nanofils et nanocables

Deux problématiques actuelles :

influence des interfaces sur la conductivité thermique

transferts thermiques dans les milieux composites diélectriques/métaux



Echelle micro-nano

$$e_t = n(e_a + e_b)$$

Echelle macroscopique

$$\lambda_a^\perp(e_a) \neq \lambda_a^{\parallel}(e_a)$$

$$\lambda_b^\perp(e_b) \neq \lambda_b^{\parallel}(e_b)$$

$$R_c = R_K \quad \text{Influence } \lambda_{eq}^{\parallel} \text{ et } \lambda_{eq}^\perp$$

$$\lambda_{eq}^\perp = \frac{e_t}{n \left(\frac{e_a}{\lambda_a} + \frac{e_b}{\lambda_b} + R_c \right)}$$

$$\lambda_{eq}^{\parallel} = \frac{e_a \lambda_a + e_b \lambda_b}{e_a + e_b}$$

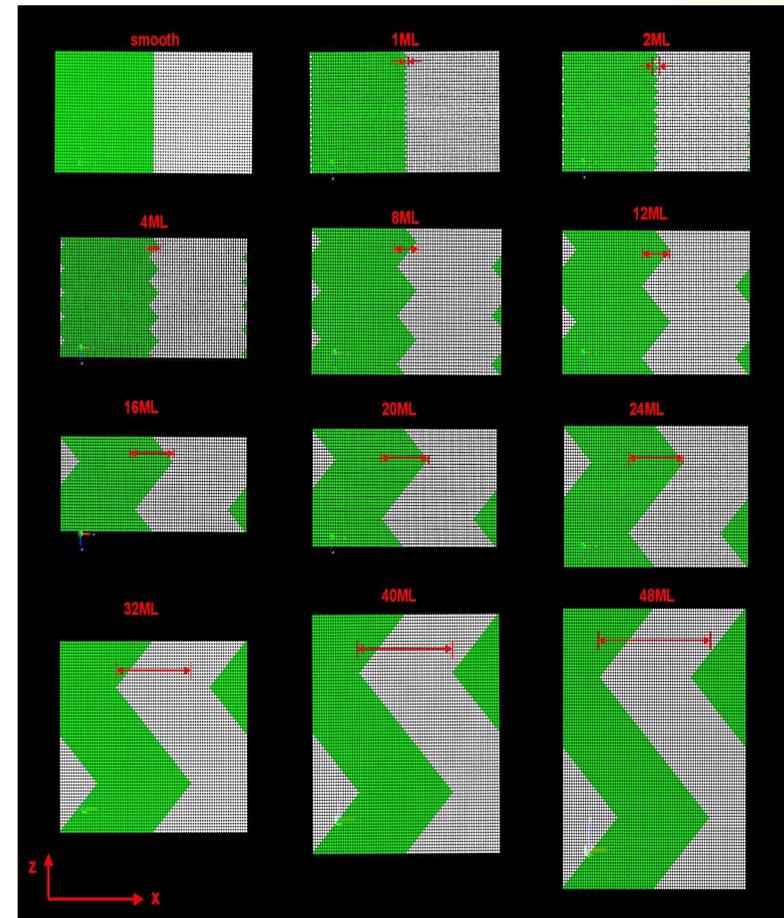
⇒ Utilisation de la Dynamique Moléculaire

$$R_K \quad \lambda_{eq}^{\parallel} \quad \lambda_{eq}^\perp$$

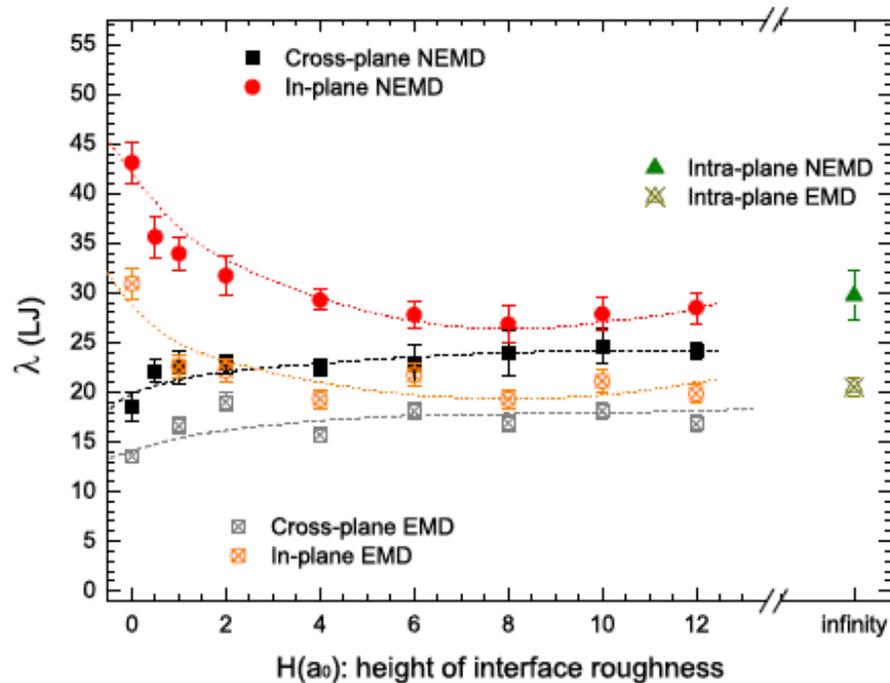
Prédiction de $\lambda_{eq}^{//}$ et λ_{eq}^{\perp} par Dynamique Moléculaire

Paramètres de simulation

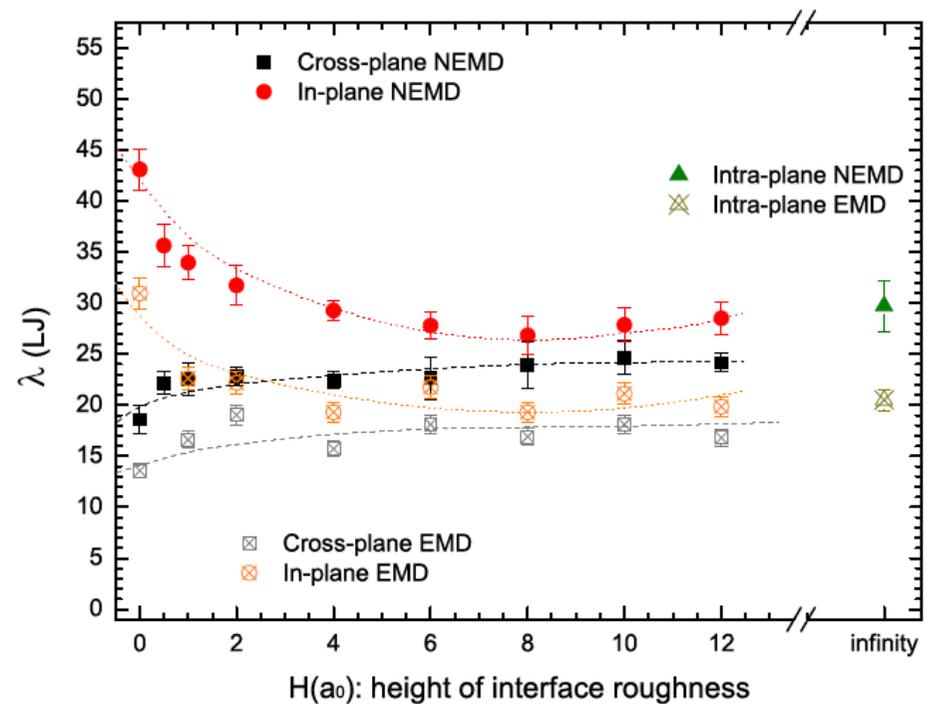
- Matériaux Lennard Jones
- Rapport de masse reproduisant le rapport d'impédance acoustique Si/Ge
- Libre parcours moyen = périodicité du réseau
- Variation de la hauteur des rugosités
- Variation de la périodicité
- Simulation de Dynamique moléculaire de non équilibre
- Comparaison avec Dynamique Moléculaire d'équilibre (méthode de Green Kubo, LPMCN)



Résultats inattendus



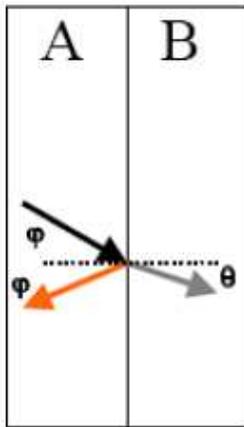
Périodicité du réseau = $20 a_0$



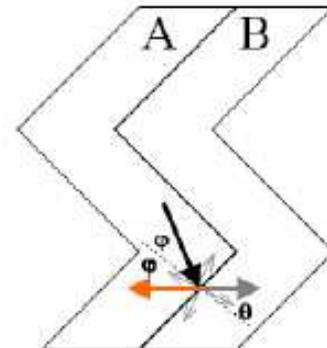
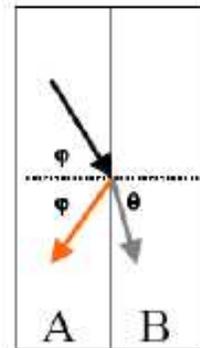
Périodicité du réseau = $40 a_0$

Explications qualitatives

$$\lambda_{eq}^{\perp}$$



$$\lambda_{eq}^{\parallel}$$



Augmentation de la conductivité thermique grâce à l'augmentation de la proportion de réflexion diffuse lorsque la rugosité augmente

Diminution de la conductivité thermique grâce à l'augmentation de la proportion de réflexion diffuse lorsque la rugosité augmente

Simulation du transfert de chaleur dans les matériaux composites diélectrique/métal

Deux problèmes à résoudre

Choix des potentiels

Critères de choix

- Paramètres structuraux
- a_0 , énergie, module élastique
- Courbes de dispersion
- Dilatation
- Temps calcul

Comparaison de potentiels

Si : SW, Tersoff(s), MEAM(s)

Métaux : EAM, MEAM(s)

Couplage électrons phonons

Utilisation du modèle à deux températures

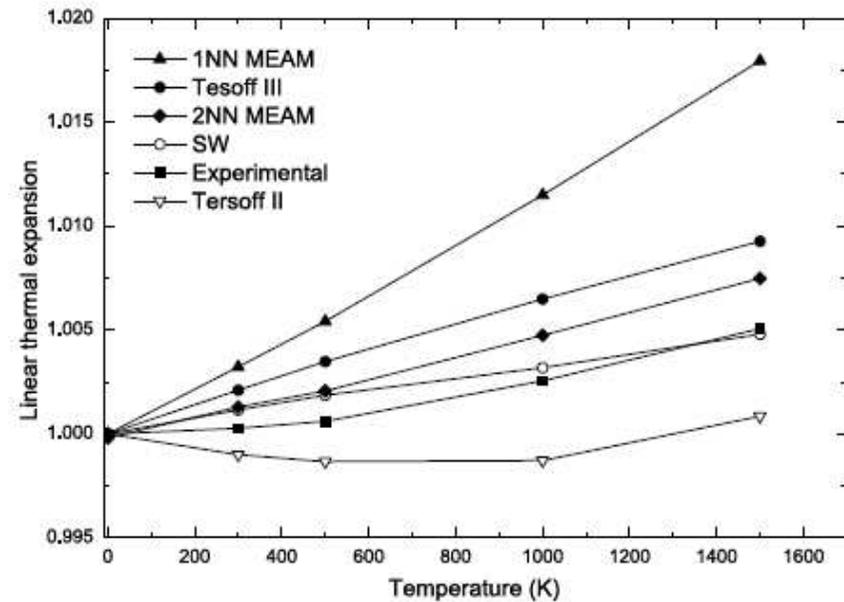
- dans LAMMPS
- Modèle pas encore utilisé pour simuler le TC dans les métaux
- Détermination du coefficient de couplage électron-phonon

$$\varphi_{e-ph} = h_{e-ph} (T_e - T_{ph})$$

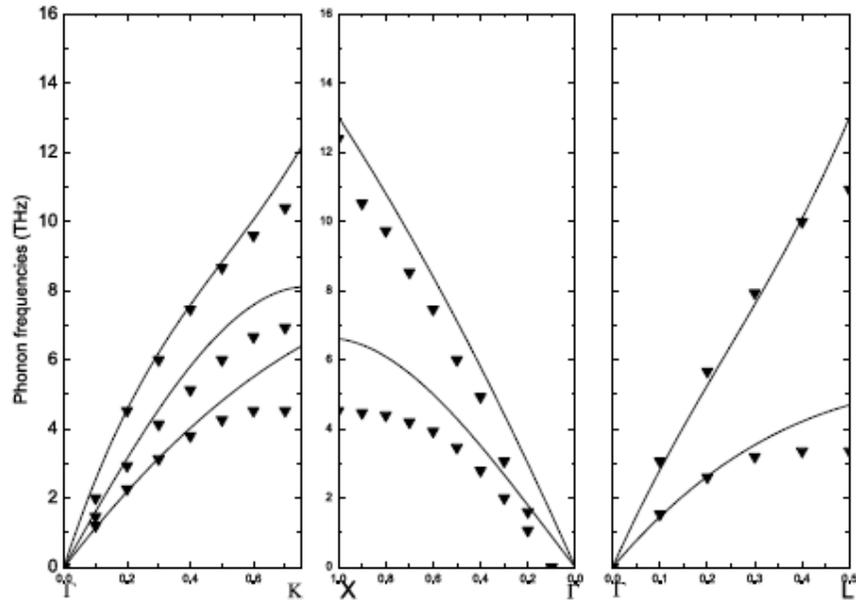
Comparaison de potentiels pour le Silicium

	E_i^0	R_i^0	B
SW	-4.33	5.431	102
Tersoff II	-4.63	5.431	97
Tersoff III	-4.63	5.431	96
1NN MEAM	-4.63	5.431	96
2NN MEAM	-4.63	5.431	98
Exp.	-4.63	5.431	98

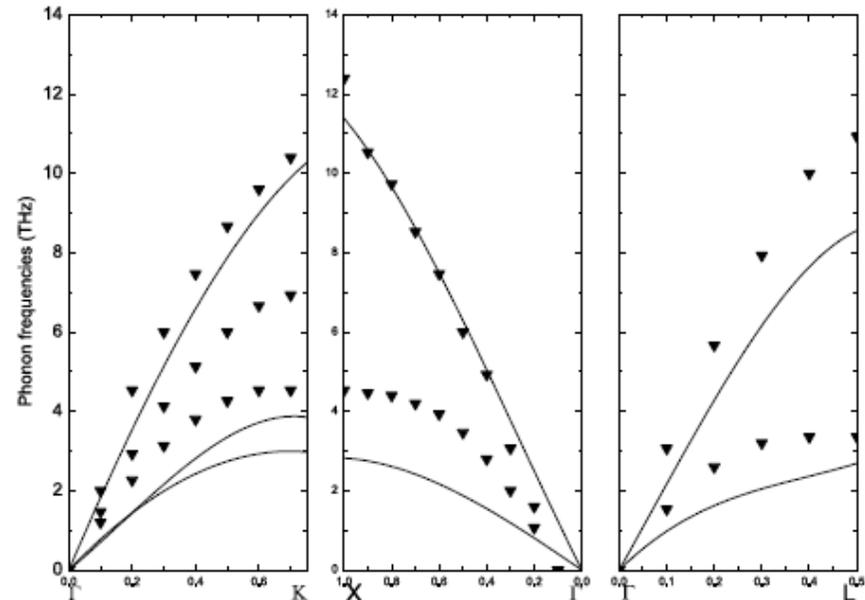
Energie cohésive, paramètre de maille et module élastique pour le Si



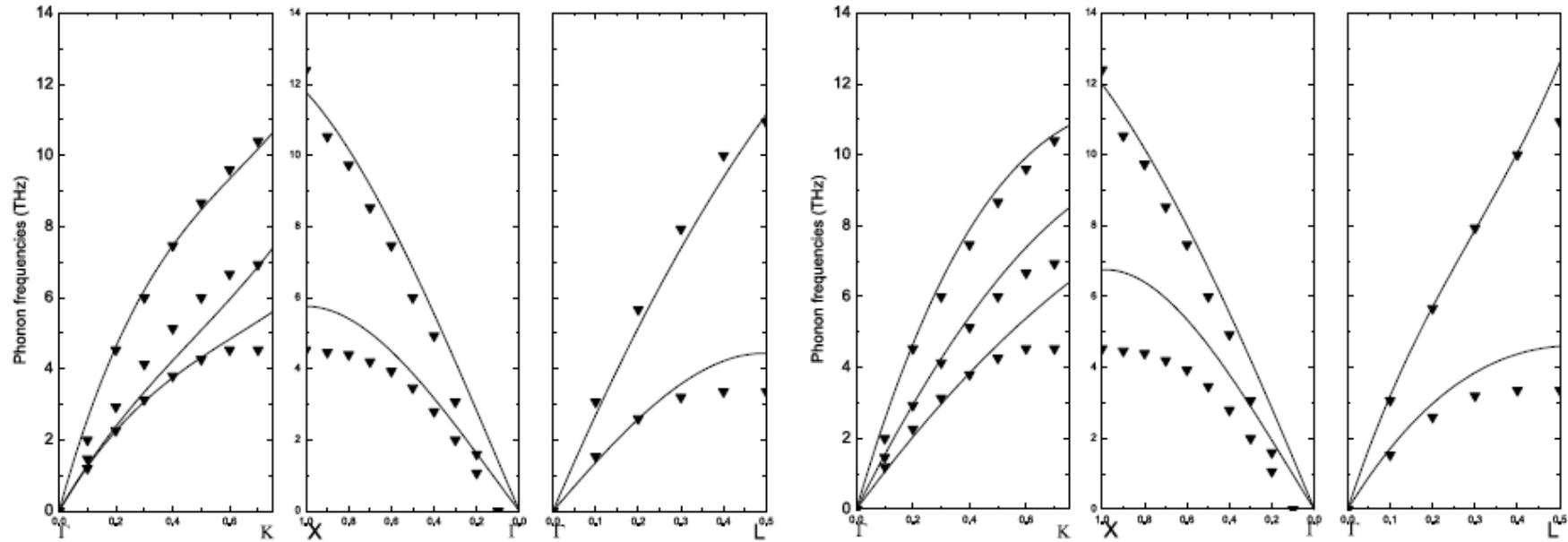
Coefficient de dilatation thermique pour le Si



Courbes de dispersion acoustiques pour le Si obtenues avec le potentiel SW



Courbes de dispersion acoustiques pour le Si obtenues avec le potentiel Tersoff II



Courbes de dispersion acoustiques pour le Si obtenues avec le potentiel 2NN MEAM

Courbes de dispersion acoustiques pour le Si obtenues avec le potentiel Tersoff III

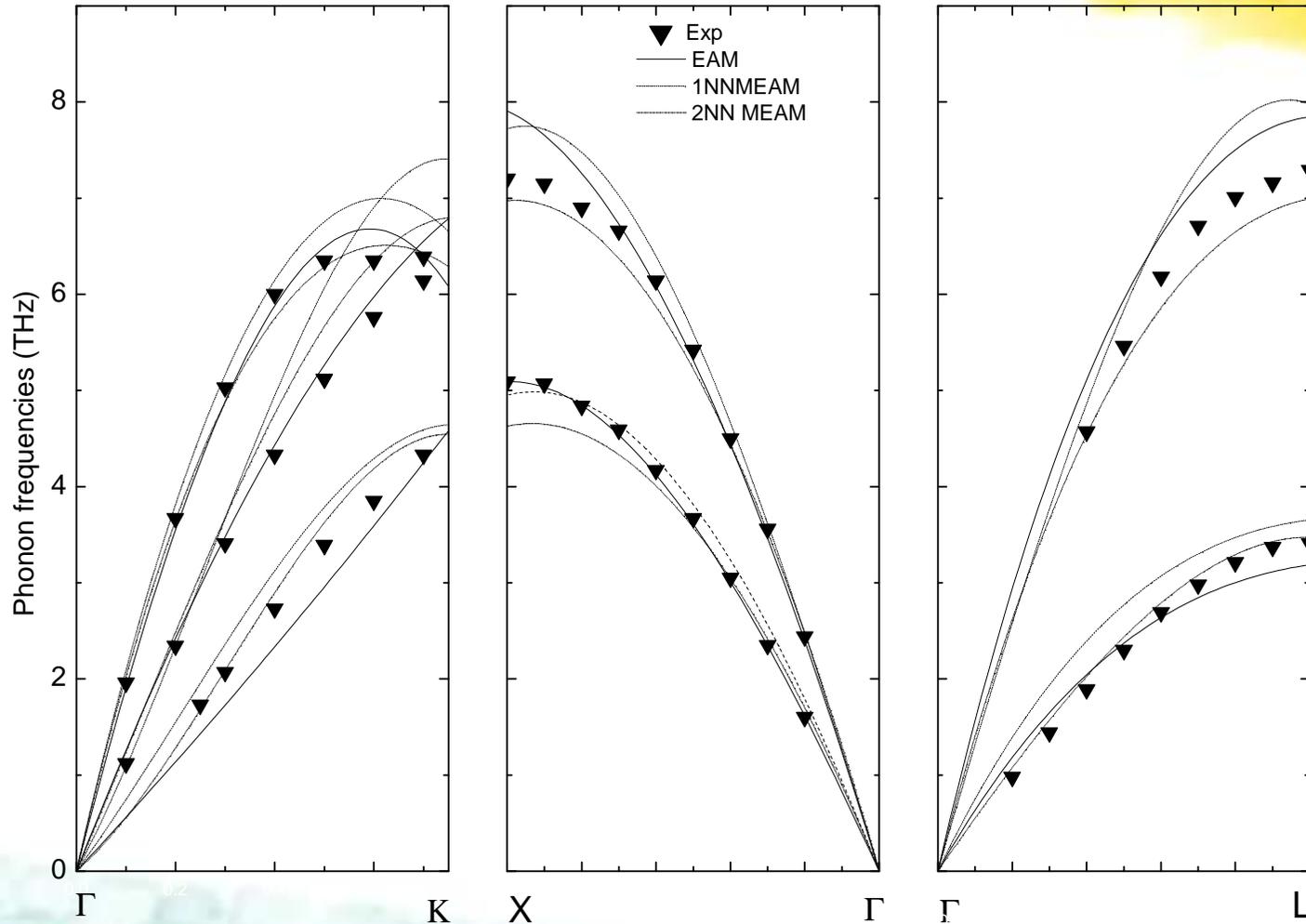
Derniers critères de comparaison :

- temps calcul SW < temps calcul Tersoff < temps calcul 2NNMEAM
- Conductivité thermique à 950 °C

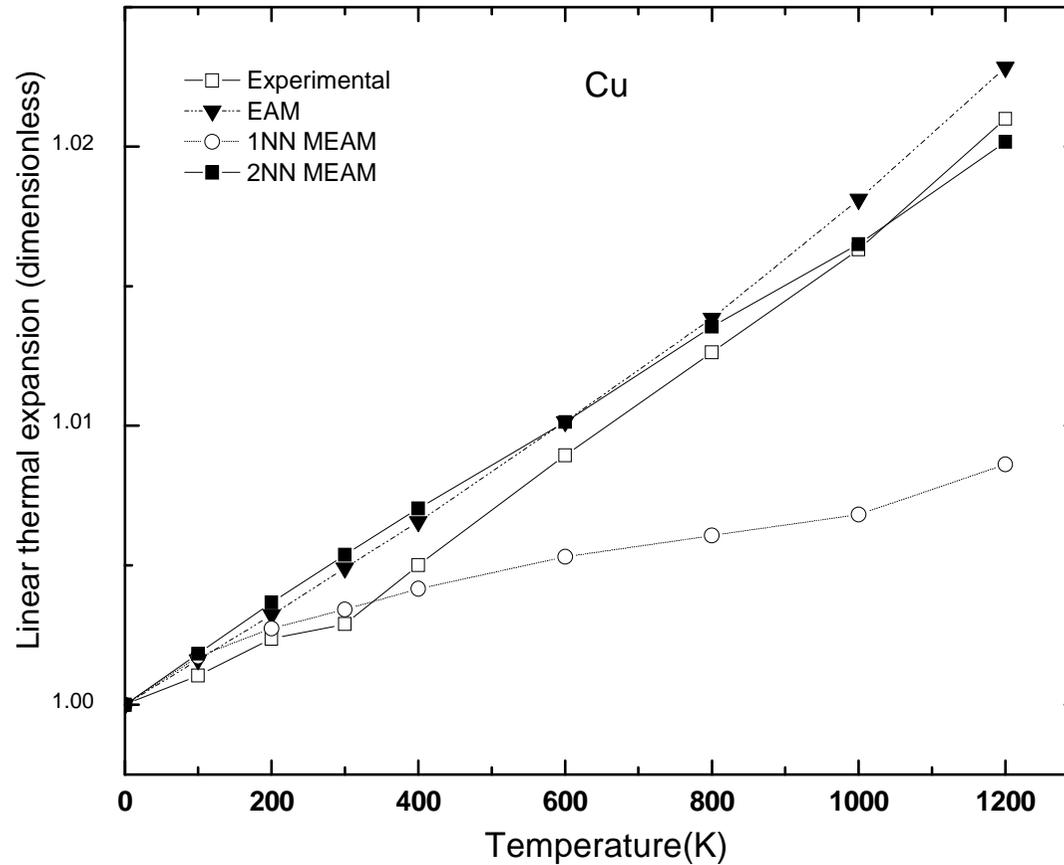
Expérience : 33,4 W/(mK) – SW : 55 W/mK – Tersoff III : 47 W/mK – 2NN MEAM : valeur à venir

Comparaison de potentiels pour les métaux

Material	Potential	Cohesive Energy (ev)	Lattice Parameter (Å)	Bulk Modulus (GPa)
Gold	EAM	-3.93	4.08	166
	MEAM	-3.93	4.07	161
	Exp	-3.93	4.08	180
Silver	EAM	-2.85	4.09	103
	MEAM	-2.85	4.08	100
	Exp	-2.85	4.08	109
Copper	EAM	-3.54	3.61	138
	MEAM	-3.54	3.61	138
	Exp.	-3.54	3.62	142

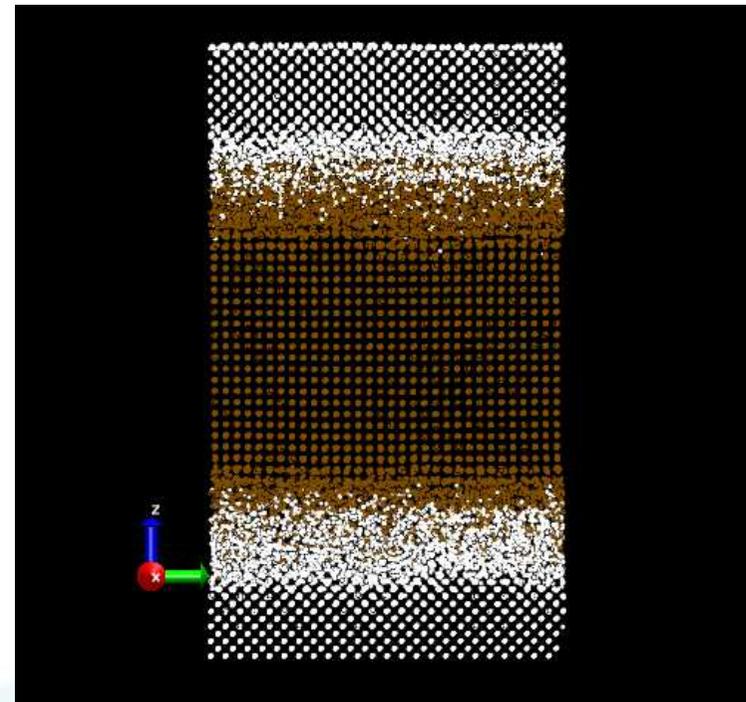
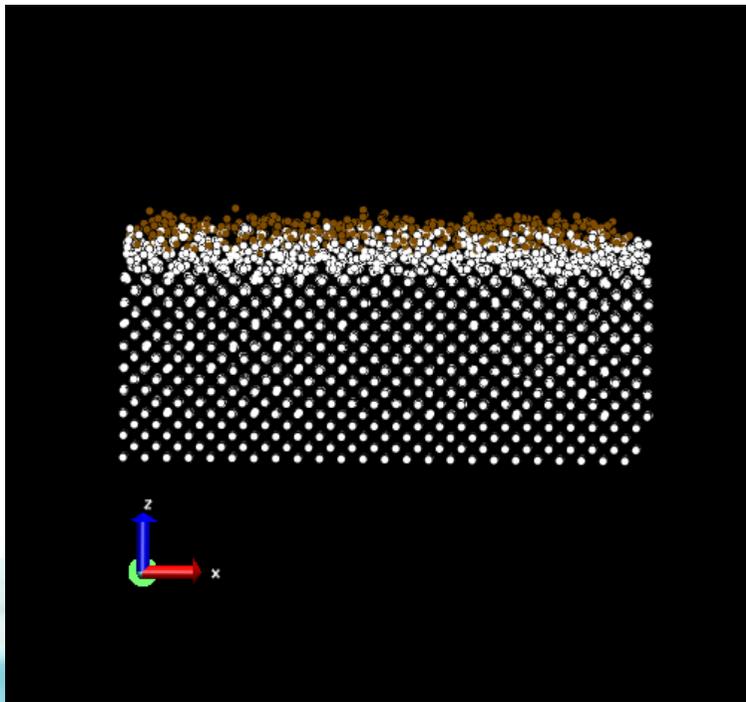


Comparaison des courbes de dispersion pour différents potentiels pour le Cuivre



Comparaison du coefficient de dilatation thermique pour différents potentiels pour le Cuivre

Réalisation d'interfaces Comparaison des profils de concentration avec des résultats expérimentaux et d'autres simulations



Des résultats, des avancées grâce à des moyens de calculs complémentaires

Cluster CETHIL, LPMCN : efficaces de 1 à 8 CPU

Mise au point production de calcul nécessitant peu de temps calcul

FLCHP, P2CHPD : efficaces jusqu'à 32 CPU (chiffre en augmentation sous peu)

Production de calcul pour système de taille moyenne

IDRIS : au delà de 100 CPU

Production de calcul pour grands systèmes

Remerciements

Konstantinos Termentzidis (Post Doc, CETHIL)

Carolina Abs Da Cruz (Doctorante, CETHIL, MATEIS)

Samy Merabia (CR, LPMCN)

Pawel Keblinski (Professeur, RPI)

Xavier Kleber (Pr., Mateis)