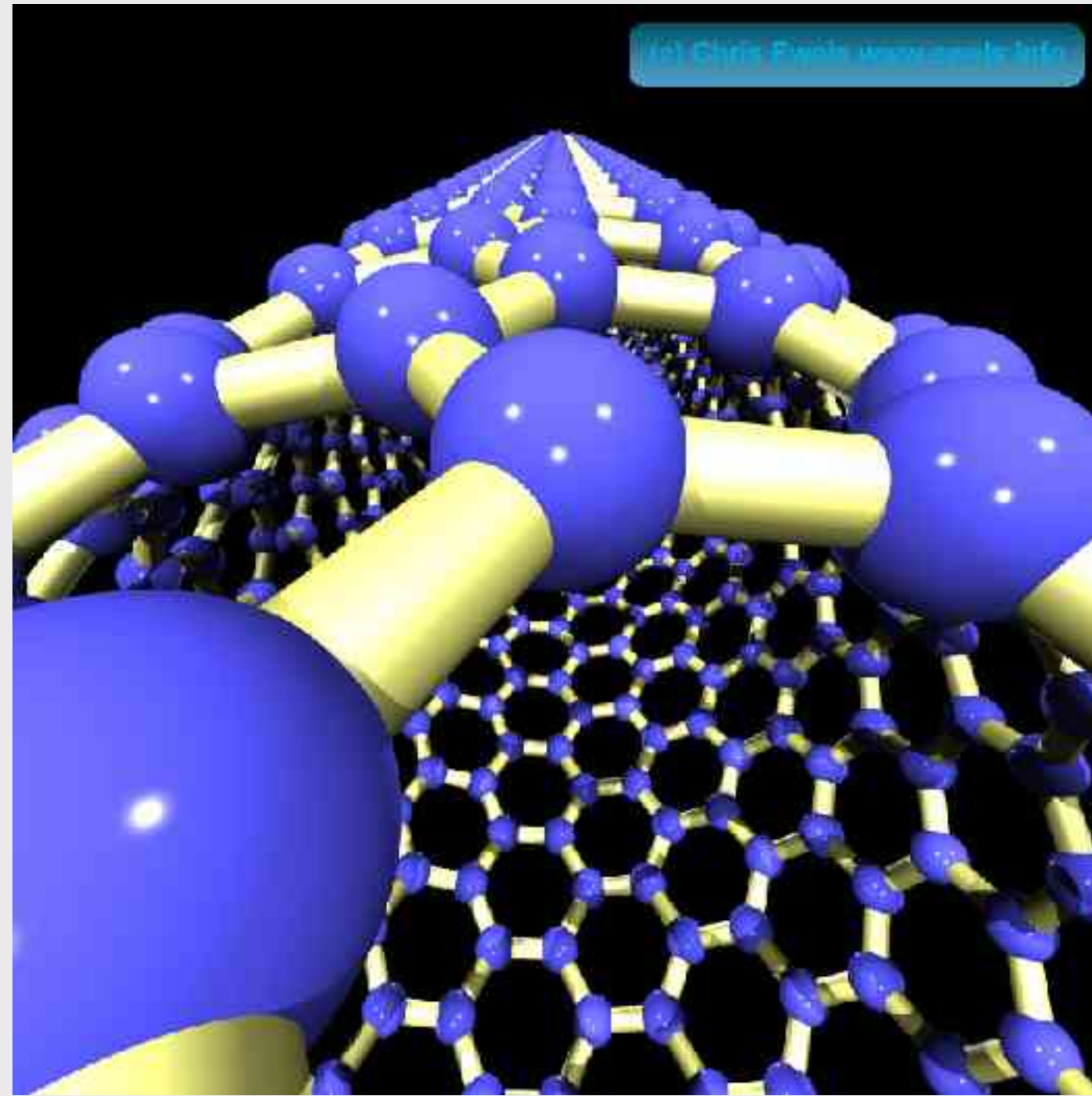


# Calculer des nanostructures avec un beowulf : de l'histoire a la realite

## Chris Ewels et Alberto Zobelli

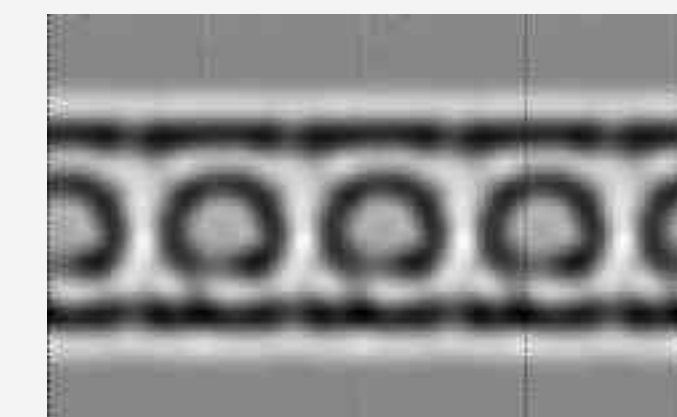
### Nanoscience

Les nanostructures tels que des nanotubes et des fullerènes contiennent normalement des dizaines, voir des millions d'atomes. Par exemple, les nanotubes de Carbone sont des feuilles qui sont formés d'atomes de Carbone arrangés en hexagones. Elles sont enroulées en forme de tube. Ces nouvelles nanostructures auront des applications potentielles dans beaucoup de domaines qui vont de la microélectronique, à la construction, jusqu'à la médecine. Elles ouvrent aussi un fascinant monde scientifique, où l'on peut utiliser des nano-objets comme des échantillons pour explorer les propriétés des atomes et des électrons à très petite échelle.

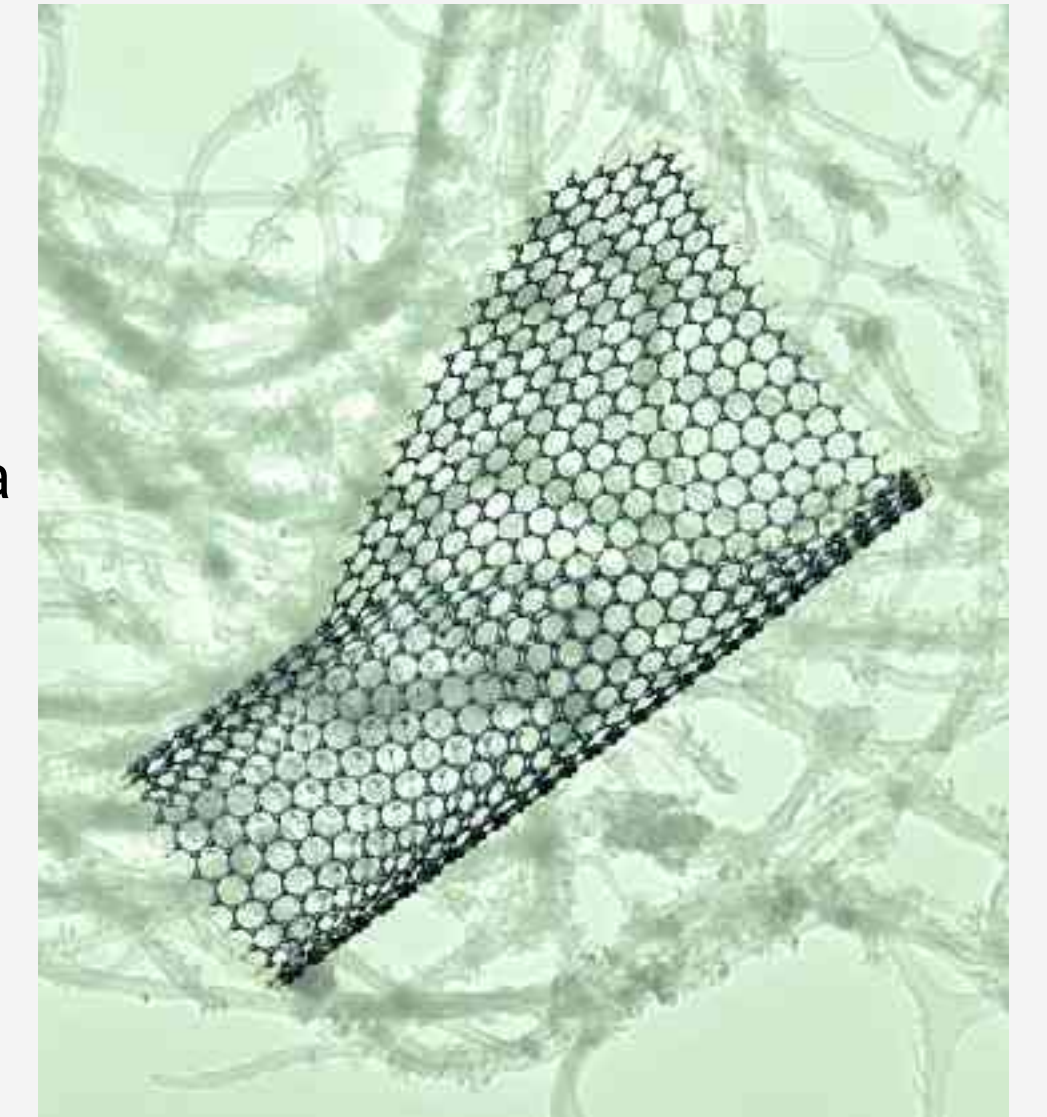


### Notre Calculs

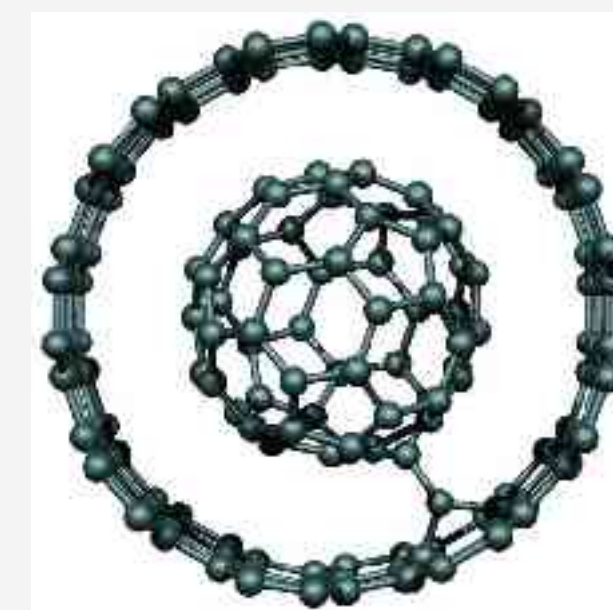
Les nanotubes contiennent des nombres "défauts" tel que des trous et des impuretés. Ils peuvent se plier et se tordre. Mais comment cela affecte-t-il leurs comportement ou leurs propriétés? Nous simulons différentes nanostructures et faisons des prédictions sur ce qui va se passer. Nous simulons également des images de microscopie électronique et de données spectroscopiques pour comparer avec les résultats expérimentaux.



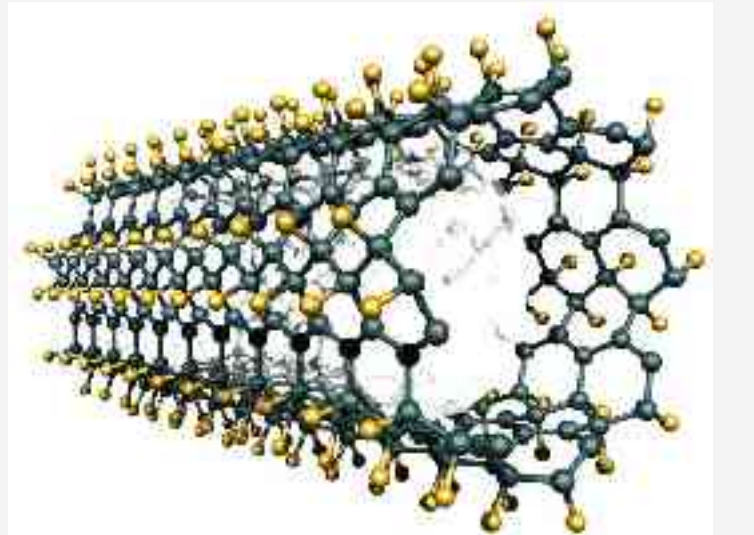
Molécules C60 reliées a la paroi d'un nanotube. Ci-dessus : Image de microscope TEM simulée. Ci-dessous : Structure moléculaire.



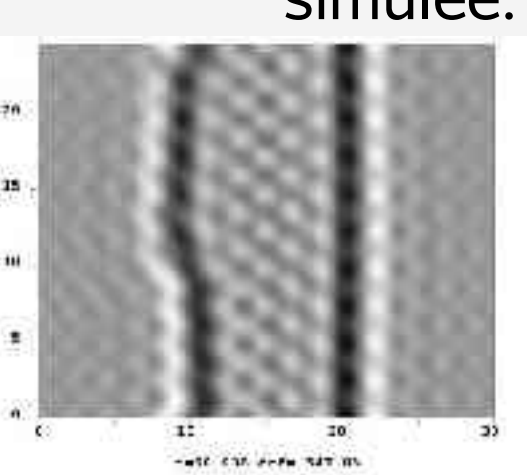
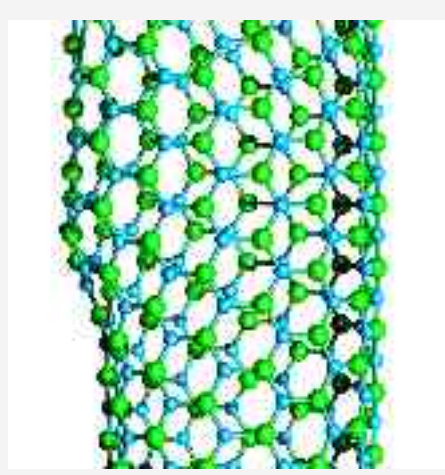
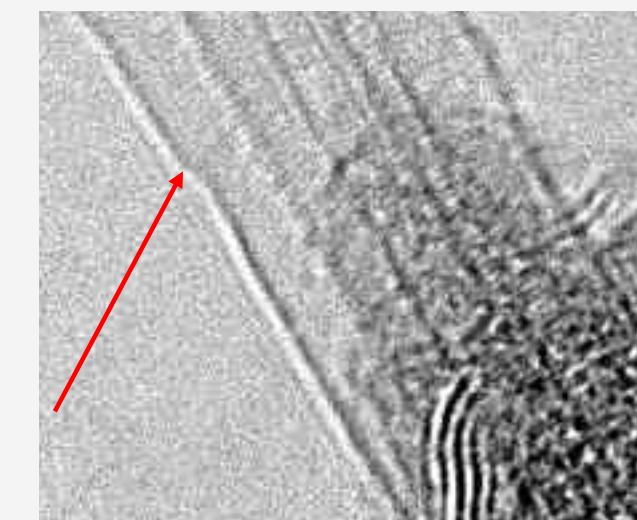
Simulation d'une déchirure d'un nanotube provoquée par l'hydrogène. En arrière-plan, l'image expérimentale.



Nanotube de carbone montrant une fluoration maximale.



A gauche: Défaut dans un nanotube de Nitrure de Bore (BN) (image de microscopie électronique). Centre: Simulation d'une dislocation dans un nanotube de BN. A droite : Image TEM simulée.



### Mensurations principales

Notre système Beowulf, « stem-arthur » est composé de 11 ordinateurs bi-processeurs fréquentés à 2.66GHz de type Pentium 4, chacun avec 2GB de RAM, connectés via un switch à 1 gigabit, tournant sous RedHat Linux, mpich and MPI.



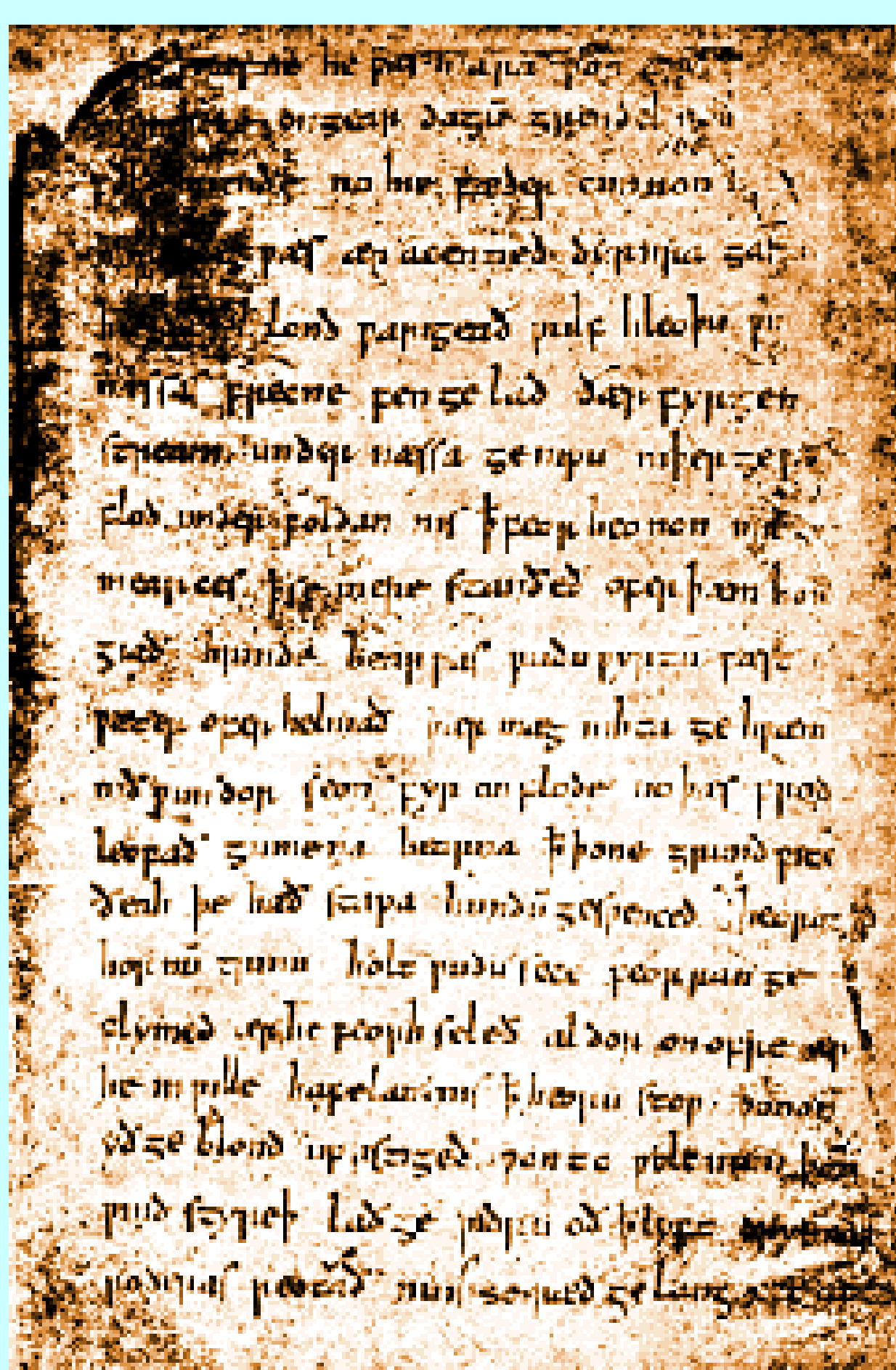
### Calcul parallèle

Ce sont des calculs théoriques très lourdes comme la théorie de la fonctionnelle de densité qui sont hors de portée des PC. Nous utilisons alors un ensemble d'ordinateurs connectés à travers un réseau interne rapide. Le programme tourne alors simultanément sur un ensemble des microprocesseurs connectés permettant ainsi d'augmenter la puissance ou/et la rapidité du calcul. C'est le principe des grappes d'ordinateurs, parfois appelé cluster ou « Beowulf ».



### Beowulf, toute une histoire?

Beowulf est une des plus anciennes épopées de la littérature britannique. Écrit avant la dixième siècle, elle décrit les aventures de Beowulf, un guerrier en provenance de Scandinavie. Quelque chose qui ressemble l'histoire de David et Goliath, la première histoire raconte l'arrivée de Beowulf dans une longère, où les gens sont tous terrorisent par le monstre Grendel. Ce lieu est en effet devenu le terrain de chasse préférée de celui-ci. Il y vient la nuit pour y dévorer les habitants. Beowulf, bien qu'il ne soit qu'un simple être humain, combat le gigantesque monstre et le défait avec succès, arrachant le bras de Grendel.



Premier page extraite du manuscrit de Beowulf (Bibliothèque de Grande Bretagne).



Beowulf combat le monstre Grendel, arrachant son bras.

Le rapport avec la grappe d'ordinateur ? Les concepteurs n'étaient pas des ingénieurs de Cray ou IBM. Ils peuvent être comparés au guerrier Beowulf faisant face aux géants de l'informatique. Néanmoins, avec leurs petits réseaux de PC, ils ont été capables de construire un système à des coûts nettement inférieurs aux super-ordinateurs des grandes compagnies. Cette approche connaît un grand succès.