

КВАНТОВОЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НА СУПЕРКОМПЬЮТЕРАХ ОБЪЕМНОГО ДВОЙНОГО СЛОЯ В СИСТЕМЕ ЭЛЕКТРОЛИТ-ГРАФИТ

А.В. Ланкин, Г.Э. Норман, В.В. Стегайлов

Расчеты электронной структуры многоатомных систем представляют собой одно из основных направлений развития теории конденсированных сред и наук о материалах. Являясь теоретической основой разработки новых материалов с заданными свойствами и описания взаимодействия излучения с веществом, точные и быстрые методы расчета электронной структуры представляют собой одну из основ развития нанотехнологий.

Углеродные суперконденсаторы представляют собой перспективные устройства для хранения энергии, основанные на адсорбции ионов жидкого электролита на поверхности высокопористого углерода (см. рисунки). Для оптимизации подобного рода технологии требуется детальное понимание физики образования двойного электрического слоя и его поведения при зарядке и разрядке суперконденсаторов. Развитие методов квантовой молекулярной динамики позволяет на сегодняшний день строить реалистичные модели подобных процессов. По проведенным предварительным оценкам для адекватных моделей системы графит-электролит требуются модели порядка тысячи атомов. Подобные молекулярно динамические расчеты возможно с использованием супер-ЭВМ петафлопного при условии максимальной оптимизации параллельного кода.

В данной работе исследовался двойной электрический слой на границе водного раствора электролита и электрода, изготовленного из графита. Целью работы была оценка ёмкостных характеристик такой системы и выяснение основных факторов, влияющих на её свойства, в частности, роли графита. Поскольку графит является полуметаллом с относительно низкой смешанной электронно-дырочной проводимостью, то для достижения поставленных целей необходимо совместное рассмотрение подсистемы ионов электролита и электронной подсистемы графита, что возможно только в рамках квантовой механики. Была сформулирована постановка задачи для плоского слоя графит-электролит. Для решения этой задачи проведено численное моделирование двойного электрического слоя с помощью метода квантовой молекулярной динамики в приближении теории функционала электронной плотности с использованием пакета CPMD.

Для осуществления моделирования была использована модель нанопоры в виде двух параллельных слоёв графита, между которыми находился слой электролита (см. рис.1). Направление вектора напряжённости внешнего поля было выбрано перпендикулярно кристаллографической плоскости графита. В качестве электролита был выбран концентрированный водный раствор гидроксида калия.

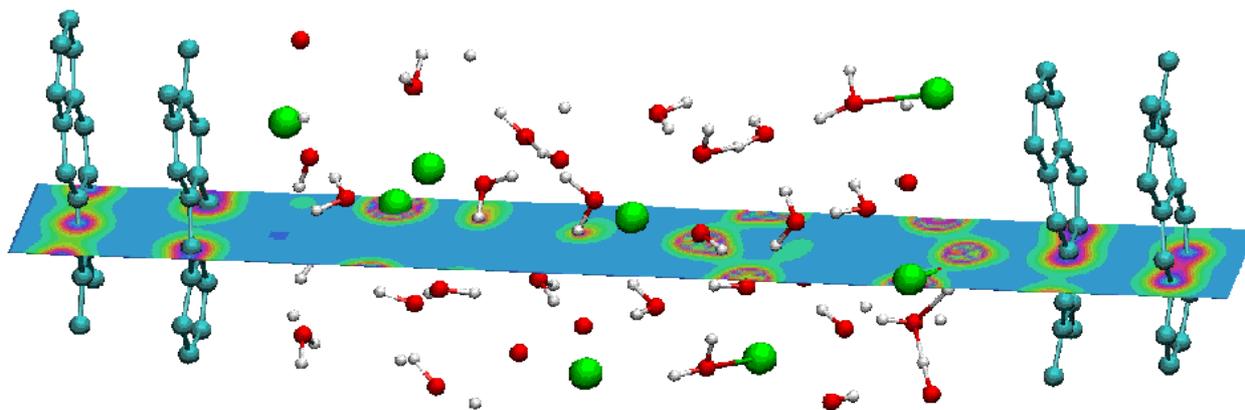


Рис. 1. Расчетная ячейка квантовой молекулярно-динамической модели для изучения двойного электрического слоя, образуемого щелочным электролитом (KOH) в нанопоре графита.

При MPI распараллеливании алгоритмов для систем с распределенной памятью в рамках используемого метода расчета электронной структуры, основанного на базисе плоских волн, основное внимание уделяется минимизации обменов между вычислительными узлами. В этой связи крайне важно распределение данных по вычислительным узлам. В первую очередь это относится к информации о волновых функциях. В пакете CPMD используется распределение данных по процессорам для данных о волновых функциях в реальном и Фурье пространстве. Распределение данных является статическим, т.е. оно не изменяется в процессе расчета. Во всех частях программы, где не возможна параллелизация по плоским волнам, используется параллелизация по числу атомов и состояниям. Главными для распараллеливания алгоритмов в пакете CPMD являются три коммуникационные процедуры. Все они – коллективные, т.е. задействуют все вычислительные узлы, что подразумевает проведение синхронизации при выполнении этих процедур. Этими процедурами являются Broadcast, GlobalSum и MatrixTranspose.

По результатам расчетов сделана оценка предельных значений емкости двойного слоя на поверхности электрода в случае плоского бездефектного графита. Показано, что данная оценка согласуется с имеющимися в литературе экспериментальными данными.

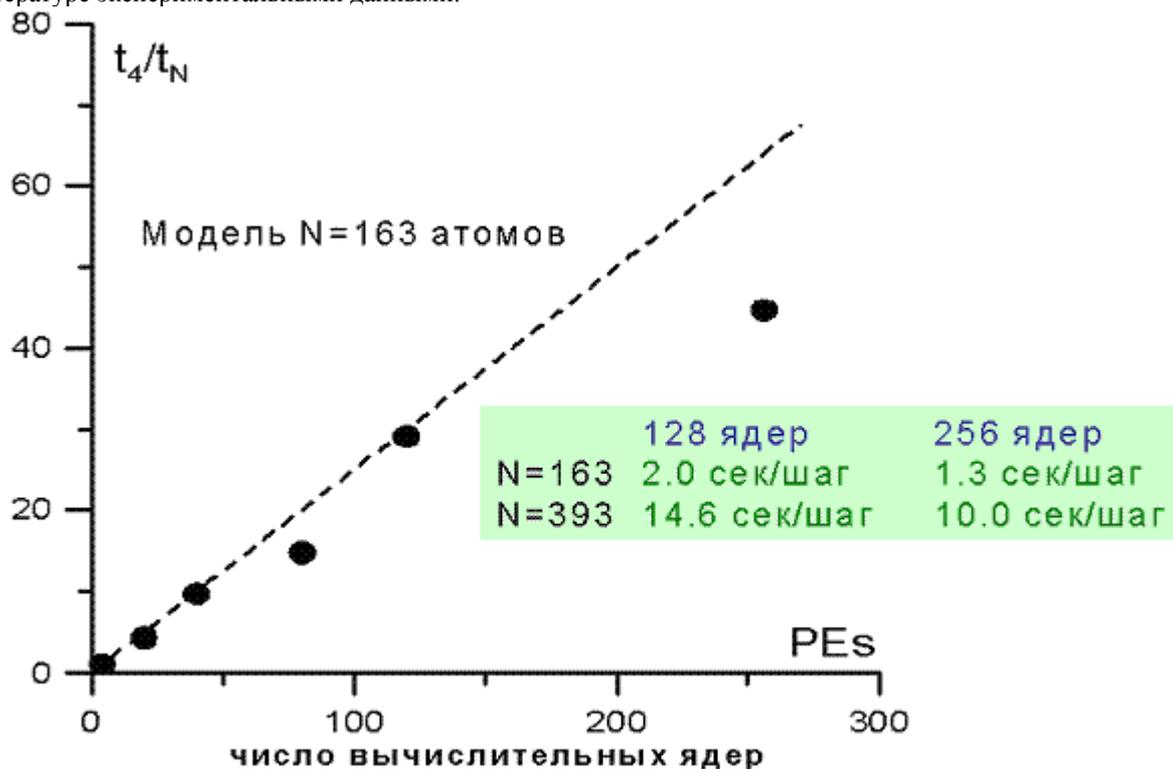


Рис. 2. Масштабируемость расчетов двойного электрического слоя (кластер МИРТ-60). t_4 – время расчёта на четырёх ядрах. t_N – время расчёта на N ядрах.

В работе проанализирована масштабированность используемой модели на кластере МФТИ-60 (см. рис.2), а также рассмотрены перспективы использования для данных расчетов систем типа BlueGene/P (см. рис.3).

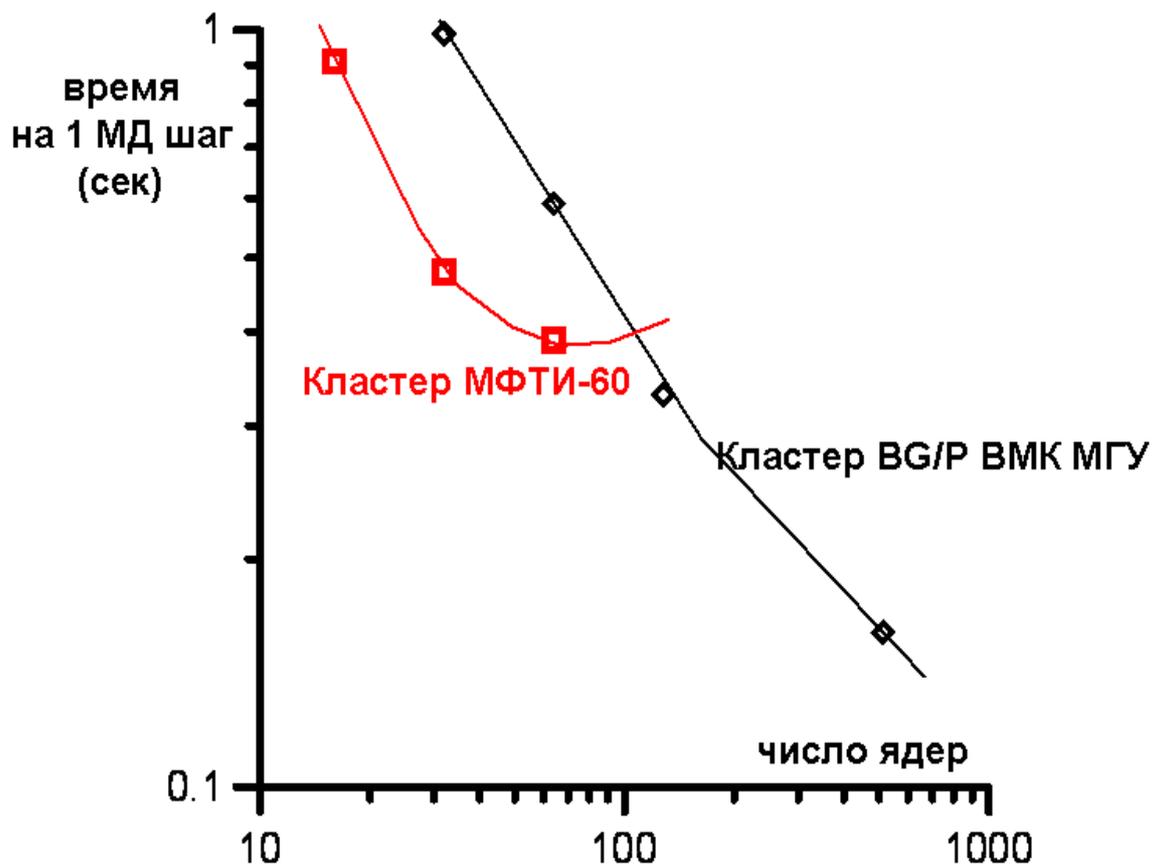


Рис. 3. Масштабируемость расчётов модели 32 молекул воды с использованием пакета CPMD на кластере МФТИ-60 и кластере BG/P ВМК МГУ.

Расчеты были проведены на кластере МФТИ-60 кафедры информатики МФТИ и кластере BlueGene/P ВМК МГУ. Работа поддержана грантом РФФИ 09-08-12161-офи_м.