

# Model dynamicznej cieczy sieciowej w zastosowaniu do wielkoskalowych symulacji złożonych układów molekularnych oraz Technologia Analizatorów Układów Rzeczywistych (TAUR)

Andrzej Sikorski<sup>1</sup>, Piotr Polanowski<sup>2</sup>, Jarosław Jung<sup>2</sup>, Krzysztof Haagan<sup>2</sup>,

<sup>1</sup>*Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski, Pasteura 1, 02-93 Warszawa*

<sup>2</sup>*Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka, Żeromskiego 116, 90-924 Łódź*

Złożone układy molekularne wymagają zastosowania specjalnych algorytmów symulujących. Na dwóch przykładach przedstawione zostaną zastosowania modelu Dynamicznej Cieczy Sieciowej, przeznaczonego do badania układów o dużej gęstości, gdzie wszystkie ruchy odbywają się w sposób kooperatywny. Badane będą gruboziarniste modelowe układy makromolekularne zbudowane w przestrzeni dyskretnej (model sieciowy). Przedstawiony zostanie model zatłoczonych układów biologicznych, w którym badano jego strukturę i dynamikę, z położeniem na nacisku na zjawisko subdyfuzji i perkolacji. Drugi model pozwolił opisać procesy polimeryzacji wielofunkcyjnych kopolimerów i przewidywać własności tych układów makromolekularnych.

W 2015 roku została oddana do użytku maszyna o nazwie Analizator Rzeczywistych Układów Złożonych (ARUZ), którą zbudowano stosując TAUR. ARUZ zawiera największą na świecie liczbę połączonych ze sobą układów FPGA, których działanie sterowane jest za pomocą 2880 jednocześnie pracujących systemów operacyjnych Linux. Parametry techniczne ARUZa są następujące: 25920 układów FPGA typu Artix XC7A200T i 2880 układów typu Zynq XC7Z015; infrastruktura zarządzająca – 22 serwery, 1 macierz NAS; UPS – SG-CE Series 400–500 kVA; waga – 52 tony; wymiary – wysokość 4.5 m, średnica 14 m; klatka Faradaya – wysokość 5.3 m, średnica 16 m (podstawa 24-ścienna), tłumienność 100dB, filtrowane przepusty komunikacji światłowodowej, zasilania, wentylacji, układu chłodzenia oraz systemu gaszenia gazem; energochłonność – pobór mocy to ok. 100kW, włącznie z infrastrukturą ok. 130kW, teoretyczny maksymalny dopuszczalny pobór mocy to 500kVA.

Opracowanie TAUR jest oryginalnym dziełem powstałym na Politechnice Łódzkiej w wyniku wieloletniej współpracy Katedry Fizyki Molekularnej i Katedry Mikroelektroniki i Technik Informatycznych. Technologia ta pozwoliła na zbudowanie maszyny ARUZ, której głównym wykonawcą była firma Ericpol (obecnie Ericsson) oraz szereg firm krajowych w większości z regionu łódzkiego. Dedykowane oprogramowanie systemu wykonane zostało w całości przez w kraju (głównie na Politechnice Łódzkiej). ARUZ został zainstalowany w specjalnie dla niego zbudowanym budynku, który stanowi część kompleksu laboratoriów w Łódzkim BioNanoParku. W budynku ARUZa znajduje się Laboratorium Symulacji Molekularnych.

Obecnie z wykorzystaniem ARUZa realizowane są dwa badawcze projekty krajowe (NCN 2014/14/A/ST5/00204 i NCN 2017/25/B/ST5/01970) dotyczące symulacji złożonych układów molekularnych zawierających od 1,5 mln do 5 mln cząsteczek.