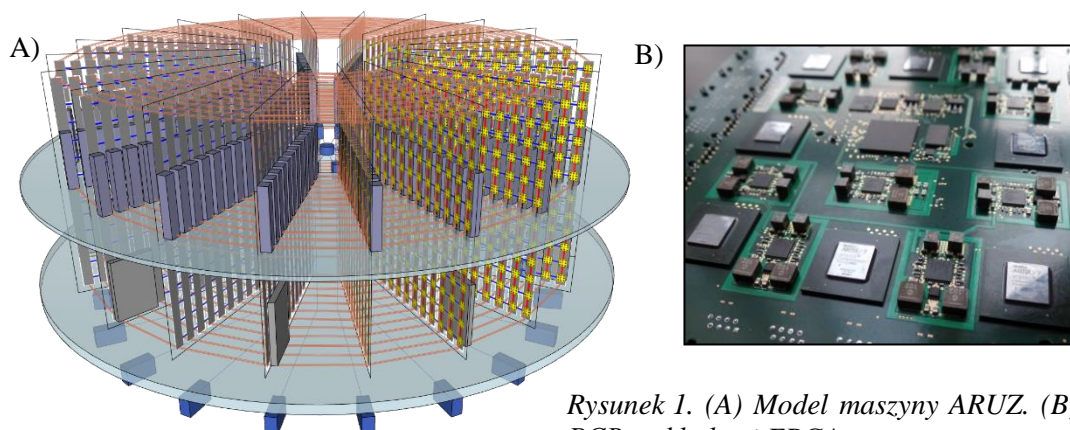


Analizator Rzeczywistych Układów Złożonych – ARUZ¹

Autorzy tekstu: J. Jung, K. Halagan

ARUZ to inaczej Analizator Rzeczywistych Układów Złożonych (Rys.1A). Został zbudowany w technologii TAUR opracowanej na Politechnice Łódzkiej. Mieści się w łódzkim BioNanoParku i jest zamknięty w klatce Faradaya o tłumienności 100dB, aby w najmniejszym stopniu nie zakłócać pracy pobliskiego portu lotniczego.



Rysunek 1. (A) Model maszyny ARUZ. (B) Płyta PCB z układami FPGA.

ARUZ w liczbach

- 20 lat projektowania, testów i aktualizacji
- 50 ton wagi
- 4,5 metra wysokości
- 14 metrów średnicy
- 75 000 przewodów sygnałowych o łącznej długości 100 km
- **25 920 programowalnych układów FPGA (23040 układów Artix XC7A200T oraz 2880 układów zarządzających Zynq XC7Z015)**
- wszystkie układy FPGA połączone są w trójwymiarową sieć kubiczną pozwalającą odwzorować torus sieci powierzchniowo centrowanej
- 2880 modułów elektronicznych z niezależnymi systemami Linux (Rys. 1B)
- 240 zdalnie sterowanych zasilaczy lokalnych
- chłodzenie wodne
- 0,1 MW poboru mocy

Koncepcja i początki ARUZa

W końcu ubiegłego wieku profesor Tadeusz Pakuła wymyślił sposób w jaki można poprawnie odwzorować mieszanie się cząsteczek w substancjach, w których molekuly ciasno wypełniają całą przestrzeń. Okazało się, że dla grupy cząsteczek możliwe są przemieszczenia kooperatywne, co stanowiło podstawę do opracowania przez profesora modelu ruchów kooperatywnych o nazwie Dynamiczna Ciecz Sieciowa (w j. ang. Dynamic Lattice Liquid – DLL) (Rys. 2). W oparciu o założenia tego modelu Tadeusz Pakuła skonstruował odpowiedni algorytm i zapisał go w postaci programu komputerowego. Później z powodzeniem stosował do symulacji procesów zachodzących w skomplikowanych układach wielocząsteczkowych.

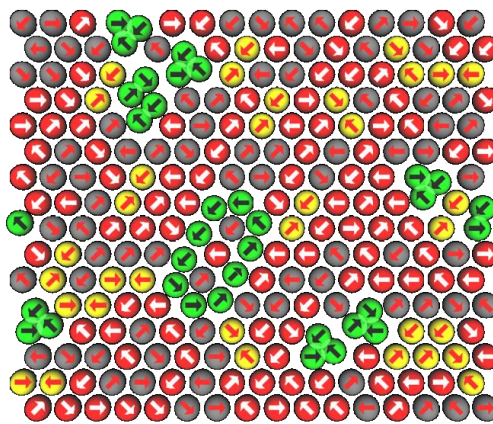
¹ Rozpowszechnianie ilustracji graficznych tylko za zgodą autorów. Część ilustracji jest własnością wydawców Elsevier oraz PCSS, Poznań.

W tym miejscu warto zapoznać się z postacią tego wybitnego naukowca. Prof. Tadeusz Pakuła, przygodę z nauką zaczynał od studiowania fizyki na Uniwersytecie Łódzkim. Przez szereg lat pracował pod kierunkiem znanego naukowca, Prof. Mariana Kryszewskiego, początkowo na Wydziale Chemicznym Politechniki Łódzkiej, a od 1973 r. w Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych Polskiej Akademii Nauk w Łodzi. Stopień doktora i doktora habilitowanego uzyskał na Wydziale Chemicznym Politechniki Łódzkiej. W roku 1984 podjął pracę w Instytucie Maksa Plancka Badań Polimerów w Moguncji w Niemczech. Od 1995 roku był także zatrudniony w Katedrze Fizyki Molekularnej Wydziału Chemicznego Politechniki Łódzkiej.

Pod koniec 1999 roku Profesor nawiązał współpracę z mgr inż. Jarosławem Jungiem, fizykiem i elektronikiem, oraz z fizykiem mgr Piotrem Polanowskim, którzy po zapoznaniu się z modelem DLL zaproponowali budowę dedykowanej maszyny realizującej założenia tego modelu. Twierdzili, że wykona ona symulacje z wykorzystaniem algorytmu DLL dla układu składającego się z 1 miliona cząsteczek tysiące razy szybciej niż komputery, którymi Profesor posługiwał się w swoich pracach. Spotkali się z wielkim entuzjazmem i zainteresowaniem tym pomysłem ze strony twórcy modelu DLL. Niebawem we troje rozpoczęli żmudną pracę nad opracowaniem koncepcji i założeń konstrukcyjnych przyszłej maszyny. Po 4 latach projekt był na tyle gotowy, żeby go zrealizować, i wtedy zwrócili się z propozycją dalszej współpracy do kierownika Katedry Mikroelektroniki i Technik Informatycznych Politechniki Łódzkiej prof. Andrzeja Napieralskiego oraz właściciela firmy elektronicznej FOREL dr inż. Witolda Zatorskiego. Dzięki przychylności prof. Napieralskiego, który od razu przydzielił do pomocy jednego ze swoich najlepszych doktorantów mgr inż. Rafała Kiełbika, praca nabrała charakteru aplikacyjnego.

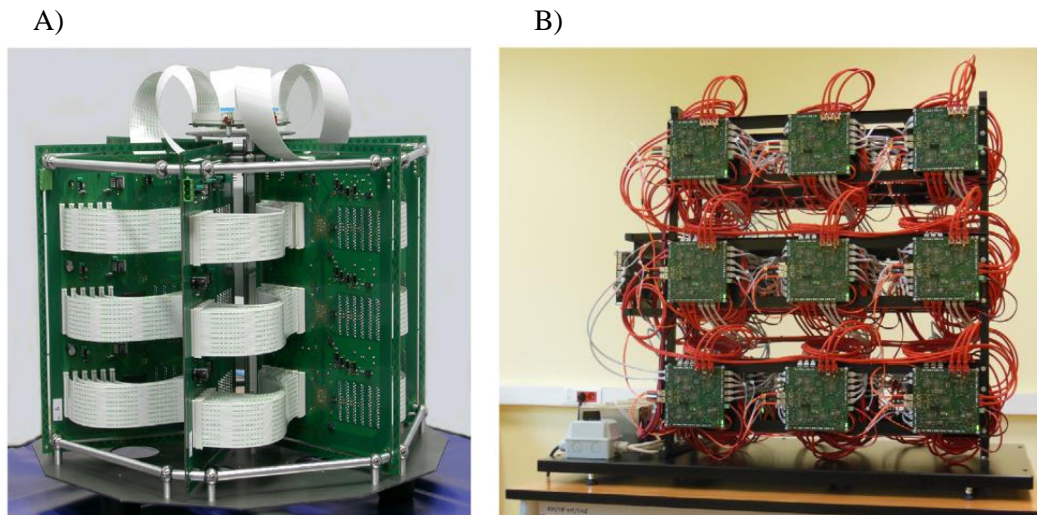
Rozpoczęto też działania związane z pozyskaniem środków na budowę maszyny. Nie było to proste, ponieważ koszt budowy tego urządzenia szacowano wówczas na 100 mln zł. Suma wydaje się być szokująco wielka, ale w porównaniu do podobnych wielkością instalacji superkomputerowych na świecie i tak kilkukrotnie mniejsza. Starano się zdobyć fundusze ze środków ówczesnego Komitetu Badań Naukowych, funduszy europejskich, środków ministerialnych i innych. Istniała duża nadzieja, że pieniądze te zostaną zdobyte dzięki wielkiemu międzynarodowemu autorytetowi Prof. Tadeusza Pakuły.

Niestety w 2005 roku, Prof. Pakuła zmarł. To spowodowało, że szanse budowy maszyny oddaliły się w bliżej nieznaną przyszłość. Od tego czasu, w oczekiwaniu na szansę finansowania maszyny, postanowiono działać „drobnymi krokami”. Najpierw, za pieniądze pozyskane z projektu badawczego KBN, w ciągu 3 lat zbudowano mały model maszyny ARUZ zawierający 216 cząsteczek (Rys. 3A). W ciągu następnych 3 lat skonstruowano następny model, w którym można było zmieścić już około 3000 cząsteczek (Rys. 3B). Podczas budowy i uruchamiania tych modeli znaleziono słabe strony proponowanych rozwiązań technicznych i wymyślono jak je ulepszyć. W trakcie tych prac zespół badawczy uległ przeorganizowaniu. Profesor Piotr Polanowski odłączył od grona konstruktorów



Rysunek 2. Koncepcja algorytmu DLL. Cząsteczki wykonują próby ruchów w kierunku oznaczonym strzałką. Przemieszczeniu mogą ulec tylko te molekuły, które należą do cykli kooperatywnych (zielone kółka).

maszyny, ale pozostał przy symulacjach molekularnych DLL stając się wysokiej klasy specjalistą. Do zespołu wykonawców maszyny zaczęło natomiast napływać coraz więcej młodych osób. Pojawili się doktoranci i pracownicy Katedry Mikroelektroniki i Technik Informatycznych, a także dr inż. Krzysztof Hałagan - wychowanek Prof. Piotra Polanowskiego. Zaczęły powstawać prace inżynierskie i magisterskie dotyczące konstrukcji tego urządzenia. Jednak ciągle nie można było pozyskać środków na budowę maszyny.



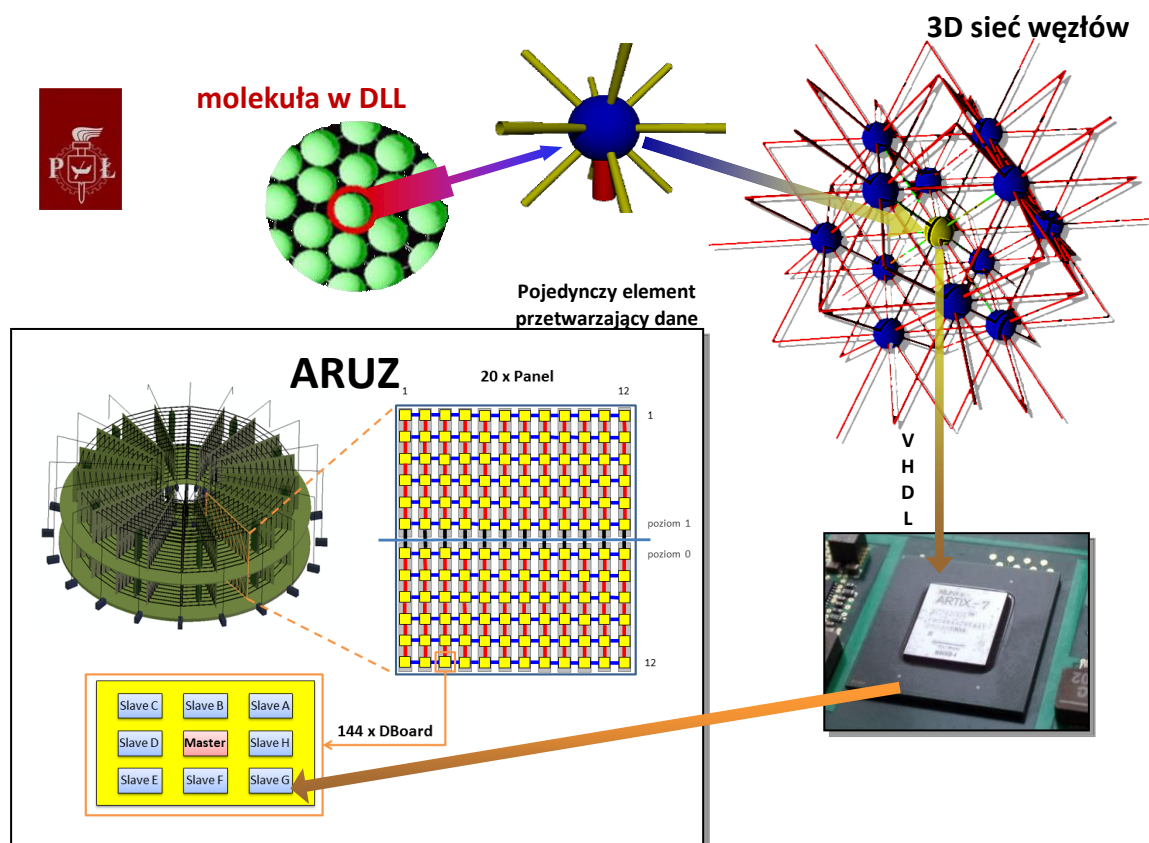
Rysunek 3. (A) pierwszy i (B) drugi prototypy maszyny ARUZ.

Sprawność w przetwarzaniu danych przez maszynę ARUZ w porównaniu istniejących systemów komputerowych

Sercem tradycyjnego komputera jest mikroprocesor, który z zawrotną szybkością, sekwencyjnie jedną po drugiej, wykonuje bardzo proste operacje arytmetyczne i logiczne. Program komputerowy ustala kolejność tych operacji, co w konsekwencji prowadzi do wykonania bardzo skomplikowanych obliczeń. Złożone zadania obliczeniowe w wielu przypadkach można podzielić na fragmenty. W sieci połączonych ze sobą mikroprocesorów (klastry komputerowe lub superkomputery) wszystkie mikroprocesory mogą jednocześnie wykonać powierzone im zadanie. Nazywane jest to pracą równoległą. Po wykonaniu obliczeń procesory muszą się wymienić wynikami za pomocą tzw. magistral sygnałowych. Później znów przystępują do realizacji kolejnego kroku algorytmu. Taki sposób pracy, chociaż znacznie przyspieszający działanie komputerów, obarczony jest poważnymi wadami: 1) nie wszystkie obliczenia można wykonać równoległe, 2) mikroprocesory wykonują powierzone im zadania w sposób sekwencyjny, 3) wymiana danych pomiędzy mikroprocesorami trwa bardzo długo w stosunku do czasu trwania obliczeń, co w największym stopniu przyczynia się do znacznego spowolnienia systemu wieloprocessorowego.

Inaczej wygląda to w ARUZie. Maszyna składa się z równoległe pracujących układów elektronicznych umieszczonych w węzłach sieci przestrzennej (Rys. 4). Zawierają one komórki przeznaczone do wykonywania konkretnych operacji logicznych. Funkcje te są znacznie bardziej złożone niż operacje arytmetyczno-logiczne wykonywane przez mikroprocesor. Oznacza to, że po pobudzeniu jednym impulsem zegara systemowego, układy te wykonają w jednej chwili wielokrotnie więcej niż mikroprocesor. Komórki połączone są tylko z sąsiadującymi kilkoma komórkami za pomocą bardzo szybkich złącz. Zapewniają one znacznie efektywniejszą wymianę danych pomiędzy komórkami niż magistrale komputerowe. Kolejne kroki algorytmów zawsze są wykonywane przez wszystkie komórki jednocześnie (maszyna w 100% równoległa). Można powiedzieć, że to nie ARUZ składa się z wielkiej

ilości współbieżnie działających mikroprocesorów, lecz on sam stanowi pewien rodzaj olbrzymiego, skomplikowanego makroprocesora lub automatu komórkowego.



Rysunek 4. Hierarchiczna struktura maszyny ARUZ.

Maszyna zawiera specjalizowane komórki, które mogą wykonać kolejne kroki algorytmu DLL. Ktoś może zadać pytanie, czy budowa tak kosztownego urządzenia służącego do przeprowadzania tylko jednego typu analiz ma sens? Odpowiedź brzmi – jak najbardziej tak. ARUZ został zbudowany przy użyciu elektronicznych programowalnych układów logicznych FPGA (w j. ang. Field Programmable Gate Array). Ich wielką zaletą jest możliwość łatwej zamiany ich wewnętrznej struktury połączeń. Oznacza to, że ARUZ dzisiaj może być maszyną realizującą algorytm DLL, a jutro można go zmienić np. w superkomputer po zaprogramowaniu w każdym układzie FPGA struktury mikroprocesora!

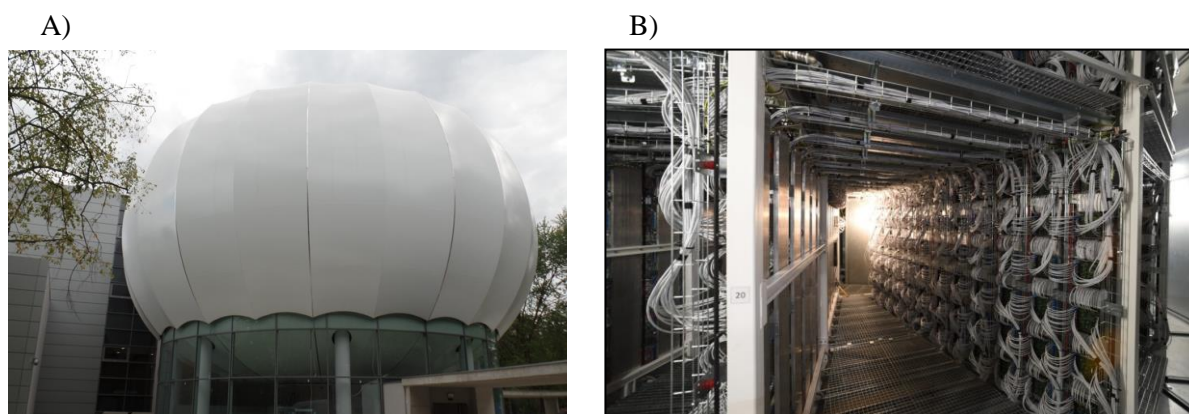
Budowa ARUZa

Nadzieja na zbudowanie maszyny pojawiła się, gdy unikalna wiedza potrzebna do zbudowania maszyny została włączona do projektu Europejskiego Centrum Bio- i Nanotechnologii (ECBNT) jako inicjatywa Rektora PŁ, prof. dr. hab. inż. Stanisława Bieleckiego, który został opracowany w PŁ. Koordynatorem był prof. Jacek Ulański, który jest wielkim entuzjastą i zwolennikiem maszyny ARUZ. Projekt ten przewidywał utworzenie szeregu zaawansowanych interdyscyplinarnych laboratoriów integrujących zespoły badawcze z różnych Wydziałów PŁ i stwarzał szansę na budowę w Łodzi ośrodka naukowego na najwyższym światowym poziomie. Przewodniczącym Międzynarodowej Rady Naukowej ECBNT został światowej sławy uczyony, prof. Krzysztof Matyjaszewski, bliski współpracownik i przyjaciel zmarłego Prof. Pałuy, uważany od szeregu lat za jednego z najpoważniejszych kandydatów do Nagrody Nobla w dziedzinie chemii. Niestety z różnych względów, nie udało się zrealizować ECBNT w Politechnice Łódzkiej. Natomiast, gdy pojawiła się szansa, że istotna część projektu ECBNT mo-

że być zrealizowana, Politechnika Łódzka wniosła ten projekt aportem do BioNanoParku (wtedy: Technoparku). Pozyskane przez BioNanoPark środki z Polskiej Agencji Rozwoju Przedsiębiorczości w ramach rozszerzenia projektu budowy laboratoriów BioNanoPark+ wraz z wkładem własnym głównych udziałowców – Miasta Łódź oraz Województwa Łódzkiego pozwoliły na realizację pomysłu łódzkich naukowców.

BioNanoPark jest instytucją, która ma dbać o komercjalizację badań naukowych, szczególnie w zakresie bio- i nanotechnologii. Jej właścicielami są miasto Łódź, województwo łódzkie i Politechnika Łódzka. W BioNanoParku znajdują się dobrze wyposażone laboratoria dla naukowców i firm innowacyjnych. Inwestycja została przeprowadzona modelowo, ukończono ją rok przed czasem, czym chętnie chwaliła się Polska Agencja Rozwoju Przedsiębiorczości. Więc kiedy znalazła oszczędności, bez wahania dała dodatkowe 63 mln zł na zadanie rozszerzające BioNanoPark+ w ramach projektu BioNanoPark. I właśnie w ramach tego rozszerzenia powstała maszyna o nazwie ARUZ. Koszt jej budowy wyniósł 16 mln zł. Ktoś może się zdziwić, że 16 mln zł wystarczyło skoro wcześniej szacowano, że maszyna kosztować będzie 100 mln. Należy jednak pamiętać o zawrotnym postępie w dziedzinie miniaturyzacji urządzeń i nanotechnologii charakterystycznym dla rynku elektronicznego. Pojawiły się nowe rozwiązania, dzięki którym można pomieścić w jednym układzie scalonym 100 razy więcej tranzystorów w stosunku do ich odpowiedników sprzed kilku lat w czasie gdy projektowano i testowano urządzenie.

Narzucony, a wynikający ze zobowiązań Technoparku wobec Państwowej Agencji Rozwoju i Przemysłu, termin wykonania ARUZa okazał się niesłychanie krótki. Maszyna musiała być zbudowana w ciągu 1 roku (podczas gdy na całym świecie realizacja tego typu przedsięwzięć trwa od 3 do 5 lat). Rozpoczęły się intensywne poszukiwania wykonawcy. Przedsiębiorstwem, które podjęło się tego trudnego i ryzykownego zadania był łódzki oddział firmy Ericsson. Zaangażował do tego celu zespół składający się z około 20 osób. Od września 2014 roku z wielkim zaangażowaniem i profesjonalizmem organizował on pracę, realizując terminowo wszystkie, zaplanowane wcześniej, etapy budowy. Ericsson jest firmą informatyczną działającą od wielu lat na polskim rynku i dlatego nie tylko sprawnie koordynował wykonanie tego przedsięwzięcia, ale też brał aktywny udział w pracach związanych z oprogramowaniem systemu. ARUZ został oddany do użytku pod koniec 2015 roku (Rys. 5).



Rysunek 5. (A) Budynek, w którym znajduje się ARUZ. (B) Wnętrze maszyny ARUZ.

ARUZ zawiera około 26000 układów FPGA, co czyni go jedynym na świecie urządzeniem, w którym znajduje się tak wielka ilość tych układów. Obecnie do każdego z układów FPGA

można implementować do około 300 komórek DLL. Daje to przestrzenną sieć symulacyjną zawierającą ponad 7 milionów komórek, w których zawarte są wirtualne cząsteczki badanych związków chemicznych. Przy takich rozmiarach przestrzeni symulacyjnej ARUZ może z powodzeniem stanowić alternatywę dla wielkich systemów superkomputerowych. Kolejną zaletą tej maszyny jest jej sprawność energetyczna - urządzenie pochłania 0,1 MW mocy.

Zastosowania ARUZa

Możliwości maszyny z wykorzystaniem zaimplementowanego algorytmu DLL:

- modelowanie materiałów zawierających do 7 mln oddziałujących ze sobą molekuł,
- symulacje nawet do 0.7 ms czasu rzeczywistego w ciągu doby (12-dniowa symulacja przy użyciu ARUZa trwałaby ok. 42 lata z wykorzystaniem komputera klasy PC),
- możliwość uwzględnienia wielu zjawisk fizycznych jednocześnie (reakcje chemiczne, polimeryzacja, gradient temperatury, niehomogeniczność dyfuzji, itd.)

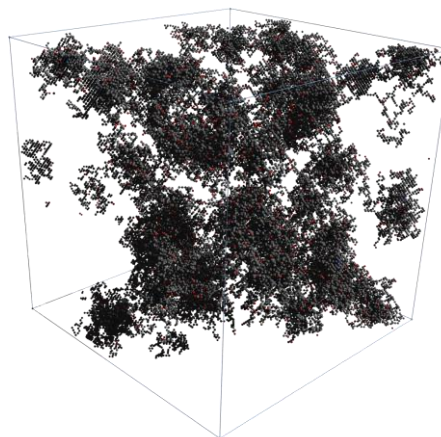
Realizowane i zrealizowane zastosowania w ramach projektów NCN:

- modelowanie procesów polimeryzacji i innych reakcji chemicznych,
- badania dynamiki makromolekuł o złożonej architekturze, w tym roztworów polimerowych,
- charakterystyka procesów przypowierzchniowych i zachowania w ośrodkach porowatych,
- badania zjawiska agregacji i samoorganizacji molekuł,
- modelowanie układów wieloskładnikowych i zjawisk kolektywnych.

Ze względu na jednoczesną pracę wszystkich 26000 układów FPGA, gęstą sieć połączeń oraz możliwość implementowania różnych, oddziaływujących ze sobą, wieloskładnikowych obiektów, ARUZ jest maszyną mogącą znaleźć zastosowanie w takich dziedzinach jak np.: sieci neuronowe, sztuczna inteligencja, szyfrowanie danych itp.

Literatura:

- P. Polanowski, J. Jung, R. Kiełbik, A. Napieralski, K. Lichy; „From dynamic lattice liquid algorithm to dedicated parallel computer | Od algorytmu dynamicznej cieczy sieciowej do dedykowanego komputera równoległego”; Przegląd Elektrotechniczny 84(11), 69-73 (2008).
- J. Jung, R. Kiełbik, K. Rudnicki, P. Polanowski; „From dynamic lattice liquid algorithm to dedicated parallel computer II - mDLL machine | Od algorytmu dynamicznej cieczy sieciowej do dedykowanego komputera równoległego II - maszyna mDLL”; Przegląd Elektrotechniczny 93(11), 162-170 (2017).
- R. Kiełbik, K. Hałagan, W. Zatorski, J. Jung, J. Ulański, A. Napieralski, K. Rudnicki, P. Amrozik, G. Jabłoński, D. Stożek, P. Polanowski, Z. Mudza, J. Kupis, P. Panek; „ARUZ - Large-scale, Massively Parallel FPGA-based Analyzer of Real Complex Systems”; Computer Physics Communications 232, 22- 34 (2018).
- J. Jung, R. Kiełbik, K. Rudnicki, K. Hałagan, P. Polanowski, A. Sikorski; „From the Dynamic Lattice Liquid Algorithm to the Dedicated Parallel Computer – mDLL Machine”; Comput. Methods Sci. Technol. 24(4), 235-247 (2018).



Rysunek 6. Graficzne przedstawienie wyniku symulacji wykonanych za pomocą ARUZa dla materiału zawierającego splątane łańcuchy makrocząsteczek polimerów.

- J. Jung, K. Hałagan, P. Polanowski; “Technology of real-world analyzers (TAUR)”; AIP Conference Proceedings 2078, 020019 (2019).
- Napieralski, R. Kielbik, K. Hałagan; “ARUZ, Analyzer of Real Complex System”; 15th International Conference on the Experience of Designing and Application of CAD Systems, CADSM 2019 - Proceedings, 27-30, 8779336 (2019).
- J. Jung, R. Kielbik, K. Hałagan, P. Polanowski, A. Sikorski; “Technology of Real-World Analyzers (TAUR) and its practical application”; Comput. Methods Sci. Technol. 26(3), 69-75 (2020).
- R. Kielbik, K. Rudnicki, Z. Mudza, J. Jung; “Methodology of firmware development for aruz—an FPGA-based HPC system”; Electronics (Switzerland) 9(9), 1-17, 1482 (2020).
- P. Amrozik, K. Hałagan, K. Rudnicki, “Modelling of first- and second-order chemical reactions on ARUZ – massively-parallel FPGA-based machine”; 2021 28th International Conference on Mixed Design of Integrated Circuits and System, p. 120-123, IEEE (2021).
- R. Kielbik, K. Hałagan, K. Rudnicki, P. Polanowski, G. Jabłoński, J. Jung, “Molecular diffusion simulation on ARUZ – massively-parallel FPGA-based machine”; 2021 28th International Conference on Mixed Design of Integrated Circuits and System, p. 124-127, IEEE (2021).
- G. Jabłoński, P. Amrozik, K. Hałagan, “Molecular simulations using Boltzmann's thermally activated diffusion - implementation on ARUZ - massively-parallel FPGA-based machine”; 2021 28th International Conference on Mixed Design of Integrated Circuits and System, p. 128-131, IEEE (2021).
- K. Hałagan, M. Banaszak, J. Jung, P. Polanowski, A. Sikorski, “Dynamic behavior of opposing polymer brushes. A computer simulation study”; Polymers 13, 2758 (2021).
- P. Polanowski, K. Hałagan, A. Sikorski, “Star polymers vs. dendrimers - studies on the synthesis based on computer simulations”; Polymers 14, 2522 (2022).
- P. Polanowski, K. Hałagan, A. Sikorski, “Dendrimers vs. Hyperbranched Polymers: Studies of the Polymerization Process Based on Monte Carlo Simulations”; Comput. Methods Sci. Technol. 28(3), 109-117 (2022).
- K. Hałagan, M. Banaszak, J. Jung, P. Polanowski, A. Sikorski, “Polymerization and Structure of Opposing Polymer Brushes Studied by Computer Simulations”; Polymers 13(24), 4294 (2021).
- W. Raj, K. Hałagan, S. Kadłubowski, P. Maczugowska, K. Szutkowski, J. Jung, J. Pietrasik, S. Jurga, A. Sikorski, “The structure and dynamics of bottlebrushes: Simulation and experimental studies combined”; Polymer 261, 125409 (2022).
- R. Kielbik, K. Hałagan, K. Rudnicki, P. Polanowski, G. Jabłoński, J. Jung, “Molecular diffusion simulation on ARUZ – massively-parallel FPGA-based machine”; Computer Physics Communications 283, 108591 (2023).

Patenty:

J. Jung, P. Polanowski, R. Kielbik, K. Hałagan, W. Zatorski, J. Ulański, A. Napieralski, T. Pakula:

- patent RP no. 223795 (2017),
- patent RP no. 227249 (2017),
- patent RP no. 227250 (2017),
- European Patent no. EP307907 (2018),
- European Patent no. EP3079066 (2018),
- 2 EP and 1 RP patents application under consideration