

# Laboratorium Wirtualne w środowisku gridowym



R.W. Adamiak, Z. Gdaniec, M. Lawenda,  
N. Meyer, Ł. Popenda, M. Stroiński, K. Zieliński



# Agenda

- ▶ Wstęp
- ▶ Potrzeba budowy
- ▶ Wymagania funkcjonalne
- ▶ Różnice między LW a SZW
- ▶ Architektura
- ▶ Wdrożenie + problematyka
- ▶ Podsumowanie



# Wstęp (1/2)

- ▶ Projekt „Obliczenia wielkiej skali i wizualizacja do zastosowań w wirtualnym laboratorium z użyciem klastra SGI” - na podstawie decyzji Ministerstwa Nauki i Informatyzacji (decyzja nr 03282/C.T11-6/2002 z dnia 9 grudnia 2002) - nr projektu 6 T11 0052 2002 C/05836
- ▶ Czas realizacji: grudzień 2002 – październik 2004



# Wstęp

(2/2)

## ▶ Partnerzy:

- ACK Cyfronet AGH
- Instytut Chemii Bioorganicznej PAN - Poznańskie Centrum Superkomputerowo Sieciowe
- Centrum Komputerowe Politechniki Łódzkiej
- Centrum Informatyczne Trójmiejskiej Akademickiej Sieci Komputerowej
- Politechnika Wrocławska, WCSS
- Instytut Meteorologii i Gospodarki Wodnej
- SGI (Silicon Graphics, Inc.)
- ATM S.A.



# Potrzeba budowy

- ▶ Możliwości korzystania w sposób zdalny z bardzo drogich przyrządów laboratoryjnych
- ▶ Wspólna praca nad projektami naukowymi
- ▶ Krótsze terminy realizacji projektów
- ▶ Bliżej koncepcji eScience
- ▶ Telepraca
- ▶ Telenauka



# Założenia

- ▶ Dostęp z dowolnego miejsca przez Internet
- ▶ Uniwersalna architektura – elastyczność umożliwiająca adaptacje do różnych typów urządzeń
- ▶ Eksploracja wyników wcześniej wykonanych eksperymentów oraz publikacji z danej dziedziny



# Funkcjonalność (1/2)

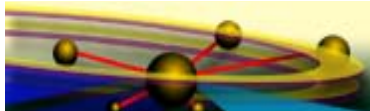
- ▶ Zdalny dostęp
- ▶ Równoważenie obciążenia
- ▶ Rozliczanie użytkowników
- ▶ Digitalizacja wyników



# Funkcjonalność (2/2)

- ▶ Praca grupowa
- ▶ Komunikacja z obsługą urządzeń
- ▶ Rezerwacja czasu wykonania eksperymentu





# Różnice między LW a SZW

- ▶ dostęp do wielu urządzeń
- ▶ wybór najmniej obciążonego
- ▶ definiowanie ciągu operacji do wykonania
- ▶ korzystanie z zasobów biblioteki cyfrowej
- ▶ praca grupowa
- ▶ rozliczanie użytkowników z wykorzystanych zasobów
- ▶ większy zakres bezpieczeństwa
- ▶ sprawdzanie poprawności zleconego zadania
- ▶ możliwość zlecania zadań wsadowych
- ▶ niezależność od architektury i posiadanego oprogramowania



# Cele badawcze

Główne cele badawcze PCSS obejmują:

- ▶ Opracowanie uniwersalnej architektury
- ▶ Alokacja przyrządu w środowisku rozproszonym
- ▶ Równoważenie obciążenia
- ▶ Uwzględnienie czynnika ludzkiego podczas wykonywania zadania
- ▶ Sposób dostarczania informacji
- ▶ Wspomaganie pracy naukowców
- ▶ Nauczanie



# Struktura komunikacyjna

- ▶ Struktura klient-agent-serwer
- ▶ Większość funkcji jest skupiona po stronie serwera aplikacyjnego (agenta)
- ▶ Konstrukcja modułarna
- ▶ Współpraca z innymi agentami
- ▶ Specjalny protokół komunikacyjny



# Modułowość systemu

- ▶ Podział na:
  - Moduły ogólnego przeznaczenia
  - Moduły specyficzne
  
- ▶ Adaptacja do nowego typu laboratorium
  
- ▶ Moduł szeregujący uwzględniający specyfikę danego laboratorium

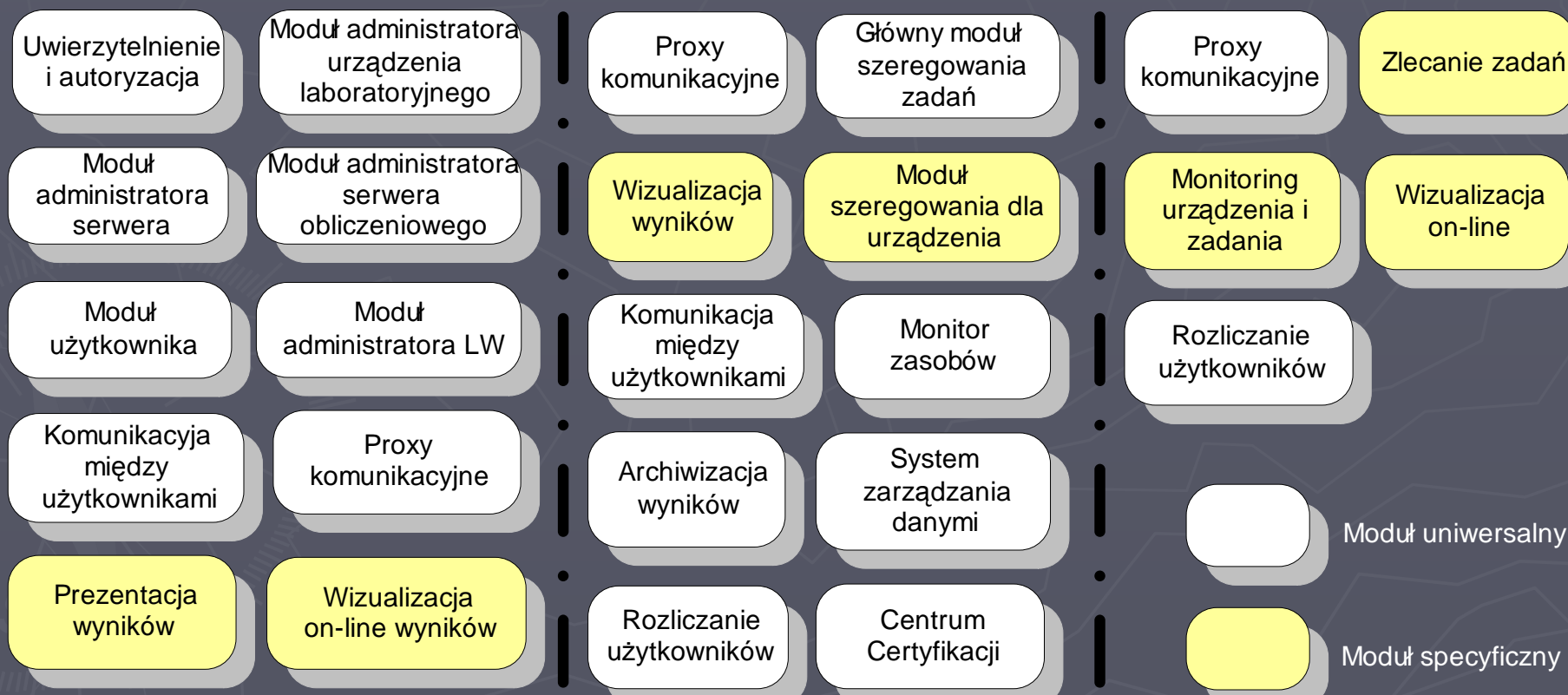


# Główne moduły funkcjonalne

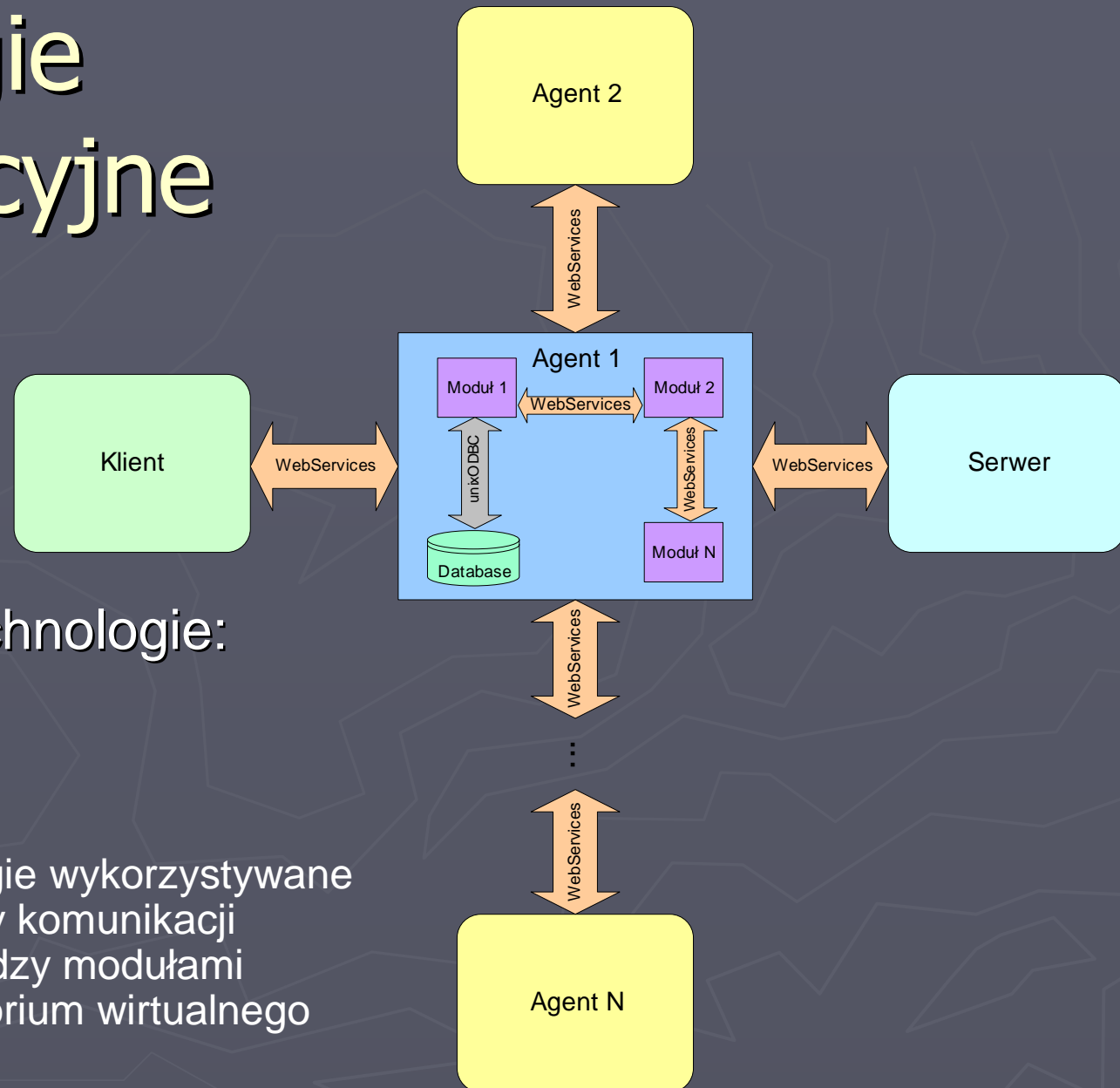
## ► Klient

## ► Agent

## ► Serwer



# Technologie komunikacyjne



Najważniejsze technologie:

- Web Service
- ODBC

Technologie wykorzystywane przy komunikacji między modułami laboratorium wirtualnego



# Bezpieczeństwo

- ▶ Dostęp do środowiska laboratorium tylko z ważnym certyfikatem
- ▶ Wieloetapowa autoryzacja procesów użytkowników
- ▶ Szyfrowanie kanałów





# Rozliczanie użytkowników

- ▶ Rozliczanie użytkowników z wykorzystanych zasobów
- ▶ Ograniczenia co do używanych zasobów
- ▶ System raportowania
- ▶ Integracja z gridowym system rozliczania
- ▶ System Użytkowników Wirtualnych (PCSS)





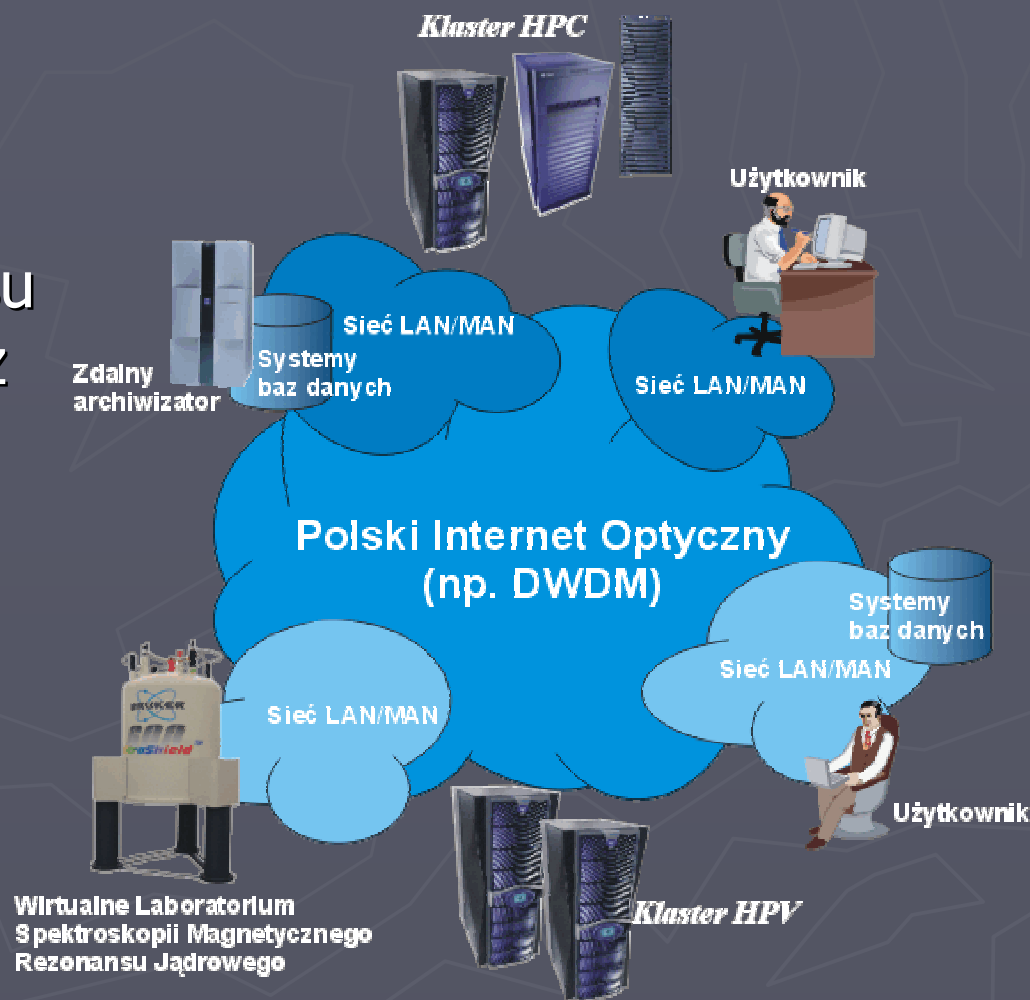
# Praca grupowa

- ▶ Wiele typów komunikacji
  - przesyłanie krótkich wiadomości
  - chat
  - audio
  - video
- ▶ Umożliwienie współpracy naukowców pochodzących z wielu odległych geograficznie miejsc



# Wdrożenie

- ▶ Laboratorium Wirtualne Spektroskopii Magnetycznego Rezonansu Jądrowego - współpraca z Instytutem Chemii Bioorganicznej PAN
- ▶ Wdrożenie w oparciu o sieć Pionier





# Spektroskopia NMR (1/2)

Dziedziny nauki:

- ▶ fizyka
- ▶ chemia
- ▶ biochemia
- ▶ chemia biopolimerów
- ▶ biologia molekularna
- ▶ biomedycyna
- ▶ biotechnologia



# Spektroskopia NMR (2/2)

Zastosowanie:

- ▶ sprawdzanie czystości substancji
- ▶ identyfikacja związków organicznych
- ▶ badanie kinetyki reakcji
- ▶ badanie równowag konformacyjnych
- ▶ badanie dynamiki molekularnej
- ▶ badanie oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych
- ▶ ustalanie struktury przestrzennej cząsteczek - wykorzystanie Laboratorium Wirtualnego



# Przebieg eksperymentu (1/2)

- ▶ Część pierwsza – wykonywana przez operatora
  - przygotowanie próbki
  - określenie typu sondy i zamontowanie jej w magnecie
  - wprowadzenie próbki do magnesu
  - ręczne dostrojenie sondy
  - podłączenie układu chłodzącego



# Przebieg eksperymentu (2/2)

- ▶ Część druga – zautomatyzowana (VNMR, Xwin-NMR)
  - wybór katalogów roboczych,
  - wybór sekwencji pomiarowej,
  - modyfikacja parametrów danej sekwencji,
  - wprowadzenie początkowych wartości parametrów dla cewek korekcyjnych
  - znalezienie sygnału jąder deuteru pochodzącego od rozpuszczalnika
  - włączenie stabilizacji jądrowej
  - korekta jednorodności pola magnetycznego



# Napotkane problemy (1/2)

## ► Próbką

- przygotowywana przez osobę dokonującą pomiaru
- wybór laboratorium gdzie zostanie wysłana - brak możliwości równoważenia obciążenia
- transport
- przechowywanie
- czas trwałości



# Napotkane problemy (2/2)

- ▶ Czynniki ludzkie
  - dostępność operatora opiekującego się spektrometrem
  - umiejętności związane z
    - ▶ przygotowaniem próbki
    - ▶ zmianą sondy
    - ▶ dostrojeniem pola magnetycznego cewek





# Stan prac na świecie

- ▶ VLAM-G (Amsterdam) <http://www.dutchgrid.nl/VLAM-G/>
- ▶ LABNET (Włochy) <http://www.labnet.cnit.it/>
- ▶ Remote Spectroscopy (Wisconsin)
- ▶ D-LAB (IST-1999-12502)  
<http://www.npk.gov.pl/cordis/www.cordis.lu/ist/projects/99-12502.htm>
- ▶ DiViLab (IST-1999-12017) <http://www.divilab.org/>
- ▶ ICE-R – (Baden-Württemberg)  
<http://www.hlrs.de/organization/vis/projects/vrslab.html>



# Podsumowanie

- ▶ Dodatkowa funkcjonalność
- ▶ Modułarna architektura
- ▶ Wdrożenie LW Spektroskopii Magnetycznego Rezonansu Jądrowego z wykorzystaniem sieci Pionier
- ▶ Napotkane problemy
  - Wpływ czynnika ludzkiego



# Dziękuję za uwagę



<http://vlab.man.poznan.pl/>  
[vlab@man.poznan.pl](mailto:vlab@man.poznan.pl)