

LABORATORIUM WIRTUALNE W ŚRODOWISKU GRIDOWYM

R. W. Adamiak¹, Z. Gdaniec¹, M. Lawenda², N. Meyer²,
Ł. Popenda¹, M. Stroiński², K. Zieliński³

¹ – Instytut Chemii Bioorganicznej Polskiej Akademii Nauk, Poznań

² – Poznańskie Centrum Superkomputerowo Sieciowe, Poznań

³ – ACK CYFRONET, AGH, Kraków
{vlab@man.poznan.pl}

Streszczenie

W pracy zaproponowano ogólną architekturę systemu laboratorium wirtualnego, która dzięki swej elastyczności umożliwi dostosowanie jej do wielu typów przyrządów laboratoryjnych. Została ona opracowana na podstawie potrzeb i wymagań użytkowników pracujących, na co dzień w laboratorium spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego. Autorzy zaprezentowali także pierwsze doświadczenia z prac nad zdalnym udostępnieniem spektrometru NMR. Prace są realizowane w ramach projektu 6 T11 0052 2002 C/05836 finansowanego przez Ministerstwo Nauki i Informatyzacji oraz firmę SGI.

1 Wstęp

Podstawą budowy laboratoriów wirtualnych są zazwyczaj istniejące już laboratoria zlokalizowane przy dużych instytutach naukowych dysponujących znacznym budżetem na zakup aparatury naukowej. Instytucje te dysponują unikatowymi przyrządami naukowymi, dostępnymi ze względu na swe położenie, sposób dostępu oraz cenę, jedynie dla wybranej grupy naukowców. Osoby pracujące w filiach instytutów w mniejszych miejscowościach lub innych organizacjach nie mają możliwości dostępu do tego typu aparatury, a przez to ograniczone szanse na rozwój i weryfikację swoich hipotez naukowych. Ważną ideą laboratoriów wirtualnych jest wyrównywanie szans osób pracujących w dużych ośrodkach naukowych i spoza nich.

Obecnie laboratoria wirtualne (LW) zdobywają coraz większą popularność wśród środowisk naukowych. Jest to związane z zaletami, jakie ze sobą niesie koncepcja tego typu laboratoriów. Najważniejsze z nich to: łatwy dostęp do kosztownej aparatury naukowej, możliwość współpracy naukowców pochodzących z różnych i geograficznie odległych od siebie miejsc, łatwiejszy i szybszy proces kształcenia, dostęp do biblioteki pomiarów i publikacji. Idea ta jest szczególnie atrakcyjna dla nauk doświadczalnych i technologii, w szczególności: fizyki, chemii, biologii strukturalnej, medycyny doświadczalnej, czy wreszcie inżynierii w szerokim tego słowa znaczeniu [1],[10].

Ważne jest, aby użytkownik wykonując eksperyment w LW odniósł wrażenie przebywania w danym laboratorium i pracy na komputerze bezpośrednio połączonym

z urządzeniem. Wiąże się to z koniecznością zapewnienia dużej przepustowości łącz oraz dostępem do komputerów o mocy obliczeniowej, zapewniającej natychmiastową obsługę generowanych żądań.

Aby dobrze zrozumieć ideę laboratorium wirtualnego powinniśmy najpierw zapoznać się z definicją takiego systemu. Przez laboratorium wirtualne rozumiemy heterogeniczne, rozproszone środowisko, które umożliwia grupie naukowców znajdujących się w różnych miejscach na świecie wspólną pracę nad wspólną grupą projektów. Podobnie jak w każdym innym laboratorium, narzędzia i techniki są specyficzne dla dziedziny nauki. Pomimo połączenia z pewnymi aplikacjami teleimersji, laboratorium wirtualne nie zakłada a priori potrzeby dzielenia środowiska pracy.

Do najważniejszych funkcji [5], na jakie powinno się zwrócić uwagę w systemach laboratoriów wirtualnych należą między innymi:

- Zlecenie zadań do wykonania (eksperymenty rzeczywiste i obliczeniowe),
- Równoważenie obciążenia,
- Rozliczanie użytkowników,
- Digitalizacja wyników (możliwość współdzielenia wyników eksperymentów, biblioteka publikacji i prac naukowych na dany temat),
- Praca grupowa (komunikacja z osobami pracującymi nad tymi samymi tematami),
- Komunikacja z obsługą urzędzeń,
- Rezerwacja czasu wykonania eksperymentu,

Pod pojęciem eksperymentu rzeczywistego rozumiemy wykonanie w sposób zdalny operacji na przyrządzie znajdującym się w odległym geograficznie miejscu, który jest podłączony do systemu Laboratorium Wirtualnego.

Eksperyment obliczeniowy polega na zleceniu wykonania operacji na maszynach obliczeniowych. Może on dotyczyć albo symulacji pewnych zjawisk przy pomocy dedykowanego oprogramowania albo wykonania operacji pre- lub postprocessingu na danych, które są następnie wykorzystywane w eksperymencie lub są jego wynikiem.

W kolejnych rozdziałach zostaną przedstawione architektura systemu, system zarządzania danymi oraz instalacja pilotowa wraz z omówieniem przykładowego zastosowania LW, jakim zajmują się autorzy w swojej pracy.

2 Architektura systemu

Laboratorium wirtualne może zawierać różne komponenty [11] w zależności od tego, do jakiego typu eksperymentów będzie używane [2]. Możemy jednak tutaj wyróżnić elementy wspólne, które mogą lub nawet powinny występować w każdej konfiguracji laboratorium i takie, które są specyficzne dla pewnego typu laboratoriów. Poniżej zostały wyszczególnione najważniejsze z nich.

Instrumenty naukowe posiadające możliwość sterowania poprzez interfejs w komputerze. Mogą to być odbiorniki satelitarne, czujniki wstrząsów ziemi, zanieczyszczenia powietrza czy narzędzia astronomiczne. Dobrym przykładem są tutaj rozproszone, radiowe pomieszczenia astronomiczne uruchomione przez National Radio Astronomy Observatory w USA [12].

Cechą wspólną laboratoriów wirtualnych jest **dostęp przez Internet**. Takie rozwiązanie spełnia główny warunek laboratorium, jakim jest dostępność z każdego miejsca poprzez sieć, jest spełniony.

Kolejnym narzędziem jest **zasób obliczeniowy** (serwer komputerowy) będący w stanie poradzić sobie z symulacjami wielkiej skali. Mogą to być maszyny zlokalizowane w regionalnych centrach obliczeniowych, podłączonych do bardzo szybkich sieci komputerowych bądź systemy o dużej wydajności najczęściej zlokalizowane w uniwersyteckich kampusach oraz w korporacjach i instytucjach rządowych. Integralną częścią serwerów obliczeniowych jest specjalizowane oprogramowanie do wykonywania symulacji, analizy danych, eksploracji oraz wizualizacji. Odrębnym zagadnieniem jest natomiast adaptacja oprogramowania, które pierwotnie było przeznaczone dla komputerów sterujących aparaturą naukową. Komputery te zazwyczaj nie były podłączone do sieci a oprogramowanie nie było przystosowane do pracy w środowisku rozproszonym. Służyło raczej akwizycji danych otrzymanych podczas eksperymentów i ich obróbce. Obecnie bardzo popularny jest proces analizy, który ma dać odpowiedź na pytanie, w jaki sposób narzędzia te mogą być wkomponowane w heterogeniczną sieć komputerową i stanowić skalowane rozwiązanie przeznaczone do pracy nad nowymi problemami, często wymagającymi bardzo dużych mocy obliczeniowych.

System zarządzania danymi zawiera informacje specyficzne dla poszczególnych aplikacji takich jak symulacje początkowe, warunki graniczne, obserwacje eksperymentalne, ograniczenia produkcyjne, rozproszone, specyficzne dla aplikacji zasoby np. repozytoria genomu ludzkiego, bazy danych publikacji z danej dziedziny, itp.

Środowisko pracy grupowej służy do współpracy i porozumiewania się umożliwiając naukowcom wspólną pracę nad tymi samymi problemami badawczymi. Możemy do nich zaliczyć między innymi: chat, listy dyskusyjne, systemy przekazujące dźwięk, wideokonferencję oraz systemy teleimersyjne.

Proponowany system Laboratorium Wirtualnego został oparty na budowie modularnej, która w łatwy sposób pozwoli rozszerzać możliwości systemu (poprzez dodanie nowych modułów), zmieniać już istniejące moduły na inne, o większych możliwościach. Aby to umożliwić konieczne jest zdefiniowanie ujednoczonego interfejsu dostępu i sposobu komunikacji pomiędzy poszczególnymi modułami. Różny sposób sterowania przyrządami laboratoryjnymi niesie ze sobą konieczność budowy systemu modularnego z rozróżnieniem na moduły ogólne oraz specyficzne. Moduły uniwersalne możemy stosować w każdym typie laboratorium, ich działanie jest niezależne od typów obsługiwanych przyrządów laboratoryjnych. Moduły specyficzne, dostosowane do przyrządów stosowanych w laboratorium, „znają” ich specyfikę i muszą być implementowane w znacznej części od nowa podczas adaptacji nowego profilu laboratorium.

W architekturze Laboratorium Wirtualnego (Rysunek 1) wyróżniono cztery warstwy:

Warstwę dostępową:

- Dynamiczne scenariusze pomiarowe – zapewniają realizację i sterowanie ciągiem operacji (eksperymentów) zleconych przez użytkownika,
- Zarządzanie laboratoriami i użytkownikami – narzędzia do tworzenia nowych profili laboratoriów, nowych użytkowników, zarządzania prawami dostępu do przyrządów, bibliotek cyfrowych i mediów komunikacyjnych,
- Prezentacja danych – prezentacja wyników eksperymentów zarówno tych zgromadzonych w SZD jak i tych zmieniających się wyświetlanych na bieżąco, wyświetlanie danych rozliczeniowych,
- Komunikacja między użytkownikami – korzystanie z narzędzi do porozumiewania się,

Warstwę gridową (usługi ogólne):

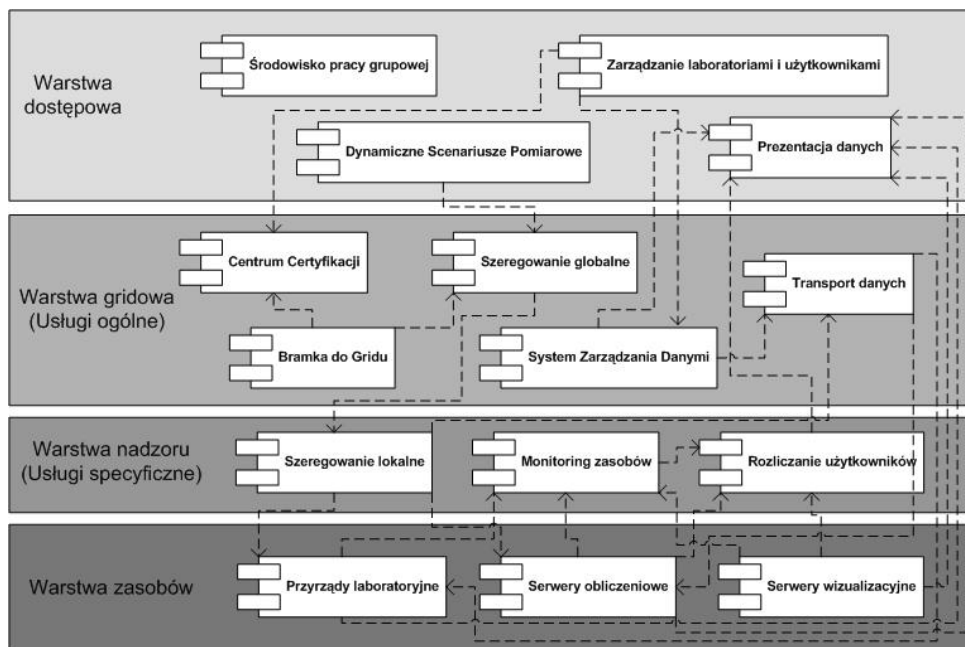
- Centrum Certyfikacji – generowanie certyfikatów i sprawdzanie ich ważności, przechowywanie i kontrola praw dostępu. Integralną częścią są narzędzia zapewniające autoryzację i uwierzytelnianie użytkowników podczas logowania,
- Szeregowanie globalne – wybór przyrządu laboratoryjnego lub serwera obliczeniowego do uruchomienia zleconego zadania,
- System zarządzania danymi – przechowywanie wyników eksperymentów i obliczeń, publikacji elektronicznych,
- Transport danych – przesłanie danych na maszynę docelową, kontrola nad transmisją,
- Bramka do Gridu – komunikacja z brokerem gridowym, odbiór zadań z Gridu (spoza systemu LW) i przesłanie zadania do wykonania na przyrządzie,

Warstwę nadzoru (usługi specyficzne):

- Szeregowanie lokalne – szeregowanie zadań na danym urządzeniu z uwzględnieniem parametrów i priorytetów szeregowania,
- Monitoring zasobów – kontrola nad wykorzystaniem zasobów oraz aktualnym stanem zadań,
- Rozliczanie użytkowników – informacje o wykorzystaniu przez użytkowników poszczególnych zasobów LW,

Warstwę zasobów:

- Przyrządy laboratoryjne – oprócz samej aparatury jest jeszcze oprogramowanie do wykonywania eksperymentów,
- Serwery obliczeniowe – wraz z oprogramowaniem do pre- i postprocessingu,
- Serwery wizualizacyjne – wraz z oprogramowaniem do wizualizacji,



Rysunek 1 Architektura Laboratorium Wirtualnego

Z punktu widzenia komunikacji w strukturze laboratorium wirtualnego możemy wyróżnić trzy główne warstwy: interfejs klienta, serwer aplikacyjny i serwer urządzenia. Taka warstwowa architektura zapewnia spełnienie zadań stawianych przed tym systemem. Jest ona odpowiednikiem znanego modelu architektury klient-agent-serwer. Poniżej zostaną opisane najważniejsze funkcje zlokalizowane na każdym z poziomów.

Klient

Warstwa ta zapewnia dostęp do serwera aplikacji (agenta) z dowolnego miejsca poprzez Internet w ściśle określony sposób. Jest to możliwe dzięki narzuceniu odpowiednich standardów komunikacji z agentem np. podczas zlecenia zadań czy przeglądania wyników. Oprócz wspomnianych inne zadania warstwy klienta polegają między innymi na: autoryzacji i weryfikacji użytkownika podczas logowania, dostępu do modułów administracyjnych laboratorium czy zapewnienia możliwości pracy grupowej.

Agent

Odbiera zlecenia od użytkowników (warstwy klienta) i przekazuje je do komputera obsługującego specyficzne urządzenie oraz przekazuje wyniki z powrotem do użytkownika. W jego gestii jest zarządzanie zadaniami zleconymi do urządzeń podłączonych do LW oraz do systemów symulacyjnych i obliczeniowych. Zarządzanie obejmuje między innymi szeregowanie zadań i w razie konieczności przesyłanie ich do innych systemów współpracujących z LW, rozliczanie użytkowników z wykorzystanego czasu na urządzeniu. Ważne jest by jak najwięcej funkcji zostało zlokalizowanych na tym właśnie poziomie, umożliwi to szybkie dostosowanie systemu do nowych wymagań związanych

z zapewnieniem dostępu do nowych typów laboratoriów i co się z tym wiąże do nowych urządzeń.

Serwer

Odpowiedzialny za odbiór zadania od serwera aplikacji, zlecenie zadania oraz odbiór wyników i przekazanie ich z powrotem do serwera aplikacji. Większość modułów serwera jest specyficznych dla obsługiwanego urządzenia, wykorzystuje funkcje API do zlecania i monitorowania zadań oraz sterowania urządzeniem.

System będzie miał możliwość współpracy z innymi systemami LW. Umożliwi to przekazywanie zadań między serwerami i rozładowywanie w ten sposób lokalnego obciążenia. Pozwoli również na dostęp do wyników eksperymentów i zasobów bibliograficznych umieszczonych na innych systemach LW.

Komunikację między modułami w systemie LW oparto o technologię Web Services. Jest to najbardziej dynamicznie i obiecująco rozwijająca się technologia usług sieciowych. Web Services uznawane są za kolejny etap ewolucji zmierzającej w kierunku zorientowanego obiektowo programowania procesów i usług sieciowych. Decydując się na tą technologię otrzymujemy jasno określony protokół definiujący formaty komunikatów (SOAP) oraz zunifikowany interfejs wraz z opisem możliwości danej usługi (WSDL). Stanowi to znakomite ułatwienie przy definiowaniu i implementacji nowych modułów systemu.

Rozliczanie użytkowników

Użytkownicy korzystający z Laboratorium Wirtualnego będą rozliczani z czasu wykorzystanego w ramach pracy w LW np. na eksperymenty bądź symulacje. Wszystkie dane rozliczeniowe będą zapisywane w bazie danych na serwerze aplikacyjnym. Przechowywane dane będą dotyczyły między innymi:

- W przypadku symulacji lub obliczeń: czasu procesora, pamięci operacyjnej, pamięci dyskowej, obciążenia interfejsów sieciowych (ilości przesyłanych danych),
- W przypadku eksperymentów rzeczywistych: czasu pracy urządzenia i wykorzystywanych komponentów,

Przewiduje się również zapisywanie informacji dotyczących sumarycznego czasu spędzonego w systemie (od momentu logowania do wylogowania) oraz z jakich aplikacji pomocniczych użytkownik korzystał (np. z narzędzi do pracy grupowej, bibliotek wyników eksperymentów).

W Laboratorium Wirtualnym będą możliwe dwa profile rozliczeń. Pierwszy z nich przewiduje nieograniczone korzystanie z systemu i wszystkich jego dostępnych narzędzi. Drugi ma limitowany czas wykorzystywanych urządzeń i maszyn obliczeniowych. Po przekroczeniu zdefiniowanej granicy zlecenie kolejnych zadań nie będzie już możliwe. Jest on szczególnie korzystny dla instytucji lub projektów naukowych z ograniczonym budżetem.

Dostęp do informacji rozliczeniowych będzie uwarunkowany posiadanymi uprawnieniami. Opracowany system raportowy ułatwi przeglądanie i analizę zgromadzonych danych.

System Zarządzania Danymi

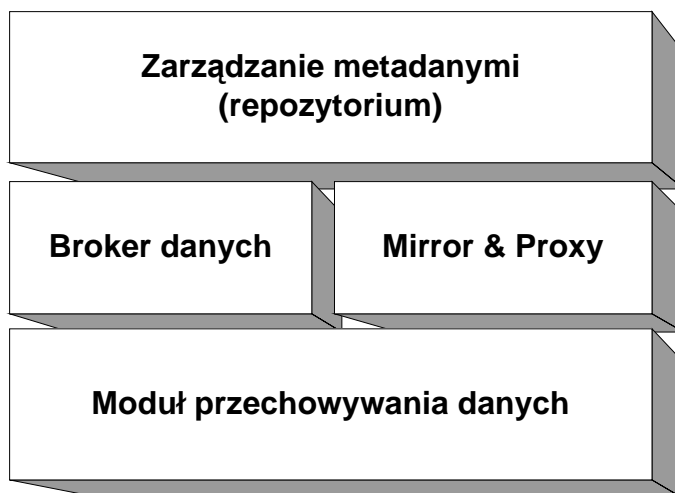
System Zarządzania Danymi (SZD) jest odpowiedzialny za przechowywanie i zarządzanie danymi laboratorium wirtualnego, w skład których wchodzi: dane użytkowników (wyniki eksperymentów i analiz), publikacje w wersji elektronicznej, dane

rozliczeniowe (ang. accounting), wyniki eksperymentów oraz wyniki analizy (przetwarzania) danych z eksperymentów i wiele innych.

System Zarządzania Danymi został opracowany w ramach projektu Progress [7]. Prace w ramach projektu LW będą miały na celu zwiększenie funkcjonalności SZD oraz dostosowanie do wymagań laboratorium. Najważniejsze zadania to:

- Rozbudowanie praw dostępu do danych i zarządzania nimi uwzględniające grupy badawcze w laboratorium,
- Zwiększenie odporności na błędy związanych z pracą w środowisku rozproszonym,
- Budowy efektywnych mechanizmów wyszukiwania danych zgromadzonych w SZD,
- Budowy zunifikowanego dostępu do bazy danych, co ma uniezależnić użytkowników od wybranej bazy danych,

SZD składa się z trzech logicznych warstw (Rysunek 2). Najwyższa warstwa to Zarządzanie metadanymi. Warstwa ta jest funkcjonalnie odpowiedzialna za wszystkie operacje związane z metadanymi oraz za przechowywanie metadanych w repozytorium. Dane w systemie są opisane za pomocą atrybutów i praw dostępu do nich. Kolejną warstwą logiczną jest Broker Danych oraz moduł Mirror i Proxy. Broker Danych stanowi interfejs pomiędzy klientem a SZD. Klientem może być zarówno użytkownik jak i oprogramowanie obliczeniowe w systemie typu Grid lub inne oprogramowanie np. portal obliczeniowy. Broker Danych dodatkowo zarządza replikami danych. Moduł Mirror i Proxy odpowiedzialny jest za dostęp systemu do różnych zewnętrznych baz danych dostępnych przez sieć. Podstawową zaletą tego modułu jest ujednoczenie dostępu do zewnętrznych źródeł danych. Trzecią i najniższą warstwą jest Moduł Przechowywania Danych. Funkcjonalnie jest on odpowiedzialny za fizyczne przechowywanie danych. Moduł ten przechowuje dane na różnych mediach: jako pliki systemowe, obiekty w bazie danych, na urządzeniach taśmowych itd. Opisywaną strukturę przedstawia poniższy rysunek:

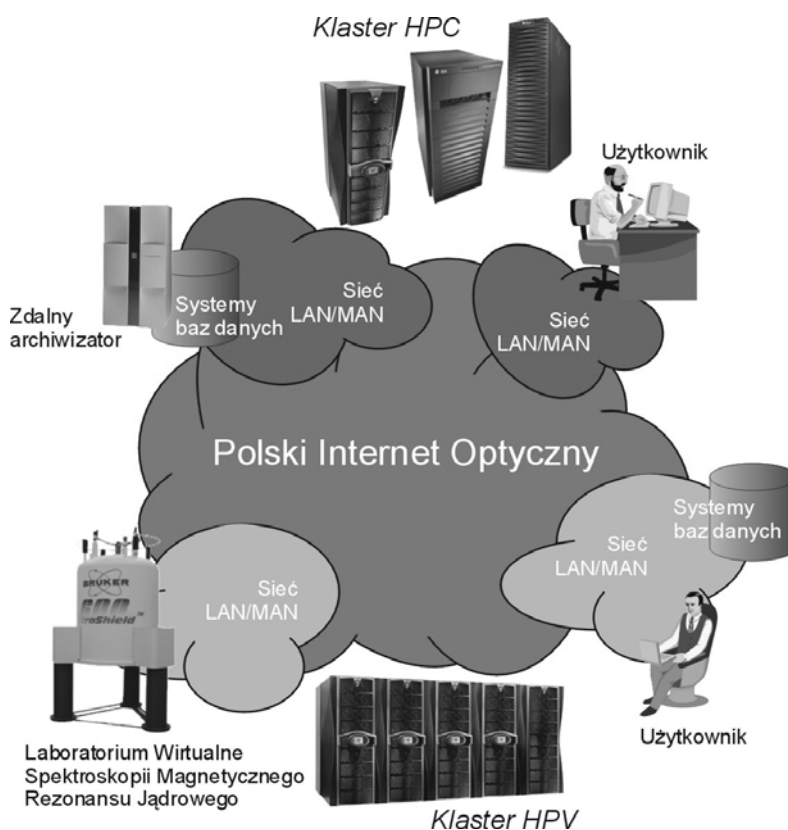


Rysunek 2 Struktura logiczna SZD

Więcej informacji na temat Systemu Zarządzania Danymi można znaleźć na stronach projektu Progress [7].

3 Wdrożenie

W ramach projektu LW planowana jest instalacja pilotowa (Rysunek 3) koncepcji *Laboratorium Wirtualnego Spektroskopii Magnetycznego Rezonansu Jądrowego* [3],[4],[6]. Zarówno na płaszczyźnie aparaturowej jak i obliczeniowej, spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR) jest obok krystalografii najbardziej złożoną metodą badania cząsteczek, w tym układów biomolekularnych. Współczesne spektrometry magnetycznego rezonansu jądrowego są niezwykle drogie. Instalacja pilotowa w projekcie zostanie wykonana w oparciu o dostęp do dwóch spektrometrów o różnej zdolności rozdzielczej - 300 i 600 MHz. Ten ostatni, unikatowy w skali kraju przyrząd, został niedawno pozyskany dzięki wspólnej inicjatywie Instytutu Chemii Bioorganicznej PAN i Wydziału Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu oraz w oparciu o finansowanie KBN. Wspólną platformą tego przedsięwzięcia jest optymalne wykorzystanie nowoczesnej Technologii Informacyjnej w oparciu o internet optyczny [10].



Rysunek 3 Schemat instalacji pilotowej

Przebieg eksperymentu w Laboratorium Wirtualnym NMR

Należy zaznaczyć, że spektrometr ze względu na swoją naturę jest przyrządem, którym nie da się sterować wyłącznie w sposób zdalny i podczas zlecenia eksperymentu wymaga on obecności operatora. Powoduje to, że przebieg całego eksperymentu jest w dużej mierze zależny od tzw. czynnika ludzkiego.

Każdy eksperyment NMR można podzielić na dwie części. Pierwsza wymaga wykonania pewnych czynności przez operatora i obejmuje m.in. następujące etapy: przygotowanie próbki, określenie typu sondy i zamontowanie jej w magnesie (opcjonalnie, jeśli użytkownik życzy sobie wykonania eksperymentu na sondzie innej niż ta zamontowana aktualnie w magnesie), wprowadzenie próbki do magnesu, ręczne dostrojenie sondy do częstości Larmora jąder atomowych, dla których będzie obserwowane zjawisko NMR, w przypadku pomiarów w niskich temperaturach (poniżej temperatury pokojowej) należy dodatkowo podłączyć układ chłodzący. Druga część eksperymentu jest zautomatyzowana i może być wykonywana zdalnie.

Początkowa faza eksperymentu obejmująca przygotowanie próbki (jeśli nie została wcześniej przygotowana), dobór i dostrojenie sondy, wprowadzenie próbki do magnesu oraz dostosowanie aparatu do pomiarów w niskich temperaturach, wymaga ręcznej obsługi operatora. Jeżeli użytkownik planuje wykonanie kolejno kilku eksperymentów z różnymi próbkami, to wówczas operator musi być obecny na początku każdego z tych eksperymentów. Można uniknąć konieczności ręcznej obsługi przed każdym eksperymentem w serii, wykorzystując automatyczny podajnik próbek. Należy jednak zaznaczyć, że wykorzystanie takiego podajnika ma sens tylko wówczas, gdy zdalny użytkownik wykonuje eksperymenty na bardzo podobnych próbkach (np. ten sam związek otrzymywany w różnych frakcjach), korzystając z tej samej sondy i obserwując zjawisko NMR dla tych samych jąder. Oczywiście, jeśli chcemy wykonać serię eksperymentów na tej samej próbce, wówczas operator jest potrzebny tylko na początku tej serii.

Jak już wspomniano druga część eksperymentu może zostać zautomatyzowana i wykonywana zdalnie za pomocą takich programów jak: Vnmr, który obsługuje spektrometr firmy Varian [8], bądź też Xwin-NMR obsługujący spektrometr firmy Bruker [9]. Polecenia takie jak: wybór katalogów roboczych, wybór sekwencji pomiarowej, modyfikacja parametrów danej sekwencji, wprowadzenie początkowych wartości parametrów dla cewek korekcyjnych, można wykonać bez bezpośredniego dostępu do przyrządu.

Natomiast operacje takie jak znalezienie sygnału jąder deuteru pochodzącego od rozpuszczalnika, włączenie stabilizacji jądrowej czy korekta jednorodności pola magnetycznego muszą być już wykonywane przy bezpośrednim połączeniu z przyrządem, w którym znajduje się już badana próbka.

Napotkane problemy

Z opisanego powyżej przebiegu eksperymentu możemy wywnioskować, że przeprowadzenie go w sposób zdalny, bez udziału osób trzecich będzie bardzo trudne lub wręcz niemożliwe. Możemy wyróżnić tutaj kilka czynników, które powodują ograniczenia idei laboratorium wirtualnego (głównie zdalnego dostępu do przyrządu z możliwością samodzielnego wykonania wszystkich koniecznych czynności dla poprawnego przeprowadzenia eksperymentu) w przypadku spektrometru.

Pierwszym jest „badana próbka”. Najczęściej jest ona przygotowywana przez osobę dokonującą pomiaru. Następnie musi ona zostać wysłana do określonego laboratorium, co uniemożliwia nam dokonywanie równoważenia obciążenia mimo posiadania dostępu

w ramach laboratorium do kilku jednakowych spektrometrów. Obecnie, w skali kraju, nie doczekaliśmy się jeszcze centrów, gdzie w jednym pomieszczeniu zgromadzono kilka lub kilkanaście spektrometrów. Zazwyczaj są one rozmieszczone w różnych instytucjach, często dość odległych od siebie. Jednak w innych krajach istnieją już takie rozwiązania, co pozwala mieć nadzieję, że będzie można w takich przypadkach stosować równoważenie obciążenia. Kolejną kwestią dotyczącą próbki jest jej trwałość. Zdarza się, że związki przygotowane przez badacza mają pewien okres ważności, po upływie którego zmieniają się ich właściwości np. krystalizują się, wytrącają, ulegają precypitacji, agregacji. Eksperyment powinien być wykonany zanim nastąpią niepożądane zmiany. Ponadto dochodzą tutaj problemy związane z transportem i sposobem przechowywania badanego związku.

Następną nie mniej istotną kwestią jest wpływ tzw. czynnika ludzkiego na poszczególne etapy wykonywania eksperymentu. Pod pojęciem czynnika ludzkiego rozumiemy w tym przypadku dostępność osoby opiekującej się spektrometrem – operatora, jego umiejętności związane z przygotowaniem próbki, zmianą sondy, dostrojeniem pola magnetycznego cewek i wielu innych czynności, które muszą być wykonane ręcznie, a które z kolei mają istotny wpływ na czas wykonania całego eksperymentu.

Pewnym problemem okazuje się także konieczność ustawienia takich parametrów jak sygnału jąder deuteru pochodzącego od rozpuszczalnika, włączenie stabilizacji jądrowej oraz korekta jednorodności pola magnetycznego. Te czynności możemy wykonać tylko w sytuacji, gdy badany związek znajduje się już w spektrometrze. Uniemożliwia to chociażby wsadową pracę systemu i wymusza zdalną obecność osoby przeprowadzającej badania w czasie uruchomienia eksperymentu.

4 Podsumowanie

Laboratoria wirtualne często postrzegane są jako pewne panaceum na problemy związane z zakupem drogich i unikatowych urządzeń, czy z ułatwionym i powszechnym dostępem do nich. Obecnie technologie z nimi związane są na etapie intensywnego rozwoju. Powstają nowe serwisy umożliwiające wykonanie prostych eksperymentów, w których można sterować niewielką liczbą parametrów. Obecny projekt LW jest krokiem do budowy systemu, który jednocześnie spełnia założenia budowy laboratoriów wirtualnych (przedstawione we wstępie niniejszej pracy) jak i jest w pełni funkcjonalny i elastyczny.

W pracy zostały omówione potrzeby i wymagania związane z ideą laboratorium wirtualnego. Scharakteryzowano ogólną architekturę laboratorium umożliwiającą dostosowanie do wielu typów laboratoriów. Przedstawiono technologie wykorzystane do komunikacji między poszczególnymi modułami systemu. W ramach projektu planowana jest instalacja pilotowa bazująca na spektrometrze NMR. Autorzy przedstawili pierwsze doświadczenia zdobyte podczas analizy możliwości zdalnego sterowania tak złożonego przyrządu laboratoryjnego, jakim jest spektrometr NMR.

Na podstawie przedstawionych spostrzeżeń można więc zauważyć, że istnieje wiele problemów do rozwiązania zarówno na etapie projektowania systemu jak i późniejszej implementacji. Jednym z największych jest czynnik ludzki, który powoduje, że nie da się osiągnąć pełnej automatyzacji realizacji eksperymentu w przypadku niektórych urządzeń np. spektrometru. Należy jednak zaznaczyć, że istnieją inne przyrządy badawcze jak chociażby radioteleskop, które umożliwiają pełną automatyzację przeprowadzania badań w sposób zdalny, począwszy od skalibrowania urządzenia poprzez wykonanie pomiaru do odbioru wyników.

Bibliografia

1. Lawenda M., „Laboratorium Wirtualne i Teleimersja”, Raport wewnętrzny PCSS nr RW-34/01, Poznań 2001
2. Lawenda M., „Projekt architektury warstw ogólnej oraz specyficznej dla koncepcji laboratorium wirtualnego”, Raport wewnętrzny PCSS nr RW-2/02, Poznań 2002
3. Adamiak R.W., Gdaniec Z., Lawenda M., Meyer N., Okoń M., Popenda Ł., Rajtar T., Stroiński M., „Adaptacja interfejsu użytkownika spektrometru NMR Varian Unity 300 na potrzeby Laboratorium Wirtualnego”, Raport wewnętrzny PCSS nr RW-2/03, Poznań 2003
4. Adamiak R.W., Gdaniec Z., Lawenda M., Meyer N., Okoń M., Popenda Ł., Rajtar T., Stroiński M., „Laboratorium Wirtualne – Specyfikacja Wymagań Użytkownika”, Raport wewnętrzny PCSS nr RW-3/03, Poznań 2003
5. Lawenda M., Meyer N., Okoń M., Rajtar T., Stroiński M., „Laboratorium Wirtualne – Wymagania Niefunkcjonalne”, Raport wewnętrzny PCSS nr RW-4/03, Poznań 2003
6. Portal Laboratorium Wirtualnego <http://vlab.man.poznan.pl/>
7. Projekt PROGRESS <https://cypress.man.poznan.pl/progress/>
8. Strona domowa firmy Varian <http://www.varianinc.com/>
9. Strona domowa firmy Bruker <http://www.bruker.de/>
10. Bubak M., Madajczyk J., Meyer N., „Laboratorium wirtualne z wykorzystaniem infrastruktury HPC/HPV”, Materiały konferencyjne z konferencji Pionier 2001, kwiecień 2001, Poznań
11. Lawenda M., Meyer N., Rajtar T., „General framework for Virtual Laboratory”, Cracow Grid Workshop, 11-14 grudzień 2002, Kraków
12. National Radio Astronomy Observatory <http://www.nrao.edu/>