

PRZEMYSŁAW REK
MIROSŁAW KOPEĆ
Centrum Komputerowe Politechniki Łódzkiej, Łódź

ZOFIA GDANIEC
ŁUKASZ POPENDA
RYSZARD W. ADAMIAK
Instytut Chemii Bioorganicznej PAN, Poznań

MARCIN WOLSKI
MARCIN LAWENDA
NORBERT MEYER
MACIEJ STROIŃSKI
Poznańskie Centrum Superkomputerowo Sieciowe, Poznań

NAUKOWA BIBLIOTEKA CYFROWA DLA SPEKTROSKOPII MAGNETYCZNEGO REZONANSU JĄDROWEGO

Streszczenie

Artykuł poświęcony jest budowie Naukowej Biblioteki Cyfrowej (NBC) ze szczególnym uwzględnieniem funkcjonalności specyficznej dla spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego. Przedstawiono wyniki prac koncepcyjnych, począwszy od analizy wymagań aż do projektu architektury. NBC oparta o System Zarządzania Danymi (zrealizowany w projekcie celowym Progress, 2883/C.T11-6/2001 - współfinansowanym przez Ministerstwo Nauki i Informatyzacji oraz firmę SUN) jest rozproszonym środowiskiem dostępu do danych. Jej podstawowym zadaniem jest przechowywanie i udostępnianie danych w środowisku gridowym. Stanowi ona ważny element systemu „Laboratorium Wirtualne” (VLab), który umożliwia zarządzanie wynikami eksperymentów. Prace są realizowane w ramach projektu 6 T11 0052 2002 C/05836 finansowanego przez Ministerstwo Nauki i Informatyzacji oraz firmę SGI.

1. Wstęp

Wraz z rozwojem Internetu wzrosły również możliwości i potrzeby elektronicznego publikowania oraz udostępniania treści cyfrowych. Użytkownicy mają do dyspozycji coraz bardziej zaawansowane narzędzia przeznaczone do tworzenia, przeglądania i wyszukiwania elektronicznych dokumentów. Narzędzia te spełniają ważną rolę w globalnej infrastrukturze informacyjnej, mogą również wspierać pracę środowisk naukowych i edukacyjnych.

Naukowa Biblioteka Cyfrowa (NBC) jest systemem tworzonym na bazie Systemu Zarządzania Danymi [1], który został opracowany na potrzeby projektu celowego PROGRESS [2]. Jego podstawowe przeznaczenie, czyli przechowywanie i udostępnianie danych w środowisku gridowym, zostało poszerzone o funkcjonalność dostosowaną do specyficznych wymagań Laboratorium Wirtualnego [3].

W pracy przedstawiono założenia, projekt i implementację Naukowej Biblioteki Cyfrowej (NBC) przeznaczonej dla danych pochodzących z eksperymentów NMR.

Naukowa Biblioteka Cyfrowa ma służyć, w zamyśle, do przechowywania i udostępniania danych wykorzystywanych przez laboratoria wirtualne. Dane te mogą być zarówno danymi wejściowymi wykorzystywanymi podczas eksperymentów naukowych, jak również wynikami przeprowadzonych eksperymentów bądź obliczeń. Ważną sprawą jest również potrzeba gromadzenia różnego rodzaju publikacji oraz dokumentów powstałych na użytek prowadzonych badań lub będących ich wynikiem. Tę funkcjonalność, znaną doskonale użytkownikom korzystającym z bibliotek cyfrowych, również zapewnia NBC. Przykładem zastosowania NBC NMR może być Laboratorium Wirtualne NMR [3].

2. Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego

Spektroskopia Jądrowego Rezonansu Magnetycznego (ang. NMR – Nuclear Magnetic Resonance) jest podstawową i najbardziej uniwersalną techniką instrumentalną znajdującą zastosowanie zarówno w fizyce, chemii organicznej, nieorganicznej, biochemii oraz medycynie. Spektroskopia NMR pozwala nie tylko na identyfikację i ustalenie struktury związków organicznych a stosowana jest np. w celu śledzenia przebiegu, mechanizmów oraz kinetyki reakcji chemicznych, analizy mieszanin czy badania dynamiki cząsteczek.

W wyniku eksperymentu NMR otrzymuje się widma homo- i heterojądrowe (jedno- lub wielowymiarowe), których analiza dostarcza informacji o przesunięciach chemicznych atomów, wielkości stałych sprzężeń skalarnych czy dipolowych, oraz wartości czasów relaksacji T_1 , T_2 . Prezentowana baza umożliwi przechowywanie tych danych oraz dostarcza narzędzi pozwalających na ich szybkie i optymalne dla danego użytkownika przeszukiwanie.

Każdy związek umieszczony w bazie, oprócz unikatowej nazwy, wzoru chemicznego i informacji o jego właściwościach fizykochemicznych posiada specyficzny dla danego związku opis wszystkich jego atomów zgodny z kodem HOSE [4]. Dla poszczególnych związków znajdujących się w bazie zawarty jest, w formie graficznej, zbiór widm NMR jedno- i wielowymiarowych, które zostały dla danego związku wykonane, oraz ich pliki źródłowe otrzymane bezpośrednio ze spektrometru, wraz z pełnym opisem parametrów użytych do rejestracji widm. W przypadku biomolekuł - białek czy kwasów nukleinowych - baza umożliwi dodatkowo zdeponowanie współrzędnych atomów oraz więzów strukturalnych zastosowanych do obliczeń wraz z pełnym protokołem wyznaczenia struktury. Ponadto istnieje możliwość zamieszczenia w bazie programów sekwencji impulsów, które mogą być wykorzystane przez innych użytkowników. Dla wszystkich danych znajdujących się w bazie załączony jest spis publikacji, w których powyższe dane zostały zamieszczone. Pełen wykaz pól wraz z formatem ich zapisu dla każdego związku przedstawiony jest w tabeli 1.

W porównaniu do innych baz NMR dostępnych w Internecie takich jak BioMagResBank [5], NMR data-sets Bank [6], NMRShiftDB [7], SDBS [8] czy Spectra Online [9], opracowywana baza zawiera pełen zakres informacji dotyczący wykonania i analizy eksperymentu NMR, dzięki czemu może ona być wykorzystana również w celach dydaktycznych. Dostęp do bazy powinien także ułatwić użytkownikom wdrażanie nowych technik eksperymentalnych i obliczeniowych. Tych cech nie posiadają dotychczasowe bazy danych.

W oparciu o dane dotyczące wartości przesunięć chemicznych, stałych sprzężeń oraz czasów relaksacji, które są sprzężone z nazwami związków, wykorzystanie bazy umożliwi szybką analizę widm oraz identyfikację związków. W przypadku analizy widm związków nieznanych baza zawierająca kody HOSE pozwoli przewidzieć otoczenie atomów na podstawie wartości ich przesunięć chemicznych i stałych sprzężeń oraz zaproponować typy grup funkcyjnych, które mogą występować

wać w badanym związku. Kody HOSE mogą być wykorzystane również przy symulacji widm w oparciu jedynie o wzór strukturalny związku.

3. Podstawowe pojęcia biblioteki cyfrowej

3.1. Analiza założeń

Podstawowe założenia funkcjonalne Naukowej Biblioteki Cyfrowej można przedstawić odnosząc się do przesłanek, które były podstawą zbudowania Wielkopolskiej Biblioteki Cyfrowej (WBC) [10] rozwijanej przez Poznańskie Centrum Superkomputerowo-Sieciowe. Są to:

- uwzględnienie unikalnego charakteru niektórych zbiorów bibliotecznych,
- oprogramowanie biblioteki cyfrowej ma stwarzać możliwość istotnego rozszerzenia funkcji realizowanej przez bibliotekę, która z niego korzysta,
- oprogramowanie biblioteki cyfrowej musi współpracować ze zintegrowanymi systemami bibliotecznymi, a w szczególności pozwalać na wykorzystywanie baz katalogowych.

Naukowa Biblioteka Cyfrowa ma służyć studentom i naukowcom do składowania wyników eksperymentów i obliczeń naukowych. Istnieje zatem potrzeba digitalizacji wyników prac naukowych, w postaci określanej dalej mianem publikacji cyfrowej.

Drugie założenie odnosi się do kwestii użyteczności, jaką ma spełniać biblioteka cyfrowa w odniesieniu do istniejących już bibliotek. Biblioteka cyfrowa nie ma być odrębną instytucją i stanowić swego rodzaju konkurencji dla już istniejących bibliotek. Powinna ona uzupełniać i rozszerzać użyteczność biblioteki, zwiększając z jednej strony jej powszechność oraz dostępność, a z drugiej pozwalając bibliotekarzom (opiekunom biblioteki) na dostosowywanie funkcjonalności biblioteki cyfrowej do potrzeb czytelników (użytkowników) i opiekuna.

NBC stanowi w tym kontekście bibliotekę cyfrową, która w zamierzeniu ma służyć instytucji naukowej udostępniającej, poprzez Laboratorium Wirtualne, wybrane urządzenie (np. spektrometr NMR). Naukowcy mają mieć możliwość gromadzenia oraz dostęp do wyników swoich eksperymentów i obliczeń naukowych. Gromadzone w NBC zasoby powinny mieć także charakter dydaktyczny i są związane z konkretną instytucją oraz udostępnianym przez nią urządzeniem.

Trzecia kwestia dotyczy opisu semantycznego przechowywanych zasobów, czyli metadanych. Pozwalają one na wyszukiwanie informacji w zbiorach biblioteki cyfrowej. NBC realizuje powyższe założenia w sposób kompletny - publikacje można opisać za pomocą dowolnie zdefiniowanych zbiorów metadanych, czyli również tych, które są przyjęte za standardy w świecie bibliotekarzy. Podobnie wygląda kwestia wyników eksperymentów naukowych, w tym przypadku dostępna funkcjonalność jest rozszerzona o możliwość przechowywania danych NMR. Temu celowi służy dedykowana baza NMR opisana w punkcie 5.

Podsumowując powyższe rozważania można stwierdzić, iż Naukowa Biblioteka Cyfrowa stanowi specyficzny rodzaj biblioteki cyfrowej, dedykowanej gremium naukowców i rozszerzonej o możliwość przechowywania wyników eksperymentów naukowych oraz ich opisu. Należy zaznaczyć, iż w przeciwieństwie do innych bibliotek, np. Wielkopolskiej Biblioteki Cyfrowej (WBC) [10], NBC realizuje odmienną filozofię w sposobie reprezentacji zasobów cyfrowych. W WBC publikacja elektroniczna przedstawia pewną wyodrębnioną treść (artykuł naukowy, raport, książkę, film), która może istnieć w systemie w wielu wersjach, a struktura tej publikacji ma postać pojedynczego pliku (np. PDF) lub zbioru plików (np. HTML). W NBC publikacja elektroniczna (artykuły, wyniki prac badawczych w postaci cyfrowej, informacje o związku chemicznym) ma format

zbioru plików, których zależności (np. wersjonowanie) są modelowane za pomocą schematów metadanych.

3.2. Funkcjonalność bibliotek cyfrowych

Na przestrzeni ostatnich lat ustalony został kanon podstawowych funkcji, które powinna spełniać nowoczesna biblioteka cyfrowa [11]. Zaliczyć można do niego przede wszystkim:

- **Kategoryzacja** – możliwość grupowania publikacji powiązanych ze sobą merytorycznie,
- **Opis katalogowy (semantyczny)** – czyli opis znajdujących się w bibliotece publikacji cyfrowych,
- **Przeszukiwanie** – możliwość odnalezienia wśród zasobów biblioteki publikacji interesującej użytkownika lub składowanych wyników eksperymentów,
- **Przeglądanie** – możliwość wygodnego obejrzenia treści odnalezionych danych.

3.3. Powszechność i dogodność w dostępie do publikacji

Wielu naukowców widzi realną potrzebę umieszczania w bibliotece cyfrowej swoich materiałów, czy też wyników badań i współdzielenia ich z innymi osobami. Aby było to jednak możliwe, poza podstawowymi funkcjami biblioteki cyfrowej konieczne jest zapewnienie dodatkowej funkcjonalności w oprogramowaniu Naukowej Biblioteki Cyfrowej, stosownej do wymagań środowiska naukowego. Poniżej wymienione są wymagania co do publikacji dokumentów oraz wyników eksperymentów naukowych w formie elektronicznej:

- **Powszechny dostęp do publikacji** - zapewnienie naukowcom dostępu za pośrednictwem Internetu do zasobów biblioteki,
- **Trwałość** - raz udostępniona publikacja naukowa nie powinna zmieniać formy (np. formatu pliku) lub lokalizacji (np. adresu w sieci),
- **Zarządzanie wersjami** - łatwe utrzymywanie wielu wersji tego samego dokumentu,
- **Zarządzanie dostępem** - ochrona dostępu do szczególnie cennych wyników badań, niepublikowanych materiałów, dokumentacji,
- **Zabezpieczenie przed kopiowaniem** - ochrona materiałów przed nieautoryzowanym kopiowaniem,
- **Automatyczne zawiadamianie** - zawiadamianie użytkownika o zmianach w zawartości biblioteki (łatwe odnalezienie interesujących naukowca informacji),
- **Wiarygodność** - wprowadzający publikację powinien być przekonany o tym, że osoby niepowołane nie wprowadzą ani nie wprowadzą zmian do treści jego dokumentu.

Przedstawiona i opisana powyżej lista właściwości NBC jest wspólna dla wielu zrealizowanych i istniejących już bibliotek cyfrowych (np. WBC). Dzięki temu, że Naukowa Biblioteka Cyfrowa jest zbudowana na bazie Systemu Zarządzania Danymi, to zyskuje pewne cechy, które nie są tak powszechne w środowiskach bibliotek cyfrowych, a istotne dla środowiska naukowego. SZD, jak już wspomniano, jest wirtualnym systemem plików o rozproszonej architekturze, uzupełnionym o specyficzne rozszerzenia archiwizacji danych na systemach HSM (ang. Hierarchical Storage Management).

4. Dane przechowywane w bazie NMR

Szczegółowa lista danych będących w gestii biblioteki NMR została zestawiona w Tablicy nr 1.

*XII Konferencja „Sieci i Systemy Informatyczne”
Łódź, październik 2004*

Wyszczególnione w niej dane będą podlegały operacjom: “wprowadź”, “zmodyfikuj”, “wyszukaj”.

Lp.	Nazwa	Typ	Rozmiar	Opis
Informacje dotyczące związku				
1	Compound Name(s)	Tekstowy	256 znaków	Informacje dotyczące związku
2	Molecular Formula	Tekstowy	32 znaki	Skrócony wzór strukturalny
3	Summary Formula	Tekstowy	32 znaki	Wzór sumaryczny
4	Chemical Structure	Graficzny		Wzór strukturalny z numeracją atomów
5	Atoms name with numbers & HOSE code	Tekstowy	Tablica ¹ : N-16 (nazwy, numery atomów) Tablica ¹ : N-64 (kody HOSE)	Nazwy atomów i odpowiadające im kody HOSE
6	Chemical Class	Tekstowy	256 znaków	Klasa chemiczna związku
7	Molecular Weight	Tekstowy	16 znaków	Ciężar cząsteczkowy
8	Boiling Point	Tekstowy	16 znaków	Temperatura wrzenia
9	Melting Point	Tekstowy	16 znaków	Temperatura topnienia
10	Form Type	Tekstowy	2 znaki	Typ formularza do wprowadzania danych
Eksperyment NMR				
11	1D NMR Spectra	Graficzny	do 0,5 MB	Graficzna prezentacja widm 1D NMR
12	Homonuclear, heteronuclear, others	Tekstowy	16 znaków	Typ korelacji widm 2D i 3D: homojądrowe, heterojądrowe
13	2D NMR Spectra	Graficzny	do 0,5 MB	Graficzna prezentacja widm 2D NMR
14	3D NMR Spectra	Graficzny	do 0,5 MB	Graficzna prezentacja widm 3D NMR
15	Pulse sequence	Binarny	do 0,25 MB	Sekwencja impulsów
16	Pulse sequence – description	Tekstowy	64 znaki	Uwagi dotyczące sekwencji impulsów
17	Spectrometer model	Tekstowy	32 znaki	Typ spektrometru NMR
18	Spectrometer manufacturer	Tekstowy	16 znaków	Producent spektrometru NMR
19	Spectrometer basic frequency	Tekstowy	16 znaków	Częstotliwość podstawowa spektrometru NMR
20	Temperature	Tekstowy	16 znaków	Temperatura pomiaru
21	Solvent	Tekstowy	32 znaki	Rozpuszczalnik
22	Concentration	Tekstowy	16 znaków	Stężenie badanego związku
23	pH	Tekstowy	8 znaków	pH roztworu
24	Bufor	Tekstowy	128 znaków	Skład buforu, nazwa zwyczajowa
25	Reference	Tekstowy	32 znaki	Nazwa wzorca wraz z jego przesunięciem chemicznym
26	Reference Compound	Tekstowy	32 znaki	Przykładowe wzorce wraz z ich przesunięciami chemicznymi
27	Additional Spectrum Information	Tekstowy	Plik tekstowy	Dodatkowe informacje o widmie
Wartości spektralne				
28	¹ H, ¹³ C, ... Chemical Shifts	Tekstowy	Tablica ¹ : N-8	Przesunięcia chemiczne
29	Coupling Constants – Scalar	Tekstowy	Tablica ¹ : N-64	Tabela wartości sprzężeń skalarnych
30	Coupling Constants – Residual Dipolar Couplings (RDC)	Tekstowy	Tablica ¹ : N-64	Tabela wartości resztkowych sprzężeń dipolowych
31	Relaxation Times	Tekstowy	Tablica ¹ : N-2-16	Czasy relaksacji T ₁ i T ₂
Informacje o autorze				
32	Authors	Tekstowy	256 znaków	Lista autorów

¹ Tablica złożona z N wierszy, gdzie N jest liczbą atomów

33	Institution	Tekstowy	128 znaków	Instytucja
34	Contact	Tekstowy	128 znaków	Kontakt z autorem (np. e-mail, tel.)
Literatura				
35	Authors	Tekstowy	256 znaków	Lista autorów
36	Journal	Tekstowy	128 znaków	Nazwa czasopisma
37	Year	Tekstowy	8 znaków	Rok wydania
38	Volume	Tekstowy	16 znaków	Tom
39	Pages	Tekstowy	16 znaków	Strony – początkowa, końcowa
40	Title	Tekstowy	256 znaków	Tytuł artykułu
41	PDF, PS	Binarny		Publikacja w formacie PDF lub PS
42	Link	Tekstowy	128 znaków	Odnosnik do bazy literaturowej
Dane eksperymentalne				
43	Original NMR Data	Binarny	do 10 MB	Skompresowane dane NMR
44	Format of data	Tekstowy	64 znaki	Typ zapisanych danych NMR
45	Processed data (zipped)	Binarny	do 50 MB	Skompresowane przetworzone dane NMR
46	Format of processed data	Tekstowy	16 znaków	Format zapisanych przetworzonych danych NMR
Analiza strukturalna				
47	Protocol (zipped)	Binarny	do 1 MB	Protokoły, skrypty, ...
48	Protocol description	Tekstowy	512 znaków	Informacja o plikach
49	Restraints (zipped)	Binarny	do 0,2 MB	Więzy eksperymentalne
50	Restraints description	Tekstowy	256 znaków	Informacja o plikach
51	Structures (zipped)	Binarny	do 5 MB	Współrzędne atomowe
52	Database	Tekstowy		Nazwa bazy danych, w której zdeponowano współrzędne
53	Reference to database	Tekstowy	128 znaków	Odnosnik do bazy danych
54	Code	Tekstowy	16 znaków	Kod zdeponowanej struktury
55	Additional Data	Tekstowy	512 znaków	Inne, dodatkowe informacje
Inne informacje				
56	Other information	Tekstowy	512 znaków	Inne, dodatkowe informacje

Tabela 1 Zestawienie atrybutów, które są przechowywane w bazie NMR

4.1 Diagram przypadków użycia dla biblioteki NMR

Na podstawie zdefiniowanych wymagań dla Naukowej Biblioteki Cyfrowej NMR (zob. 3.2) możemy tam wyróżnić głównego aktora, co przedstawione jest schematycznie na Diagramie 1. Aktorem może być system umiejscowiony w warstwie pośredniej lub też w warstwie prezentacji pod warunkiem, że potrafi on komunikować się za pomocą protokołu SOAP.

Poniższy diagram prezentuje dwóch aktorów. Pierwszy z nich - *SOAPCompliedClient* jest utożsamiany z pewnym wzorcem aktora o nadanych uprawnieniach do wykonywania określonych operacji i wyposażonym w umiejętność komunikowania się z biblioteką w oparciu o protokół *SOAP*. Jako drugiego aktora przedstawiono bibliotekę *nuSOAP (nuSOAP_PHPClient)*, która może być użyta do stworzenia serwisu dostępowego dla *Naukowej Biblioteki Cyfrowej NMR* opartego o strony *WWW* i język *PHP*.

Diagram pokazuje także główne przykłady użycia systemu biblioteki NMR:

- **Data gathering and updating** – umożliwia wprowadzanie i uaktualnianie informacji dotyczących związków chemicznych oraz danych eksperymentalnych.
- **Querying / viewing** – umożliwia otrzymanie informacji o badanym związku, eksperymencie i jego rezultatach oraz analizie wykonanej na podstawie uzyskanych danych. Przebieg wyszukiwania zależy od postawionych wymagań. Możliwe predefiniowane standardowe wymagania, to:

- **Query for compound info** – warunek: istnienie informacji dotyczących badanego związku; wyszukiwanie po jego atrybutach.
- **Query for experiment data** – warunek: istnienie danych eksperymentalnych; wyszukiwanie po atrybutach eksperymentu, takich jak np.: typ widma, sekwencja impulsów, typ spektrometru, rozpuszczalnik, temperatura pomiaru.
- **Query for postexperimental analyses** – warunek: istnienie opisu analiz; wyszukiwanie związków według wartości przesunięć chemicznych, stałych sprzężeń.
- **Query for postexperimental additional data** – warunek: istnienie danych dokumentujących badania, tj. referencji do autorów eksperymentu, referencji do artykułów dotyczących prowadzonych badań bądź też prac dokumentujących uzyskane rezultaty.

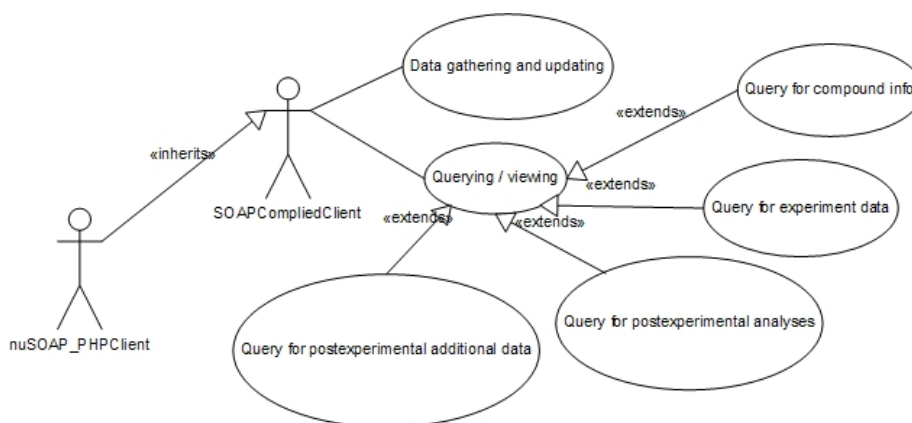


Diagram 1. Diagram dla głównego aktora

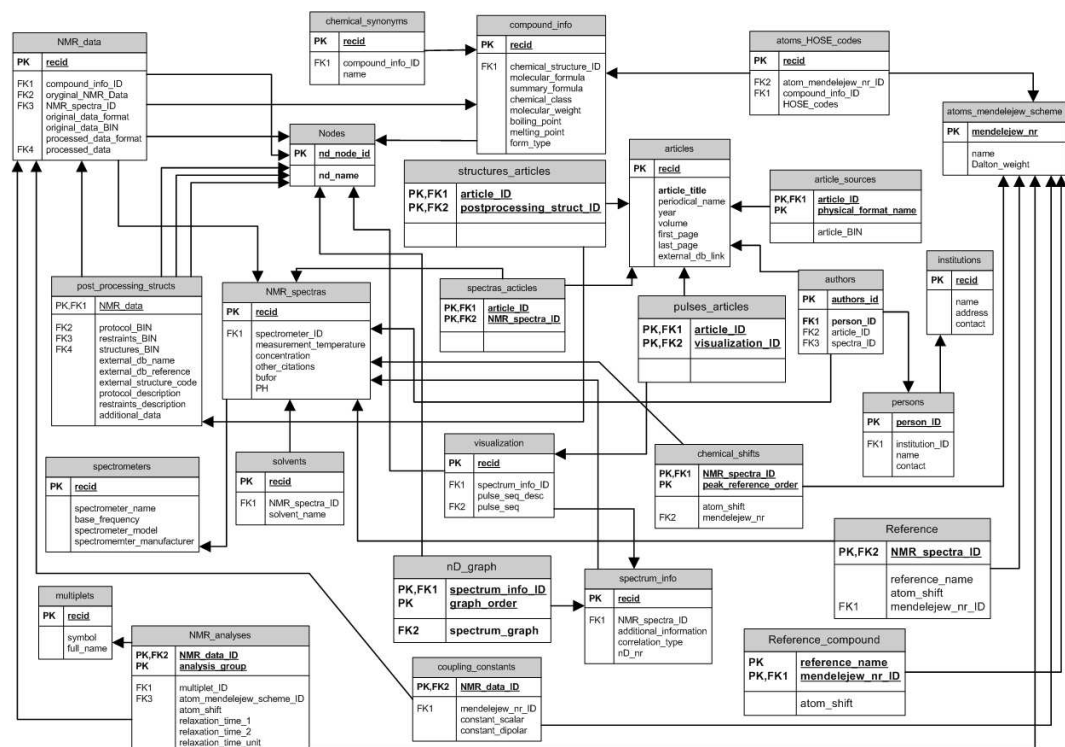
5. Fazy projektowania systemu Naukowej Biblioteki Cyfrowej NMR

Rozdział przedstawia schemat specyficznej części bazy danych dla Biblioteki Cyfrowej NMR oraz analizę statyczną warstwy aplikacyjnej biblioteki z użyciem diagramów klas.

5.1 Projektowanie bazy danych

Tworzenie schematu bazy danych dla biblioteki NMR przebiegało kilkietapowo w oparciu o wymagania użytkownika. Ważnym etapem w procesie projektowania bazy danych był proces jej normalizacji, pozwalający na usunięcie z tabel nadmiaru informacji oraz na zwiększenie optymalizacji struktury danych. W schemacie bazy NMR można rozróżnić 4 logiczne części dedykowane dla przechowywania:

- podstawowych informacji charakteryzujących badany związek chemiczny,
- informacji i lokalizacji danych opisujących przeprowadzony eksperyment,
- informacji na temat analizy danych eksperymentalnych,
- informacji i lokalizacji danych dodatkowych/uzupełniających badania.



Rysunek 1 Schemat bazy NMR

6. Podsumowanie

Biblioteki cyfrowe zyskują coraz większą popularność i uznanie wśród osób poszukujących i udostępniających informacje. Dzieje się tak zapewne za sprawą łatwego i nieograniczonego czasowo dostępu do informacji, prostoty wyszukiwania i przeglądania informacji. Nie bez znaczenia jest również możliwość eksploracji danych bez konieczności opuszczania stanowiska pracy lub ruszania się z domu. Biblioteki obecnie dostępne w Internecie posiadają różne profile: jedne propagują dziedzictwo kulturowe, inne sztukę regionalną, a jeszcze inne poświęcone są edukacji oraz gromadzeniu cennych informacji naukowych z wybranej dziedziny wiedzy. Dlatego też niezwykle ważnym jest zastosowanie otwartych standardów przy opisie zasobów cyfrowych. Umożliwi to współpracę pomiędzy Naukową Biblioteką Cyfrową a innymi bibliotekami (np. WBC), a tym samym stworzy wzajemnie uzupełniające się platformy oferujące użytkownikom dostęp do zasobów cyfrowych o różnej tematyce i treści.

Przykładowy interfejs Naukowej Biblioteki Cyfrowej dla danych NMR można przetestować na stronach Laboratorium Wirtualnego [3].

Literatura

- [1] Grzybowski P., Mazurek C., Spychała P., Wolski M.: *Data Management System for grid and portal services*. Submitted to Grid Computing: Infrastructure and Applications special issue of The International Journal of High Performance Computing Applications (IJHPCA), Cardiff University, UK, <http://progress.psnc.pl/English/DMS.pdf>
- [2] PROGRESS - Polish Research on Grid Environment for SUN Servers, <http://progress.psnc.pl/English/index.html>
- [3] Virtual Laboratory PSNC <http://vlab.psnc.pl/>
- [4] Bremser W.: *HOSE - A Novel Substructure Code*, Anal. Chim. Acta, 103, 355-365 (1978).
- [5] Seavey B.R., Farr E.A., Westler W.M., Markley J.L.: *A Relational Database for Sequence-Specific Protein NMR Data*, J. Biomolecular NMR, 1, 217-236 (1991).
- [6] NMR data-sets Bank: A repository for raw NMR data-sets, <http://nmrb.cbs.cnrs.fr/index.html>
- [7] Steinbeck Ch., Krause S., Kuhn S., *NMRShiftDBs Constructing a Free Chemical Information System with Open-Source Components*, J. Chem. Inf. Comput. Sci., 43, 1733-1739 (2003).
- [8] Yamamoto O., Someno K., Wasada N., Hiraishi J., Hayamizu K., Tanabe K., Tamura T., Yanagisawa M., *An Integrated Spectral Data Base System Including IR, MS, 1H-NMR, 13C-NMR, ESR and Raman Spectra*, Anal. Sci., 4, 233-239 (1988).
- [9] Spectra Online, http://spectra.galactic.com/SpectraOnline/Default_ie.htm
- [10] Wielkopolska Biblioteka Cyfrowa, <http://www.wbc.poznan.pl>
- [11] Mirosław Górny, Jan Andrzej Nikisch, Paweł Gruszczyński, Cezary Mazurek, Maciej Stroiński, Andrzej Swędrzyński, *Zastosowanie oprogramowania dLibra do budowy Wielkopolskiej Biblioteki Cyfrowej*, <http://ebib.oss.wroc.pl/matkonf/iwb2/dlibra.php>

PRZEMYSŁAW REK

rek@mail.p.lodz.pl

MIROSŁAW KOPEĆ

kopec@sir.p.lodz.pl

Centrum Komputerowe Politechniki Łódzkiej, Łódź

90-924 Łódź, Wólczańska 175

tel.: (+48 42) 638-35-28 fax: (+48 42) 638-35-05

ZOFIA GDANIEC

zgdan@ibch.poznan.pl

ŁUKASZ POPENDA

lpopenda@ibch.poznan.pl

RYSZARD W. ADAMIAK

adamiakr@ibch.poznan.pl

Instytut Chemii Bioorganicznej PAN, Poznań

61-704 Poznań, Noskowskiego 12/14

tel. (+48 61) 852-85-03 fax. (+48 61) 852-05-32

MARCIN WOLSKI

maw@man.poznan.pl

MARCIN LAWENDA

lawenda@man.poznan.pl

NORBERT MEYER

meyer@man.poznan.pl

MACIEJ STROIŃSKI

stroins@man.poznan.pl

Poznańskie Centrum Superkomputerowo Sieciowe, Poznań

61-704 Poznań, Noskowskiego 10

tel. (0 61) 858-20-52 fax. (0 61) 852-59-54