




Naukowa Biblioteka Cyfrowa dla spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego

Przemysław Rek
Mirośław Kopeć
Centrum Komputerowe Politechniki Łódzkiej, Łódź

Zofia Gdaniec
Łukasz Popena
Ryszard W. Adamiak
Instytut Chemii Bioorganicznej PAN, Poznań

Marcin Wolski
Marcin Lawenda
Norbert Meyer
Maciej Stroiński
Poznańskie Centrum Superkomputerowo Sieciowe, Poznań





- Prace realizowane w ramach projektu 6 T11 0052 2002 C/05836 wspieranego przez Ministerstwo Nauki i Informatyzacji Polski oraz firmę SGI.

- *Laboratorium Wirtualne* – <http://vlab.psnc.pl>

- NBC NMR oparta o System Zarządzania Danymi



XII Konferencja
Sieci i Systemy Informatyczne
Łódź, 21 – 22 października 2004

Plan wystąpienia

1. Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego.
2. Biblioteka Cyfrowa.
 - a) Przedstawienie założeń.
 - b) Obszary funkcjonalne biblioteki.
 - c) Powrzechność i dogodność w dostępie do publikacji.
3. Biblioteka Cyfrowa NMR.
 - a) Cel i kontekst.
 - b) Dane przechowywane w bazie NMR.
 - c) Projekt architektury Naukowej Biblioteki Cyfrowej NMR.



1. Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego

- Uniwersalna technika instrumentalna.

Zastosowanie:

fizyka, chemia organiczna i nieorganiczna, biochemia, medycyna.



- Identyfikacja i ustalenie struktury związków organicznych. Stosowana do śledzenia reakcji chemicznych w szczególności ich przebiegu, mechanizmów oraz kinetyki.

- Analiza widm NMR homo- i heterojądrowych (jedno- lub wielowymiarowych) – informacja o przesunięciach chemicznych atomów, wielkościach stałych sprzężeń skalarnych, dipolowych, wartości czasów relaksacji.

2. Biblioteka Cyfrowa (BC) - 1/2

a) Przedstawienie założeń – kryteria klasyfikacji

- Unikalność charakteru niektórych zbiorów bibliotecznych.
- Istotne rozszerzenie funkcji realizowanych przez bibliotekę korzystającą z oprogramowania biblioteki cyfrowej.

Możliwość współpracy oprogramowania biblioteki cyfrowej ze zintegrowanymi systemami bibliotecznymi (wykorzystanie baz katalogowych).



b) Obszary funkcjonalne biblioteki

Usystematyzowany kanon podstawowych funkcji BC obejmuje:

- kategoryzację, opis katalogowy,
- przeszukiwanie i przeglądanie.

2. Biblioteka Cyfrowa (BC) - 2/2

c) Powszechność i dogodność w dostępie do publikacji:

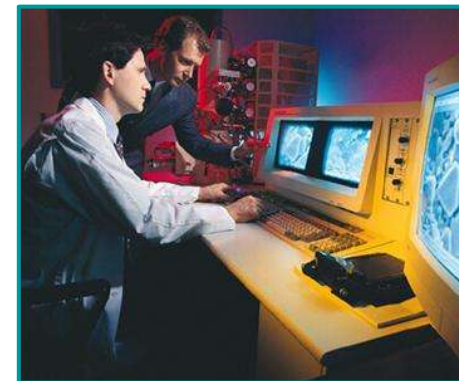
- **trwałość** - raz udostępniona publikacja naukowa nie powinna zmieniać formy (np. formatu pliku) lub lokalizacji (np. adresu w sieci),
- **zarządzanie wersjami** - łatwe utrzymywanie wielu wersji tego samego dokumentu,
- **zarządzanie dostępem** - ochrona dostępu do szczególnie cennych wyników badań, 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 wprowadzały ani nie wprowadzą zmian do treści jego dokumentu.



3. Biblioteka Cyfrowa NMR (1/2)

a) Cel i kontekst

NBC NMR ma służyć instytucji naukowej udostępniającej np. poprzez Laboratorium Wirtualne, wybrane urządzenie (np. spektrometr NMR). Domyślnie biblioteka ma służyć studentom, wykładowcom uczelni wyższych lub naukowcom do publikowania swoich prac a także składowania wyników eksperymentów i obliczeń naukowych.



b) Dane przechowywane w bazie NMR:

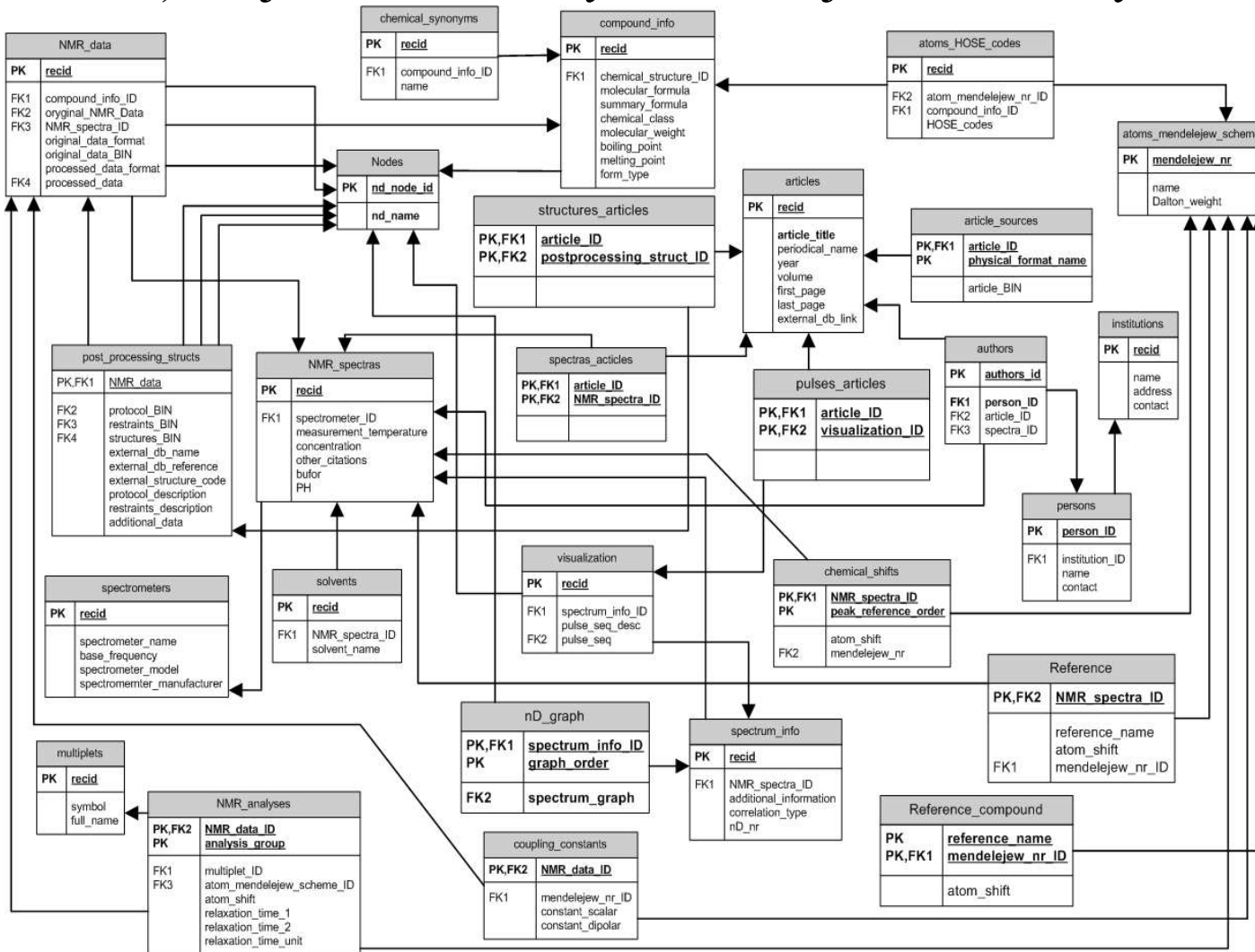
- dane wejściowe scenariuszy pomiarowych,
- wyniki eksperymentów bądź obliczeń,
- wyniki analizy otrzymanych danych.

Kategorie danych przechowywanych w bibliotece NMR:

- informacje dot. związku chemicznego, eksperymentu NMR, analizy strukturalnej związku, publikacji naukowych.

3. Biblioteka Cyfrowa NMR (2/2)

c) Projekt architektury Naukowej Biblioteki Cyfrowej NMR



Schemat bazy
NMR

Architektura

klient-agent-serwer

Technologia:

- Java
- Web Services
- Oracle/PostgreSQL



XII Konferencja
Sieci i Systemy Informatyczne
Łódź, 21 – 22 października 2004



POLITECHNIKA ŁÓDZKA
Centrum Komputerowe

Dziękuję za uwagę

Laboratorium Wirtualne – <http://vlab.psnc.pl>

Kontakt:
Przemysław Rek
rek@p.lodz.pl



XII Konferencja
Sieci i Systemy Informatyczne
Łódź, 21 – 22 października 2004