

Obliczenia wielkiej skali i wizualizacja do zastosowań
w wirtualnym laboratorium z użyciem klastra SGI

Laboratorium Wirtualne

Instytut Chemii Bioorganicznej PAN
Poznańskie Centrum Superkomputerowo Sieciowe

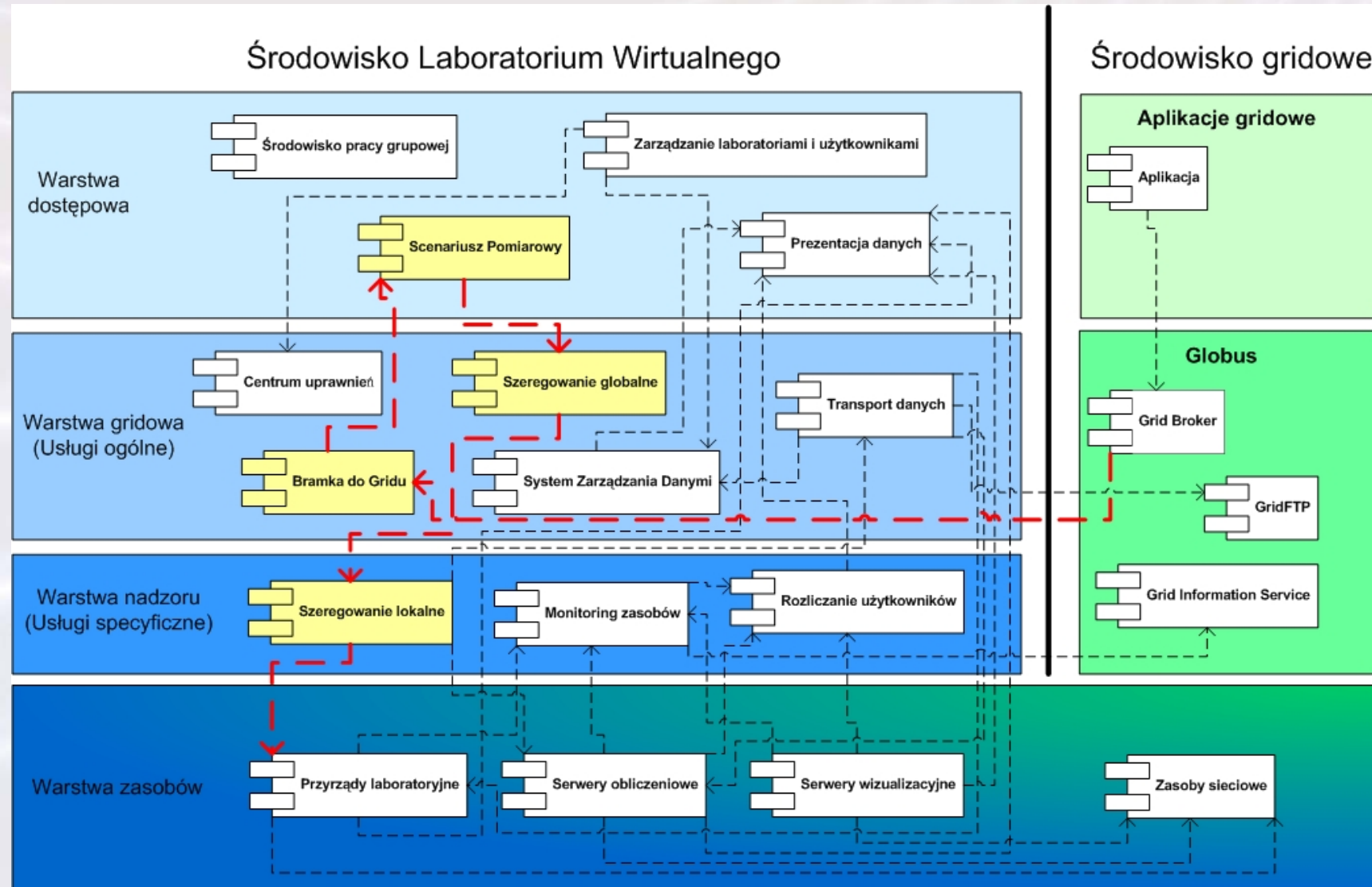
Harmonogram i spotkania

- Zadania są realizowane zgodnie z harmonogramem
- Odbyły się następujące spotkania: 2xPoznań, Kraków i Łódź
- Raz w tygodniu odbywają się spotkania poprzez VRVSA z zespołem z Łodzi
- Spotkania z uczestnikami innych zadań w ramach PCSS

Funkcjonalność

- Zdalny dostęp do drogich przyrządów badawczych
- Równoważenie obciążenia
- Rozliczanie użytkowników
- Digitalizacja wyników
- Praca grupowa
- Komunikacja z obsługą urządzeń
- Rezerwacja czasu wykonania eksperymentu

Architektura



Aktualny stan prac (1/2)

Prace koncepcyjne

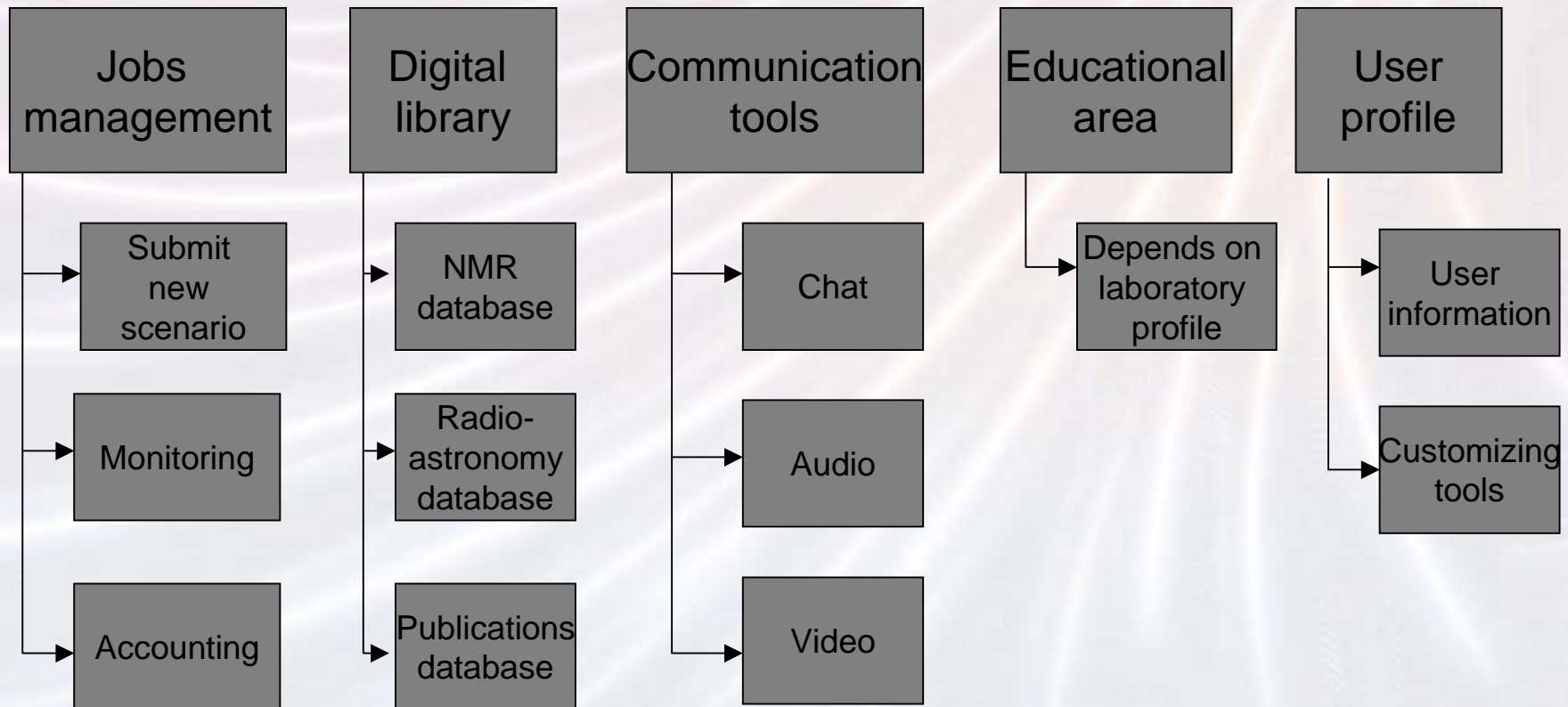
- Określone założenia systemu Vlab
- Zdefiniowane wymagania funkcjonalne i нефункционалне
- Zdefiniowana architektura
- Opis funkcjonalności i sposobu działania poszczególnych modułów

Aktualny stan prac (2/2)

Prace implementacyjne

- Podstawowa funkcjonalność najważniejszych modułów
- Interfejs umożliwiający:
 - zlecenie scenariusza pomiarowego obejmującego wykonanie zadania na spektrometrze, obróbkę otrzymanych danych na etapie postprocessingu oraz ich wizualizację
 - obserwację stanu zadania
- Strony edukacyjne - częściowo
- Projekt bazy danych dla biblioteki cyfrowej danych NMR (LODMAN)
- Interfejsy użytkownika dla biblioteki cyfrowej (LODMAN)

Interfejs użytkownika



Scenariusz pomiarowy

POZNAŃ SUPERCOMPUTING AND NETWORKING CENTER

SCENARIO SUBMISSION
NMR EXPERIMENT

Choose scenario tasks

Input data

Preprocessing

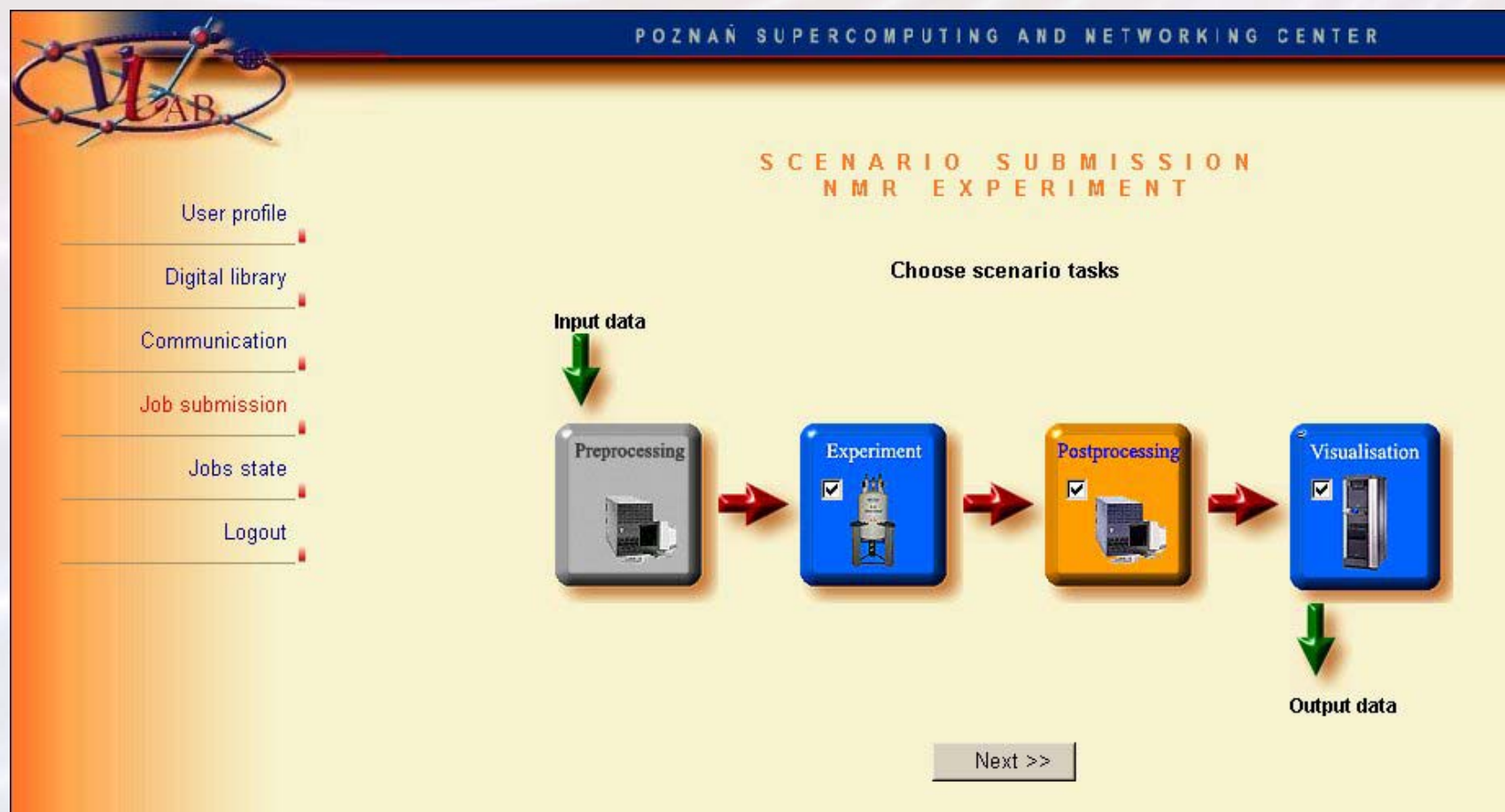
Experiment

Postprocessing

Visualisation

Output data

Next >>



Zlecenie eksperymentu (1/2)

POZNAŃ SUPERCOMPUTING AND NETWORKING CENTER

SCENARIO SUBMISSION
NMR EXPERIMENT: EXPERIMENT



User profile

Digital library

Communication

Job submission


Jobs state

Logout

| | |
|-------------------|--|
| NMR Device | <input type="text" value="ICHB: Varian 300MHz"/> |
| Experiment type | <input type="text" value="2D"/> |
| Pulse sequeention | <input type="text" value="2D : COSY"/> |
| Nucleus type | <input type="text" value="15N"/> |
| Solvent type | <input type="text" value="methanol CD3OD"/> |
| Probe type | <input type="text" value="Broadband"/> |
| Temperature | <input type="text" value="25"/> °C |

Zlecenie eksperymentu (2/2)

POZNAŃ SUPERCOMPUTING AND NETWORKING CENTER



- User profile
- Digital library
- Communication
- Job submission
- Jobs state
- Logout

Deadline DD MM YYYY
 Not specified

Experiment time reservation
From DD MM YYYY
To DD MM YYYY
 Not specified

Presence of the user 30 minutes

Presence of the operator 30 minutes

Execution profile Quickest

Execution mode Interactive

Cost 0 \$ No limits

Priority Highest

Results backup

Cancel Next >>

Definicja postprocessingu (1/2)

POZNAŃ SUPERCOMPUTING AND NETWORKING CENTER

SCENARIO SUBMISSION
NMR EXPERIMENT: POSTPROCESSING



User profile

Digital library

Communication

Job submission

Jobs state

Logout

Computing system architecture: SGI

Program: VNMR

Postprocessing data file: Browse...

Use previous processing task output data

Processing type:

- Filling zero
- Linear prediction
- Drift correction
- Numeric filtration
- Fourier transformation 2D

Definicja postprocessingu (2/2)

POZNAŃ SUPERCOMPUTING AND NETWORKING CENTER

Processing type

Use previous processing task output data

Filling zero

Linear prediction

Drift correction

Numeric filtration

Fourier transformation

Phase correction

Baseline correction

Shift point establishing

Execution profile

Execution mode

Cost \$ No limits

Priority

Results backup

Cancel Next >>

Zadanie wizualizacji (1/2)

POZNAŃ SUPERCOMPUTING AND NETWORKING CENTER

SCENARIO SUBMISSION
NMR EXPERIMENT: VISUALISATION

User profile
Digital library
Communication
Job submission
Jobs state
Logout

Experiment → Postprocessing → Visualisation

Program: VNMR

Visualisation data file: Browse...
 Use previous processing task output data

Parameters: None


Graphic mode: 1024x768

Output file format: JPG

Execution profile: Quickest

Zadanie wizualizacji (2/2)

POZNAŃ SUPERCOMPUTING AND NETWORKING CENTER




User profile
Digital library
Communication
Job submission
Jobs state
Logout

| | |
|-------------------------|--|
| Program | VNMR |
| Visualisation data file | <input type="text"/> Browse... |
| | <input checked="" type="checkbox"/> Use previous processing task output data |
| Parameters | None |
| Graphic mode | 1024x768 |
| Output file format | JPG |

| | |
|-------------------|--|
| Execution profile | Quickest |
| Execution mode | Batch |
| Cost | 0 \$ <input checked="" type="checkbox"/> No limits |
| Priority | Highest |
| Results backup | <input checked="" type="checkbox"/> |

Cancel Next >>

Wykonanie eksperymentu



POZNAŃSKIE CENTRUM SUPERKOMPUTEROWO-SIECIOWE

VNC SCREEN

- User profile
- Digital library
- Communication
- Job submission
- Jobs state
- Logout

Disconnect Options Clipboard Record Send Ctrl-Alt-Del Refresh

Vnmr

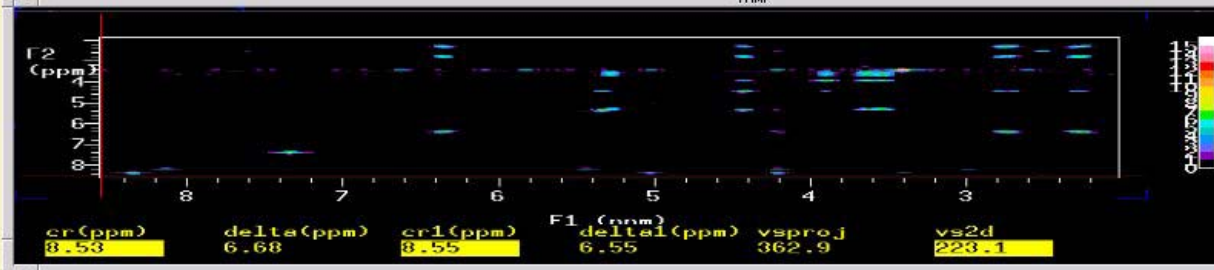
Seq: COSY Exp:1 Index: 1 sp wp

wft

Abort Acq Cancel Cmd GLIDE Main Menu Help Flip Resize

Box Part Integral Full sp wp Mark Phase Th Resets Dscale Lvl/Tlt Set Int Ref Pt

Vnmr

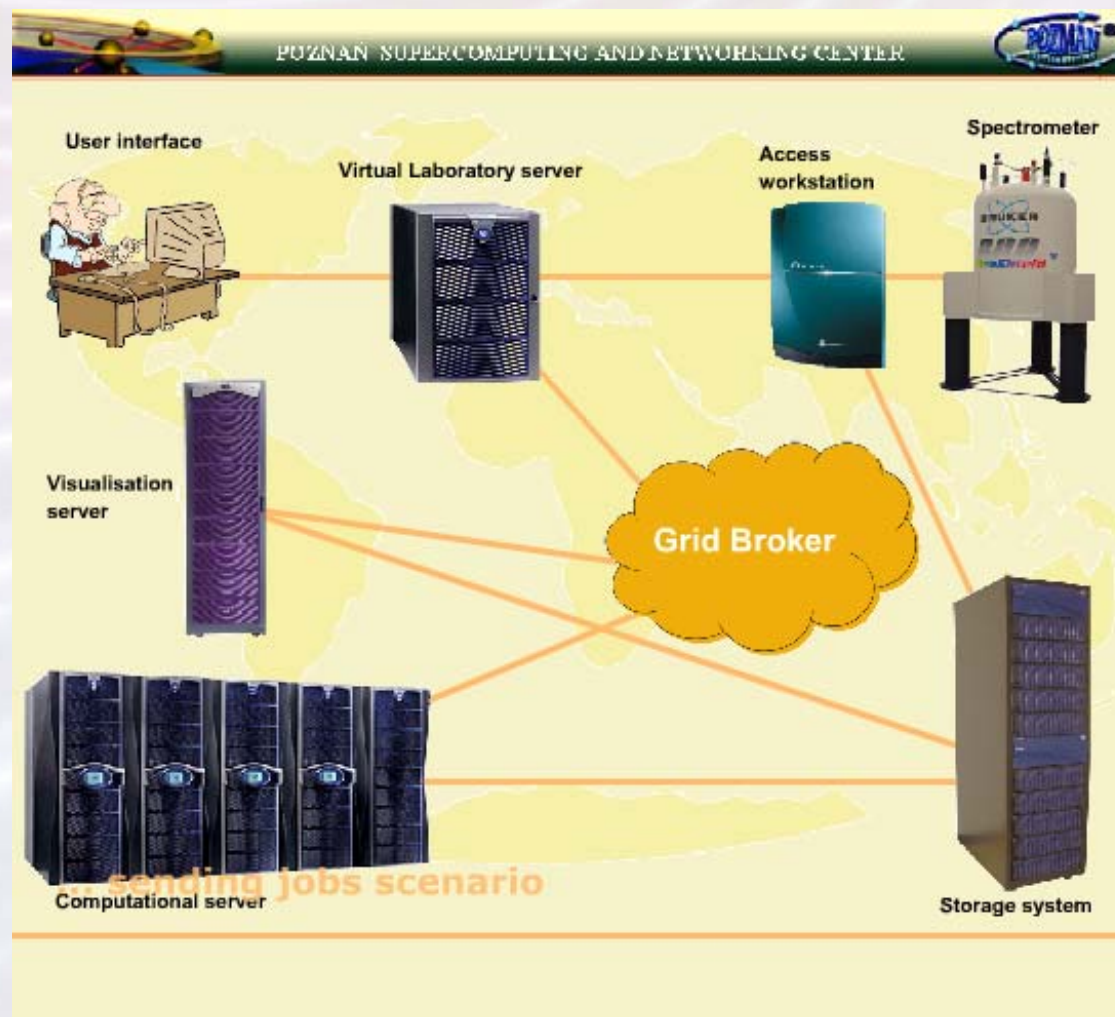


cr(ppm) delta(ppm) cr1(ppm) F1 (nmr) delta1(ppm) vsproj vs2d
 8.53 6.68 8.55 6.55 362.9 223.1

dg

| | | | | | | | |
|--------|---------|-----------|---------|---------|----|---------------|----------|
| seqfil | COSY | tn | H1 | satmode | n | sb | -0.124 |
| sw | 16501.7 | sfrq | 500.621 | satfrq | 0 | sbs | not used |
| at | 0.248 | tof | 0 | satdly | 0 | fn | 8192 |
| np | 8192 | tpwr | 55 | satpwr | 0 | 2D PROCESSING | |
| ss | 32 | pw | 13.000 | FLAGS | | sb1 | -0.008 |
| d1 | 1.000 | DECOUPLER | | hs | nn | sbs1 | not used |
| nt | 2 | dn | H1 | sspul | n | proc1 | lp |

Jak działa Laboratorium Wirtualne?



Zadania do realizacji

- Rozbudowa funkcjonalności istniejących modułów w zakresie:
 - zarządzania dynamicznymi scenariuszami pomiarowymi
 - szeregowania zadań
 - komunikacji z innymi laboratoriami
- Rozbudowa funkcjonalności interfejsu użytkownika w zakresie narzędzi do zarządzania laboratoriami
- Zwiększenie poziomu bezpieczeństwa – integracja z Centrum Autoryzacji realizowanym w ramach zadania „Zaawansowany system bezpieczeństwa”
- Zlecenie zadań obliczeniowych do Super-zarządcy
- Realizacja systemu rozliczeniowego we współpracy z Systemem Użytkowników Wirtualnych
- Dokończenie części edukacyjnej laboratorium

Pierwsze prezentacje

- Pierwsza prezentacja działającego systemu na spotkaniu projektu SGIGrid w Krakowie (7.11.2003)
- Prezentacja prototypu na SC2003 w Phoenix (15-21.11.2003)



Dziękuję za uwagę

<http://vlab.psnc.pl/>

e-mail: vlab@man.poznan.pl