



*Polska Infrastruktura  
Informatycznego Wspomagania Nauki  
w Europejskiej Przestrzeni Badawczej*

GridSpace

## **Wirtualne Laboratorium w PL-Grid: GridSpace**

**M. Bubak, B. Baliś, T. Bartyński, E. Ciepiela,  
W. Funika, T. Gubała, D. Hareźlak,  
M. Kasztelnik, J. Kocot, M. Malawski,  
J. Meizner, P. Nowakowski, and K. Rycerz**

*Akademickie Centrum Komputerowe Cyfronet AGH*



# Plan Prezentacji

- ◆ **Motywacja i cel wirtualnego laboratorium**
- ◆ **Przykładowy problem z życia naukowca wzięty**
- ◆ **Przykładowy problem – rozwiązany z pomocą GridSpace**
- ◆ **Przykładowy problem – demonstracja (film)**

# Motywacje i cel wirtualnego laboratorium

- ◆ Umożliwić naukowcom **tworzenie, uruchamianie, zarządzanie, dzielenie się oraz udostępnianie programów** (nazywanych przez nas *eksperymentami*) złożonych z etapów pisanych w różnych językach (programowania jak i domenowych), **które realizują całościowo pewną metodę naukową** prowadzącą od danych wejściowych poprzez preprocessing, symulacje obliczeniowe, analizy, postprocessing aż po wizualizację i opracowanie rezultatów
- ◆ Ułatwić (e-)naukowcom przeprowadzającym w ramach swych badań obliczeń z wykorzystywaniem zasobów centrum komputerowego:
  - ◆ Klatry komputerowe (już dostępne)
  - ◆ Pakiety oprogramowania (już dostępne, lub instalowane na bieżąco na życzenie użytkowników)
  - ◆ Inne „aktywa”, np. licencje na używanie oprogramowania
- ◆ Zwiększyć efektywność pracy naukowców i zespołów naukowych:
  - ◆ Uwolnić użytkowników od powtarzania czynności, które mogą (bez żadnych negatywnych implikacji) zostać zautomatyzowane
  - ◆ Umożliwić bardziej interaktywny sposób wykorzystania klastrów, oprogramowania itp.
  - ◆ Sprawić by raz napisany program (fragment programu) mógł być z łatwością wykorzystany w innych programach i/lub przez inne osoby w innym kontekście
- ◆ Zaoferować ogólne rozwiązanie adresowane do szerokiego zakresu domen zastosowań
- ◆ Stworzyć jedno łatwo osiągalne i kompleksowe miejsce pracy - **portal internetowy**

## Motto

- ◆ Sprawić, by aplikacje naukowe było tak łatwo dostępne jak strony WWW...
- ◆ by uruchamianie aplikacji naukowych było tak proste jak używanie stron WWW...
- ◆ by tworzenie aplikacji naukowych było tak proste jak tworzenie stron WWW...
- ◆ ...niezależnie od tego jak ogromna i złożona jest infrastruktura komputerowa je uruchamiająca.

# Przykładowy problem z życia naukowca wzięty

- ◆ Zespół naukowy z Wydziału Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego
- ◆ Chciano zastosować metodę, którą znaleziono opublikowaną w wiodącym journalu, ale poza opisem brak programu, który by ją realizował
- ◆ Setki obrazów SEM do przetworzenia:
  - ◆ Identyfikacja porów w nanomateriałach
  - ◆ Odrzucenie szumów i nieistotnych porów
  - ◆ Obliczenie stopnia regularności struktury (im większy tym lepszy)
  - ◆ Zapis wartości różnych miar regularności
  - ◆ Wizualizacja metryk na wykresach i diagramach
  - ◆ Analiza „na oko” i wybór podzbioru interesujących wartości
  - ◆ Bardziej dogłębna analiza wybranego podzbioru
- ◆ Jeden komputer PC, brak odpowiedniego oprogramowania
- ◆ Zespół 3 naukowców, kilku studentów do pomocy
- ◆ Zwrócili się o pomoc do ACK Cyfronet

# Przykładowy problem – rozwiązany przy pomocy GridSpace

- ◆ Wybór odpowiednich języków/narzędzi do odpowiednich zadań (języki *general-purpose* vs *domain-specific*) które już są dostępne na klastrze Zeus w Cyfronecie:
  - ◆ Identyfikacja porów w nanomateriałach – JNano
  - ◆ Odrzucenie szumów i nieistotnych porów – Bash/AWK
  - ◆ Obliczenie stopnia regularności struktury – Mathematica
  - ◆ Zapis wartości różnych miar regularności – Mathematica
  - ◆ Wizualizacja metryk na wykresach i diagramach – GnuPlot
  - ◆ Analiza „na oko” i wybór podzbioru interesujących wartości – interakcja z człowiekiem
  - ◆ Ekstrakcja wybranych wartości – Bash
  - ◆ Bardziej dogłębna analiza wybranego podzbioru– GnuPlot
- ◆ Wejście na GridSpace2 Experiment Workbench (portal) i wybór Zeusa jako miejsce gdzie eksperyment zostanie uruchomiony (*Experiment Host*)
  - ◆ Pisanie, uruchamianie, udoskonalanie, uruchamianie itd. kolejnych fragmentów eksperymentu w sposób eksploracyjny aż do osiągnięcia zadowalającego efektu
  - ◆ Zapisywanie eksperymentu jako zwykłego pojedynczego pliku i udostępnianie go zespołowi
  - ◆ Eksperyment ma przypisany adres URL – wystarczy go przesłać, a adresat będzie mógł go uruchomić



# Przykładowy problem – demonstracja (film)



## Zapraszamy do współpracy!

- ◆ Stań się użytkownikiem PL-Grid
  - ◆ <https://portal.plgrid.pl>
- ◆ Spróbuj demo GridSpace2 (dostępne dla użytkowników PL-Grid)
  - ◆ <https://gs2.cyfronet.pl>
- ◆ Użyj GridSpace2 jako oficjalnej usługi PL-Grid (dostępne dla użytkowników PL-Grid)
  - ◆ <https://gs2.plgrid.pl>
- ◆ Zasięgnij pełnej informacji o technologii GridSpace
  - ◆ <http://dice.cyfronet.pl/gridspace>
- ◆ Dowiedz się więcej o naszym zespole, jego dokonaniach, aktualnych przedsięwzięciach i planów na przyszłość
  - ◆ <http://dice.cyfronet.pl>
- ◆ Oferujemy pomoc w nauce GridSpace i zastosowywania go do konkretnych problemów