



E-SCIENCE.PL
SPIN-LAB

E-SCIENCE.PL – usługi dla grup badawczych

Mateusz Tykierko



**INNOWACYJNA
GOSPODARKA**
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI



E-SCIENCE.PL
SPIN-LAB

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ
ROZWOJU REGIONALNEGO





WCSS – partner technologiczny środowiska naukowego od 1994r.

- **Wrocławskie Centrum Sieciowo-Superkomputerowe to jednostka organizacyjna Politechniki Wrocławskiej działająca na rzecz środowiska naukowego. Główne zadania:**
 - Rozwój i utrzymanie infrastruktury obliczeniowej (klastry, chmury, gridy obliczeniowej) jak i usługowej (aplikacje www, archiwizacja, serwery wirtualne, kolokacja) na rzecz polskiego środowiska naukowego (nauki polskiej),
 - Prowadzenie prac badawczo-rozwojowych w zakresie infrastruktury obliczeniowych i usługowych oraz aplikacji w tym naukowych.
 - Prowadzenie zespołu bezpieczeństwa WCSS CSIRT
 - Rozwój i utrzymanie WASK (Wrocławskiej Akademickiej Sieci Komputerowej),
- **Rozwiązania opracowywane w WCSS są wdrażane w celu zapewnienia najwyższej jakości usług obliczeniowych, składowania danych i podniesienia poziomu bezpieczeństwa infrastruktury.**



Konsorcja

WCSS nie jest anonimowa organizacja!

Świadczymy usługi dla środowiska naukowego od 20lat!

WCSS jest członkiem Konsorcjum Pionier i PL-Grid

Pionier jest formalnym porozumieniem zawartym pomiędzy wiodącymi jednostkami MAN i KDM. Celem Konsorcjum jest budowa sieci optycznej oraz usług. Jednostki znajdują się w większych miastach akademickich

Konsorcjum PL-Grid zawiązane zostało przez jednostki prowadzące działy KDM (Komputery Dużej Mocy). Ma na celu budowę i utrzymanie infrastruktury obliczeniowej na rzecz nauki. Członkami są: Cyfronet, ICM, TASK, PCSS, WCSS



Usługi WCSS

- Szerokopasmowy dostęp do sieci
- LIMS/ELN
- Usługi e-science.pl
- Usługi obliczeniowe
- Usługi programistyczne
- Usługi składowania danych
- Audyty bezpieczeństwa
- Poczta elektroniczna
- Domeny, Hosting WWW
- Kolokacja sprzętu
- Serwery wirtualne i dedykowane
- Biblioteka Cyfrowa
- Centrum certyfikacji
- Usługi strumieniowania audio-video
- Szkolenia
- Doradztwo organizacyjne
- Contact center/Call center



Dlaczego nie Google, DropBox,...

- Statutowym zadaniem WCSS jest wspieranie nauki - nie zysk
- Brak opłat, reklam
- Infrastruktura zlokalizowana w Polsce
- Lepiej uregulowane zagadnienia prawne, prywatność danych, własność danych
- Pomoc techniczna w języku polskim
- Dostosowanie rozwiązań do potrzeb środowiska naukowego
- Integracja z innymi infrastrukturami naukowym np. obliczeniowymi, usługowymi



Koszt korzystania z usług

- Usługi dla społeczności naukowej udostępniane są nieodpłatnie
- Wymagane jest jedynie zamieszczanie podziękowań w opracowaniach naukowych oraz udostępnienie informacji statystycznej (liczba realizowanych projektów i ich tytuły)
- WCSS nie zlikwidował dotychczas żadnej usługi z której korzystali użytkownicy



Infrastruktura informatyczna nauki

- **PL-Grid**
 - Grid obliczeniowy
 - Usługi dziedzinowe
- **Platon**
 - U1 - Usługi wideokonferencji
 - U2 - Usługi eduroam
 - U3 - Usługi kampusowe
 - U4 - Usługi powszechnej archiwizacji
 - U5 - Usługi naukowej interaktywnej telewizji HD
- **MAN-HA**
 - Pionier ID
 - Rozwój usług chmurowych
- **E-SCIENCE.PL**



Zasoby KDM WCSS

- Klaster Bem
 - 22,5 tys. rdzeni obliczeniowych
 - 860 TFLOPS
 - TOP500 – 127 miejsce
 - Graph500 – 45 miejsce
- Przestrzeń składowania 3 PB dyski; 5,5 PB taśmy,

Statystyki obliczeń użytkowników w 2015 r.:

- 1,3 mln zadań obliczeniowych,
- 6,7 mln godzin czasu rzeczywistego,
- 27,3 mln godzin czasu procesora.



Szkolenia

- dla początkujących użytkowników WCSS
- indywidualne konsultacje
- szkolenia z pakietów oprogramowania naukowego
- podstawy programowania (Python)
- system linux, bash
- kurs w ramach studium doktoranckiego PWr
- praktyki studenckie



Oprogramowanie

Abaqus · ABINIT · AutoDock · Biovia [Materials Studio, Discovery Studio] · ADF · Amber · ANSYS [ANSYS CFD: Fluent, CFX, ICEM; Mechanical] · Cfour · Comsol · CP2K · CPMD · CRYSTAL09 · Dalton · FDS-SMV · GAMESS · Gaussian · Gromacs · IDL · Lumerical [FDTD, MODE] · Maple · Mathcad · Mathematica · Matlab · Molcas · Molden · Molpro · MOPAC · NAMD · NBO · NWChem · OpenFOAM · Orca · R · Rosetta · SIESTA · Tinker · TURBOMOLE · VMD · WIEN2k,

Kompilatory (Intel, Portland, GNU) biblioteki



Oprogramowanie

- Uruchomianie aplikacji wsadowo (zasoby obliczeniowe)
- Uruchamianie aplikacji interaktywnie (serwer terminali, maszyna wirtualna, węzeł dostępowy)
- Dostęp do licencji i pakietów instalacyjnych
- Utrzymywanie serwerów licencji



E-SCIENCE.PL

E-SCIENCE.PL to idea otwartej nauki

- **Przestrzeń szybkiego udostępniania i przetwarzania danych**
- **Bezpieczeństwo przepływu danych**
- **Zintegrowana, specjalizowana platforma informatyczna**
- **Wzmocnienie potencjału jednostek naukowych**
- **Interdyscyplinarna współpraca**
- **Źródło informacji i miejsce rozwoju wiedzy**



Usługi i aplikacje

- E-TEAM
- E-DRIVE
- E-DOCS
- E-REPO
- E-LAB
- UAD – uniwersalny akwizytor danych



Pakiet podstawowy

W ramach pakietu podstawowego oferujemy usługi:

- E-DRIVE,
- E-REPO,
- E-DOCS,
- E-TEAM,
- E-LAB (osobisty dziennik laboratoryjny ELN Online).



Pakiet premium

Na potrzeby jednostek naukowych oferujemy:

- **personalizację i rozbudowę usług zgodnie z potrzebami instytucji,**
- **wdrożenie systemów zarządzania laboratoriami LIMS Online i ELN Online dla zespołów badawczych.**
- **instalację i integrację z infrastrukturą jednostki**
- **pomoc techniczną z gwarantowanym czasem odpowiedzi.**



Zespół w E-SCIENCE.PL

- **Zespół - formalny lub nieformalny zbiór osób współpracujących ze sobą.**
- **Kierownik zespołu – musi być człowiekiem nauki, zakłada zespół, zarządza użytkownikami i usługami, nadaje uprawnienia, tworzy grupy**
- **Członkowie zespołu – osoby współpracujące z zespołem, które zarejestrują się i zostaną zaakceptowane przez kierownika**



Procedura zakładania zespołu

1. Rejestracja zespołu na stronie <https://rejestracja.e-science.pl/>.
Potwierdzenie email.
2. Weryfikacja danych rejestracyjnych z formularza odbywa się m.in. telefonicznie. (do 3 dni roboczych)
3. Powiadomienie email o zakończeniu procedury. Usługi gotowe do użycia.



Rejestracja użytkownika

1. Członkowie zespołu rejestrują się poprzez stronę www.
2. Kierownik otrzymuje email. Akceptuje lub odrzuca użytkownika poprzez interfejs www
3. Użytkownik otrzymuje email o zakończonej procedurze rejestracyjnej

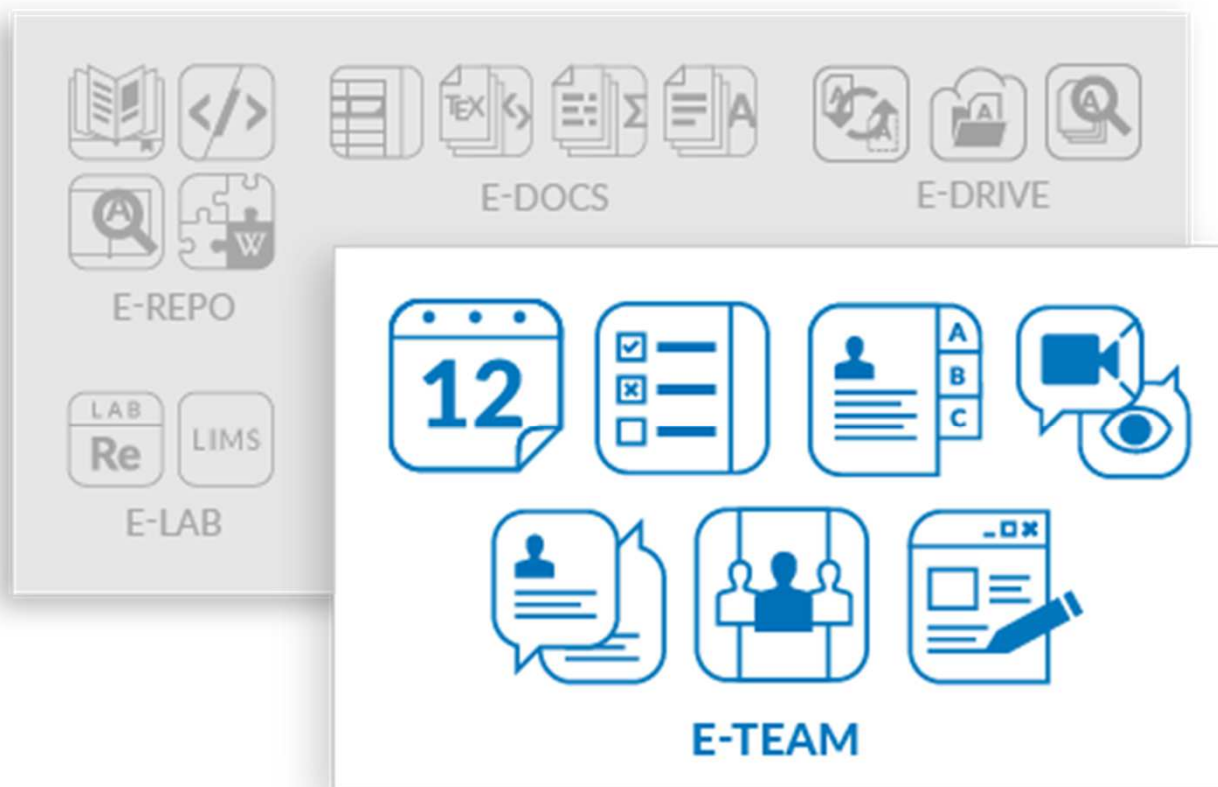


Przestrzeń nazw

- Każdy użytkownik otrzymuje adres pocztowy login@e-science.pl Poczta jest przekazywana na adres podany podczas rejestracji
- Przestrzeń nazw DNS dla komunikacji email oraz serwisów
nazwa_zespołu.e-science.pl



E-TEAM





E-TEAM

- Zarządzanie zespołem
- Kontakty
- Kalendarz
- Wideokonferencje
- Ankiety
- Listy dyskusyjne
- CMS

**Jeden login i hasło do wszystkich usług.
Mechanizm Single Sign On.**



Zarządzanie zespołem

- **Zarządzanie użytkownikami**
 - Akceptacja, blokowanie
 - Wysyłanie zaproszeń do rejestracji
 - Dodawanie użytkowników z innych zespołów
- **Zarządzanie grupami**
 - Tworzenie grup
 - Delegacja uprawnień na liderów
- **Listy dyskusyjne**
 - Zakładanie list
 - Zarządzanie użytkownikami



Mechanizm grup

Grupy umożliwiają samoorganizację zespołu oraz delegacja uprawnień na liderów

- **Podkatalog dostępny tylko dla członków grupy**
- **Zapraszanie grupy na wydarzenia lub współdzielenie z grupą dokumentów**
- **Adres email grupy**
nazwa_grupy@nazwa_zespołu.e-science.pl



Kontakty

- **Protokół dostępu CardDav**
- **Interfejs www**
- **Osobiste, Zespołowe i Grupowe książki adresowe**
- **Współdzielenie w ramach zespołu lub publicznie**
- **Automatyczna subskrypcja**
- **Synchronizacja z klientami pocztowymi i urządzeniami mobilnymi**
 - MS Outlook (CalDav Synchronizer)
 - Thudnerbird (Lightning)
 - Android (Davdroid)
 - iOS (wsparcie natywne)
 - Inne wspierające cardDav



Kontakty

- Podczas rejestracji nowi użytkownicy dopisywani do książki zespołu
- Kontakty do grup w ramach zespołu
- Integracja z usługami platformy
 - Zarządzanie zespołem
 - Współdzielenie plików
 - Zapraszanie na wideokonferencje, wydarzenia
 - Współdzielenie notatników, arkuszy kalkulacyjnych, notatników matematycznych, dokumentów Latex
 - LIMS Online



Kalendarz

- Protokół dostępu CalDav, formaty xml, ics,
- Interfejs www
- Współdzielenie w ramach zespołu lub publicznie
- Automatyczna subskrypcja
- Synchronizacja z klientami pocztowymi i urządzeniami mobilnymi
 - MS Outlook (CalDav Synchronizer)
 - Thudnerbird (Lightning)
 - Android (Davdroid)
 - iOS (wsparcie natywne)
 - Inne wspierające caldav
- Rezerwacja zasobów (rzutnik, sala, ...)



Kalendarz

- Rezerwacja zasobów (rzutnik, sala, ...)
- Zapraszanie na spotkania grup albo zespołu
- Integracja z usługami platformy
 - LIMS Online
 - Wideokonferencje
 - Kontakty



Wideokonferencje

- Prosty formularz tworzenia konferencji
- Konferencje prywatne, chronione albo publiczne
- Powiadomienie o terminach i zmianach
- Wsparcie dla wszystkich systemów operacyjnych.
- Transmisja audio i wideo
- Współdzielenie dokumentów, aplikacji, tablicy
- Tworzenie notatek, ankiet, adnotacji
- Wymiana plików
- Zdalne sterowania aplikacją
- Nagrywanie
- Udostępnianie nagrań
- Przygotowanie materiału przed spotkaniem
- Statystyki uczestnictwa



Ankiety

- **Dwa typy ankiet**
 - Pytanie jedno, wielokrotnego wyboru i otwarte
 - Ustalenie terminu
- **Dostęp anonimowy, publiczny (konieczność podania emaila) albo chroniony (tylko użytkownicy platformy)**
- **Automatyczne rozsyłanie zaproszeń**
- **Kopiowanie, dodawanie uczestników w trakcie trwania ankiety**
- **Zapraszanie grup albo zespołu**
- **Wizualizacja wyników**
- **Eksport wyników**



CMS

- **Predefiniowany wygląd strony i kolorystyka**
- **Przygotowane formularze do wprowadzania informacji**
- **Słowniki słów kluczowych, aparatury, kategorii naukowych**
- **Automatyczna adnotacja mikro danymi – pozwala wyszukiwarkom zrozumieć dane**
- **Agregacja oferty, laboratoriów i sprzętu zespołów na portalu E-SCIENCE.PL**

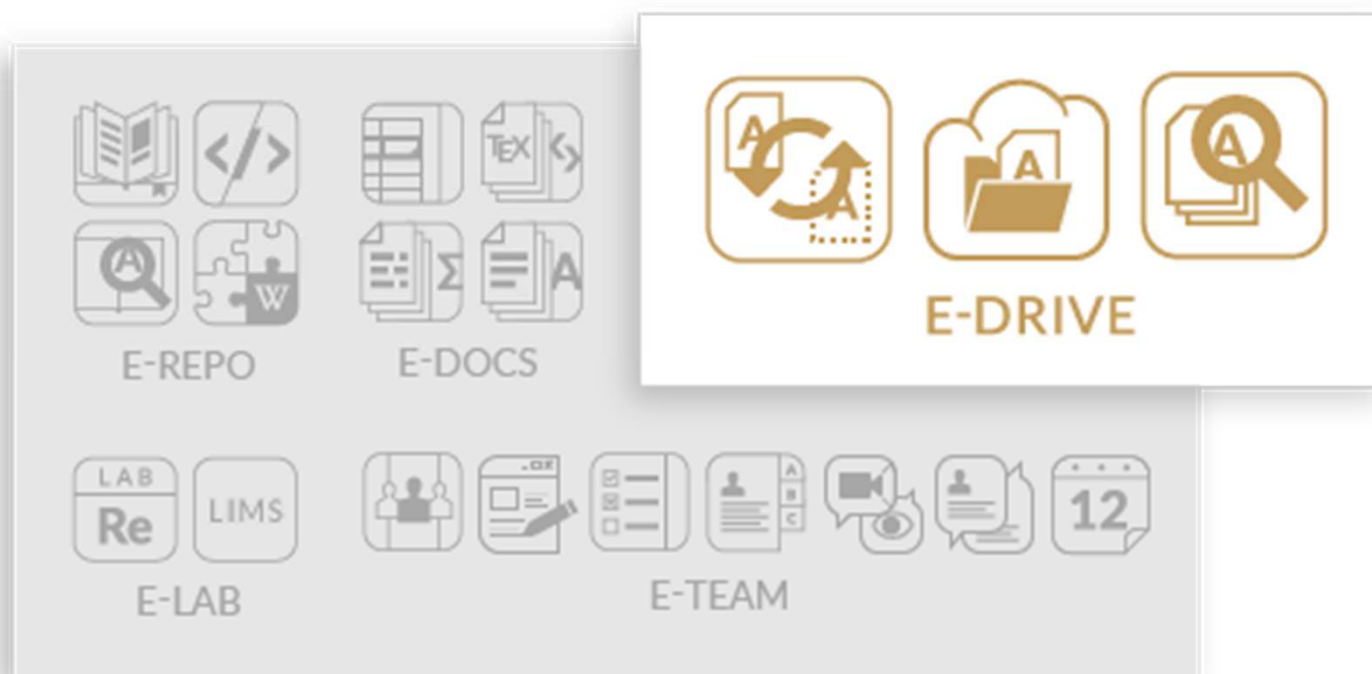


CMS

- Informacje o zespole (personel, procedury badawcze, publikacje, projekty)
- Laboratoria
- Sprzęt
- Oferta
- Wizytówka



E-DRIVE





E-DRIVE

- Dysk sieciowy
- Wyszukiwarka
- Synchronizacja



Cechy rozwiązania

- delegacja zarządzanie uprawnieniami w ramach zespołu
- wsparcie dla wiodących systemów operacyjnych i mobilnych
- dostęp z systemów zarządzania laboratorium
- dostęp z systemów obliczeniowych
- indeksacja zawartości
- mechanizmy współdzielenia
- prosta struktura katalogów



Aspekty techniczne

- system plików per zespół
- kontrola dostępu oparta na ACL
- protokoły sieciowe sftp, cfis, nfs, https
- odzyskiwanie skasowanych plików lub poprzednich wersji
- integracja z systemami Windows, Linux, MacOS
- migracja danych
- wydajność 1,5 GB/s



Struktura katalogów

- **Personal** – katalogi osobiste użytkowników. Dostęp wyłącznie dla właściciela.
- **Groups** – katalogi grup w ramach zespołu. Dostęp wyłącznie dla członków danej grupy.
- **Team** – katalog dostępny dla całego zespołu.
- **Users** – katalogi dla mechanizmów udostępniania.



Interfejs WWW

- Listowanie zawartości archiwum
- Udostępniania plików członkom zespołu
- Publiczne udostępnianie plików z ograniczeniem czasowym
- Listowanie, rozpakowywanie archiwów
- Operacje na wielu plikach
- Menu szybkiego dostępu



upload.e-science.pl

- **Dowolna osoba spoza platformy może udostępnić pliki**
- **Pliki widoczne w strukturze katalogowej użytkownika**
- **Informacja emailem o otrzymanych plikach**
- **Uzupełnienie formularza poprzez spreparowany link**



Wyszukiwarka

- respektowanie praw dostępu (ACL) – tylko pliki, do których uprawniony jest użytkownik, są uwzględnione w wynikach
- Indeksacja metadanych
- Indeksacja zawartości popularnych formatów (pdf,doc,xls,ppt)
- Indeksacja wybranych formatów naukowych



Wyszukiwarka

- Interfejs www
- zapytanie proste i złożone
- wyszukiwanie po zakresie
- zgodność ze standardem opensearch 1.1
- Integracja z mechanizmami wyszukiwania w systemie Windows
- Integracja z przeglądarkami oraz klientami mobilnymi
- format wyników html, xml, atom, rss, json



Synchronizacja i backup

- Mechanizmy wbudowane w systemy operacyjne
- Oprogramowanie korzystające z jednego z dostępnych protokołów dostępu np. always sync, duplicati, rsync itd.
- Usługa sync.e-science.pl

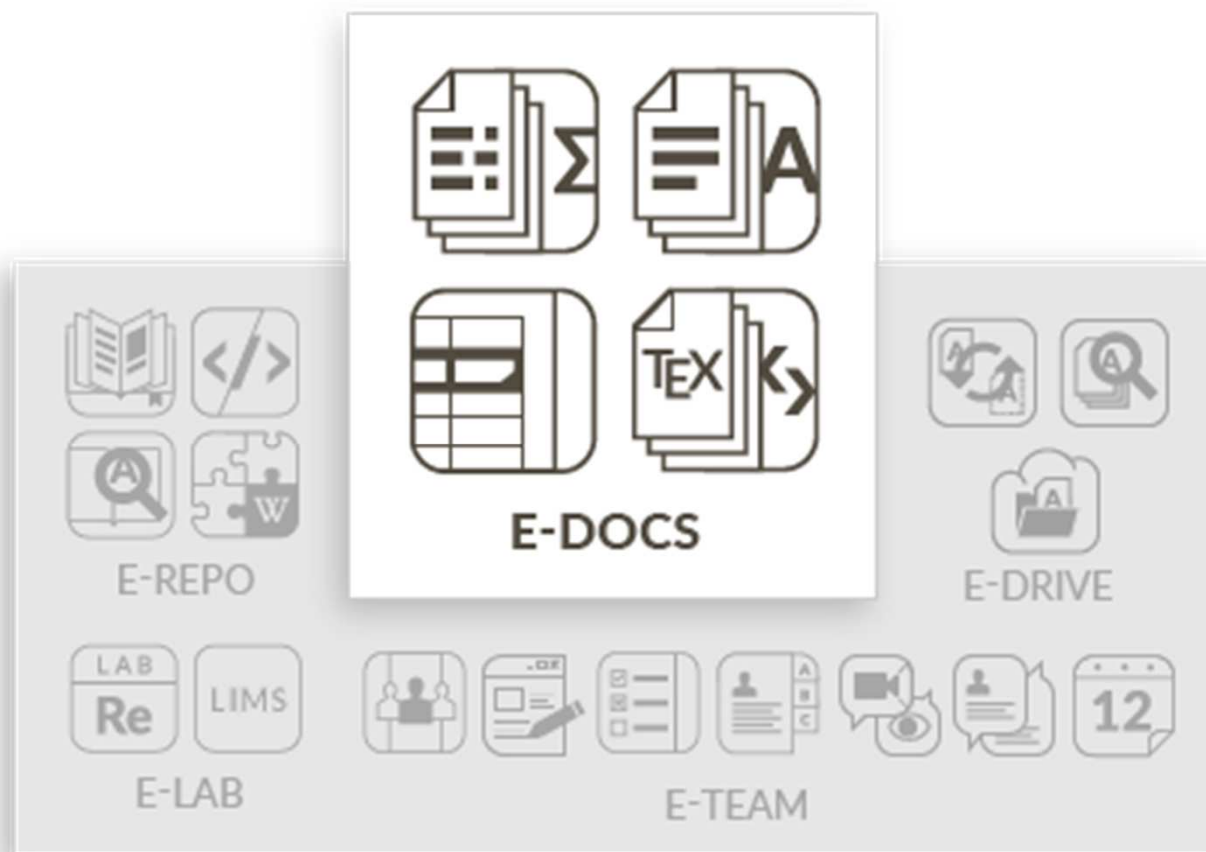


sync.e-science.pl

- **Wsparcie dla wiodących systemów operacyjnych i mobilnych**
- **Konieczność instalacji klienta**
- **Ograniczenie przestrzeni do 2GB**
- **Niskie zapotrzebowanie na łącze**



E-DOCS





E-DOCS

- Notatnik tekstowy
- Notatnik matematyczny
- Arkusz kalkulacyjny
- Edytor Latex



E-DOCS - komponenty

- Notatnik elektroniczny
- Notatnik matematyczny
Arkusz kalkulacyjny
- Menadżer projektów Latex

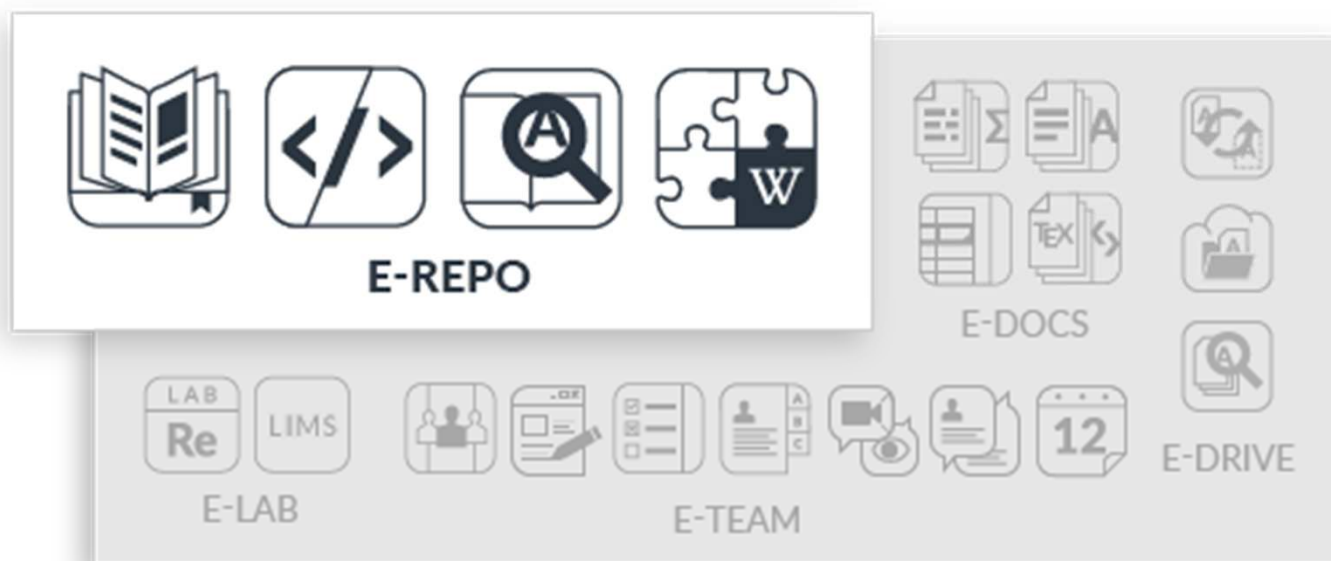


E-DOCS - funkcje

- Jednoczesna praca kilku osób nad dokumentem
- Grupowanie dokumentów w foldery
- Udostępnienie z prawem odczyt/zapis dla pojedynczych użytkowników oraz grup
- Udostępnianie (anonimowe) dla osób spoza zespołu z ograniczeniem czasowym



E-REPO





E-REPO

- Repozytorium cyfrowe
- Repozytorium kodu (git)
- Menadżer bibliografii
- Media Wiki

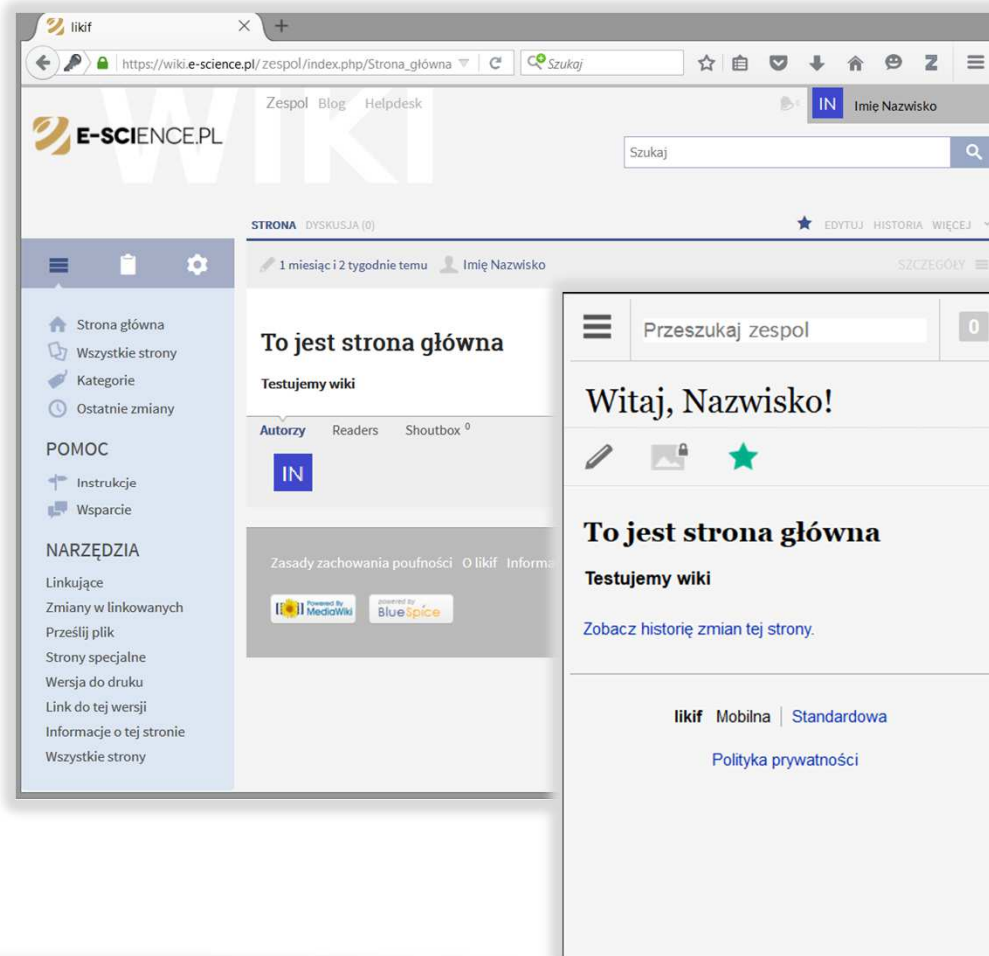


MediaWiki – ogólnie



<https://wiki.e-science.pl>

- Aplikacja webowa
- Funkcje
 - współtworzenie, gromadzenie i współdzielenie informacji oraz wiedzy
- Architektura
 - MediaWiki
 - Centralną Usługą Uwierzytelnienia (CAS)
 - Zasoby platformy
- Zastosowanie
 - prowadzenie dokumentacji projektowej
 - składowanie i archiwizacja danych wraz z opisami
 - dystrybucja wiadomości



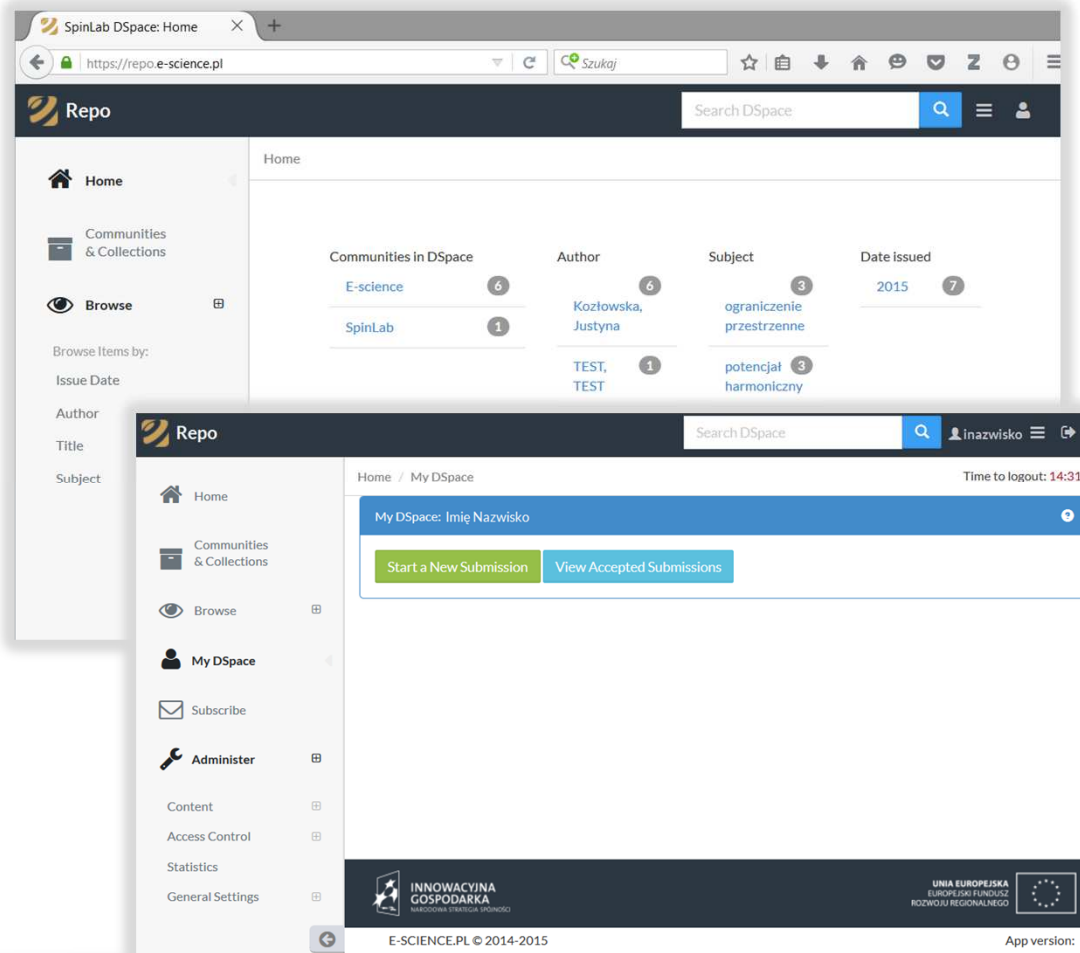


Repozytorium cyfrowe - ogólnie



<https://repo.e-science.pl/>

- **Aplikacja webowa**
 - dostęp otwarty i chroniony
- **Funkcje**
 - zarządzanie zasobami cyfrowymi (publikowanie, wyszukiwanie, przeglądanie)
 - długoterminowe użytkowanie
 - obsługa metadanych i danych
 - **API (publikowanie, zakładanie społeczności, tworzenie użytkowników)**
 - Uprawnieniami, strumienie pracy
- **Architektura**
 - DSpace v.5
 - LDAP
 - Zasoby platformy
- **Zastosowanie**
 - upowszechnianie dorobku naukowego pracowników,
 - promowanie badań naukowych,
 - tworzenie archiwum własnych dokumentów elektronicznych



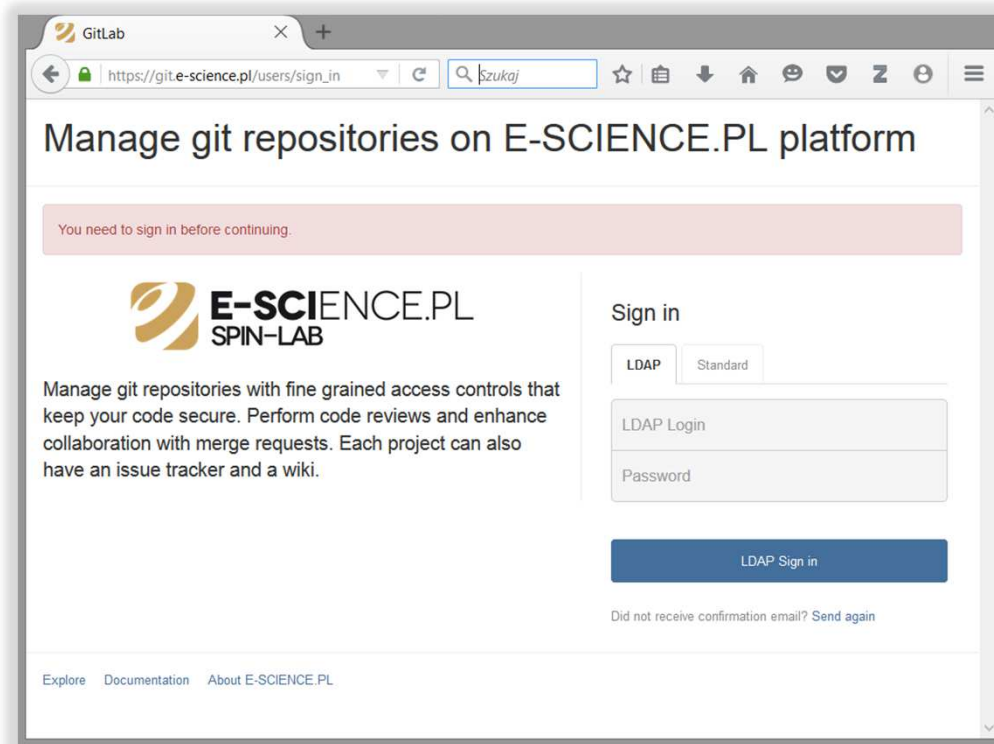


Repozytorium kodu - ogólnie



<https://git.e-science.pl>

- Aplikacja webowa i usługa sieciowa
- Funkcje
 - tworzenie i utrzymanie repozytoriów kodu GIT
 - zarządzanie uprawnieniami
- Architektura
 - GitLab 7.4.5
 - LDAP
 - Zasoby platformy
- Zastosowanie
 - wersjonowanie kodu źródłowego (C, C++, Mathematica, Matlab, LabVIEW)
 - wersjonowanie tekstów publikacji naukowych
 - archiwizacja pomiarów

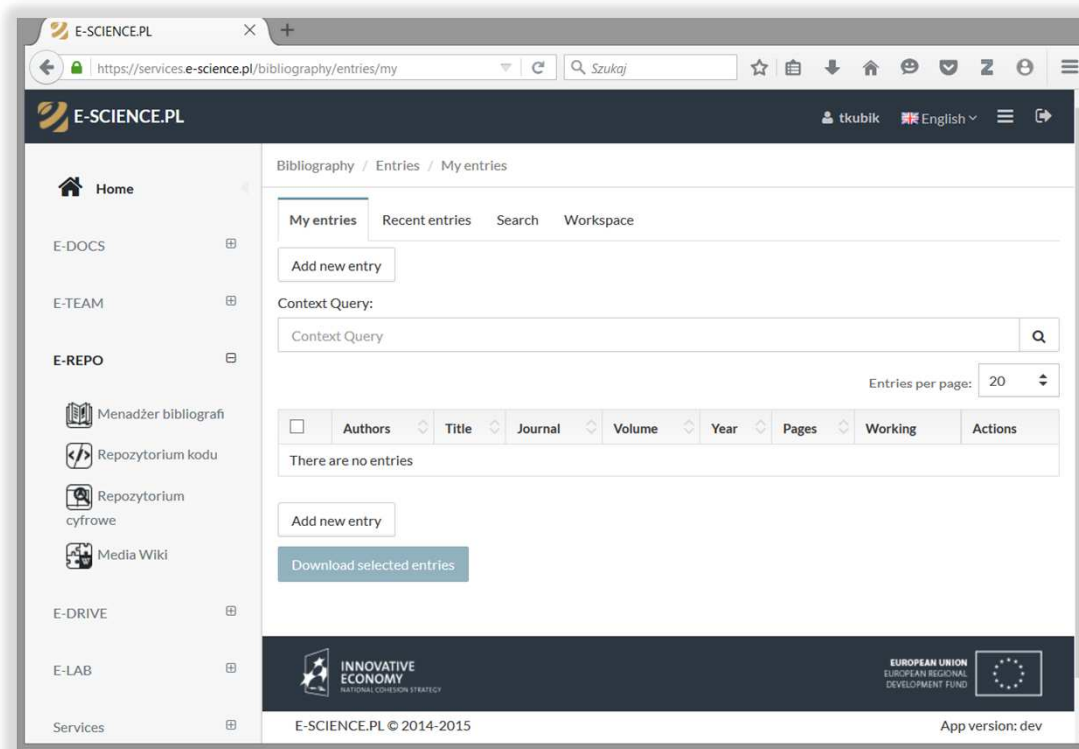




Menadżer bibliografii - ogólnie

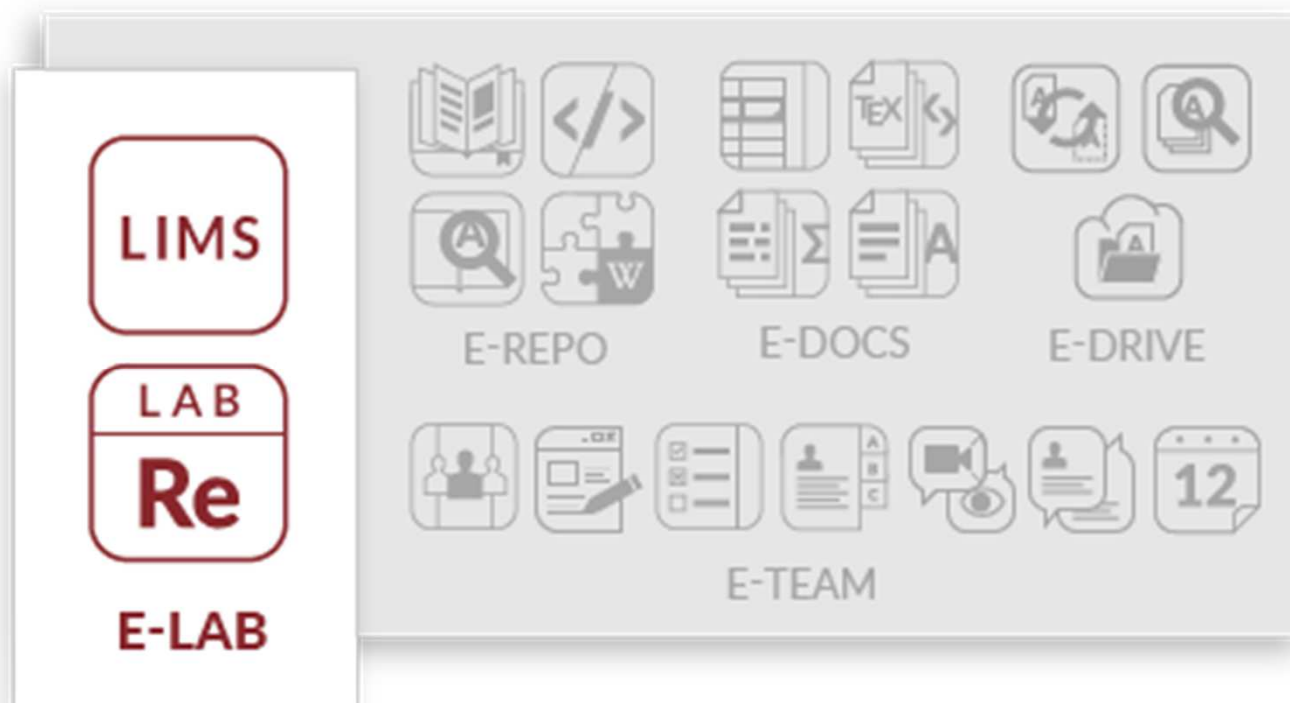


- Aplikacja webowa
- Funkcje
 - Zarządzanie bibliografią
 - Pozyskiwanie danych tematycznych ze stron internetowych
 - Import i eksport danych bibliograficznych z/do wielu formatów
 - Formatowanie cytowań
- Architektura
 - Rozwiązanie własne
 - Dołączane do usług dedykowanych
- Zastosowanie
 - gromadzenie i współdzielenie danych o dorobku naukowym
 - wiązanie danych bibliograficznych z danymi laboratoryjnymi
 - dystrybucja wiadomości
 - współdzielenie informacji
 - redakcja naukowych prac





E-LAB



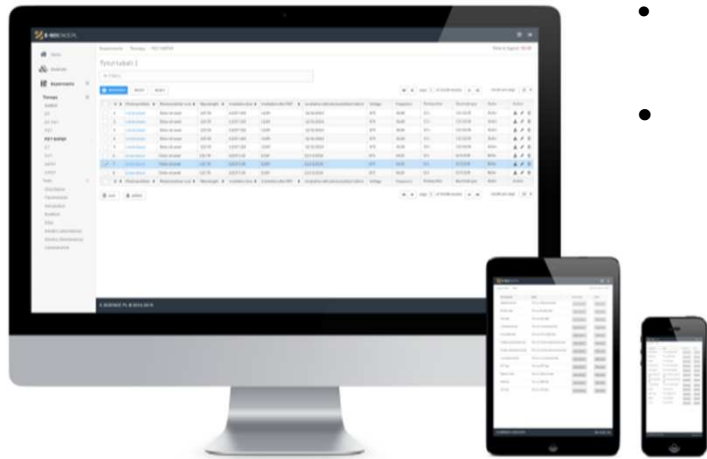


E-LAB

- ELN Online
- LIMS Online



LIMS Online



- LIMS Online to zintegrowany system informatyczny wspomagający zarządzanie laboratoriami,
- **LIMS Online wspomaga pracę naukową:**
 - Dbą o powtarzalność procedur badawczych
 - Dbą o jednoznaczny i ustandaryzowany sposób opisu danych,
 - Tworzy i udostępnia wewnętrznie repozytorium wyników badań/eksperymentów,
 - Umożliwia współdzielenie wyników badań pomiędzy naukowcami zgodnie z życzeniem naukowca,
 - Dostarcza narzędzia do współpracy w grupach naukowych/projektowych,
 - Zapewnia pełną identyfikację badań i materiału badawczego,
 - Dostarcza najwyższe standardy bezpieczeństwa i archiwizacji danych,
 - Daje możliwość zwiększenia atrakcyjności i konkurencyjności naukowej.



LIMS Online. Korzyści

- Monitorowanie aktywności laboratorium w tym :
 - nadzór nad realizacją zleceń, umów
 - nadzór nad wykorzystaniem aparatury
 - nadzór nad zużyciem materiałów
 - nadzór nad kosztami pracy laboratorium
- Monitorowanie pracy personelu.
- Stały dostęp do informacji. Dokumentacja działań.
- Raportowanie wewnętrzne i zewnętrzne.
- Budowa standardów, rozwój organizacyjny.
- Wymagania rynku.



ELN Online

- tworzenie dzienników laboratoryjnych
- dodawanie wpisów i komentarzy
- wpis może dotyczyć dowolnego obiektu z bazy danych
- możliwość linkowania wpisów bibliograficznych i załączników
- wpis może być tylko komentowany, nie można go edytować (dzięki czemu może stanowić swego rodzaju dowód)
- możliwość dodawania kolorowych wstążek
- mechanizm filtracji i wyszukiwania



LIMS Online

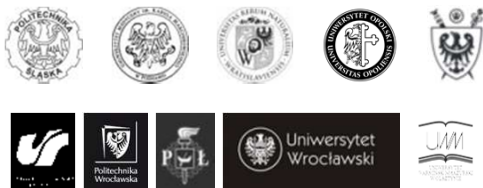
- zarządzanie stanem magazynowym
- zarządzanie personelem (urlopy, delegacje itp.)
- zarządzanie projektami i zadaniami w laboratorium badawczym
- prowadzenie dziennika syntez
- generowanie raportów na podstawie szablonów latex
- zarządzanie czasem rezerwacji urządzeń w laboratorium (np. urządzeń pomiarowych i badawczych)
- wyszukiwanie pomiarów
- zarządzanie dokumentacją (bibliografią, dokumentacją techniczną czy pomiarową)
- zarządzanie kontaktami zewnętrznymi (np. klientami i instytucjami)
- pełna możliwość zarządzania uprawnieniami i tworzenia grup uprawnień
- zintegrowany dziennik laboratoryjny
- konfigurowalny pulpit (zadania do realizacji, podgląd kalendarzy, statystyki, komunikacja z zespołem)



Aktualne wdrożenia SPIN-LAB



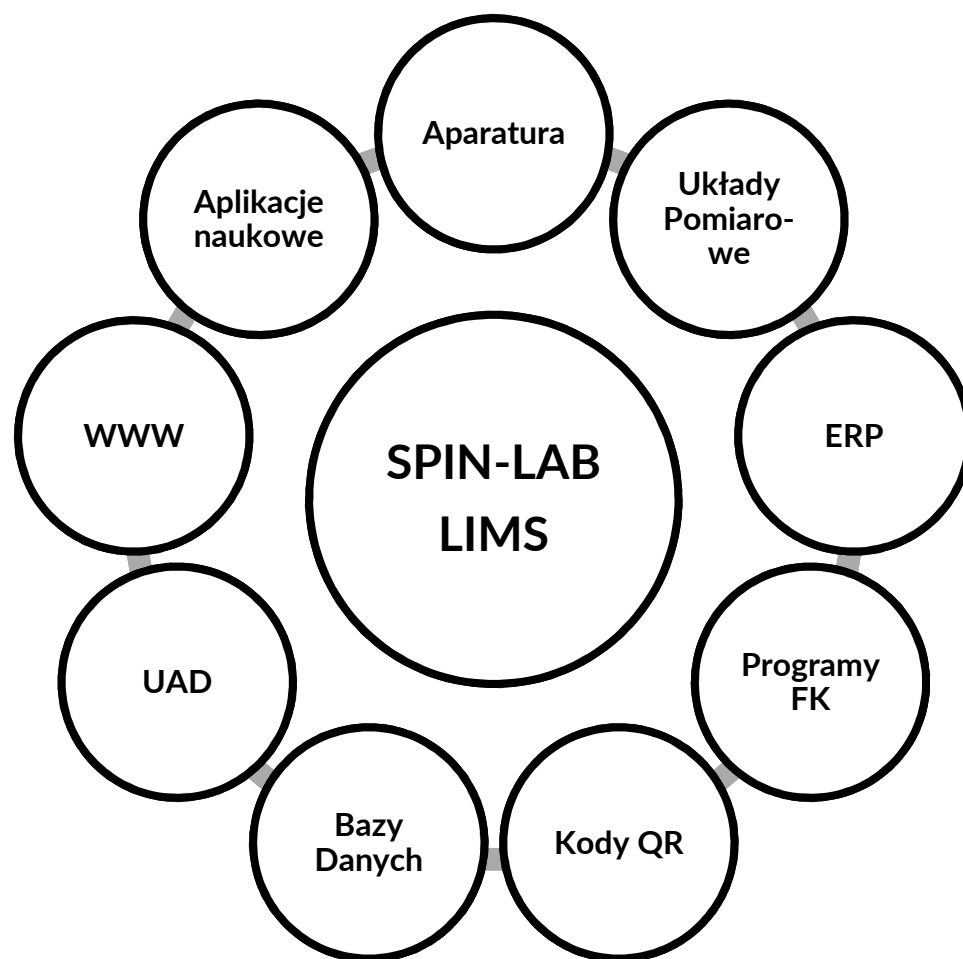
SPIN-LAB
listopad 2014r.



- Politechnika Wrocławska
- Politechnika Łódzka
- Politechnika Śląska
- Uniwersytet Wrocławski
- Uniwersytet Medyczny we Wrocławiu,
- Uniwersytet Warmińsko-Mazurski w Olsztynie
- Uniwersytet Śląski w Katowicach
- Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu
- Uniwersytet Medyczny we Wrocławiu
- Uniwersytet Medyczny w Poznaniu
- Uniwersytet Opolski
- Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN
- Instytut Immunologii i Terapii Doświadczalnej PAN
- Międzynarodowe Laboratorium Silnych Pól Magnetycznych i Niskich Temperatur PAN
- Centrum Badań Kosmicznych PAN
- Instytut Fizyki Molekularnej PAN
- Instytut Elektrotechniki Oddział Wrocławski



Integracja SPIN-LAB LIMS



**Szerokie
możliwości
integracji
SPIN-LAB
LIMS.**



Dziękuję za uwagę

Mateusz Tykierko
mt@e-science.pl