

ROSA Desktop Fresh в химической лаборатории

Денис Силаков, НТЦ ИТ РОСА
Елена Силакова, ЦКП им. Д.И. Менделеева



НТЦ ИТ РОСА
Научно-технический центр
информационных технологий



ЦКП — Центр Коллективного Пользования

ЦКП - много дорогих приборов в одном месте

- Студенты/аспиранты/ученые имеют доступ к профессиональному оборудованию
- Приборы не простаивают без дела

ЦКП им. Д.И. Менделеева — часть РХТУ им. Д.И. Менделеева

- Оборудование для анализа состава и свойств объектов



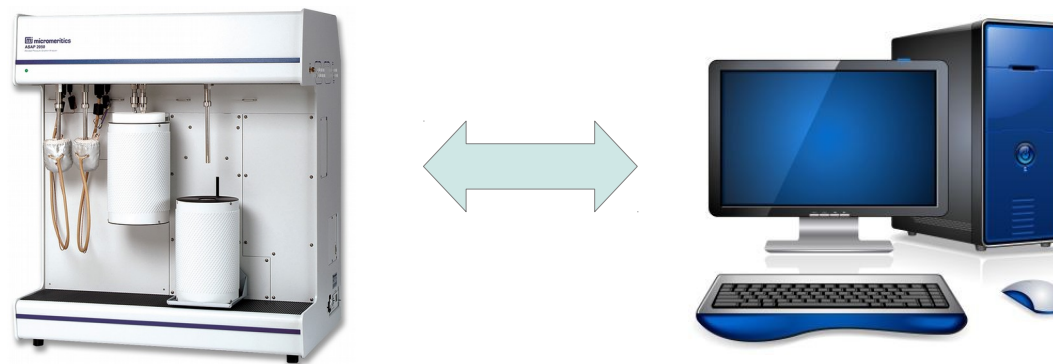
Оборудование

- Атомно-абсорбционные спектрометры КВАНТ
- ИК-Фурье спектрометр Nicolet 380
- Спектрофотометр GBC Cintra 303
- Масс-спектрометр с индуктивно-связанной плазмой ICP-MS Xseries 2
- Анализатор удельной поверхности и пористости ASAP 2020
- ...



Современный прибор-анализатор

- «Железка»
- Управляющий компьютер
- Специализированное ПО для анализа результатов



Отдельная машина для анализа данных

Преимущества:

- Не занимаем время прибора
- Можем работать где угодно — дома, в лесу, ...

... и препятствия:

- Специализированное ПО — проприетарное



Место для Linux?

Управляющий компьютер?

Нет заинтересованности руководства и энтузиастов

- Драйвера для оборудования
- Сложности с сервисным обслуживанием
- ПО включено в стоимость прибора
- ...

Компьютер для анализа данных?

Все в наших руках



Требования к ПО

- Статистические расчеты
- Визуализация данных
- Побольше GUI, поменьше программирования
- «Знание» особенностей предметной области (обработка спектров всевозможных материалов)



Полезные утилиты и программы

- Gnome Chemistry Utils

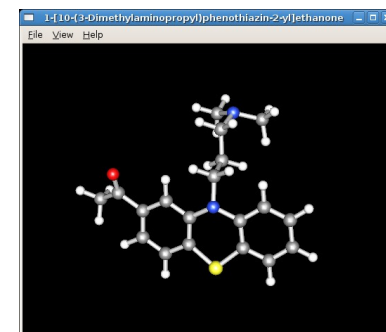
- gchemcalc
- gchempaint
- gspectrum
- ...

- Периодическая таблица

- kalzium
- gchemtable
- gperiodic

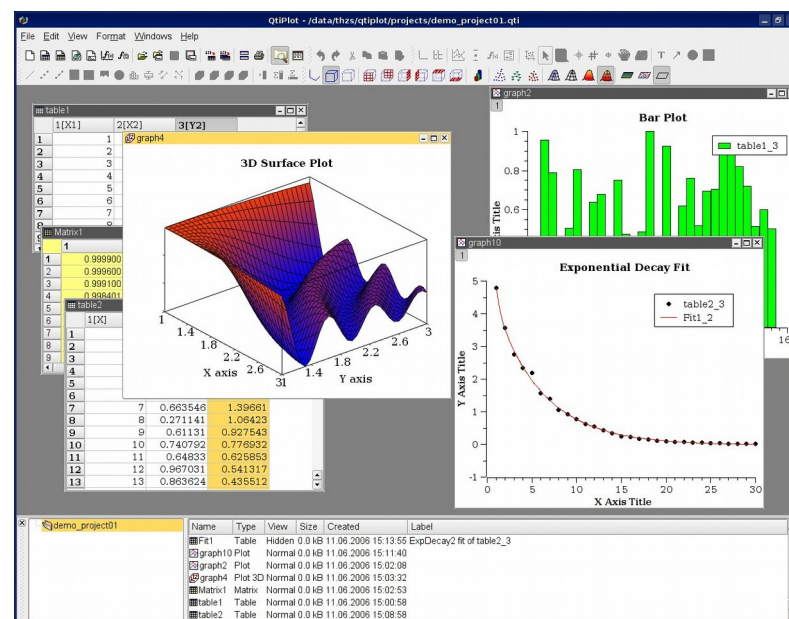
- Отрисовка химических структур, молекул, ...

- rasmol
- gcrystal
- gchem3d
- Marvin Beans - *бесплатный, но закрытый*



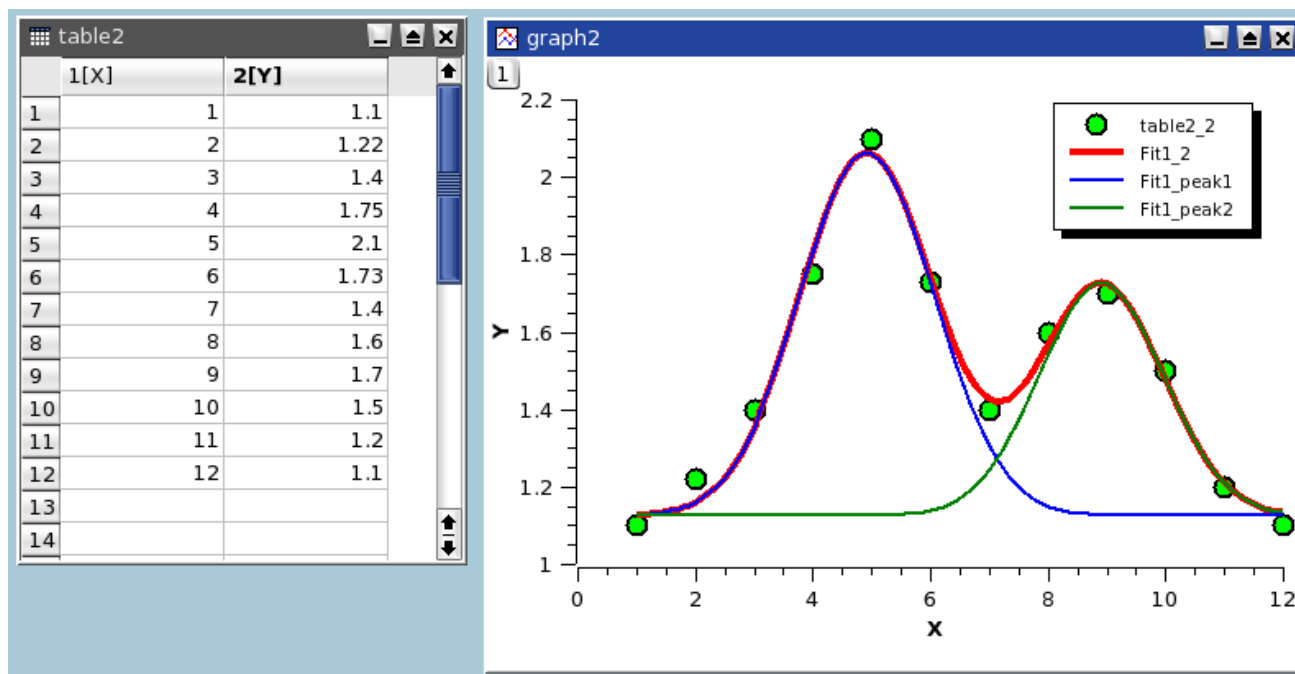
Обработка данных

- Базовая статистическая обработка
Excel → **LibreOffice Calc**
- Продвинутая обработка
Origin → **QtiPlot**
(LabPlot, Veusz, OpenDX, ...)
- Специализированное ПО
massXpert — анализ спектров полимеров



QtiPlot

- 2D- и 3D-графики
- Аппроксимация кривых
- Разложение спектра на кривые Гаусса или Лоренца



Страховка не мешает

WXP [Работает] - Oracle VM VirtualBox

OMNIC Spectra

Data Tray - add items from My Data

Home

About

Help

Welcome to OMNIC Spectra...
making spectroscopy simple for analytical investigations!

Manage

Collect

Process

Identify

Report

Getting Started

OMNIC Spectra Overview

Explore the world of OMNIC Spectra. Click a topic to view an introductory movie.

Click the Question Mark or select Step Me Through topics for help any time while using OMNIC Spectra software.

Result Tray - add Process or Identify results

Oracle VM VirtualBox Менеджер

Общие

Имя: WXP
Операционная система: Windows XP

Система

Оперативная память: 1024 МБ
Порядок загрузки: Дискета, CD/DVD-ROM, Жесткий диск
Ускорение: VT-x/AMD-V, Nested Paging

Дисплей

Видеопамять: 18 МБ
Сервер удаленного дисплея: Выключен

Носители

Контроллер: IDE
Первичный мастер IDE: WXP.vdi (Обычный, 20,00 Гб)
Вторичный мастер IDE: (Привод CD/DVD) disc2.iso (Недоступен)

Аудио

Аудиодрайвер: PulseAudio
Аудио-контроллер: ICH AC97

Сеть

Адаптер 1: PCnet-FAST III (Внутренняя сеть, 'intnet')

USB

Фильтры устройств: 0 (0 активно)

Общие папки

Общие папки: 1

20:02



Результаты

Проблемы

- Крайне мало квалифицированных разработчиков
 - завуалированный «vendor-lock»
 - отставание от «современных» технологий (GTK3 & со.)
- ... при этом - много небольших утилит
- Слабая локализация
- Слабая документация и методические пособия



Проблема курицы и яйца?

Статистика использования (Debian PopCon)

- Dpkg — 170.000
- LibreOffice — 80.000
- Galculator — 2.000
- QtiPlot — 1.000
- Kalzium — 400
- Pymol — 550
- MassXpert — 20
- *90% пакетов «Chemistry» - менее 100 пользователей*

Результаты - главное

Позитив

- Программ немного, но хватает
- Никаких претензий к ОС как к таковой (ROSA Desktop Fresh KDE)
 - Музыка и фильмы воспроизводятся
 - Ярлыки на рабочем столе работают
 - Браузер работает
 - ...

Работать можно!



ИТЦ ИТ РОСА, ЦКП им. Менделеева

WWW:

<http://www.rosalab.ru/>

<http://www.muctr.ru/univsci/ckp/>

E-mail:

denis.silakov@rosalab.ru

