

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



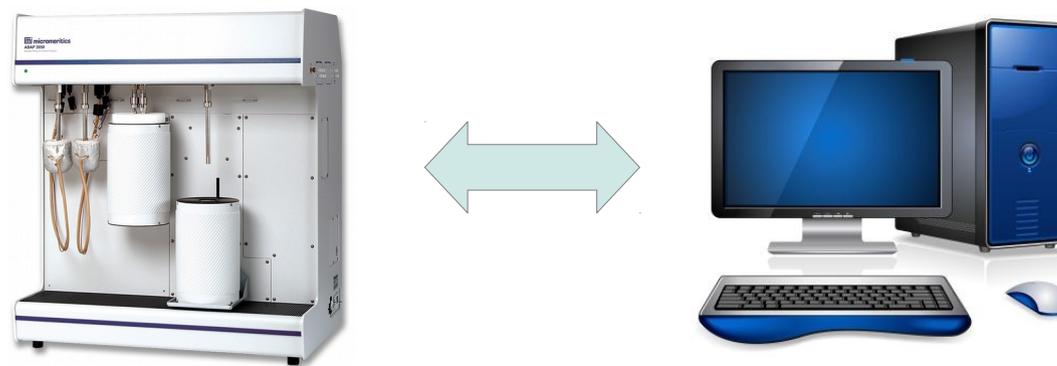
Оборудование

- 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

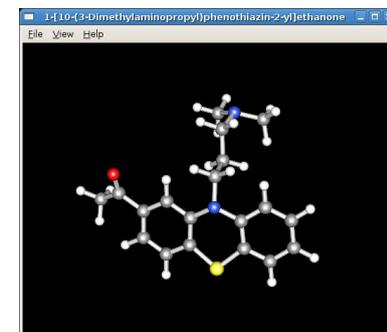
- gchemcalc
- gchempaint
- gspectrum
- ...

- Периодическая таблица

- kalzium
- gchemtable
- gperiodic

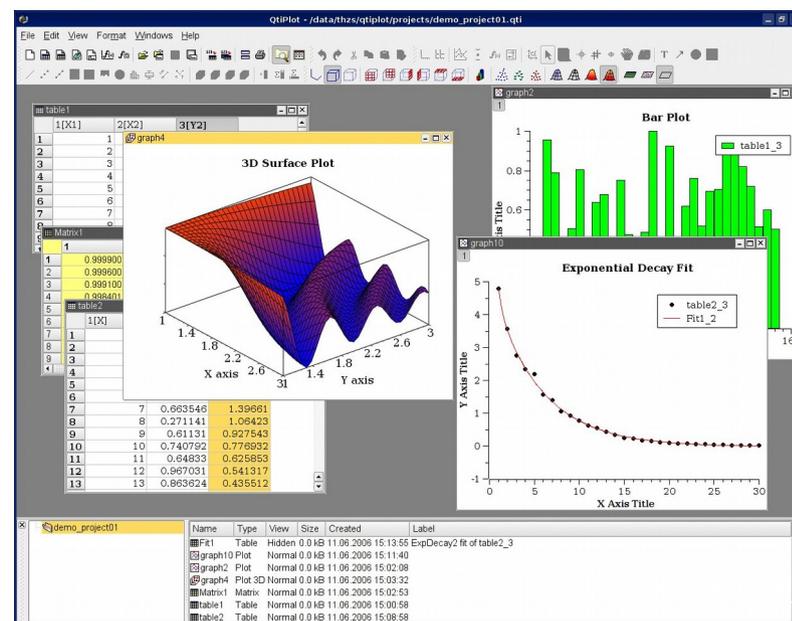
- Отрисовка химических структур, молекул, ...

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



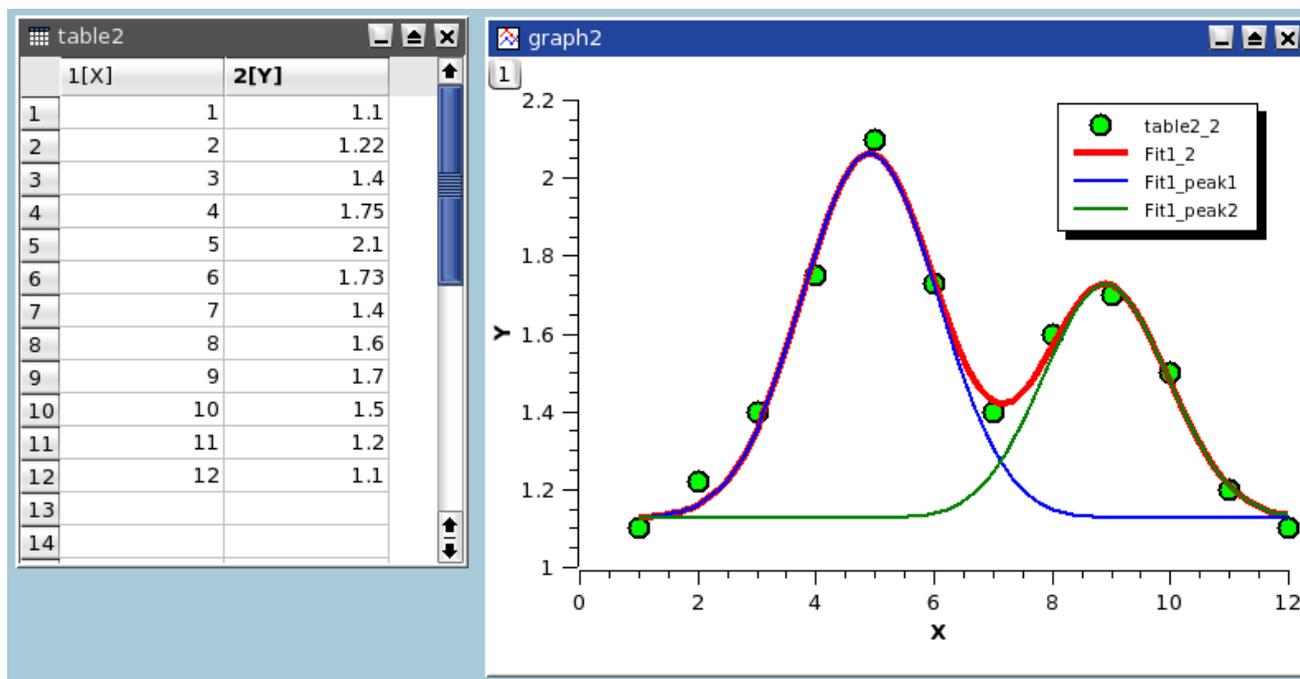
Обработка данных

- 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

The image shows a Windows XP desktop environment within an Oracle VM VirtualBox. The main application window is OMNIC Spectra, displaying a welcome screen with the text "Welcome to OMNIC Spectra... making spectroscopy simple for analytical investigations!". The screen features a circular navigation menu with the following steps: Manage, Collect, Process, Identify, Report, and Getting Started. A central "OMNIC Spectra Overview" icon is also present. Below the menu, there is a "Result Tray - add Process or Identify results" section. The desktop background is blue with several folders and files. A "Oracle VM VirtualBox Менеджер" window is open on the right, showing system details for the VM, including the name "WXP", operating system "Windows XP", and various hardware specifications like memory (1024 MB) and disk settings.

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

