

ROSA Desktop Fresh в химической лаборатории

Денис Силаков, Елена Силакова

Москва

ООО «НТЦ ИТ РОСА», ЦКП им. Д.И. Менделеева

ROSA Desktop Fresh

<http://www.rosalab.ru>

Аннотация

В докладе освещается использование дистрибутива ROSA Desktop Fresh для обработки экспериментальных результатов, получаемых на оборудовании Центра коллективного пользования (ЦКП) им. Д.И. Менделеева. Рассказывается об опыте замещения ряда проприетарных приложений свободными аналогами и о трудностях, с которыми приходится сталкиваться в работе.

Центры коллективного пользования (ЦКП) призваны дать возможность ученым и студентам пользоваться дорогостоящим оборудованием, приобретение которого конкретным институтом или учебным заведением с финансовой точки зрения не оправдано или вовсе невозможно. В ЦКП им. Менделеева используются приборы, позволяющие проводить анализ состава образцов — хроматограф, спектрофотометр, атомно-абсорбционные и ИК-Фурье спектрометры, масс-спектрометр с индуктивно связанной плазмой, электронный микроскоп и другие.

Каждый из приборов, предполагающих программную обработку получаемых данных, обычно поставляется с собственным ПО. Более того, нередко с прибором поставляется непосредственно компьютер с уже установленными программами — при стоимости прибора в несколько миллионов рублей, компьютер можно рассматривать как мелкую периферию.

Предлагаемое поставщиками приборов ПО (по крайней мере, в нашем случае) является проприетарным и работает только в ОС Windows. Заменить ОС на компьютере, непосредственно работающем с прибором, проблематично — ряду приборов требуются специфичные драйвера, альтернативное ПО вряд ли будет одобрено инженерами, осуществляющими сервисное обслуживание и так далее. А поскольку стоимость всех этих программ фактически вошла в стоимость прибора, то и финансовых стимулов для этого нет.

Неудобства, конечно, имеются — например, для предотвращения заражения критически важных машин вирусами, эти машины не подключены к интернету, а результаты измерений передаются пользователям на непerezаписываемых CD-дисках (никаких флешек!). Однако на данный момент сотрудники готовы мириться с этими неудобствами.

Тем не менее, есть другой фактор, открывающий дистрибутивам Linux дорогу в ЦКП и схожие организации. Дело в том, что исследовательская работа заключается не только в снятии замеров с помощью некоторого прибора, но и в последующем анализе результатов.

Поставщики приборов предоставляют приложения для проведения такого анализа, однако не всегда они удобные, а обычно еще и бесплатные. Поэтому законопослушный ученый должен либо обрабатывать результаты на той же машине, где он их получил (и занимать время дорогостоящего оборудования), либо покупать себе отдельную лицензию. Однако результаты измерений обычно представляют собой кучу цифр либо картинок, которые можно перенести на другую машину и обрабатывать, чем душе угодно. На нашем личном примере мы попробовали использовать для обработки данных дистрибутив ROSA Desktop Fresh и в этом докладе рассмотрим приглянувшиеся нам приложения из его репозитория.

Базовые программы

Начнем с программ и утилит, которые в наших условиях не являются принципиальными, но сильно упрощают работу. К таковым следует отнести:

- Представления периодической таблицы Менделеева — *gchemtable* и *gperiodic*.
- «Химический калькулятор» *Gchemcalc* (из набора *Gnome Chemistry Utils*) для анализа веществ сложной структуры.
- Программы для рисования химических структур, трехмерных моделей молекул и кристаллов и тому подобного.

Среди программ последнего вида есть немало свободных — *rasmol*, *gcrystal*, *gchemzd* и другие. Эти приложения хороши для относительно несложных действий (например, нарисовать красивую картинку для статьи), однако могут спасовать при необходимости моделирования и анализа сложных структур. На такие случаи мы установили *Marvin Beans* от *ChemAxon* — закрытый инструментарий, имеющий вполне функциональную бесплатную версию. Написан инструментарий на *Java* и в *Linux* чувствует себя отлично.

Обработка данных

Многие задачи по обработке данных, получаемых от различных спектрометров и схожих приборов, достаточно рутинны. Достаточно взять полученный набор значений, построить по ним графики спектров, вычислить положения пиков, отклонения и тому подобные характеристики.

В первом приближении, с такими задачами справляются редакторы электронных таблиц. На этом поле *LibreOffice Calc* оказался достойной заменой *MS Excel*.

Для более сложных расчетов используются «продвинутые» приложения, коих на первый взгляд хватает и в *Linux* — *Veusz*, *OpenDX*, или даже система статистических вычислений *R*. В нашем случае оказалось, что основной кандидат на замену проприетарным аналогам — это *QtiPlot*, построенный по образу и подобию *Origin*, ибо последний являлся в организации стандартом де-факто.

Недостаток всех этих программ в том, что они не учитывают специфики обрабатываемых данных. Например, если масс-спектрометр разделяет элементы в зависимости от отношения массы к заряду ядра, то в результирующем спектре может произойти наложение сигналов от двух разных ионов с одинаковым отношением заряда к массе. Современные приборы являются достаточно «интеллектуальными» и способны автоматически корректировать и учитывать многие подобные аспекты (естественно, с подсказками оператора), однако всегда выдавать идеальный результат они еще не в состоянии.

Как следствие, анализ полученных результатов — задача отнюдь не тривиальная, и посильная помощь со стороны ПО здесь очень пригодится. Например, программа может вывести подсказки о соответствии определенных пиков в спектре тем или иным веществам, помочь рассчитать характеристики сложных полимеров и так далее. Единственной свободной программой такого рода, которую нам удалось найти, является *massXpert*. Приложение нацелено на анализ спектров полимеров и при этом обладает изрядной универсальностью, не ограничиваясь каким-то одним их видом.

Заключение

Главный итог наших усилий — это возможность использовать машину с *Linux* как

рабочее место химика-аналитика. Однако отметим, что обойтись исключительно свободными программами не получилось (несмотря на относительную простоту решаемых задач), и текущие тенденции разработки свободного ПО пока не позволяют утверждать, что в скором будущем ситуация изменится.