

Instal·lació del Topspin 3.6.1

S'instal·la la darrera versió disponible per consoles Avancelll: Topspin 3.6.1

2019-06-07 - TREBALL EN MARXA / WORK IN PROGRESS



- ✔ actualitzar el sistema operatiu Debian GNU/Linux
- ✔ instal·lar i configurar el TopSpin 3.6.1
- ✔ còpia automàtica dels *parameter sets* de TopSpin 3.5.pl6 a 3.6.1
- ✔ comprovar el CORTAB
- ✔ definir els valors de referència de durada i potència dels pulsos (edprosol)
- ❗ exportar les carpetes de dades i de llistes (pulse programs, etc.) al servidor de dades i fer-les accessibles a través del servidor de ftp.
- ❗ optimitzar l'homogeneïtat: topshim 3d i després topshim
- ✔ comprovar la sintonia del canal BB pels nuclis més habituals, i, si cal, corregir els valors per defecte de Tuning & Matching.

Instal·lació del Topspin 3.6.1

Un cop instal·lades les llibreries necessàries, executo el programa d'instal·lació

```
sermnadmin@cie-55-31:~/Downloads/Topspin-3.6.1$ sh ./topspin-3.6.1-linux.sh
Verifying archive integrity... All good.
Uncompressing TopSpin 3.6.1
Not enough space left in /tmp (342777 KB) to decompress ./topspin-3.6.1-
linux.sh (1042072 KB)
Consider setting TMPDIR to a directory with more free space.
```

Llavors comprovo l'espai disponible a la partició */tmp*

```
sermnadmin@cie-55-31:~/Downloads/Topspin-3.6.1$ df -lh
Filesystem                Size      Used Avail Use% Mounted on
udev                      10M         0   10M   0% /dev
tmpfs                     1.6G      9.1M   1.6G   1% /run
/dev/dm-0                 8.2G      3.9G   3.9G  51% /
tmpfs                     4.0G       18M   3.9G   1% /dev/shm
tmpfs                     5.0M      4.0K   5.0M   1% /run/lock
tmpfs                     4.0G         0   4.0G   0% /sys/fs/cgroup
/dev/mapper/cie--55--31--vg-tmp 360M      2.3M  335M   1% /tmp
/dev/sda1                 236M       89M  135M  40% /boot
/dev/mapper/cie--55--31--vg-var 2.7G      1.2G   1.5G  44% /var
/dev/mapper/cie--55--31--vg-home 394G     190G  185G  51% /home
/dev/mapper/cie--55--31--vg-opt  40G      3.7G   34G  10% /opt
```

tmpfs	799M	12K	799M	1%	/run/user/1000
-------	------	-----	------	----	----------------

i com que és massa petita, defineixo una nova carpeta temporal

```
sermnadmin@cie-55-31:~/Downloads/Topspin-3.6.1$ ls -la ~/Temp
total 8
drwxr-xr-x  2 sermnadmin sermnadmin 4096 May 19  2017 .
drwxr-xr-x 31 sermnadmin sermnadmin 4096 Jun  7 15:32 ..

sermnadmin@cie-55-31:~/Downloads/Topspin-3.6.1$ export set TMPDIR=~/Temp
sermnadmin@cie-55-31:~/Downloads/Topspin-3.6.1$ printenv TMPDIR
/home/sermnadmin/Temp
```

i torno a iniciar el procés d'instal·lació del TopSpin 3.6.1

```
sermnadmin@cie-55-31:~/Downloads/Topspin-3.6.1$ sh ./topspin-3.6.1-linux.sh
Verifying archive integrity... All good.
Uncompressing TopSpin 3.6.1 100%
NOTE: using DISPLAY=:0
Please enter root password if prompted for it.
Password:
NOTE: using DISPLAY=:0
NOTE: using
TCL_LIBRARY=/home/sermnadmin/Temp/selfgz2657/linux/tcl-8.5.16/lib/tcl8.5
NOTE: using
TK_LIBRARY=/home/sermnadmin/Temp/selfgz2657/linux/tk-8.5.16/lib/tk8.5
NOTE: running /home/sermnadmin/Temp/selfgz2657/linux/tk-8.5.16/bin/wish8.5 -
f /home/sermnadmin/Temp/selfgz2657/xwinstall.d/swim/lib/xwinstall.tcl --
NOTE: using log file: /tmp/install.log
NOTE: using log file: /opt/topspin3.6.1/install.log
```

A la finestra *Selection of components to install* deixo les opcions triades per defecte:

- Install Bruker NMR Software
- Install GPL licensed GNU GCC 4.9.1 compiler (recommended)

El programa s'instal·la a la carpeta

- /opt/topspin3.6.1

A la finestra *Please select setup type* trio l'opció *Data processing, acquisition and automation* que instal·la els components del TopSpin necessaris per l'adquisició i processament de les dades de rmn.

Al pas de configuració del tallafocs (firewall), trio l'opció *Show necessary firewall rules* i desactivo la configuració automàtica del firewall. Les *firewall rules* són:

```
Note: Using init directory /etc/init.d
Note: Using Systemd for service control
/usr/diskless/prog/bin/setfirewall.sh: install firewall rules for
```

```
Spectrometer Operating System (show only)
command: iptables-restore < /etc/sysconfig/iptables
saving of iptables not necessary
command: ip6tables-restore < /etc/sysconfig/ip6tables
saving of ip6tables not necessary
/usr/diskless/prog/bin/setfirewall.sh: terminated with status OK
```

El programa d'instal·lació mostra diversos missatges d'error i avís mentre s'executa:

```
sermnadmin@cie-55-31:~/Downloads/Topspin-3.6.1$ sh ./topspin-3.6.1-linux.sh
Verifying archive integrity... All good.
Uncompressing TopSpin 3.6.1 100%
NOTE: using DISPLAY=:0
Please enter root password if prompted for it.
Password:
NOTE: using DISPLAY=:0
NOTE: using
TCL_LIBRARY=/home/sermnadmin/Temp/selfgz2657/linux/tcl-8.5.16/lib/tcl8.5
NOTE: using
TK_LIBRARY=/home/sermnadmin/Temp/selfgz2657/linux/tk-8.5.16/lib/tk8.5
NOTE: running /home/sermnadmin/Temp/selfgz2657/linux/tk-8.5.16/bin/wish8.5 -
f /home/sermnadmin/Temp/selfgz2657/xwinstall.d/swim/lib/xwinstall.tcl --
NOTE: using log file: /tmp/install.log
NOTE: using log file: /opt/topspin3.6.1/install.log
Error: Execute cmd: exit=1
Error: Execute cmd: error=<
```

Primer error

```
*** ERROR: ***

Could not enable service tftp: not in xinetd.conf

sed: can't read /usr/lib/systemd/system/dhcpd.service: No such file or
directory
/tftpboot/service-lib.sh: line 1272: restorecon: command not found
*** ERROR: ***

restorecon -v /etc/dhcpd.conf

Failed to start dhcpd.service: Unit dhcpd.service failed to load: Invalid
argument. See system logs and 'systemctl status dhcpd.service' for details.
(systemctl start dhcpd.service) [FAILED]
(systemctl status dhcpd.service) [FAILED]>
Error: Execute cmd: exit=1
Error: Execute cmd: error=<Warning: network interface eth1 not found
/usr/diskless/prog/bin/service-lib.sh: line 1243: /etc/sysconfig/iptables:
No such file or directory
```

Solució

Instal·lo el paquet de Debian *policycoreutils* que inclou el programa 'restorecon'

```
Sroot@cie-55-31:/tftpboot# apt install policycoreutils
Reading package lists... Done
Building dependency tree
Reading state information... Done
The following extra packages will be installed:
  libapol4 libauparse0 libqpoll python-audit python-ipy python-selinux
python-semanage python-sepolgen python-sepolicy
python-setools selinux-utils
Suggested packages:
  selinux-policy-dev
Recommended packages:
  selinux-policy-default
The following NEW packages will be installed:
  libapol4 libauparse0 libqpoll policycoreutils python-audit python-ipy
python-selinux python-semanage python-sepolgen
python-sepolicy python-setools selinux-utils
0 upgraded, 12 newly installed, 0 to remove and 0 not upgraded.
Need to get 3,385 kB of archives.
After this operation, 12.5 MB of additional disk space will be used.
Do you want to continue? [Y/n]
Get:1 http://ftp.caliu.cat/debian/ jessie/main libqpoll amd64 3.3.8-3.1 [198
kB]
:
:
Get:12 http://ftp.caliu.cat/debian/ jessie/main python-audit amd64
1:2.4-1+b1 [60.8 kB]
Fetched 3,385 kB in 1s (3,081 kB/s)
Selecting previously unselected package libqpoll:amd64.
(Reading database ... 165291 files and directories currently installed.)
Preparing to unpack .../libqpoll_3.3.8-3.1_amd64.deb ...
Unpacking libqpoll:amd64 (3.3.8-3.1) ...
:
:
Processing triggers for libc-bin (2.19-18+deb8u10) ...
Processing triggers for systemd (215-17+deb8u13) ...
```

i executo la comanda '/tftpboot/service-lib.sh' i no surt cap missatge d'error.

Més errors



*** ERROR: ***

iptables-restore

/usr/diskless/prog/bin/service-lib.sh: line 1243: /etc/sysconfig/ip6tables:
No such file or directory

*** ERROR: ***

ip6tables-restore

/usr/diskless/prog/bin/setfirewall.sh: terminated with error status 1>
Error: *** Error ***

Could not configure and show firewall rules for Diskless:
(command: /bin/bash /usr/diskless/prog/bin/setfirewall.sh install)

Warning: network interface eth1 not found

/usr/diskless/prog/bin/service-lib.sh: line 1243: /etc/sysconfig/iptables:
No such file or directory

*** ERROR: ***

iptables-restore

/usr/diskless/prog/bin/service-lib.sh: line 1243: /etc/sysconfig/ip6tables:
No such file or directory

*** ERROR: ***

ip6tables-restore

/usr/diskless/prog/bin/setfirewall.sh: terminated with error status 1

Note: Using init directory /etc/init.d

Note: Using Systemd for service control

/usr/diskless/prog/bin/setfirewall.sh: install firewall rules for
Spectrometer Operating System

command: iptables-restore < /etc/sysconfig/iptables

saving of iptables not necessary

command: ip6tables-restore < /etc/sysconfig/ip6tables

saving of ip6tables not necessary

Summary of errors that occurred during installation:

Error: Execute cmd: exit=1

Error: Execute cmd: error=<

*** ERROR: ***

Could not enable service tftp: not in xinetd.conf

sed: can't read /usr/lib/systemd/system/dhcpd.service: No such file or
directory

/tftpboot/service-lib.sh: line 1272: restorecon: command not found

*** ERROR: ***

```
restorecon -v /etc/dhcpd.conf
```

```
Failed to start dhcpd.service: Unit dhcpd.service failed to load: Invalid argument. See system logs and 'systemctl status dhcpd.service' for details.
(systemctl start dhcpd.service) [FAILED]
(systemctl status dhcpd.service) [FAILED]>
Error: Execute cmd: exit=1
Error: Execute cmd: error=<Warning: network interface eth1 not found
/usr/diskless/prog/bin/service-lib.sh: line 1243: /etc/sysconfig/iptables:
No such file or directory
```

*** ERROR: ***

```
iptables-restore
```

```
/usr/diskless/prog/bin/service-lib.sh: line 1243: /etc/sysconfig/ip6tables:
No such file or directory
```

*** ERROR: ***

```
ip6tables-restore
```

```
/usr/diskless/prog/bin/setfirewall.sh: terminated with error status 1>
Error: *** Error ***
```

```
Could not configure and show firewall rules for Diskless:
(command: /bin/bash /usr/diskless/prog/bin/setfirewall.sh install)
```

```
Warning: network interface eth1 not found
/usr/diskless/prog/bin/service-lib.sh: line 1243: /etc/sysconfig/iptables:
No such file or directory
```

*** ERROR: ***

```
iptables-restore
```

```
/usr/diskless/prog/bin/service-lib.sh: line 1243: /etc/sysconfig/ip6tables:
No such file or directory
```

*** ERROR: ***

```
ip6tables-restore
```

```
/usr/diskless/prog/bin/setfirewall.sh: terminated with error status 1
Note: Using init directory /etc/init.d
Note: Using Systemd for service control
/usr/diskless/prog/bin/setfirewall.sh: install firewall rules for
```

Spectrometer Operating System

```
command: iptables-restore < /etc/sysconfig/iptables
```

```
saving of iptables not necessary
```

```
command: ip6tables-restore < /etc/sysconfig/ip6tables
```

```
saving of ip6tables not necessary
```

```
Could not configure and show firewall rules for Diskless:
```

```
(command: /bin/bash /usr/diskless/prog/bin/setfirewall.sh install)
```

```
Warning: network interface eth1 not found
```

```
/usr/diskless/prog/bin/service-lib.sh: line 1243: /etc/sysconfig/iptables:
```

```
No such file or directory
```

```
*** ERROR: ***
```

```
iptables-restore
```

```
/usr/diskless/prog/bin/service-lib.sh: line 1243: /etc/sysconfig/ip6tables:
```

```
No such file or directory
```

```
*** ERROR: ***
```

```
ip6tables-restore
```

```
/usr/diskless/prog/bin/setfirewall.sh: terminated with error status 1
```

```
Note: Using init directory /etc/init.d
```

```
Note: Using Systemd for service control
```

```
/usr/diskless/prog/bin/setfirewall.sh: install firewall rules for
```

```
Spectrometer Operating System
```

```
command: iptables-restore < /etc/sysconfig/iptables
```

```
saving of iptables not necessary
```

```
command: ip6tables-restore < /etc/sysconfig/ip6tables
```

```
saving of ip6tables not necessary
```

```
Terminated SETUP at 2019-06-07 16:36:11 +0200 with status OK
```

```
*** Error ***
```

```
Could not configure and show firewall rules for Diskless:
```

```
(command: /bin/bash /usr/diskless/prog/bin/setfirewall.sh install)
```

```
Warning: network interface eth1 not found
```

```
/usr/diskless/prog/bin/service-lib.sh: line 1243: /etc/sysconfig/iptables:
```

```
No such file or directory
```

```
*** ERROR: ***
```

```
iptables-restore
```

```
/usr/diskless/prog/bin/service-lib.sh: line 1243: /etc/sysconfig/ip6tables:
```

```
No such file or directory
```

```
*** ERROR: ***
```

ip6tables-restore

```
/usr/diskless/prog/bin/setfirewall.sh: terminated with error status 1
Note: Using init directory /etc/init.d
Note: Using Systemd for service control
/usr/diskless/prog/bin/setfirewall.sh: install firewall rules for
Spectrometer Operating System
command: iptables-restore < /etc/sysconfig/iptables
saving of iptables not necessary
command: ip6tables-restore < /etc/sysconfig/ip6tables
saving of ip6tables not necessary
```

Al pas de post-instal·lació de l'IpsoOS s'obre una finestra amb el següents avisos i errors,

```
during command /tftpboot/install-services
Errors:
```

```
*** ERROR: ***
```

```
Could not enable service tftp: not in xinetd.conf
```

```
sed: can't read /usr/lib/systemd/system/dhcpd.service: No such file or
directory
```

```
/tftpboot/service-lib.sh: line 1272: restorecon: command not found
```

```
*** ERROR: ***
```

```
restorecon -v /etc/dhcpd.conf
```

```
Failed to start dhcpd.service: Unit dhcpd.service failed to load: Invalid
argument. See system logs and 'systemctl status dhcpd.service' for details.
(systemctl start dhcpd.service) [FAILED]
(systemctl status dhcpd.service) [FAILED]
```

```
Output:
```

```
Note: Using init directory /etc/init.d
```

```
Note: Using Systemd for service control
```

```
*** WARNING: ***
```

```
network interface eth1 not found
```

```
/tftpboot/install-services: install services: tftp dhcpd
```

```
command: echo > /tftpboot/dhcpd.service
```

```
command: cp -af /tftpboot/dhcpd.conf /etc/dhcpd.conf
```

```
command: restorecon -v /etc/dhcpd.conf
```

```
systemctl -q daemon-reload ... [OK]
```

```
systemctl start dhcpd.service ... systemctl status dhcpd.service ... *
dhcpd.service
```



```
Loaded: error (Reason: Invalid argument)
Active: inactive (dead)
```

```
Jun 07 15:52:39 cie-55-31 systemd[1]: dhcpcd.service lacks both ExecStart=
and ExecStop= setting. Refusing.
Jun 07 15:52:39 cie-55-31 systemd[1]: dhcpcd.service lacks both ExecStart=
and ExecStop= setting. Refusing.
/tftpboot/install-services: terminated with error status 1
```



Al TopSpin 3.5.x aquests errors es varen resolen amb la instal·lació i configuració dels següents servidors:

- tftp (paquets tftp-hpa i tftpd-hpa)
- bootparamd (paquet bootparamd))
- dhcp (paquet isc-dhcp-server).

Error IpsoOS post installation

Al final del procés d'instal·lació apareix un error relacionat amb l'*IpsoOS post installation*

```
during command /tftpboot/install-services
Errors:
/tftpboot/service-lib.sh: line 241: rpm: command not found
*** Fatal error: ***

/tftpboot/install-services: is not a number

Output:
/tftpboot/install-services: terminated with status 99
```

i

```
Error: Execute cmd: exit=99
Error: Execute cmd: error=</usr/diskless/crco_data/service-lib.sh: line 241:
rpm: command not found
*** Fatal error: ***

/usr/diskless/crco_data/crco-install: is not a number
>
Error: Execute cmd: exit=99
Error: Execute cmd: error=</tftpboot/service-lib.sh: line 241: rpm: command
not found
*** Fatal error: ***

/tftpboot/install-services: is not a number
```

Aquest error potser es podria solucionar amb la instal·lació del paquet rpm, però la recomanació per

Debian és no instal·lar-ho i emprar el programa aïen per tal que la instal·lació dels paquets amb format *.rpm* es gestioni conjuntament amb la dels paquets propis de Debian en format *.deb*.

Premo el botó  per continuar,  i ja miraré més endavant si cal corregir o completar aquest pas de la instal·lació.

Error configuració firewall

Al final del procés d'instal·lació apareix un error relacionat amb la configuració del firewall,


```
*** Error ***
*
Could not show firewall rules for Diskless:
(command: /bin/bash /usr/diskless/prog/bin/setfirewall.sh show)

/usr/diskless/prog/bin/service-lib.sh: line 241: rpm: command not found
Fatal error: is not a number
/usr/diskless/prog/bin/setfirewall.sh: terminated with status 3
```

Com abans, premo el botó  per continuar, i  ja miraré més endavant si cal completar o corregir algun pas del procés d'instal·lació i/o configuració.

Primer intent d'executar TopSpin

El primer intent d'executar TopSpin aparentment funciona sense problemes

 copy & paste dels missatges mostrats a la terminal

```
...
...
```

Però més endavant s'obre una finestra en pantalla, relacionada amb el mòdul *bsmsproxyserver* (finestres del senyal de lock i del panel de control de la BSMS), on es mostra un missatge d'error:

```
mod bsmsproxy

terminated with exit(1 2 7)
  libjpeg.so.62 => not found
  libXp.so.6 => not found
```

El fitxer *libjpeg.so.62* forma part del paquet *libjpeg62-turbo* que ja està instal·lat per l'arquitectura amd64 (64 bits), de forma que només cal instal·lar-ho per l'arquitectura i386 (32 bits).

El fitxer *libXp.so.6* forma part del paquet *libxp6* que no està instal·lat, de forma que l'instal·lo per les arquitectures amd64 (64 bits) i i386 (32 bits).

Per precaució, comprovo si `/opt/topspin3.6.1/prog/mod/bsmsproxysvr` té accés a totes les biblioteques enllaçades

```
root@cie-55-31:/opt/topspin3.6.1/prog/curdir/sermnadmin# ldd
/opt/topspin3.6.1/prog/mod/bsmsproxysvr
    linux-gate.so.1 (0xf7703000)
    libomniORB4.so.2 => not found
    libomniCodeSets4.so.2 => not found
    libomniSSLTP4.so.2 => not found
    libomniThread.so.4 => not found
    libssl.so.1.0.0 => not found
    libcrypto.so.1.0.0 => not found
    libpthread.so.0 => /lib/i386-linux-gnu/i686/cmov/libpthread.so.0
(0xf76c6000)
    :
    libuuid.so.1 => /lib/i386-linux-gnu/libuuid.so.1 (0xf6f6e000)
    libXdmcp.so.6 => /usr/lib/i386-linux-gnu/libXdmcp.so.6 (0xf6f67000)
```

i, de les que no es troben, instal·lo el paquet `libomniorb4-dev` per l'arquitectura `i386` (32-bits):

-  `libomniorb4-dev:i386`
 - Instal·la automàticament els següents paquets dels quals en depèn: `libomniorb4-1:i386` `libomniThread3-dev:i386` `libomniThread3c2:i386` `libssl-dev:i386` `libssl1.0.0:i386` `libstdc++6:i386` `zlib1g-dev:i386`
 - Cal crear l'enllaç: `ln -s /usr/lib/libomniORB4.so.1.6 /usr/lib/libomniORB4.so.2`
 - Cal crear l'enllaç: `ln -s /usr/lib/libomniCodeSets4.so.1.6 /usr/lib/libomniCodeSets4.so.2`
 - Cal crear l'enllaç: `ln -s /usr/lib/libomniSSLTP4.so.1.6 /usr/lib/libomniSSLTP4.so.2`
 - Cal crear l'enllaç: `ln -s /usr/lib/libomniThread.so.3.4 /usr/lib/libomniThread.so.4`




Ja posats, comprovo tots els programes,

```
root@cie-55-31:/opt/topspin3.6.1/prog/mod# for FILE in *; do echo $FILE; \
ldd $FILE | grep "not found" | grep "so.[0-9]"; done

accumctrlserver
:
bsmsproxysvr
    libXp.so.6 => not found
cf
:
chkpwd
    libpam.so.0 => not found
cpr
:
mddnmr
    libgfortran.so.3 => not found
mvcube
```

```
:  
nrmquant  
nmrsim.mod  
    libXp.so.6 => not found  
peak  
plot  
    libXp.so.6 => not found  
probeserver  
proc1d  
proc2d  
    libgfortran.so.3 => not found  
proc3d  
    libgfortran.so.3 => not found  
psf  
:  
xwish3
```

i, de les que no es troben, instal·lo els paquets per l'arquitectura *i386* (32-bits) que les contenen

-  **libpam0g-dev:i386**
 - Instal·la automàticament els següents paquets dels quals en depèn: **libaudit1:i386 libpam0g:i386**
-  **libgfortran-4.9-dev:i386**
 - Instal·la automàticament els següents paquets dels quals en depèn: **libasan1:i386 libatomic1:i386 libcilkrts5:i386 libgcc-4.9-dev:i386 libgfortran3:i386 libgomp1:i386 libitm1:i386 libquadmath0:i386 libubsan0:i386**
-  **libxp-dev:i386**
 - Instal·la automàticament els següents paquets dels quals en depèn: **libpthread-stubs0-dev:i386 libx11-dev:i386 libx11-doc libxau-dev:i386 libxcb1-dev:i386 libxdmcp-dev:i386 libxext-dev:i386 libxp6:i386 x11proto-core-dev x11proto-input-dev x11proto-kb-dev x11proto-print-dev x11proto-xext-dev xorg-sgml-doctools xtrans-dev**



La biblioteca `libXp.so.6` inicialment s'havia proporcionat amb la instal·lació del paquet *libxp6* (veure més amunt), però el gestor de paquets ha suggerit que es podia desinstal·lar perquè no hi havia cap paquet instal·lat que en depengués. Per evitar confusions més endavant, l'he desinstal·lat i he instal·lat el paquet *libxp-dev:i386* en substitució.



Aquesta comanda permet comprovar si tots els executables del tipus “ELF 32-bit” d'un directori troben les biblioteques que necessiten:

```
for FILE in `file * | grep "ELF 32-bit" | awk -F: '{ print $1 }'  
`; \  
do echo $FILE; \  
ldd $FILE | grep "not found" | grep "so.[0-9]"; \  
done
```




done

Un cop resolt aquests problemes, provo a configurar-ho amb cf i expinstall.

Configuració amb "cf"

Executo la comanda cf del TopSpin i, després de reiniciar l'IPSO perquè no es configurava correctament i l'amplificador de gradients perquè no es detectava, aquest és el resultat:

 afegir el text mostrat en pantalla

CONFIGURATION INFORMATION

=====

```
Path          : /opt/topspin3.6.1/conf/instr/spect/uxnmr.info
Date          : Sun Jun  9 19:18:38 2019
Release       : TopSpin 3.6.1
Installed in  : /opt/topspin3.6.1
Host          : cie-55-31
OS            : Linux 4.9.0-0.bpo.9-amd64 #1 SMP Debian
4.9.168-1+deb9u2~deb8u1 (2019-05-14)
CPU           : Intel(R) Core(TM)2 CPU 6600 @ 2.40GHz (2 cores at 2400 MHz)
User          : sermnadmin (SeRMN-UAB Staff)
System        : Avance III 400 NMR spectrometer
1H-frequency  : 400.13 MHz
Description   : Avance III 400 MHz standard-bore
Location      : Servei de Ressonància Magnètica Nuclear
Bruker Order  : FIXME
Configured in: cie-55-31:/opt/topspin3.6.1/conf/instr/spect
```

IPSO: connected to spectrometer subnet

```
- TCP/IP address = 149.236.99.90
- IPSO type: AQS
- Tctrl : 1
- Fctrls: 2
- Gctrl1: with digital preemphasis
- Rctrl : 1
- FREDs : none
- DPP : 1
```

DRU1: AQS DRU Z100977/00582 ECL 04.00

```
- TCP/IP address = 149.236.99.89
- Firmware Version = 170619
- DRU1 controls AQS-Rack and HPPR/2
```

AQS: connected to 149.236.99.89:/dev/tty10

Slot	SBSB	Board	Number	Addr	Type	HW-VS	FW-VS	ID	ECL	Name	Description

2	0x10	0x72	0x3	AW	R	3.0	REC-1	AQS	RXAD400	Z102116/705	ECL	03.00						
3	0x34	0x2	0x1		X	5.0	REF-1	REF-400	Reference Board for AQS Receiver									
4	0x24	0x11	0x8	AE	S	2.0	SGU-1	AQS	SGU/2	400	Z103080/00351	ECL 02.00						
FPGA-Vs=AF																		
5	0x25	0x11	0x8	AE	S	2.0	SGU-2	AQS	SGU/2	400	Z103080/00340	ECL 02.00						
FPGA-Vs=AF																		
9	0x36	0x5	0		A	6.0	BLA-1	BLA2BB	150/60	20-400	W1345049/1817 ECL 6							
21	0x21	0xcf	0		P	1.0	PSD-1	PSD/3	Power Supply Distribution Board									
--	0x20	0xd1	0		B	2.0	MASTER	AQS/3	Chassis									
1	0x20	0x7	0		B		MASTER	AQS	Rack Master									
Logical Receiver/SGU configuration:																		
Router: 1 AQS-Minirouter																		
Amplifiers (AQS configuration):																		
R0	Amplifier	Module	Nucleus	Power/W	Switchbox	Name	PN/SN/FW											
1	1	1	B	150	N	BLA2BB	150/60 20-400	W1345049/1817/-										
2	1	2	B	60	N	BLA2BB	150/60 20-400	W1345049/1817/-										
3	2	1	2H	20	N	2HTX in BSMS	-/-/-											
Gradient amplifiers at the spectrometer subnet:																		

BGA1: BGA_W1213891_0040																		
- TCP/IP address = 149.236.99.93																		
- Firmware version = 20080206																		
- Web version = 1.1																		
- Current limits = 0.0/X, 0.0/Y, -10.0/Z (in A)																		
BSMS: BSMS/2 connected to ethernet																		
- TCP/IP address = 149.236.99.20																		
- ELCB firmware version = 20150423																		
- SCB channels = 20																		
- Shim System = BOSS1-SB																		
- 2HTX Amplifier: available																		
- Lock: installed																		
MAS2 control unit: connected to 149.236.99.90:/dev/tty05																		
- Boot Software : 20031216																		
- Application Software : 20120329																		
- Insert Time : 10 s																		

```
- Eject Time          : 10 s
- Spin Lock Tolerance : 5 Hz
```

Eurotherm VTU: device connected to 149.236.99.90:/dev/tty04

Preamplifiers :

```
HPPR2: - HPPR/2 preamplifier connected to 149.236.99.89:/dev/tty10
Type      : HPPR/2
Controller: Cover/1 with Application firmware = AQ
          15 LEDs for tuning, 15 LEDs for matching
Module  1 : 1H/2H 1H (virtual 50 Ohm reference: 274.9%/85.9deg)
          PN=Z003959, SN=00418 from 20070319
Module  2 : 1H/2H 2H (virtual 50 Ohm reference: 116.6%/-71.1deg)
          PN=Z003959, SN=00418 from 20070319
Module  3 : XBB19F 2HS
          PN=Z003504, SN=00415 from 20070425
```

Gradient Controller cable connections

```
-----
GCtrl1: connected via DPP to GREAT 1-10 Gradient Amplifier Unit
W1213891/0040
```

RF cable connections (assumed)

```
-----
SGU1 NORM output -> input 2 of transmitter 1 (BLA2BB 150/60 20-400
W1345049/1817)
SGU1 AUX  output -> input 1 of transmitter 2 (2HTX in BSMS)
SGU2 NORM output -> input 3 of transmitter 1 (BLA2BB 150/60 20-400
W1345049/1817)
SGU2 AUX  output -> TUNE signal input of HPPR
```

Blanking cable connections (assumed)

```
-----
transmitter 1 = BLA2BB 150/60 20-400 W1345049/1817:
- amplifier B-150W uses blanking 1
- amplifier B-60W uses blanking 2

transmitter 2 = 2HTX in BSMS:
- amplifier 2H-20W uses blanking 3
```

Configuració de la sonda amb "edhead"

Sonda BB & ATMA



Probe information:



BB Information:

- Name: PA BBO 400S1 BBF-H-D-05 Z
- ID: Z104450\ -182457200 ECL: 2.0 Var: 0.0
- ATM Nuclei: 1H BB
- Required ATMA-SW Version: 2.1

- BB range: 19F-109Ag

El TopSpin detecta el PICS de la sonda, i es descarrega el paràmetres de configuració i la configura correctament. Però quan comprovo el funcionament de la sintonia automàtica ATMA, em dona un missatge d'error:

```
tma Info
atma_ProbeCorba_impl::start exception: NucConf::init Error: can't create
probe-obj Probe-MotorBase-Motor: findActiveLimitSwitch cant access Motor-
Nr:1 <1H Tune>
(Original message = Atma Info
atma_ProbeCorba_impl::start exception: NucConf::init Error: can't create
probe-obj Probe-MotorBase-Motor: findActiveLimitSwitch cant access Motor-
Nr:1 <1H Tune>)

=====
atma_ProbeCorba_impl::start exception: NucConf::init Error: can't create
probe-obj Probe-MotorBase-Motor: findActiveLimitSwitch cant access Motor-
Nr:1 <1H Tune>

9 June 2019 20:15:16.721 +0200
Topspin Version = TopSpin 3.6.1 (of 2018-12-20 14:06:00),build 143
OS Name         = Linux 4.9.0-0.bpo.9-amd64
JVM Version      = 1.8.0_192 (32 bit) Oracle Corporation
JVM Total memory = 244 MB
JVM Free memory  = 80 MB

java.lang.Exception: Stack trace
    at
    bruker.bio.topspin.bfw.gui.warn.AbstractMessage.getDetailsString(AbstractMes
sage.java:875)
    at
    bruker.bio.topspin.bfw.gui.warn.AbstractMessage.setMsgSource(AbstractMessage
.java:837)
    at
    bruker.bio.topspin.bfw.gui.warn.AbstractMessage.<init>(AbstractMessage.java:
821)
    at de.bruker.nmr.mfw.base.BWarning.<init>(BWarning.java:102)
    at de.bruker.nmr.mfw.base.BError.<init>(BError.java:93)
    at
    de.bruker.nmr.sc.atma.impl.AtmaPanelStart.showAtmaException(AtmaPanelStart.j
ava:2010)
```



```
    at
de.bruker.nmr.sc.atma.impl.AtmaPanelStart.connect(AtmaPanelStart.java:318)
    at
de.bruker.nmr.sc.atma.impl.AtmaPanelStart.start(AtmaPanelStart.java:176)
    at
de.bruker.nmr.sc.atma.impl.AtmaPanelStart.atmm(AtmaPanelStart.java:121)
    at sun.reflect.NativeMethodAccessorImpl.invoke0(Native Method)
    at
sun.reflect.NativeMethodAccessorImpl.invoke(NativeMethodAccessorImpl.java:62)
)
    at
sun.reflect.DelegatingMethodAccessorImpl.invoke(DelegatingMethodAccessorImpl
.java:43)
    at java.lang.reflect.Method.invoke(Method.java:498)
    at
de.bruker.nmr.mfw.base.CmdThreadImpl.executeMethod(CmdThreadImpl.java:652)
    at
de.bruker.nmr.mfw.base.CmdThreadImpl.doJmethod(CmdThreadImpl.java:565)
    at de.bruker.nmr.mfw.base.CmdThreadImpl.exec(CmdThreadImpl.java:514)
    at de.bruker.nmr.mfw.base.CmdThreadImpl.run(CmdThreadImpl.java:494)
```

Aquest missatge es correspon al següent error al fitxer

/opt/topspin3.6.1/prog/curdir/sermnuab/db_xatma_default.log

```
root@cie-55-31:/opt/topspin3.6.1/prog/curdir/sermnuab# cat
db_xatma_default.log
2019-06-09 20:15:10.340 +0200 INFO    DebugBase::DebugBase() depth:10
2019-06-09 20:15:10.340 +0200 INFO    DebugBase::DebugBase() depth:10
...
2019-06-09 20:15:11.357 +0200 INFO    ProbeCorba::initialize
2019-06-09 20:15:11.357 +0200 INFO    ProbeCorba TopSpin: 3.5 Atma version
5.01
2019-06-09 20:15:11.357 +0200 INFO    ProbeData::initialize
2019-06-09 20:15:11.357 +0200 INFO    ProbeData::check_lock (new client)
fd:18 count:2 lock:2
2019-06-09 20:15:11.357 +0200 INFO    ProbeData::initialize Current used
Dataset is:
/home/sermnuab/data/eva/nmr/test_bor/1/pdata/1/home/sermnuab/data/eva/nmrtes
t_bor11
2019-06-09 20:15:11.358 +0200 INFO    ProbeData::initialize: pics = new Pics
0
2019-06-09 20:15:12.525 +0200 INFO    ProbeData::initialize
pics->readAndUpdatePicsFile()
2019-06-09 20:15:13.419 +0200 INFO    ProbeCorba::getVersion()
2019-06-09 20:15:13.462 +0200 INFO    ProbeCorba::getInfo()
2019-06-09 20:15:13.462 +0200 INFO    ProbeData::getProbeInfo
2019-06-09 20:15:13.462 +0200 INFO    ProbeData::getProbeInfo [Probe
information:
Name: PA BB0 400S1 BBF-H-D-05 Z
ID: Z104450\ -182457200 ECL: 2.0 Var: 0.0
ATM Nuclei: 1H BB
```

```
Required ATMA-SW Version: 2.1]
2019-06-09 20:15:13.463 +0200 INFO    ProbeData::getBBInfo
2019-06-09 20:15:13.474 +0200 INFO    ProbeData::getBBInfo [BB range:
19F-109Ag
Nuclei: 19F 7Li 31P 117Sn 13C 11B 87Rb 23Na 79Br 113Cd 29Si 127I 77Se 2H 17O
15N 14N 95Mo 109Ag 119Sn 195Pt]
2019-06-09 20:15:13.474 +0200 INFO    ProbeData::getDrivePos
2019-06-09 20:15:13.474 +0200 INFO    ProbeData::getDrivePos [1H Tune   fine:
1
1H Match fine: 2
BB Tune   fine: 9
BB Match fine: 3
BB Tune   coarse 100: 6
BB Tune   coarse 10:  7
BB Tune   coarse 1:   8
BB Match coarse 10:  4
BB Match coarse 1:   5
]
...
2019-06-09 20:15:15.558 +0200 INFO    Probe::updatePicsRef: PICS changed,
create backup
</opt/topspin3.6.1/conf/instr/probeheads/Z104450_0188.20170529.bb>
...
2019-06-09 20:15:16.047 +0200 INFO    PositionTracker::PositionTracker Nr:4
2019-06-09 20:15:16.047 +0200 INFO    Motor::Motor Nr:4
2019-06-09 20:15:16.047 +0200 INFO    DebugBase::DebugBase() depth:10
2019-06-09 20:15:16.047 +0200 INFO    MotorDrv2: LogMotNr:4 Physik.Nr:3 Dir:0
Imax:388
2019-06-09 20:15:16.047 +0200 INFO    Motor::setMotorName name [BBSlider3]
2019-06-09 20:15:16.047 +0200 INFO    Slider: LogMotNr:4 maxNotch: 9 name
[BBSlider3]
2019-06-09 20:15:16.047 +0200 INFO    DebugBase::DebugBase() depth:10
2019-06-09 20:15:16.047 +0200 INFO    DebugBase::DebugBase() depth:10
2019-06-09 20:15:16.047 +0200 INFO    Slider::Slider motorNr=5
2019-06-09 20:15:16.093 +0200 INFO    DebugBase::DebugBase() depth:10
2019-06-09 20:15:16.093 +0200 INFO    DebugBase::DebugBase() depth:10
2019-06-09 20:15:16.093 +0200 INFO    DebugBase::DebugBase() depth:10
2019-06-09 20:15:16.093 +0200 INFO    DebugBase::DebugBase() depth:10
2019-06-09 20:15:16.093 +0200 INFO    PositionTracker::PositionTracker Nr:5
2019-06-09 20:15:16.093 +0200 INFO    Motor::Motor Nr:5
2019-06-09 20:15:16.093 +0200 INFO    DebugBase::DebugBase() depth:10
2019-06-09 20:15:16.093 +0200 INFO    MotorDrv2: LogMotNr:5 Physik.Nr:4 Dir:0
Imax:388
2019-06-09 20:15:16.093 +0200 INFO    Motor::setMotorName name [BBSlider4]
2019-06-09 20:15:16.093 +0200 INFO    Slider: LogMotNr:5 maxNotch: 9 name
[BBSlider4]
2019-06-09 20:15:16.094 +0200 INFO    NucleusBb Name<BB>
2019-06-09 20:15:16.094 +0200 INFO    Nucleus::setChannelNumber Nuc [BB]
channel 1
```

```

2019-06-09 20:15:16.094 +0200 INFO   Nucleus::setChannelOnInnerCoil Nuc:[BB]
preSetMove:2
2019-06-09 20:15:16.094 +0200 INFO   Nucleus::setChannelHasSuperHighQ
Nuc:[BB] hasSuperHighQ:0
2019-06-09 20:15:16.094 +0200 INFO   Nucleus::setChannelOnOuterCoil Nuc:[1H]
preSetMove:2
2019-06-09 20:15:16.094 +0200 INFO   Probe::initAllDrivesOnProbe
2019-06-09 20:15:16.094 +0200 INFO   MotorBase::doInitDrivesIfReset
2019-06-09 20:15:16.132 +0200 INFO   MotorDrv2::MotorMove: Name[1H Tune]
posTime:-1 PosMode:0 iLimit:36 iMax:36 hwImax:-1
2019-06-09 20:15:16.511 +0200 INFO   writeToAtma failed! Cannot get type of
cover module:
error in command 'ZP' sent to probe via HPPR/2:
Error 100 in CAPH: I2C error: I2C device did not respond
2019-06-09 20:15:16.716 +0200 INFO   setAtmaRegister failed! Cannot get type
of cover module:
error in command 'ZW' sent to probe via HPPR/2:
Error 100 in CAPH: I2C error: I2C device did not respond
2019-06-09 20:15:16.717 +0200 INFO   Motor: findActiveLimitSwitch cant
access Motor-Nr:1 <1H Tune>
2019-06-09 20:15:16.717 +0200 INFO   MotorBase-Motor: findActiveLimitSwitch
cant access Motor-Nr:1 <1H Tune>
2019-06-09 20:15:16.717 +0200 INFO   Probe-MotorBase-Motor:
findActiveLimitSwitch cant access Motor-Nr:1 <1H Tune>
2019-06-09 20:15:16.717 +0200 INFO   ProbeCorba::unlock()
2019-06-09 20:15:16.717 +0200 INFO   ProbeData::unlock
2019-06-09 20:15:16.717 +0200 INFO   ProbeData::unlock Unlock AtmaServer 18
2019-06-09 20:15:16.717 +0200 INFO   ProbeData::unlock Unlocked AtmaServer
-1
2019-06-09 20:15:16.717 +0200 INFO   ProbeCorba::start exception
[NucConf::init Error: can't create probe-obj Probe-MotorBase-Motor:
findActiveLimitSwitch cant access Motor-Nr:1 <1H Tune>]
2019-06-09 20:15:16.858 +0200 INFO   ProbeCorba::unlock()
2019-06-09 20:15:16.858 +0200 INFO   ProbeData::unlock
2019-06-09 20:15:16.858 +0200 INFO   ProbeData::unlock Unlock AtmaServer -1
2 2

```

Després de comentar-ho amb el servei tècnic de Bruker i de fer diverses comprovacions, la solució és carregar un nou firmware (PICS) a la sonda.

Un cop resolt el problema, comprovo la sintonia dels següents nuclis i que tinguin definida la seva potència màxima a la sonda:

Nuclei	ATMA/ATMM	BB-Tuning	BB-Matching	Power Limit
1H	✓	—	—	40.00 W
19F	✓	899.0052	99.0321	50.00 W
7Li	✓	799.0083	99.0232	80.00 W
31P	✓	799.0056	99.0268	80.00 W
117Sn	✓	799.0159	99.0235	80.00 W
13C	✓	798.0277	89.0203	100.00 W

Nuclei	ATMA/ATMM	BB-Tuning	BB-Matching	Power Limit
11B	✓	798.0122	99.0227	81.34 W
87Rb	✓	798.0092	99.0223	80.00 W
23Na	✓	797.0154	67.0053	95.80 W
79Br	✓	795.0093	99.0035	100.00 W
113Cd	✓	794.0229	99.0022	100.00 W
29Si	✓	792.0222	99.0062	100.00 W
127I	✓	792.0198	99.0068	100.00 W
77Se	✓	792.0168	89.0172	100.00 W
2H	✓	784.0282	95.0228	100.00 W
17O	✓	779.0198	87.0118	100.00 W
15N	✓	754.0171	83.0146	120.00 W
14N	✓	682.0179	74.0218	120.00 W
95Mo	✓	657.0303	70.0112	120.00 W
109Ag	✓	480.0231	46.0233	120.00 W
119Sn	✓	326.0092	76.0014	80.00 W

Compte! no n'hi ha prou amb que la sonda s'hagi sintonitzat a un nucli per poder-lo detectar. També s'ha de:



- configurar l'*Acquisition Correction Table* o CORTAB del nucli; i
- mesurar el puls de 90° per totes les combinacions de fonts de rf i amplificadors que es vulguin fer servir (normalment observació i desacoblament); i
- entrar al PROSOL els valors dels pulsos de 90° mesurats i calibrar la resta de pulsos.

Sonda HR-MAS

La sonda no té PICS i, per això no es detecta i configura automàticament, però faig servir l'opció *Manage* → *Import Old Probe* de l'Edprobe (obrir amb la comanda edhead) per importar la configuració a partir del fitxer *B3748_0321_34.par* d'una versió anterior del TopSpin.

Li asigno el nickname *4 mm HRMAS 1H/13C/31P* i comprovo la configuració:

Parameter name	Value
PHNAME	4 mm HRMAS 1H/13C/31P-2H Z-GRD B3748/0321
PHTYPE	HRMAS
PHGTYPE	MAS

Aquesta configuració es guarda al fitxer */opt/topspin3.5pl6/conf/instr/probeheads/B3748_0321.par*

Instal·lació dels experiments amb "expinstall"

Executo la comanda `expinstall` i selecciono els tres conjunts d'experiments disponibles:

- High Resolution Systems
- Solid State Systems
- Micro-Imaging and Diffusion Systems

i es completa el procés sense errors ni avisos.

Còpies de seguretat amb `nmr-save`

Provo a configurar les còpies de seguretat automàtiques amb `nmr-save` però em dóna un error de compilació (veure l'apartat següent). Un cop resolto l'error, configuro el TopSpin perquè es facin automàticament les següents còpies de seguretat:

-  Fix Me!
-  Fix Me!

Compilació dels programes AU

Intento configurar les còpies de seguretat automàtiques però dóna un error quan intenta compilar el programa `nmr_save`,

```
nmr_save.c:30:19: fatal error:stdio.h: No such file or directory
#include <stdio.h>
                ^
compilation terminated
```

Per resoldre'l instal·lo les següents biblioteques de l'arquitectura i386:

- `libc6-dev:i386` (instal·la `libc-dev-bin`, `linux-libc-dev:i386`, `manpages-dev`)
- `libc6-dev-i386:amd64` (instal·la múltiples paquets de l'arquitectura amd64 relacionats amb gcc, `lib32`, `libc6`, `libx32`, i altres, necessaris per compilar aplicacions de 32-bits en un entorn de 64-bits)

Amb això aconseguixo compilar el programa AU `nmr_save`. Llavors provo a compilar tots els programes AU amb la comanda `cplbruk all` i es compilen sense cap missatge d'error.

Configuració dels solvents amb "edprosol"

Com que no funciona correctament la importació dels valors de potència a partir d'un fitxer de configuració de la versió 2.x del TopSpin, decideixo entrar a mà el valor del puls de 90° i deixar que el Prosol calculi la resta de pulsos. Els nuclis calibrats són:

- ^1H , ^2H , ^{11}B , ^{13}C , ^{19}F , ^{29}Si , ^{31}P

Configuració dels paràmetres del client i sistema



Comprovar i/o completar les dades

Un cop completada la configuració del TopSpin amb la comanda `cf`, a la finestra de *Additional Setups* - *Important* executo la comanda `Edcstm` per entrar la informació sobre el sistema i el client:

Customer Info	
Customer Name *	Servei de Ressonància Magnètica Nuclear
Operator Name	—
Company *	Universitat Autònoma de Barcelona
Address	Edifici C, Campus de Bellaterra s/n
Postal Code	08193
City *	Cerdanyola del Vallès
Country *	Catalunya (Spain)
Phone Contact Customer *	+34 93 581 2291
Mobile	—
Fax	—
E-Mail *	s.rmn@uab.cat
Bruker Info	
Engineer *	Òscar Benítez
Office *	Bruker Española, S.A.
Central Hotline Phone *	+34 686 944 920
Central Hotline E-Mail *	oscar.benitez@bruker.com
System Info	
Order No. *	
Contract Service No	—
System Type	Avance III 400
Console Part and Serial No	
Coil	
Dewar	
Shim System Offset *	
Shim System Angle	—
CryoProbe Order No.	—
Location	Servei de Ressonància Magnètica Nuclear
Register No.	

* Required Fields

Configuracions opcionals: Ednuc, Edsolv, Edscon i MICS

setup

Un cop completada la configuració del TopSpin amb la comanda `cf`, a la finestra de *Additional Setups* - *Optional* executo les següents comandes de configuració:

- `Ednuc`: s'obre una taula amb la llista de nuclis, i la guardo;
- `Eddsolv`: s'obre una taula amb la llista de solvents i, després de comprovar-la, la tanco;
- `Edscon`: s'obre una finestra amb paràmetres de l'espectròmetre, deixo els valors per defecte, i la tanco;
- `MICS setup`: no executo aquesta comanda.

Cortab dels nuclis

Comprovo si s'ha importat el calibratge (Cortab) dels nuclis:

- `1H, 2H, 6Li, 7Li, 11B, 13C, 15N, 19F`
- `23Na, 27Al, 29Si, 31P, 39K, 67Zn, 71Ga, 77Se, 79Br, 87Rb, 95Mo`
- `103Rh, 111Cd, 113Cd, 119Sn, 127I, 195Pt, 199Hg, 207Pb`

i trobo que només estan disponibles els taules de:

- `39K, 95Mo, 15N, 2H, 29Si, 79Br, 13C, 23Na, 11B, 31P, 19F, 1H, 2H`

Comprovacions varies

Fitxers `gp/user`, `par/user`, `pp/user`, ...

Comprovo que s'hagin copiat a la nova versió de TopSpin els fitxers que hi havia a les següents carpetes de l'anterior versió:

-  `<TOPSPIN_HOME>/exp/stan/nmr/par/users/`
-  `<TOPSPIN_HOME>/exp/stan/nmr/par/teo*` (i `pau*`, `mir*`. Tots es copien a `<TOPSPIN_HOME>/exp/stan/nmr/par/users/`)
-  `<TOPSPIN_HOME>/exp/stan/nmr/lists/pp/users/`
-  `<TOPSPIN_HOME>/exp/stan/nmr/lists/gp/users/` (carpeta buida)
-  `<TOPSPIN_HOME>/exp/stan/nmr/lists/vc/` (carpeta buida)
-  `<TOPSPIN_HOME>/exp/stan/nmr/lists/vd/`
-  `<TOPSPIN_HOME>/exp/stan/nmr/lists/vt/` (carpeta buida)
-  `<TOPSPIN_HOME>/exp/stan/nmr/lists/wave/users/`

Fitxers `au/src/user`

No hi ha cap fitxer AU a la carpeta:

- `<TOPSPIN_HOME>/exp/stan/nmr/au/src/users/`

Afegir sermnadmin al grup 'nmrsu'

Afegeixo l'usuari *sermnadmin* al grup *nmrsu*.

Transferència de les dades

Aconsegueixo una còpia de seguretat antiga que servirà per recuperar algunes dades, fitxers de paràmetres, etcètera mentre s'intenta recuperar el contingut del disc dur avariats.

Dades de rmn de la posta en marxa de l'equip

Copio el contingut de l'antiga carpeta */opt/~TOPSIN-21/data* (accept, final, etc.)

```
root@cie-55-31:/home/sermnadmin/Documents/old-old-hdd-recovery/sdb4-old-old-hdd-opt/topspin/data# rsync -Hvax --progress --stats ./*/  
/opt/topspin3.5pl6/data/  
[...]  
Number of files: 7,573 (reg: 6,405, dir: 1,168)  
Number of created files: 7,573 (reg: 6,405, dir: 1,168)  
Number of deleted files: 0  
Number of regular files transferred: 6,405  
Total file size: 459,101,587 bytes  
Total transferred file size: 459,101,587 bytes  
Literal data: 459,101,587 bytes  
Matched data: 0 bytes  
File list size: 65,536  
File list generation time: 0.001 seconds  
File list transfer time: 0.000 seconds  
Total bytes sent: 459,608,752  
Total bytes received: 128,851  
  
sent 459,608,752 bytes  received 128,851 bytes  54,086,776.82 bytes/sec  
total size is 459,101,587  speedup is 1.00
```

Dades de rmn d'una antiga instal·lació

Copio les dades de rmn que hi havia en una còpia de seguretat antiga

```
root@cie-55-31:/home/sermnadmin/Documents/old-old-hdd-recovery/sdb4-old-old-hdd-opt/sermn-uab# rsync -Hvax --progress --stats ./data /home/sermnadmin/
```


Exportació de la carpeta de dades

Exporto la carpeta de dades i la carpeta `~topspin/exp/stan/nmr/lists/` al servidor de dades. Primer afegeixo les entrades corresponents al fitxer `/etc/exports`

```
root@cie-55-31:/etc# cat /etc/exports
# /etc/exports: the access control list for filesystems which may be
exported
#
#           to NFS clients.  See exports(5).
#
# Example for NFSv2 and NFSv3:
# /srv/homes          hostname1(rw,sync,no_subtree_check)
hostname2(ro,sync,no_subtree_check)
#
# Example for NFSv4:
# /srv/nfs4           gss/krb5i(rw,sync,fsid=0,crossmnt,no_subtree_check)
# /srv/nfs4/homes     gss/krb5i(rw,sync,no_subtree_check)
#
# SERMN - EXPORTED FOLDERS
#
# Export data folder to SeRMN data server
/home/sermnuab/data
sermn.uab.es(ro,sync,no_subtree_check,root_squash,all_squash,insecure)
#
# Export TopSpin 3.5 pl6 lists folder to SeRMN data server
/opt/topspin3.5pl6/exp/stan/nmr/lists
sermn.uab.es(ro,sync,no_subtree_check,root_squash,all_squash,insecure)
#
# DO NOT MAKE CHANGES BELOW THIS LINE
/usr/diskless/dl_usr          spect(sync,ro)
/usr/diskless/clients/spect   spect(sync,rw,no_root_squash)
```

i després exporto les carpetes i comprovo que estiguin disponibles i els permisos amb què s'exporten,

```
root@cie-55-31:/etc# exportfs -av
exportfs: /etc/exports [7]: Neither 'subtree_check' or 'no_subtree_check'
specified for export "spect:/usr/diskless/dl_usr".
    Assuming default behaviour ('no_subtree_check').
    NOTE: this default has changed since nfs-utils version 1.0.x

exportfs: /etc/exports [8]: Neither 'subtree_check' or 'no_subtree_check'
specified for export "spect:/usr/diskless/clients/spect".
    Assuming default behaviour ('no_subtree_check').
    NOTE: this default has changed since nfs-utils version 1.0.x

exporting spect:/usr/diskless/clients/spect
exporting spect:/usr/diskless/dl_usr
```

```
exporting sermn.uab.es:/opt/topspin3.5pl6/exp/stan/nmr/lists
exporting sermn.uab.es:/home/sermnuab/data
```

Llavors provo a muntar les carpetes al servidor de dades i no em dona cap error, i es pot accedir al contingut de les carpetes.

Adreces IP dels mòduls de la consola



Aquestes adreces només donen accés als mòduls de la consola si es visiten des de l'ordinador de l'espectròmetre. Des de qualsevol altre ordinador, en la major part dels casos no porten enlloc (són adreces de xarxa local) o a altres ordinadors/dispositius que no tenen res a veure amb els indicats aquí.

- [IPSO Service Web - Main](#)
- [DRU Service Web - AQS Main](#)
- [BSMS Service Web - Main Menu](#)
- [Bruker Gradient Amplifier - Device Information](#)

Nuclis disponibles amb la sonda 1H-BB/19F BBO+ATMA

La taula següent resumeix l'estat actual dels nuclis que haurien d'estar disponibles a la sonda 1H-BB/19F BBO+ATMA:

	Probe: 1H-BB/19F BBO+ATMA			Console: SGU & Amp
Nuclei	ATMA / ATMM (Tune & Match)	Power Limit	PROSOL (Pulses)	CORTAB (RF Calibration)
1H	✓	✓	✓	✓
13C	✓	✓	✓	✓
31P	✓	✓	✓	✓
19F	✓	✓	✓	✓
2H	✓	✓	✓	✓

From:
<https://sermn.uab.cat/wiki/> - **SeRMN Wiki**

Permanent link:
https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp_xw4400_400sb_topspin361&rev=1560108199

Last update: 2019/06/09 21:23

