Instal·lació del Topsin 3.5 Pl 6

2017-05-18 - TREBALL EN MARXA / WORK IN PROGRESS

- instal·lar el sistema operatiu Debian GNU/Linux
- instal·lar i configurar el TopSpin 3.5 pl 6
- recuperar els *parameter sets* a partir d'una còpia antiga i de l'av3-600
- comprovar el CORTAB
  - no està disponible per tots els nuclis
  - caldrà recalibrar de nou els que manquen
- definir els valors de referència de durada i potència dels pulsos (`edprosol`)
  - tasca feta pels nuclis més habituals
- convertir els *parameter sets* de PL/SP a PLW/SPW
  - tasca feta pels *parameter sets* més habituals. Per la resta cal executar `getprosol` després de carregar un *parameter set* amb `rpar`
-
- 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.
- optimar 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.
- ...
- ...

S'instal·la la darrera versió disponible per consoles AvanceIII: Topspin 3.5 Patchlevel 6.

Addició de l'arquitectura de 32-bits

Executo la comanda `dpkg –add-architecture i386` i `apt-get update` per afegir la col·lecció de paquets de 32-bits i poder instal·lar les biblioteques necessàries per executar alguns programes de TopSpin de 32-bits, per exemple, el programa d'instal·lació i el servei *bfsd*.

Instal·lo els següents paquets:

- libc6-i386 (instal·la els paquets: gcc-4.9-base, libc6-i686, libgcc1)
- libx11-6 [i386] (instal·la els paquets: libxau6, libxcb1, libxdmcp6)
- libxft2 [i386] (instal·la els paquets: libexpat1, libfontconfig1, libfreetype6, libpng12, libxrender1, zliblg)
- libsm6 [i386] (necessària pel programa xpdf, instal·la els paquets: libice6, libuuid1, uuid-runtime)

Per més informació consultar els enllaços:

- Debian multiarch support
- Multiarch HOWTO for users. User-oriented info on how to use multiarch: configuration, installation, cross-building.

Instal·lació del Topspin 3.5 Pl-6

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

```
sermnadmin@cie-55-31:~/Downloads/Topspin-3.5-pl6$ ./linux-topspin3.5.6.sh
Verifying archive integrity... All good.
Uncompressing TopSpin 3.5pl6
Not enough space left in /tmp (342973 KB) to decompress ./linux-
topspin3.5.6.sh (896471 KB)
Consider setting TMPDIR to a directory with more free space.

sermnadmin@cie-55-31:~/Downloads/Topspin-3.5-pl6$ export
TMPDIR=/home/sermnadmin/Temp/
sermnadmin@cie-55-31:~/Downloads/Topspin-3.5-pl6$ printenv TMPDIR
/home/sermnadmin/Temp/

sermnadmin@cie-55-31:~/Downloads/Topspin-3.5-pl6$ ./linux-topspin3.5.6.sh
Verifying archive integrity... All good.
Uncompressing TopSpin 3.5pl6  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/selfgz15084/linux/tcl-8.5.16/lib/tcl8.5
NOTE: using
TK_LIBRARY=/home/sermnadmin/Temp/selfgz15084/linux/tk-8.5.16/lib/tk8.5
NOTE: running /home/sermnadmin/Temp/selfgz15084/linux/tk-8.5.16/bin/wish8.5
-f /home/sermnadmin/Temp/selfgz15084/xwinstall.d/swim/lib/xwinstall.tcl --
NOTE: using log file: /tmp/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/topspin3.5pl6

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
```

i el programa mostra un missatge d'error:

```
***  Error  ***

Could not show firewall rules for MICS:
(command: /bin/bash /opt/Bruker/mics/setfirewall.sh show)

/opt/Bruker/mics/service-lib.sh: line 241: rpm: command not found
Fatal error:  is not a number
/opt/Bruker/mics/setfirewall.sh: terminated with status 3
```

Cal comprovar si el firewall està actiu i si cal configurar algunes regles pel TopSpin

Els programes que s'instal·laran són:

- TopSpin 3.5pl6
- CMC-a 2.5
- IconNMR 5.0.6_32
- Diskless 3.5.20160805
- NMR-Sim 6.0.b
- MICS 2.06d
- NMR-GUIDE 4.4
- NMR-Data 8.7
- FLEXlm 9.5.9

El registre del procés d'instal·lació s'anota als fitxers:

- /tmp/install.log
- /opt/topspin3.5pl6/install.log

El programa d'instal·lació mostra un missatge d'avís relacionat amb el compte de l'usuari flexlm

```
*** Warning ***

Cannot create user account 'flexlm' and/or group 'flexlm':
Cannot create user account flexlm: useradd flexlm : useradd: group flexlm
exists - if you want to add this user to that group, use -g.
```

per resoldre el problema, creo el compte de l'usuari a mà amb la comanda `useradd -g flexlm flexlm` i continuo amb la instal·lació.

Al final del procés d'instal·lació i configuració, el programa d'instal·lació informa de **tres errors i un avís** (veure més avall) que estan relacionats amb la configuració dels serveis de xarxa necessaris per servir remotament el sistema operatiu de l'IPSO, i que caldrà resoldre:

```
installation of DISKLESS 3.5 finished>
>> installnmr terminated at 2017-05-18 11:51:47 +0200
>> STEP post terminated for mod=hostacq with result = NEXT
>> STEP post started for mod=ipso at 2017-05-18 11:51:47 +0200 ...
>> cd /tftpboot
>> Status: Running post-installation scripts for IpsoOS
>> ::file::write (version.txt, -log)
>> Status: Post processing for IpsoOS ...
>> Execute cmd: LAUNCH=</bin/bash /tftpboot/install-services >
>> Execute cmd: options log=0 canfail=0 cont=0 argc=2>
>> Execute cmd: pwd=</tftpboot>

***  ERROR:  ***

Could not enable service tftp: not in xinetd.conf

Failed to get unit file state for dhcpd.service: No such file or directory
Failed to execute operation: No such file or directory
(systemctl enable dhcpd.service) [FAILED]
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/systemd/system/dhcpd.service

/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
systemctl enable dhcpd.service ... command: echo > /tftpboot/dhcpd.service
command: cp -af /tftpboot/dhcpd.service /etc/systemd/system/dhcpd.service
command: restorecon -v /etc/systemd/system/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)

May 18 11:51:47 cie-55-31 systemd[1]: dhcpd.service lacks both ExecStart=
and ExecStop= setting. Refusing.
May 18 11:51:47 cie-55-31 systemd[1]: dhcpd.service lacks both ExecStart=
and ExecStop= setting. Refusing.
/tftpboot/install-services: terminated with error status 1

Saved in: /opt/topspin3.5pl6/install.log
```

Aquests errors es 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 `alien` 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 Seen per continuar, Fix Me! i ja miraré més endavant si cal corregir o completar aquest pas de la instal·lació.

Error FLEXlm post installation

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

```
during command installation script (post)
Errors:
./Bruker/service-lib.sh: line 241: rpm: command not found
 is not a number
/home/sermnadmin/Downloads/Topspin-3.2.7/Topspin3.2PL7/xwinstall.d/modscript
s/flexlm.post: terminated with status 99

Output:
```

i

```
Error: Execute cmd: exit=99
Error: Execute cmd: error=<./Bruker/service-lib.sh: line 241: rpm: command
not found
 is not a number
/home/sermnadmin/Downloads/Topspin-3.2.7/Topspin3.2PL7/xwinstall.d/modscript
s/flexlm.post: terminated with status 99>
```

Com en el cas de l'error anterior, premo el botó Seen per continuar, i Fix Me! ja miraré més endavant si cal completar o corregir algun pas del procés d'instal·lació i/o configuració.

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 Seen per continuar, i Fix Me! 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 no funciona perquè no troba algunes biblioteques de 32-bits (arquitectura i386)

```
sermnadmin@cie-55-31:~$ topspin
TopSpin 3.5 pl 6  -  Copyright (C) 2016 Bruker BioSpin GmbH
Installation directory: "/opt/topspin3.5pl6"
Waiting for FLEXlm license

Cannot checkout TopSpin FLEXlm license
Invalid license file syntax
Feature:       TOPSPIN3
License path:  /usr/local/flexlm/Bruker/licenses/license.dat
FLEXlm error:  -2,413
For further information, refer to the FLEXlm End User Manual,
available at "www.macrovision.com".

The FLEXlm host ID of this machine is 0010182755de

      If your workstation controls the spectrometer,
      you may run the program without license.
      This requires the acquisition server to be ready.

checking connection to spectrometer (may last several minutes)
CPR : 2017-05-19 17:30:51.941 +0200
      TopSpin is currently running under
      the spectrometer service license.
      Please apply to receive a correct
      license for your workstation
      using the online license form:
      https://www.bruker.com/nmr_license_requests.html

error message cprserver: GetSystemPrinterList: dlopen(libcups.so) failed
Exception in thread "main" java.lang.UnsatisfiedLinkError:
/opt/topspin3.5pl6/jre/lib/i386/libawt_xawt.so: libXtst.so.6: cannot open
shared object file: No such file or directory
    at java.lang.ClassLoader$NativeLibrary.load(Native Method)
```

```
    at java.lang.ClassLoader.loadLibrary0(ClassLoader.java:1941)
    at java.lang.ClassLoader.loadLibrary(ClassLoader.java:1824)
    at java.lang.Runtime.load0(Runtime.java:809)
    at java.lang.System.load(System.java:1086)
    at java.lang.ClassLoader$NativeLibrary.load(Native Method)
    at java.lang.ClassLoader.loadLibrary0(ClassLoader.java:1941)
    at java.lang.ClassLoader.loadLibrary(ClassLoader.java:1845)
    at java.lang.Runtime.loadLibrary0(Runtime.java:870)
    at java.lang.System.loadLibrary(System.java:1122)
    at java.awt.Toolkit$3.run(Toolkit.java:1636)
    at java.awt.Toolkit$3.run(Toolkit.java:1634)
    at java.security.AccessController.doPrivileged(Native Method)
    at java.awt.Toolkit.loadLibraries(Toolkit.java:1633)
    at java.awt.Toolkit.<clinit>(Toolkit.java:1668)
    at java.awt.Color.<clinit>(Color.java:275)
    at de.bruker.nmr.mfw.base.BSplashScreen.<clinit>(BSplashScreen.java:44)
    at de.bruker.nmr.mfw.base.MfwBuilder.programMain(MfwBuilder.java:420)
    at bruker.bio.start.topspin.Start.main(Start.java:47)

premature Java Virtual Machine termination
Program is exiting ...


Hit ENTER to continue ...
```

Ho comprovo amb la comanda `ldd`

```
sermnadmin@cie-55-31:~$ ldd /opt/topspin3.5pl6/jre/lib/i386/libawt_xawt.so
    linux-gate.so.1 (0xf779f000)
    libpthread.so.0 => /lib/i386-linux-gnu/i686/cmov/libpthread.so.0
(0xf7719000)
    libm.so.6 => /lib/i386-linux-gnu/i686/cmov/libm.so.6 (0xf76d3000)
    libawt.so => /opt/topspin3.5pl6/jre/lib/i386/libawt.so (0xf7621000)
    libXext.so.6 => /usr/lib/i386-linux-gnu/libXext.so.6 (0xf760c000)
    libX11.so.6 => /usr/lib/i386-linux-gnu/libX11.so.6 (0xf74ba000)
    libXrender.so.1 => /usr/lib/i386-linux-gnu/libXrender.so.1 (0xf74ae000)
    libdl.so.2 => /lib/i386-linux-gnu/i686/cmov/libdl.so.2 (0xf74a9000)
    libXtst.so.6 => not found
    libXi.so.6 => not found
    libjava.so => /opt/topspin3.5pl6/jre/lib/i386/libjava.so (0xf7483000)
    libjvm.so => not found
    libc.so.6 => /lib/i386-linux-gnu/i686/cmov/libc.so.6 (0xf72d6000)
    /lib/ld-linux.so.2 (0x56648000)
    libjvm.so => not found
    libxcb.so.1 => /usr/lib/i386-linux-gnu/libxcb.so.1 (0xf72af000)
    libjvm.so => not found
    libverify.so => /opt/topspin3.5pl6/jre/lib/i386/libverify.so
(0xf72a3000)
    libXau.so.6 => /usr/lib/i386-linux-gnu/libXau.so.6 (0xf729f000)
```

```
    libXdmcp.so.6 => /usr/lib/i386-linux-gnu/libXdmcp.so.6 (0xf7298000)
    libjvm.so => not found
sermnadmin@cie-55-31:~$ ldd /opt/topspin3.5pl6/jre/lib/i386/libawt_xawt.so
    linux-gate.so.1 (0xf770a000)
    libpthread.so.0 => /lib/i386-linux-gnu/i686/cmov/libpthread.so.0
(0xf7684000)
    libm.so.6 => /lib/i386-linux-gnu/i686/cmov/libm.so.6 (0xf763e000)
    libawt.so => /opt/topspin3.5pl6/jre/lib/i386/libawt.so (0xf758c000)
    libXext.so.6 => /usr/lib/i386-linux-gnu/libXext.so.6 (0xf7577000)
    libX11.so.6 => /usr/lib/i386-linux-gnu/libX11.so.6 (0xf7425000)
    libXrender.so.1 => /usr/lib/i386-linux-gnu/libXrender.so.1 (0xf7419000)
    libdl.so.2 => /lib/i386-linux-gnu/i686/cmov/libdl.so.2 (0xf7414000)
    libXtst.so.6 => /usr/lib/i386-linux-gnu/libXtst.so.6 (0xf740b000)
    libXi.so.6 => /usr/lib/i386-linux-gnu/libXi.so.6 (0xf73f8000)
    libjava.so => /opt/topspin3.5pl6/jre/lib/i386/libjava.so (0xf73d3000)
    libjvm.so => not found
    libc.so.6 => /lib/i386-linux-gnu/i686/cmov/libc.so.6 (0xf7226000)
    /lib/ld-linux.so.2 (0x565df000)
    libjvm.so => not found
    libxcb.so.1 => /usr/lib/i386-linux-gnu/libxcb.so.1 (0xf71ff000)
    libjvm.so => not found
    libverify.so => /opt/topspin3.5pl6/jre/lib/i386/libverify.so
(0xf71f3000)
    libXau.so.6 => /usr/lib/i386-linux-gnu/libXau.so.6 (0xf71ef000)
    libXdmcp.so.6 => /usr/lib/i386-linux-gnu/libXdmcp.so.6 (0xf71e8000)
    libjvm.so => not found
```

i les instal·lo. Per això cal instal·lar els següents paquets de l'arquitectura *i386* (32-bits) i aquells dels que en depenen (instal·lació automàtica):

- libxext6 [i386]
- libxtst6 [i386] (instal·la libxi6)
- libxi6 [i386] (ja instal·lada)
- libcups2 [i386] (instal·la un munt de dependències)
- libxmu6 [i386] (instal·la libxt6)

Els missatges “libjvm.so ⇒ not found” es poden ignorar ja que la biblioteca “libjvm.so” està disponible al TopSpin (*/opt/topspin3.2/jre/lib/i386/[client|server]/libjvm.so*).

Ara el TopSpin ja s'executa,

```
sermnadmin@cie-55-31:~$ topspin
TopSpin 3.5 pl 6  -  Copyright (C) 2016 Bruker BioSpin GmbH
Installation directory: "/opt/topspin3.5pl6"
Waiting for FLEXlm license

Cannot checkout TopSpin FLEXlm license
Invalid license file syntax
```

```
Feature:       TOPSPIN3
License path:  /usr/local/flexlm/Bruker/licenses/license.dat
FLEXlm error:  -2,413
For further information, refer to the FLEXlm End User Manual,
available at "www.macrovision.com".

The FLEXlm host ID of this machine is 0010182755de

      If your workstation controls the spectrometer,
      you may run the program without license.
      This requires the acquisition server to be ready.

checking connection to spectrometer (may last several minutes)
CPR : 2017-05-19 17:33:57.165 +0200
      TopSpin is currently running under
      the spectrometer service license.
      Please apply to receive a correct
      license for your workstation
      using the online license form:
      https://www.bruker.com/nmr_license_requests.html
```

i puc provar 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:

```
CONFIGURATION INFORMATION
=========================

Path         : /opt/topspin3.5pl6/conf/instr/spect/uxnmr.info
Date         : Mon May 29 17:06:26 2017
Release      : TopSpin 3.5 pl 6
Installed in : /opt/topspin3.5pl6
Host         : cie-55-31
OS           : Linux 3.16.0-4-amd64 #1 SMP Debian 3.16.43-2 (2017-04-30)
CPU          : Intel(R) Core(TM)2 CPU 6600 @ 2.40GHz (2 cores at 2400 MHz)
User         : sermnuab (SeRMN-UAB - Users,,,)
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/topspin3.5pl6/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 = 151014
- 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):
  RO  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:

- 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 Information:

- 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, trobo que funciona amb un experiment de protó (rpar sr_proto all) i de fósfor amb i sense desacoblament (rpar sr_fosfor[cpd] all), però que no funciona amb carboni.

Amb un experiment de carboni (rpar sr_carboni all) dóna un missatge dona un missatge d'error en pantalla quan, després d'haver sintonitzat la sonda a la posició inicial, crida el wobb per mostrar en pantalla la senyal de sintonia mentre la optimitza:

```
atma_ProbeCorba_impl::start exception: Error:can't stat the wobble process
[NucBB-NUcBB-]
```

Aquest missatge es correspon al següent error al fitxer
/opt/topspin3.5pl6/prog/curdir/sermnuab/history

```
10:54:39.938   25157    22 W error msg: atma
    atma_ProbeCorba_impl::start exception: Error:can't start the wobble
process [NucBB-NucBB-]
10:56:25.281   25157    22  error ackn: ok
10:56:25.288   25157          cmd term: atma; status=-2
10:56:25.288   25157         proc term
```

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
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

Parameter name	Value
PHGTYPE	MAS

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

Instal·lacio 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 resolt 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'arquitecura i386:

- libc6-dev:i386 (instal·la libc-dev-bin, linux-libc-dev:i386, manpages-dev)
- libc6-dev-i386:amd64 (instal·la multiples 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 aconsegueixo 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, 11B, 13C, 19F, 29Si, 31P

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. *	Fix Me!
Contract Service No	—
System Type	Avance III 400
Console Part and Serial No	Fix Me!
Coil	Fix Me!
Dewar	Fix Me!
Shim System Offset *	Fix Me!
Shim System Angle	—
CryoProbe Order No.	—

Customer Info	
Location	Servei de Ressonància Magnètica Nuclear
Register No.	Fix Me!

* 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 vàries

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*.

Restriccions a l'usuari 'nmrsu'

Caldrà restringir l'usuari *mrsu*

- ~~que no surti a la finestra de login (gdm3)~~
- ~~que no es pugui fer login remotament via SSH~~
- que no es pugui fer login a l'escriptori

Elimino l'usuari *nmrsu* de la llista d'usuaris que es mostra a la pantalla de login. Per fer-ho, edito el fitxer */etc/gdm3/daemon.conf* (abans faig una còpia de seguretat) i, a la secció `[greeter]` afegeixo les línies:

```
# 20160422 - MCE - Hide nmrsu user from the login screen
IncludeAll = false
Include = sermnadmin,sermnuab
```

Malauradament, un *bug* al programa fa que ignori aquestes línies i que segueixi sortint l'usuari *nmrsu* a la pantalla de login.

Per tal que `nmrsu` no pugui connectar-se remotament via *SSH*, edito el fitxer */etc/ssh/sshd_config* i afegeixo les línies:

```
# 20160422 - MCE - Prevent nmrsu user from log-in via ssh
DenyUsers 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 avariat.

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/sermnuab/
```

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/cl
ients/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 dóna 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_topspin35&rev=1496408623

Last update: **2017/06/02 15:03**