

Instal·lació del 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
- 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.
- 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.
- ...
- ...

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

Instal·lació del Topspin 3.6.1

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

```
sermadmin@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`

```
sermadmin@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.caluu.cat/debian/ jessie/main libqpoll amd64 3.3.8-3.1 [198
kB]
:
:
Get:12 http://ftp.caluu.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]: dhcpd.service lacks both ExecStart=
and ExecStop= setting. Refusing.
Jun 07 15:52:39 cie-55-31 systemd[1]: dhcpd.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 a l'ien 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,  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 [Seen](#) 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/bsmsproxyserver` 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/bsmsproxyserver
    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
:
bsmsproxyserver
    libXp.so.6 => not found
cf
```

```
:
chkpwd
    libpam.so.0 => not found
cpr
:
mddnmr
    libgfortran.so.3 => not found
mvcube
:
nmrquant
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.

Aquest script 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
```

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
=====
...
...
```

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) dona 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 assigno 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 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'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, 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 Resonància Magnètica Nuclear
Operator Name	—
Company *	Universitat Autònoma de Barcelona
Address	Edifici C, Campus de Bellaterra s/n
Postal Code	08193
City *	Cerdanyola del Vallès

Customer Info	
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.	—
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*.

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/sermn-uab/
```

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 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_topspin361&rev=1559957021

Last update: 2019/06/08 03:23

