

Avance III 400 MHz - Instal·lació del Topspin

3.6.3

Instal·lació del Topspin 3.6.3

Instal·lo el TopSpin 3.6.3 a partir del fitxer d'instal·lació descarregat al maig i que vaig fer servir per instal·lar el programa a l'Avance III 600 MHz,

```
$ sh ./topspin-3.6.3-linux.sh
Verifying archive integrity... All good.
Uncompressing TopSpin 3.6.3 100%
NOTE: using DISPLAY=:0.0
Please enter root password if prompted for it.
Password: *****
NOTE: using DISPLAY=:0.0
NOTE: using TCL_LIBRARY=/tmp/selfgz158608332/linux/tcl-8.6.9/lib/tcl8.6
NOTE: using TK_LIBRARY=/tmp/selfgz158608332/linux/tk-8.6.9/lib/tk8.6
NOTE: running /tmp/selfgz158608332/linux/tk-8.6.9/bin/wish8.6 -f
/tmp/selfgz158608332/xwinstall.d/swim/lib/xwinstall.tcl --
NOTE: using log file: /tmp/install.log
```

S'obre la finestra on es mostra el progrés de la instal·lació, i la finestra inicial de la instal·lació, on premo el botó **Next** per començar a instal·lar el TopSpin.

Selecciono que s'instal·lin tots els components,

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

i el directori on s'instal·larà el programa és,

- /opt/topspin3.6.3

Llavors trio que s'instal·li la versió completa del programa,

- Data processing, acquisition and automation
Installs Data Processing, Acquisition and Automation Components for Spectroscopy

i que la carpeta del TopSpin s'afegeixi al *global PATH*.

Al pas següent accepto que nmrsu sigui el *NMR Super User*, i que es crei el compte d'usuari (la contrasenya del compte és l'habitual). Després em demana la contrasenya per *NMR Administration* i assigno l'habitual.

Accepto les altres carpetes d'instal·lació proposades pel programa d'instal·lació,

- MICS: /opt/Bruker/MICS
- NMR-Data: /opt/topspin3.6.3/examdata

Defineixo ens3 com la connexió de xarxa a l'espectròmetre, i dic que es configuri el tallafocs.

A continuació comença el procés d'instal·lació de fitxers:

- extracció dels fitxers de distribució comprimits,
- còpia de les carpetes i fitxers a la carpeta del TopSpin, etc.

Es nota que el disc dur és d'estat sòlid (SSD) i que és molt més ràpid que un disc tradicional perquè en pocs minuts s'acaba la instal·lació i surt en pantalla el missatge "Installation finished with the following results", i es mostra que s'han instal·lat tots els components del programa.

Per acabar premo el botó **Finish** i surto del programa d'instal·lació.

Posada en funcionament del TopSpin 3.6.3

Abans de posar en marxa el TopSpin per primer cop, comprovo que l'IPSO es pugui connectar a l'ordinador i descarregar-se el diskless.

Obro el programa Wireshark per capturar i examinar els paquets a la xarxa de l'espectròmetre i així comprovar l'activitat i detectar qualsevol problema que pugui aparèixer. El primer que veig és que l'IPSO pregunta per la IP 149.239.99.90, que coincideix amb l'adreça definida al fitxer /etc/hosts,

```
# cat /etc/hosts
## 127.0.0.1    localhost localhost.localdomain localhost4
localhost4.localdomain4
### ::1       localhost localhost.localdomain localhost6
localhost6.localdomain6

127.0.0.1     localhost localhost.localdomain
158.109.54.214 cie-54-214.uab.es      cie-54-214      av3-400-sb

# The following lines are related to Bruker NMR spectrometers
# DO NOT REMOVE THEM.
#
# An older TS version?
# 149.236.99.99  spect

# TS 3.6.3
149.236.99.90  spect

149.236.99.1   ASP_ST2

[...]
```

i a Wireshark puc veure que ja s'estableix la correspondència entre adreça IP i MAC, i que l'IPSO sol·licita descarregar-se el seu sistema operatiu PXE/PXElinux, però que no ho aconsegueix, potser perquè cal configurar o activar el servidor o servei (tftp? bootparams?).

Comprovo l'estat de TFTP i, com que està inactiu, l'engego

```
# systemctl status tftp
● tftp.service - Tftp Server
   Loaded: loaded (/usr/lib/systemd/system/tftp.service; indirect; vendor
  preset: disabled)
   Active: inactive (dead)
     Docs: man:in.tftpd

# systemctl start tftp

# systemctl status tftp
● tftp.service - Tftp Server
   Loaded: loaded (/usr/lib/systemd/system/tftp.service; indirect; vendor
  preset: disabled)
   Active: active (running) since Tue 2021-08-24 13:08:07 CEST; 2s ago
     Docs: man:in.tftpd
  Main PID: 22527 (in.tftpd)
   CGroup: /system.slice/tftp.service
           └─22527 /usr/sbin/in.tftpd -s /var/lib/tftpboot

Aug 24 13:08:07 cie-54-214.uab.cat systemd[1]: Started Tftp Server.
```

poc després el Wireshark mostra que l'IPSO aconseguix connectar-se i descarregar-se el seu sistema operatiu, i es restableix la connexió entre l'ordinador i l'IPSO,

```
# ping -c 5 spect
PING spect (149.236.99.90) 56(84) bytes of data.
64 bytes from spect (149.236.99.90): icmp_seq=1 ttl=64 time=0.123 ms
64 bytes from spect (149.236.99.90): icmp_seq=2 ttl=64 time=0.153 ms
64 bytes from spect (149.236.99.90): icmp_seq=3 ttl=64 time=0.147 ms
64 bytes from spect (149.236.99.90): icmp_seq=4 ttl=64 time=0.157 ms
64 bytes from spect (149.236.99.90): icmp_seq=5 ttl=64 time=0.147 ms

--- spect ping statistics ---
5 packets transmitted, 5 received, 0% packet loss, time 3999ms
rtt min/avg/max/mdev = 0.123/0.145/0.157/0.016 ms
```

Problema amb el PXE de l'IPSO

Quan vaig a l'adreça web de l'IPSO (<http://149.236.99.90>) surt el missatge

```
PXES on IPSO
Under construction.
```

```
System information    PXES variables    Boot messages    Administration
```

i quan clico a l'enllaç Administration, surt

```
IPSO Service Web
Main
Version: Diskless 3.6 3
```

Fatal error: Unknown action (undefined)

Aquest error ja sortia amb la versió anterior. Després de consultar el registre de missatges del PXE, se m'ocorre que potser l'error té a veure amb la connexió via port sèrie. Desconnecto el cable sèrie del port TTY0 de l'IPSO, el reinicio, i aquest cop puc accedir a l'aplicació web de gestió de l'IPSO

```
IPSO Service Web
Main
Version: Diskless 3.6 3
```

- * Information
- * Administration
- * RS Devices
- * Function Test
- * Help

→Main

Main | Information | Administration | RS Devices | Function Test | Help

©BRUKER BIOSPIN GMBH

Posada en marxa del TopSpin

Poso en marxa per primer cop el TopSpin i detecta la consola i arrenca amb la "spectrometer service license",

```
$ topspin
TopSpin 3.6.3 - Copyright (C) 2021 Bruker BioSpin GmbH
Installation directory: "/opt/topspin3.6.3"
Waiting for CodeMeter license

2021-08-24 13:32:12.790 +0200
Cannot checkout TopSpin CodeMeter license
No matching license entry found for feature "TOPSPIN3" mapped to product
code 1011013000 .
CmContainer Entry not found, Error 200.

CodeMeter Runtime Version: 7.10.4196
empty CodeMeter Server Search List Configuration

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 : 2021-08-24 13:32:14.290 +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

Configuració de l'espectròmetre



El procés d'instal·lació i configuració s'ha aturat en aquest punt.

Un cop es posa en marxa el TopSpin, s'obre una finestra on posa que cal executar `cf` i després `expinstall` per completar la instal·lació.

Executo `cf`, trio crear un nou espectròmetre, i aprofito l'opció d'importar una configuració anterior per importar el fitxer creat a la instal·lació de maig (carpeta `/mnt/old-opt/topspin3.6.3/conf/instr/spect`). però quan provo a editar, em dona un error perquè no es pot connectar a la DRU ja que la xarxa de l'espectròmetre està caiguda.

Crec que la millor solució serà reiniciar l'ordinador i que configuri la xarxa correctament.

Després de reiniciar-ho el problema amb la xarxa externa persisteix, però la xarxa de l'espectròmetre està configurada. Tanmateix, quan engego el TopSpin no detecta l'IPSO, de forma que el reinici, i poc després ja el detecta i el TopSpin es posa en marxa.

Executo `cf` i trio la configuració d'espectròmetre importada **Avance III 600 (configured in spect)**, la carrega i vaig passant pàgines alhora que comprovo que no surti cap missatge d'error.

- Spectrometer Description
 - Description: Avance III 600 @SeRMN
- Spectrometer Data
 - 1H Spectrometer frequency: 600.130 MHz
- Security Options
 - Enable power check: option not checked
- Optional Standard Devices
 - Bruker Automatic Changer (BACS) connected to: tty01
 - Variable Temperature Unit connected to: 149.236.99.20
- Options for the Sample Changer
 - Sample lift controlled by: Sample Changer
 - Delay between insert of sample and next command: 10 s
 - Start experiment while sample changer in motion: option not checked

Es mostra un error perquè no detecta els amplificadors. Caldrà reiniciar-los i tornar a repetir `cf`. Per altra banda, com que el SampleCase està aturat, també surt el missatge d'error

BSMS Error:

SampleTransporter: Emergency button pressed.

malaauradament per ara no el puc posar en marxa.

Després de reiniciar els amplificadors, aconseguixo completar cf sense errors i el contingut del fitxer uxnmr.info és semblant al de la instal·lació feta al maig,

Fitxer "uxnmr.info"

```
# cat uxnmr.info
CONFIGURATION INFORMATION
=====

Path          : /opt/topspin3.6.3/conf/instr/spect/uxnmr.info
Date          : Fri Aug 13 09:38:41 2021
Release       : TopSpin 3.6.3
Installed in  : /opt/topspin3.6.3
Host          : cie-56-18.uab.cat
OS            : CentOS Linux release 7.9.2009 (Core)
CPU           : Intel(R) Xeon(R) CPU W3550 @ 3.07GHz (4 cores at 3067 MHz)
User         : sermnuab
System        : Avance III 600 NMR spectrometer
1H-frequency  : 600.13 MHz
Description   : Avance III 600 @SeRMN
Location      : SeRMN UAB
Bruker Order  : PH000806
Configured in: cie-56-18.uab.cat:/opt/topspin3.6.3/conf/instr/spect

IPSO: connected to spectrometer subnet
- TCP/IP address = 149.236.99.90
- IPSO type: 19"
- Tctrl : 1
- Fctrls: 3
- Gctrl1: with digital preemphasis
- Rctrl  : none
- FREDs  : none
- DPP    : 1

DRU1: DEB_DEFAULT
- TCP/IP address = 149.236.99.77
- Firmware Version = 170619
- DRU1 controls AQS-Rack and HPPR/2

AQS: connected to 149.236.99.77:/dev/tty10
  _Slot_ SBSB _____ Board _____
  Number Addr Type HW-VS FW-VS ID  ECL Name  Description
```

```

-----
  2  0x10 0x42  0x3  AW R  3.0 REC-1  AQS RXAD600 Z102117/00312 ECL
03.00
  3  0x34 0xc0  0x1      X  0.4 REF-1  REF-600 Reference Board for
AQS Receiver
  4  0x24 0x19  0x8  AD S  2.0 SGU-1  AQS SGU/2 600 Z103081/00300
ECL 02.00 FPGA-Vs=AF
  5  0x25 0x19  0x8  AD S  2.0 SGU-2  AQS SGU/2 600 Z103081/00126
ECL 02.00 FPGA-Vs=AF
  6  0x26 0x19  0x8  AD S  2.0 SGU-3  AQS SGU/2 600 Z103081/00316
ECL 02.00 FPGA-Vs=AF
 21  0x21 0xcf   0      P  1.0 PSD-1  PSD/3 Power Supply
Distribution Board
  -- 0x20 0xc6   0      B  1.2 AQS/2  AQS/2 chassis
  1  0x20  0x7   0      B      MASTER AQS Rack Master
Logical Receiver/SGU configuration:

```

Router: none installed

Transmitters at the spectrometer subnet:

```

-----
BLA_W1345096_0091 W1345096/0091 ECL 1:
- TCP/IP address = 149.236.99.93
- Firmware VS    = 20120627
- Amplifier      = BLAXH2H300/100/150 E 200-600MHZ: W1345096/0091 ECL 1
- Router         = BLMMR32 RF AMPLIFIER MODULE: W1345204/0135 ECL 0
- Controller     = BLA CONTROL BOARD 6 2V H-USB: W1522050/0022 ECL 1
BLA_W1345092_0060 W1345092/0060 ECL 0:
- TCP/IP address = 149.236.99.92
- Firmware VS    = 20120627
- Amplifier      = BLAX300 E 6-365MHZ: W1345092/0060 ECL 0
- Router         = BLMMR31 RF AMPLIFIER MODULE: W1345212/0215 ECL 0
- Controller     = BLA CONTROL BOARD 6 1V V-USB: W1522041/0110 ECL 1

```

Gradient amplifiers at the spectrometer subnet:

```

-----
BGA1: BGA_W1213891_0009
- TCP/IP address = 149.236.99.94
- 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 = 20210212
- SCB channels = 40
- Shim System = BOSS2-SB
- 2HTX Amplifier: not available
- Lock: installed
- VTU_SPB = BSMS/2 SPB-E SENSOR & PNEUMATIC BD: Z115192/00855 ECL 05.04

```

- VTU_VPSB1 = BSMS/2 VARIABLE POWER SUPPLY BD: Z115193/04339 ECL 01.05

VTU: in BSMS/2 connected to ethernet

- TCP/IP address = 149.236.99.20

SampleCase: in BSMS/2 connected to ethernet

- TCP/IP address = 149.236.99.20

Bruker Automatic Changer: device connected to 149.236.99.90:/dev/tty01

- Capacity: 24 holders

- Firmware: 970111

- use BACS air = yes

- BACS sx delay = 10 s

- Sample Rail fast changer mode = no

Eurotherm VTU: device connected to 149.236.99.90:/dev/tty05

- (used by TopSpin)

Preamplifiers :

HPPR2: - HPPR/2 preamplifier connected to 149.236.99.77:/dev/tty10

Type : HPPR/2

Controller: Cover/1 with Application firmware = AQ
15 LEDs for tuning, 15 LEDs for matching

Module 1 : 1H LNA

PN=Z003462, SN=00485 from 20061101

Module 2 : XBB19F 2HS

PN=Z003506, SN=00529 from 20061024

Module 3 : 2H

PN=Z003473, SN=00491 from 20061206

Gradient Controller cable connections

GCtrl1: connected via DPP to GREAT 1-10 Gradient Amplifier Unit
W1213891/0009

RF cable connections (detected)

SGU1 NORM output -> input 1 of transmitter 1 (BLAXH2H300/100/150 E
200-600MHZ W1345096/0091 at TCP/IP 149.236.99.93)

SGU1 AUX output -> input 4 of transmitter 1 (BLAXH2H300/100/150 E
200-600MHZ W1345096/0091 at TCP/IP 149.236.99.93)

SGU2 NORM output -> input 2 of transmitter 1 (BLAXH2H300/100/150 E
200-600MHZ W1345096/0091 at TCP/IP 149.236.99.93)

SGU2 AUX output -> TUNE signal input of HPPR

SGU3 NORM output -> input 3 of transmitter 1 (BLAXH2H300/100/150 E
200-600MHZ W1345096/0091 at TCP/IP 149.236.99.93)

SGU3 AUX output -> input 1 of transmitter 2 (BLAX300 E 6-365MHZ
W1345092/0060 at TCP/IP 149.236.99.92)

Blanking cable connections (detected)

```
-----  
transmitter 1 = BLAXH2H300/100/150 E 200-600MHZ W1345096/0091 at TCP/IP  
149.236.99.93:  
- amplifier 1H-100W uses blanking 2  
- amplifier X-300W uses blanking 1  
- amplifier 2H-150W needs no blanking  
  
transmitter 2 = BLAX300 E 6-365MHZ W1345092/0060 at TCP/IP 149.236.99.92:  
- amplifier X-300W uses blanking 3
```

Fitxers de configuració de les connexions RS232

La configuració de les connexions per port sèrie (RS232) també coincideix amb la del mes de maig,

```
# for FILE in ./rs232_device/*  
> do  
> echo $FILE  
> cat $FILE  
> echo  
> done  
  
./rs232_device/aqs  
# TOPSPIN alpha TTY configuration file  
# created automatically by 'cf'  
# do not edit, changes are lost after next 'cf'  
unit    = AQS  
host    = 149.236.99.77  
device  = /dev/tty10  
type    = RS485  
stty    = 9600 min 1 time 50 cs8 hupcl cread clocal  
  
./rs232_device/bacs  
# TOPSPIN alpha TTY configuration file  
# created automatically by 'cf'  
# do not edit, changes are lost after next 'cf'  
unit    = Bruker Automatic Changer  
host    = 149.236.99.90  
device  = /dev/tty01  
type    = RS232  
stty    = 9600 min 1 time 50 cs8 hupcl cread clocal  
  
./rs232_device/preamp1  
# TOPSPIN alpha TTY configuration file  
# created automatically by 'cf'  
# do not edit, changes are lost after next 'cf'  
unit    = HPPR/2 preamplifier  
host    = 149.236.99.77  
device  = /dev/tty10  
type    = RS485
```

```
stty = 9600 min 1 time 50 cs8 hupcl cread clocal

./rs232_device/temp
# TOPSPIN alpha TTY configuration file
# created automatically by 'cf'
# do not edit, changes are lost after next 'cf'
unit = Eurotherm VTU
host = 149.236.99.90
device = /dev/tty05
type = RS232
stty = 9600 time 5 parenb cs7 cread clocal istrip
```

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

Permanent link: https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp_z230_400sb_topspin363_1&rev=1629810796

Last update: **2021/08/24 15:13**

