

# 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.

Seleccio 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](https://www.bruker.com/nmr_license_requests.html)

## Particions a l'antic disc dur del 400SB

Abans de continuar, munto les particions que hi ha a l'antic disc dur per tal de poder accedir als fitxers de configuració del TopSpin i a les carpetes de dades.

```
# pvscan
PV /dev/sdc5   VG cie-55-31-vg          lvm2 [<465.52 GiB / 5.98 GiB free]
PV /dev/sda2  VG centos_cie-54-214    lvm2 [<464.76 GiB / 4.00 MiB free]
Total: 2 [<930.28 GiB] / in use: 2 [<930.28 GiB] / in no VG: 0 [0  ]
```

```
# vgscan
Reading volume groups from cache.
Found volume group "cie-55-31-vg" using metadata type lvm2
Found volume group "centos_cie-54-214" using metadata type lvm2
```

```
# lvscan
ACTIVE          '/dev/cie-55-31-vg/root' [<8.38 GiB] inherit
ACTIVE          '/dev/cie-55-31-vg/var' [2.79 GiB] inherit
ACTIVE          '/dev/cie-55-31-vg/swap_1' [<8.00 GiB] inherit
ACTIVE          '/dev/cie-55-31-vg/tmp' [380.00 MiB] inherit
ACTIVE          '/dev/cie-55-31-vg/home' [400.00 GiB] inherit
ACTIVE          '/dev/cie-55-31-vg/opt' [40.00 GiB] inherit
ACTIVE          '/dev/centos_cie-54-214/swap' [7.50 GiB] inherit
ACTIVE          '/dev/centos_cie-54-214/home' [407.25 GiB] inherit
ACTIVE          '/dev/centos_cie-54-214/root' [50.00 GiB] inherit
```

## 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 darrera instal·lació (carpeta `/run/media/sermadmin/1b902ee2-`

c0bc-4868-9b8b-f4d714bd19cf/topspin3.6.1) que es guardarà a la carpeta /opt/topspin3.6.3/conf/instr/topspin3.6.1.

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 400 @SeRMN
- Spectrometer Data
  - 1H Spectrometer frequency: 400.130 MHz
- Security Options
  - Enable power check: yes (option checked)
- Optional Standard Devices
  - MAS2 control unit: connected to: tty05
  - Eurotherm VTU: device connected to: tty04

Problemes:

- Com que la MAS Unit està aturada, no la detecta.
  - Solució: poso en marxa la MAS Unit per quan torni a fer cf.
- A l'hora de configurar les connexions de RF, no puc configurar les connexions a la sonda perquè la BBI muntada no té PICS, i tampoc puc fer edprobe perquè no hi ha cap fitxer de configuració.
  - Solució: copio els fitxers de configuració de les sondes que hi havia a l'anterior instal·lació del TopSpin.
- Edprosol: copio els fitxers de configuració per quan hagi d'executar edprosol.

Després de repetir cf, el contingut del fitxer uxnmr.info és semblant al de la darrera instal·lació.

## 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

<u>Slot</u>	<u>SBSB</u>					<u>Board</u>			
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=1629815318](https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp_z230_400sb_topspin363_1&rev=1629815318)

Last update: **2021/08/24 16:28**

