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'adreçs 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 aconsegueix 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
```

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
```

Edito el fitxer `/etc/fstab` i afegeixo les línies,

```
## 20210824 - MCE - Munto provisionalment les particions de l'antic
##                  disc dur per poder accedir a les carpetes de
##                  configuració del tospin i a les carpetes de dades.
##
/dev/mapper/cie--55--31--vg-home    /mnt/old-400sb-home    ext4
ro,defaults    0 0
/dev/mapper/cie--55--31--vg-opt     /mnt/old-400sb-opt     ext4
ro,defaults    0 0
/dev/mapper/cie--55--31--vg-root    /mnt/old-400sb-root    ext4
ro,defaults    0 0
/dev/mapper/cie--55--31--vg-var     /mnt/old-400sb-var     ext4
ro,defaults    0 0

## no cal muntar les antigues particions swap i tmp
##
## cie--55--31--vg-swap_1
## cie--55--31--vg-tmp
```

i llavors munto les particions (ignoro els avisos de SELinux perquè no tinc intenció de modificar el contingut d'aquestes particions, per això les munto `read-only`),

```
# mount -v /mnt/old-400sb-home/
mount: /mnt/old-400sb-home does not contain SELinux labels [...]
mount: /dev/mapper/cie--55--31--vg-home mounted on /mnt/old-400sb-home.

# mount -v /mnt/old-400sb-root/
mount: /mnt/old-400sb-root does not contain SELinux labels [...]
mount: /dev/mapper/cie--55--31--vg-root mounted on /mnt/old-400sb-root.

# mount -v /mnt/old-400sb-var/
mount: /mnt/old-400sb-var does not contain SELinux labels [...]
mount: /dev/mapper/cie--55--31--vg-var mounted on /mnt/old-400sb-var.

# mount -v /mnt/old-400sb-opt/
mount: /mnt/old-400sb-opt does not contain SELinux labels [...]
mount: /dev/mapper/cie--55--31--vg-opt mounted on /mnt/old-400sb-opt.

# df -hl
Filesystem                              Size  Used Avail Use% Mounted on
devtmpfs                                3.7G     0  3.7G   0% /dev
tmpfs                                   3.7G   59M  3.7G   2% /dev/shm
tmpfs                                   3.7G  9.6M  3.7G   1% /run
tmpfs                                   3.7G     0  3.7G   0% /sys/fs/cgroup
/dev/mapper/centos_cie--54--214-root   50G   13G   38G  25% /
```

```
/dev/sda1                               1014M  237M  778M  24% /boot
/dev/mapper/centos_cie--54--214-home     408G  1.4G  406G   1% /home
tmpfs                                    751M   48K  751M   1% /run/user/1000
/dev/mapper/cie--55--31--vg-home         394G  206G  169G  55% /mnt/old-400sb-
home
/dev/mapper/cie--55--31--vg-root         8.2G  4.2G  3.6G  55% /mnt/old-400sb-
root
/dev/mapper/cie--55--31--vg-var          2.7G  910M  1.7G  36% /mnt/old-400sb-
var
/dev/mapper/cie--55--31--vg-opt           40G  6.4G   31G  18% /mnt/old-400sb-
opt
```

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 darrera instal·lació (carpeta `/run/media/sermnadmin/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 reinicio, 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

...
```

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=1629817477

Last update: **2021/08/24 17:04**