

Avance III 400 MHz - Instal·lació del Topspin 3.6.4

Instal·lació del Topspin 3.6.4

Per resoldre el [problema de la versió 3.6.3 amb la unitat de temperatura variable](#), instal·lo la versió TopSpin 3.6.4 a partir del fitxer d'instal·lació descarregat de la web de Bruker,

```
$ sh ./topspin-3.6.4-linux.sh
Verifying archive integrity... All good.
Uncompressing TopSpin 3.6.4 100%
NOTE: using DISPLAY=:0
Please enter root password if prompted for it.
Password:
NOTE: using DISPLAY=:0
NOTE: using TCL_LIBRARY=/tmp/selfgz1602632396/linux/tcl-8.6.9/lib/tcl8.6
NOTE: using TK_LIBRARY=/tmp/selfgz1602632396/linux/tk-8.6.9/lib/tk8.6
NOTE: running /tmp/selfgz1602632396/linux/tk-8.6.9/bin/wish8.6 -f
/tmp/selfgz1602632396/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/topspin3.6.4

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 s'importi la configuració de l'espectròmetre de la versió 3.6.3,

- Select a spectrometer configuration to import
 - spect in /opt/topspin3.6.3

però em surt un missatge d'error

```
*** Warning ***

Cannot import the selected spectrometer configuration (got invalid
```

```
selection: )
```

```
Saved in /tmp/install.log
```

o sigui que l'hauré d'importar manualment al final de la instal·lació.

Llavors li dic que la carpeta del TopSpin s'afegeixi al *global PATH*.

Al pas següent accepto que nmrsu sigui el *NMR Super User*, i assigno a *NMR Administration* la contrasenya habitual.

Després aturo l'IPSO des de la seva aplicació web (<http://149.236.99.90>, menú Administration), i més tard indico que s'ha de reiniciar automàticament

```
The IPSO computer controlling the spectrometer has to be rebooted for the installed Diskless package to take effect.
```

```
Reboot IPSO computer automatically? [Yes]
```

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

- MICS: /opt/Bruker/MICS
- NMR-Data: /opt/topspin3.6.4/examdata

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

A continuació m'indica els programes i versions que s'instal·lara,

Product	Version	Size/MB	Target directory
TopSpin	3.6.4	1595	/opt/topspin3.6.4
Central Audit File	1.0	1	/opt/topspin3.6.4
CMC-a	2.22	1	/opt/topspin3.6.4
IconNMR	5.0.12_6	35	/opt/topspin3.6.4
Diskless	3.6.20210727	45	/opt/topspin3.6.4
NMR-GUIDE	4.4	58	/opt/topspin3.6.4
NMR-Data	8.9	125	/opt/topspin3.6.4

i 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.

Com que he aturat l'IPSO, ara no el pot reiniciar i surt en pantalla el missatge

```
Error: *** Error ***
```

```
Installation of Spectrometer Operating System: Could not reboot the IPSO
```

```
computer:
connect failed connection refused
```

You have to reset or reboot the IPSO computer at IP address 149.236.99.90 manually before the installed Diskless package takes effect.

To do this, either

- press the red button on the IPSO computer, or
- start TopSpin after this installation has been completed, type 'ha', open the IPSO web site, navigate to 'Administration' and click on Reboot.

de forma que el reinici manualment. Llavors premo el botó **Seen** 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 3.6.4

Abans de posar en marxa per primer cop aquesta versió del TopSpin, visito l'adreça web de l'IPSO (<http://149.236.99.90/>) per comprovar que s'hagi reiniciat correctament i que estigui en funcionament.

També comprovo l'estat de TFTP i, com que està inactiu, l'engego, però abans el configuro perquè es posi en marxa automàticament (systemctl enable tftp),

```
# 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 enable tftp
Created symlink from /etc/systemd/system/sockets.target.wants/tftp.socket to
/usr/lib/systemd/system/tftp.socket.

# 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 Thu 2021-08-26 16:02:06 CEST; 2s ago
     Docs: man:in.tftpd
  Main PID: 13576 (in.tftpd)
   CGroup: /system.slice/tftp.service
           └─13576 /usr/sbin/in.tftpd -s /var/lib/tftpboot

Aug 26 16:02:06 cie-54-214.uab.cat systemd[1]: Started Tftp Server.
```



```

++ MEMORY='-Xms64M -Xmx200M -XX:+HeapDumpOnOutOfMemoryError'
++ test '' = cmca
++ SPLASH_OPTIONS=-
splash:/opt/topspin3.6.4/classes/prop/loadinggraphic_600.png
++ JAR='/opt/topspin3.6.4/classes/lib/topspin.jar'
++ START_CLASS=bruker.bio.start.topspin.Start
++ test '' = ICONIFIED
++ VERIFY=-Xverify:none
++ test -z ''
++ test -z ''
++ export 'JAVA_ARGS=-
splash:/opt/topspin3.6.4/classes/prop/loadinggraphic_600.png -Xms64M -
Xmx200M -XX:+HeapDumpOnOutOfMemoryError -Xverify:none -
DsecondVirtualMachine=n -DXWINMRHOME="/opt/topspin3.6.4" -
DCOMPUTERNAME=cie-54-214 -DUSERHOME_DOT_TOPSPIN="/home/sermnadmin/.topspin-
cie-54-214" -Duser.language= -Dawt.useSystemAAFontSettings=lcd -
Djava.endorsed.dirs="/opt/topspin3.6.4/classes/lib/jacorb" -
DTOPSPIN_COMM_DEBUG=0 -Djava.util.Arrays.useLegacyMergeSort=true -jar
"/opt/topspin3.6.4/classes/lib/topspin.jar"'
++ JAVA_ARGS='-splash:/opt/topspin3.6.4/classes/prop/loadinggraphic_600.png
-Xms64M -Xmx200M -XX:+HeapDumpOnOutOfMemoryError -Xverify:none -
DsecondVirtualMachine=n -DXWINMRHOME="/opt/topspin3.6.4" -
DCOMPUTERNAME=cie-54-214 -DUSERHOME_DOT_TOPSPIN="/home/sermnadmin/.topspin-
cie-54-214" -Duser.language= -Dawt.useSystemAAFontSettings=lcd -
Djava.endorsed.dirs="/opt/topspin3.6.4/classes/lib/jacorb" -
DTOPSPIN_COMM_DEBUG=0 -Djava.util.Arrays.useLegacyMergeSort=true -jar
"/opt/topspin3.6.4/classes/lib/topspin.jar"'
+ '[' '' -z '' ']'
+ StartProgram /opt/topspin3.6.4/prog/mod/cpr -c demo
+ '[' /opt/topspin3.6.4/prog/mod/cpr = topspin ']'
+ case "$machine" in
+ export LD_LIBRARY_PATH=/opt/topspin3.6.4/prog/shlib
+ LD_LIBRARY_PATH=/opt/topspin3.6.4/prog/shlib
+ Program=/opt/topspin3.6.4/prog/mod/cpr
+ shift
++ dirname /opt/topspin3.6.4/prog/mod/cpr
+ d=/opt/topspin3.6.4/prog/mod
+ '[' /opt/topspin3.6.4/prog/mod = . ']'
+ '[' '' -f /opt/topspin3.6.4/prog/mod/cpr ']'
+ '[' '' -x /opt/topspin3.6.4/prog/mod/cpr ']'
+ MyExec /opt/topspin3.6.4/prog/mod/cpr -c demo
+ exec /opt/topspin3.6.4/prog/mod/cpr -c demo
TopSpin 3.6.4 - Copyright (C) 2021 Bruker BioSpin GmbH
Installation directory: "/opt/topspin3.6.4"
Waiting for CodeMeter license

2021-08-26 15:57:11.616 +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 : 2021-08-26 15:57:13.104 +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

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 i trio la configuració d'espectròmetre importada **Avance III 400 (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 MHz SB - SeRMN, UAB
- 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

I només surt un error



```
Error setting parameter "LIFTMODE": Parameter does not exist  
(Original message = Error setting parameter "LIFTMODE": Parameter  
does not exist)
```

```
=====  
26 August 2021 16:17:50.630 +0200  
Topspin Version = TopSpin 3.6.4 (of 2021-07-26 14:56:34), build 95  
OS Name         = Linux 3.10.0-1160.25.1.el7.x86_64  
JVM Version     = 1.8.0_242 (64 bit) AdoptOpenJDK  
JVM Total memory = 236 MB  
JVM Free memory = 142 MB
```



```
java.lang.Exception: Stack trace
  at
  bruker.bio.topspin.bfw.gui.warn.AbstractMessage.getDetailsString(A
  bstractMessage.java:875)
  at
  bruker.bio.topspin.bfw.gui.warn.AbstractMessage.setMsgSource(Abstr
  actMessage.java:837)
  at
  bruker.bio.topspin.bfw.gui.warn.AbstractMessage.<init>(AbstractMes
  sage.java:821)
  at de.bruker.nmr.mfw.base.BWarning.<init>(BWarning.java:59)
  at de.bruker.nmr.mfw.base.BError.<init>(BError.java:50)
  at de.bruker.nmr.sc.util.Misc.makeDialog(Misc.java:119)
  at de.bruker.nmr.sc.util.Misc.showMsg(Misc.java:98)
  at de.bruker.nmr.sc.util.Misc.showMsg(Misc.java:72)
  at de.bruker.nmr.sc.util.Misc.showMsg(Misc.java:59)
  at
  de.bruker.nmr.sc.bsms.impl.BsmsCorbaUtil$1.run(BsmsCorbaUtil.java:
  147)
  at java.lang.Thread.run(Thread.java:748)
```

Fitxer "uxnmr.info"

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

Path      : /opt/topspin3.6.4/conf/instr/spect/uxnmr.info
Date      : Thu Aug 26 16:17:50 2021
Release   : TopSpin 3.6.4
Installed in : /opt/topspin3.6.4
Host      : cie-54-214.uab.cat
OS        : CentOS Linux release 7.9.2009 (Core)
CPU       : Intel(R) Xeon(R) CPU E3-1246 v3 @ 3.50GHz (8 cores at 3500
MHz with Hyperthreading)
User      : sermnadmin (SeRMN Staff)
System    : Avance III 400 NMR spectrometer
1H-frequency : 400.13 MHz
Description : Avance III 400 MHz SB - SeRMN, UAB
Bruker Order : Instal·lat al 1993
Configured in: cie-54-214.uab.cat:/opt/topspin3.6.4/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 = 170619
- 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):

R0	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 = 149.236.99.92
- 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

Fitxers de configuració de les connexions RS232

La configuració de les connexions per port sèrie (RS232) és la mateixa que a la versió 3.6.3 perquè he copiat els fitxers de configuració,

- `~topspin/conf/instr/spect/rs232_device/aqs`
- `~topspin/conf/instr/spect/rs232_device/mas`
- `~topspin/conf/instr/spect/rs232_device/mas2`
- `~topspin/conf/instr/spect/rs232_device/preamp1`
- `~topspin/conf/instr/spect/rs232_device/temp`

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

Permanent link:
https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp_z230_400sb_topspin364_1

Last update: **2021/08/26 16:31**

