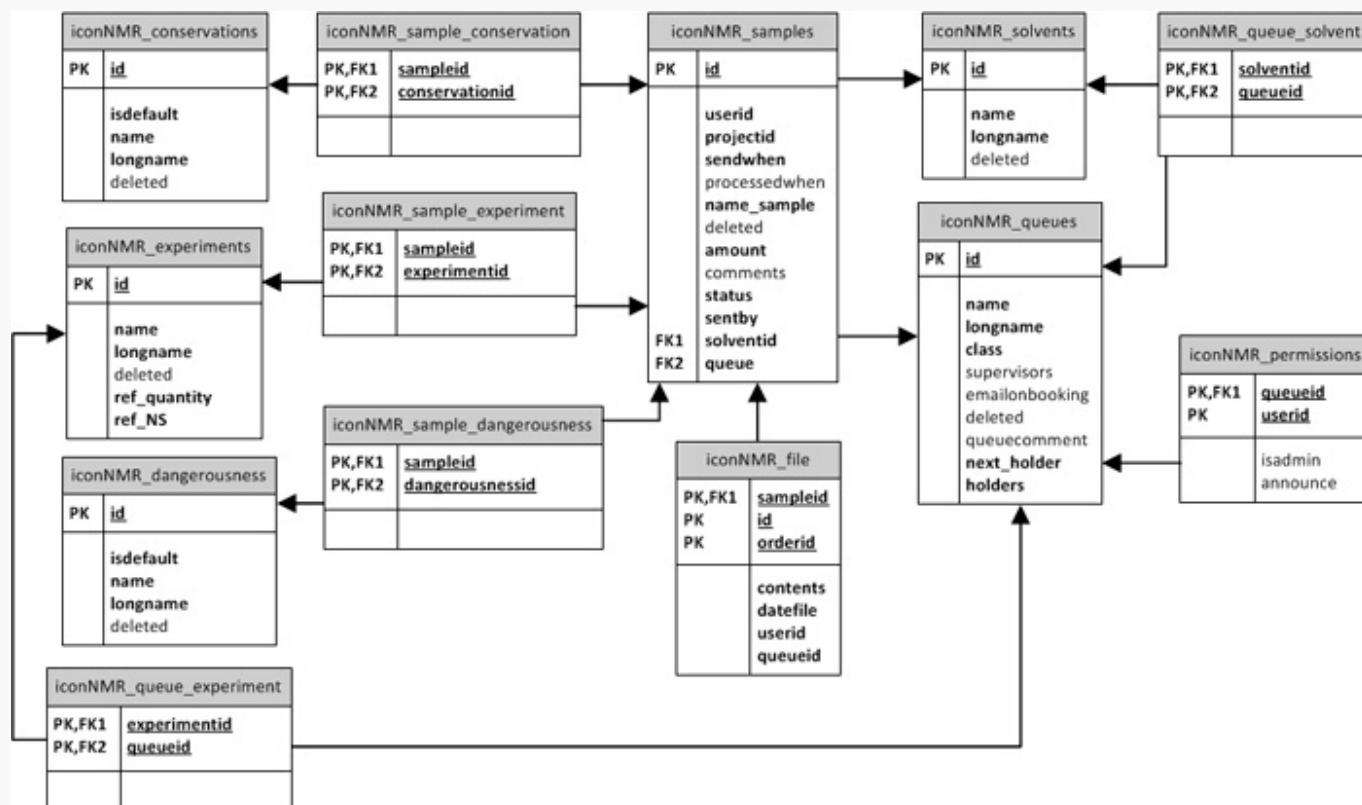


Cua de Rutina (Mòdul) - IconNMR

Diagrama de taules per el mòdul iconNMR



Nota: no surt al diagrama, però, els camps userid i sentby són claus externes de la taula ja existent 'users'. Igualment, el camp projectid és clau externa de la taula també existent 'projects'.

Reunió 30-05-12

Les frases taxades volen dir que ja ha estat implementat.

- Formulari d'enviar un Sample:
 - Sample name abans de Solvent
 - Spectrum Quality: High or Low (per defecte Low). Si és High, ns*2.
 - Sample prepared: Yes or Not (per defecte Not).
 - Process & Plot: Yes or Not (per defecte Not).
 - Conservation, només s'ha de poder marcar una opció.
- Usuari supervisor:
 - My group samples (Sent + Processed junt, es diferencia per la Processed Date)
 - My projects samples (Sent + Processed junt, es diferencia per la Processed Date)

Reunió 11-04-12

Les frases taxades volen dir que ja ha estat implementat.

- Formulari d'enviar un Sample i My Samples:
 - ~~A Processed Samples no ha de sortir el missatge de: "(Press CTRL to multiple choice)"~~
 - ~~La quantitat de mostra (Amount) és obligatòria i per defecte és el valor 40.~~
 - ~~Separar els camps del formulari amb l'ordre acordat.~~
 - ~~Al camp d'Experiment i als camps de Properties només es mostra el longname.~~
 - ~~Els camps de dins de 'Experiments and properties' han de ser obligatoris (per evitar queixes d'usuaris i demés).~~
 - ~~El camp Conservation i Dangerousness estan ordenats perquè primer surti el camp que té isdefault = 1.~~
 - ~~A mostres processades, les llistes experiments/perillositat/conservació només haurien de mostra els seleccionats.~~
 - ~~Implementar l'opció 'Sample as new' (tant a Sended com Processed Samples).~~
 - ~~Faltar implementar 'Delete samples' (només poden veure aquests Samples els administradors de la Cua).~~
 - ~~A My samples, fer un offset per poder passar pàgina (cada pàgina és una setmana)~~
- Altres:
 - ~~Al llistat de conservació/perillositat surt la columna default~~
 - ~~Masquerade per enviar samples en nom d'altres.~~
- Manage Samples:
 - ~~Ordenat de la més antiga a la més nova.~~
 - ~~Checkbox, select all, deselect all.~~
 - ~~Posa les mostres a processades.~~
 - ~~Processed Date (s'aprofita com a Deleted Date per mostres esborrades) es crea el processar una mostra i s'ordena per aquest camp.~~
 - ~~Offset cada 5 dies _linksForwardBack (com a My Samples) a Processed Samples i cada mes a Deleted Samples dins Manage Samples~~
 - ~~Si no s'ha seleccionat res, no crear un arxiu buit i avisar de l'error.~~
 - ~~Crear i descarregar el fitxer.~~
 - ~~Provar fitxers exemple al programa del iconNMR.~~
 - ~~Falta la fórmula correcte del càlcul del NS.~~
 - ~~Fer el ChangeLog file versió 1.3.1.~~
 - ~~Diagrama en Visio de taules de iconNMR.~~

Exemple nom fitxer: *bumblebee-file-311-20120521-171900.txt* on:

- 311 = id fitxer, id de la cua, id de l'usuari
- 20120521 = any-mes-dia
- 171900 = hora-minuts-segons

Notes d'en Miquel sobre l'IconNMR

Per ara deixo aquí la informació que he recopilat sobre la programació externa d'experiments a l'IconNMR (cua de rutina),

Per fer

- Decidir quins experiments s'ofereixen a la cua de rutina. Consultar els experiments a les carpetes C:\Bruker\TOPSPIN\exp\stan\nmr\par.*iconnmr* i C:\Bruker\TOPSPIN\exp\stan\nmr\par.*SeRMN* de l'espectròmetre Avance DPX-250 ROBOT ([iconnmr_parameter_sets.txt](#)).
- Decidir quins paràmetres d'adquisició deixem que pugui modificar l'usuari. Alternativament, es podria definir un catàleg més ampli d'experiments, per exemple, amb diferents *sw*, *ns*, *d1*, etcètera.
- Decidir quins solvents s'ofereixen a la cua de rutina ([iconnmr_solvents.txt](#)).
- Decidir com s'indica si la mostra ja ve preparada per l'usuari o si l'hem de preparar nosaltres. Cal guardar aquesta informació al programa de reserves?
- Decidir com s'indica si cal processar i representar els experiments. Cal guardar aquesta informació al programa de reserves?
- Redactar unes notes breus sobre com exportar els fitxers i importar-los a l'IconNMR.
- Què fem amb les opcions *SUBMIT* i *NO_SUBMIT*?
- Decidir el títol dels experiments, per exemple: *<data> <hora> - <sample name> \n <experiment> - <solvent> - <parameter set> [(modif)]* on *(modif)* només s'afegeix si s'ha modificat algun valor per defecte de l'experiment (parameter set) triat.

Fitxers per programació d'experiments

Aquest és un exemple senzill de fitxer per programar experiments a l'IconNMR. En aquest exemple, es programen dos experiments per una mostra d'un usuari,

```
# iconnmr external setup file
#
# dual experiment test file - default parameters modified
#
USER SeRMN
HOLDER 33
NAME ext-set-test-003
SOLVENT acetone
#
# begin of 1st experiment
#
EXPNO 1
NO_SUBMIT
PARAMETERS sw,20,o1p,0,ns,512
EXPERIMENT teo_proto
TITLE ext-set-test-004\n 1D-1H-experiment
#
# end of 1st experiment
#
# begin of 2nd experiment
#
EXPNO 2
NO_SUBMIT
PARAMETERS ns,32k
```

```
EXPERIMENT teo_carboni
TITLE ext-set-test-00\n 1D-13C-experiment
#
# end of 2nd experiment
#
# end of holder definition
END
```

Aquest altre exemple és més complet, i il·lustra com programar experiments per **múltiples mostres i usuaris**. Per exemple, pel primer usuari es programa un experiment per una mostra, i pel segon i tercer usuari es programen dos experiments per cadascuna de les dues mostres enviades pels usuaris,

```
# iconnmr external setup file
#
# three users

# ##### BEGIN USER
USER SeRMN

# ##### BEGIN SAMPLE (HOLDER)
HOLDER 31
DELETE
NAME user1-sample1
SOLVENT cdcl3
# ##### BEGIN EXPERIMENT
PARAMETERS ns,128,swp,15,td,8192
EXPERIMENT teo_proto
TITLE user1-sample1-exp1
##### END SAMPLE (HOLDER)
END

##### BEGIN USER
USER avirgili

##### BEGIN SAMPLE (HOLDER)
HOLDER 32
DELETE
NAME user2-sample1
SOLVENT dmso
##### BEGIN EXPERIMENT
PARAMETERS ns,128,swp,15,td,8192
EXPERIMENT teo_proto
TITLE user2-sample1-exp1
##### BEGIN EXPERIMENT
EXPERIMENT teo_carboni
TITLE user2-sample1-exp2
##### END SAMPLE (HOLDER)
END
```

```
##### BEGIN SAMPLE (HOLDER)
HOLDER 33
DELETE
NAME user2-sample2
SOLVENT dmso
##### BEGIN EXPERIMENT
PARAMETERS ns,128,swp,15,td,8192
EXPERIMENT teo_proto
TITLE user2-sample2-exp1
##### BEGIN EXPERIMENT
EXPERIMENT teo_carboni
TITLE user2-sample2-exp2
##### END SAMPLE (HOLDER)
END

##### BEGIN USER
USER urquima

##### BEGIN SAMPLE (HOLDER)
HOLDER 34
DELETE
NAME user3-sample1
SOLVENT acetone
##### BEGIN EXPERIMENT
PARAMETERS ns,128,swp,15,td,8192
EXPERIMENT teo_proto
TITLE user3-sample1-exp1
##### BEGIN EXPERIMENT
EXPERIMENT teo_carboni
TITLE user3-sample1-exp2
##### END SAMPLE (HOLDER)
END



##### BEGIN SAMPLE (HOLDER)
HOLDER 35
DELETE
NAME user3-sample2
SOLVENT cdcl3
##### BEGIN EXPERIMENT
PARAMETERS ns,128,swp,15,td,8192
EXPERIMENT teo_proto
TITLE user3-sample2-exp1
##### BEGIN EXPERIMENT
EXPERIMENT teo_carboni
TITLE user3-sample2-exp2
##### END SAMPLE (HOLDER)
END
```

El resultat és pot veure a la següent captura de pantalla,

Holder	Type	Status	Disk	Name	No.	Solvent	Experiment	Par	Title / Orig	Pri	Time	User
29		Available										
30		Available										
31	1	Queued	F:\	user1-sample1	1	cdcl3	teo_proto		user1-sample1-exp1		00:05:33	SeRMN
32	2	Queued	F:\	user2-sample1	1	dmso	teo_proto		user2-sample1-exp1		00:05:33	avirgli
		Queued	F:\	user2-sample1	2	dmso	teo_carboni		user2-sample1-exp2		00:18:07	avirgli
33	2	Queued	F:\	user2-sample2	1	dmso	teo_proto		user2-sample2-exp1		00:05:33	avirgli
		Queued	F:\	user2-sample2	2	dmso	teo_carboni		user2-sample2-exp2		00:18:07	avirgli
34	2	Queued	E:\	user3-sample1	1	acetone	teo_proto		user3-sample1-exp1		00:05:33	urquima
		Queued	E:\	user3-sample1	2	acetone	teo_carboni		user3-sample1-exp2		00:18:07	urquima
35	2	Queued	E:\	user3-sample2	1	cdcl3	teo_proto		user3-sample2-exp1		00:05:33	urquima
		Queued	E:\	user3-sample2	2	cdcl3	teo_carboni		user3-sample2-exp2		00:18:07	urquima
36		Available										
37		Available										
38		Available										

Date	Time	Holder	Name	No.	Experiment	ATM	Rotat	Lock	Shim	Acq	Proc	User
2012-04-12	16:36:58	1	ap-ib-8-5-noesy	2	teo_noesy		✓	✓	✓	✓		APPLUS
2012-04-12	16:27:45	2	egd001cru	1	teo_proto		✓	✓	✓	✓		avirgli19
2012-04-12	11:17:18	1	ap-ib-8-5-noesy	1	teo_noesy		✓	✓	✓	✓		APPLUS

Busy Until: Mon 16:00 Day Experiments: 01:40 Night Experiments: 00:00 User: urquima

En aquest cas, els experiments no inclouen el paràmetre NO_SUBMIT i IconNMR els importa, programa i envia a la cua alhora. En aquests casos, és recomanable posar el programa IconNMR en mode *HALT* (prémer el botó ) per tal de poder comprovar que els experiments s'hagin importat correctament. Llavors, un cop verificats, només cal prémer el botó  perquè el programa comenci a processar els sol·licituds.



Així doncs, **els experiments a programar a l'IconNMR es poden exportar en un únic fitxer.**

Altres fitxers d'exemple emprats a les proves. **COMPTE!** abans d'importar-los cal substituir les extensions .ext per .001, .002,... d'acord amb el número al final del nom del fitxer (-001, -002,...)


- [iconnmr-external-setup-001.txt](#)
- [iconnmr-external-setup-002.txt](#)
- [iconnmr-external-setup-003.txt](#)
- [iconnmr-external-setup-004.txt](#)
- [iconnmr-external-setup-005.txt](#)
- [iconnmr-extset-mult_users-mult_samples-submit-1.txt](#)

Notes sobre l'ús de fitxers externs per programar experiments

Aquestes són les notes que vaig prendre mentre feia proves amb diferents fitxers. Caldrà tenir-les present a l'hora d'introduir la informació a la base de dades del Bumblebee, i quan es generin els fitxers.

- La importació dels fitxers és gairebé immediata. Tan bon punt es copien a la carpeta C:\Bruker\TOPSPIN\prog\tmp el programa els importa i mostra a la pantalla de l'IconNMR.
- Els fitxers importats es mouen a la carpeta C:\Bruker\TOPSPIN\prog\tmp\save, de forma que, en cas de necessitat, es podrien recuperar, editar (si calgués), i moure de nou a la carpeta C:\Bruker\TOPSPIN\prog\tmp.
- Després del paràmetre EXPERIMENT només pot anar TITLE, qualsevol altre paràmetre es descarta. Així doncs, cal respectar l'ordre de definició dels paràmetres que es mostra al fitxer d'exemple anterior.
- El nom de l'usuari ha de ser exactament un dels definits a l'IconNMR, i les majúscules i minúscules no són equivalents (case sensitive!)
- El nom del solvent ha de ser un dels noms reconeguts pel TopSpin/IconNMR
- Si el nom de la mostra es repeteix encara que sigui en un altre holder, els EXPNO s'incrementaran perquè no coincideixin amb els EXPNO de la mostra d'igual nom en un holder diferent.
- No sé quin és el límit per TITLE, però accepta sense problemes frases tan llargues com: *TITLE <data - hora> - ext-set-test-00\n 1D-13C - acetone - teo_carboni (modif).*
- Si per error s'assigna el mateix HOLDER i EXPNO a una segona mostra, els experiments es programen al HOLDER indicat, però els EXPNO s'incrementen per no coincidir amb els ja definits. Malauradament, com que només es pot posar una mostra per holder, el que passarà és que a l'IconNMR haurem de moure aquests experiments al holder correcte.
- Si s'envien nous experiments a un holder amb experiments definits, els nous experiments s'afegeixen darrera dels existents, amb l'EXPNO incrementat per respectar els existents. Però si s'afegeix el paràmetre DELETE darrera del paràmetre HOLDER, els experiments existents s'esborraran abans d'afegir els nous, sense tenir en compte l'estat dels experiments (submitted, available, etc.).

Captures de pantalla de l'IconNMR

 **Fix Me!** Vaig fer varies captures de pantalla del programa IconNMR després d'importar diferents fitxers. Aquestes captures il·lustren els errors i problemes que es poden produir. Quan tingui una estona les comentaré.

KONRAD: Automation Feb01-2012-1223-albert

File Run Holder View Fgd Parameters Options Help

Holder Type Status Desk Name No. Solvent Experiment Par Title / Orig. Pri Time User

1	Finished	F:\	lpc	1	CDCl3	teo_proto			00:02:21	Synthesis
2	Finished	F:\	lpc723	2	CDCl3	teo_proto			00:02:21	Synthesis
3	Finished	F:\	lpc724	1	CDCl3	teo_proto			00:02:21	Synthesis
4	Finished	F:\	lpc725	1	CDCl3	teo_proto			00:02:21	Synthesis
5	Finished	F:\	lpc726	1	CDCl3	teo_proto			00:02:21	Synthesis
6	Finished	D:\	pv5ct	1	CDCl3	teo_proto			00:02:21	jeciana
7	Finished	D:\	pv5ct	2	CDCl3	teo_coy			00:02:16	jeciana
8	Finished	D:\	pv5t	1	CDCl3	teo_proto			00:02:21	jeciana
9	Finished	D:\	pv5t	2	CDCl3	teo_coy			00:02:16	jeciana
10	Finished	F:\	xe599	1	CDCl3	teo_proto			00:02:21	ICFO-velas
11	Finished	F:\	xe599	1	CDCl3	teo_proto			00:02:21	ICFO-velas
12	Available		aprv595	1	CDCl3	teo_proto			00:04:30	APPLUS
13	Available									
14	Available									

Submit Cancel Edit Delete Add Copy

Change User

Date	Time	Holder	Name	No.	Experiment	ATM	Rotatb	Lock	Shm	Acq	Proc	User	Desk	Tk	Remarks
2012-02-16	10:48:20	10	aprv595	1	teo_proto							APPLUS	F:\		
2012-02-16	10:35:51	9	xe599	1	teo_proto							ICFO-velas	F:\		
2012-02-16	10:24:33	8	xe598	1	teo_proto							ICFO-velas	F:\		
2012-02-15	14:45:17	7	pv5t	2	teo_coy							jeciana	D:\		
2012-02-15	14:33:51	7	pv5t	1	teo_proto							jeciana	D:\		
2012-02-15	13:43:15	6	pv5ct	2	teo_coy							jeciana	D:\		
2012-02-15	13:32:18	6	pv5ct	1	teo_proto							jeciana	D:\		
2012-02-14	18:18:06	5	lpc726	1	teo_proto							Synthesis	F:\		
2012-02-14	18:07:10	4	lpc725	1	teo_proto							Synthesis	F:\		

4.

Busy Until: No Jobs! Day Experiments: 00:00 Night Experiments: 00:00 User: albert

TD 16384

NS 32

SW 10.9592 [ppm]

O1P 4.892

D1 1

OK

Index	State	Path	File Name	Size	Owner	Permissions	Mod Time	Mod User
▷ 29	Available							
▷ 30	Available							
▽ 31	1 Queued							
	Queued	D:\	ext-set-test-001	1 cdd3	teo_proto	ext-set-tes	00:02:21	sermn
▽ 32	1 Queued							
	Queued	D:\	ext-set-test-002	1 cdd3	teo_proto			sermn
▽ 33	3 Queued							
	Queued	D:\	ext-set-test-003	1 acetone	teo_proto	ext-set-tes 1D-1H-exp	00:02:21	sermn
	Available	D:\	ext-set-test-003	2 acetone	teo_carboni	ext-set-tes 1D-13C-ex		sermn
	Queued	D:\	ext-set-test-003	3 acetone	teo_proto		00:02:21	sermn
	Available	D:\	ext-set-test-003	4 acetone	teo_carboni	ext-set-tes 1D-1H-exp	02:01:01	sermn
▷ 34	Available							
▷ 35	Available							
▷ 36	Available							

Index	Status	Path	File Name	Size	Format	Thumbnail	Preview	Time	Owner
30	Available								
31	Available								
	Available	D:\	ext-set-test-001	1	cdcl3	teo_proto		ext-set-test-001	SeRMN
32	Available								
	Available	D:\	ext-set-test-002	1	cdcl3	teo_proto		ext-set-test-002	SeRMN
33	Available								
	Available	D:\	ext-set-test-003	1	aceton	teo_proto		ext-set-test-003	SeRMN
	Available	D:\	ext-set-test-003	2	aceton	teo_carboni		ext-set-test-003	SeRMN
	Available	D:\	ext-set-test-003	3	aceton	teo_proto		ext-set-test-003	SeRMN
	Available	D:\	ext-set-test-003	4	aceton	teo_carboni		ext-set-test-003	SeRMN
34	Available								
35	Available								

The screenshot displays the Bruker TopSpin software interface. A dialog box titled 'Acquisition Parameters' is open, showing the following fields:

- TD: 8192
- NS: 128
- SW: 10.9592 [ppm]
- O1P: 4.892
- D1: 1

The 'OK' button is located at the bottom of the dialog box. In the background, the 'Acquisition Parameters' table is visible, showing parameters for 'ext-set-test-001' and 'ext-set-test-002'.

35

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

https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=sermn_wiki:userpages:marta:cua_rutina

