



Hands on, ovvero mettiamoci le mani!!! (quarta parte)

Nel numero scorso della rubrica "Non solo NMR" si è parlato di come scaricare dati dal computer Aspect 3000 di uno spettrometro Bruker ad un PC via porta parallela con l'impiego del programma gratuito ZZNET. Intendiamo ora compiere il "passo" anticipato al termine di quel discorso, cioè proporre una serie di migliorie che permettano di guidare da una postazione remota l'intera operazione. Perché questo risultato possa essere ottenuto è necessario che l'Aspect, contemporaneamente alla gestione dello spettrometro, sia in grado di eseguire anche comandi impartiti dall'esterno. Nell'impossibilità di collegare in rete l'Aspect, sarà il PC a fungere da tramite per i comandi indirizzati a questo.

Una disposizione dell'hardware che rende possibile tutto ciò è schematizzata in Figura 1 e rispecchia quanto fatto presso il nostro laboratorio: essa prevede un collegamento tra le porte seriali dei due computer, un collegamento tra le porte parallele bidirezionali ed un collegamento del PC alla propria intranet mediante una scheda ethernet. Come si vedrà, la prima connessione verrà utilizzata per trasferire i comandi dalla rete all'Aspect, mentre la seconda continuerà ad essere utilizzata da ZZNET per la trasmissione dei FID o degli spettri verso il PC.

Per fare sì che lo spettrometro possa ricevere comandi via cavo è necessario sfruttare la capacità del suo sistema operativo (ADAKOS) di gestire contemporaneamente due porzioni di memoria, permettendo il controllo di una delle due (la cosiddetta "regione B") attraverso la porta seriale. Questa parte della memoria sarà dunque utilizzata per lanciare il programma ZZNET sull'Aspect attraverso la porta seriale del PC. Ogni normale attività dello spettrometro continuerà senza rallentamenti nella regione A. Per attivare la regione B si dovrà reiniziare lo spettrometro e dare al *prompt* di sistema (l'asterisco) i comandi `ON B` seguito da `DMP 200K`, entrando poi

normalmente nel programma per l'acquisizione degli spettri con il comando appropriato (ad esempio, come nel nostro caso, `DISR90`).

Per quanto riguarda il PC, è necessario modificare la semplice configurazione software basata su FreeDOS descritta nel numero scorso in modo che il PC

possa 1) fare girare contemporaneamente più di un programma alla volta e 2) ricevere input e inviare l'output di un qualsiasi programma via rete. Il PC deve infatti allo stesso tempo mantenere attivi sia ZZNET (per la ricezione dei dati) e sia un programma di gestione del collegamento via porta seriale (un normale programma di terminale) con il quale l'utente possa avviare la controparte Aspect di ZZNET sulla regione B dello spettrometro. Il tutto deve poi essere effettuabile via rete.

La soluzione a "costo zero" ai problemi sopra illustrati esiste ed è basata su Linux (www.linux.org), un sistema operativo gratuito simile a Unix scaricabile in varie versioni direttamente da Internet. Seguendo la filosofia (o la necessità!) del nostro laboratorio di utilizzare per quanto possibile software i cui autori non perseguano scopo di lucro, abbiamo installato sul nostro PC (ricordate? Un "vecchio" pentium 75 MHz con 16 Mb di RAM e 500 Mb di disco rigido) la versione Debian di Linux (www.debian.org) che viene curata solo da volontari. Ogni altra versione più commerciale, ad esempio RedHat Linux (www.redhat.com) o SuSE Linux (www.suse.de), potrà comunque essere usata senza problemi.

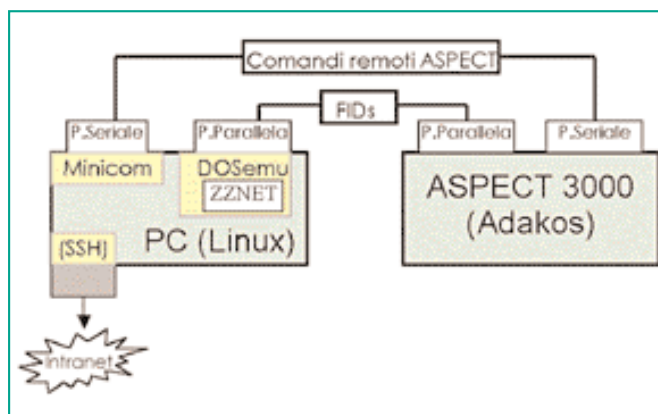


Figura 1 - Schema dei collegamenti tra PC e Aspect descritto nel testo

Perché ZZNET, scritto per DOS, possa essere usato anche sotto Linux si è fatto ricorso ad un emulatore DOS chiamato DOSemu (www.dosemu.org). Una volta installato correttamente DOSemu (seguendo le istruzioni riportate sul sito) basterà dare il comando `dos` e la nostra macchina Linux sembrerà trasformarsi in un vecchio PC ante-Windows. Abbiamo scritto "sembrerà" perché in effetti per il nostro PC-Linux il DOS (emulato) non è altro che un normale programma applicativo e dunque avviabile anche in remoto. Basterà collegarsi al PC-Linux mediante TELNET (o meglio SSH, che permette di criptare la comunicazione per evitare il furto delle password, www.freessh.org) e dare in quella sessione il comando `dos`. L'avvio di ZZNET in questa sessione DOSemu remota ci permetterà quindi di comandare tutto il processo di trasferimento dati (lato-PC) direttamente dal nostro studio. Una piccola notazione tecnica: DOSemu ha bisogno di sapere quali indirizzi hardware verranno usati da ZZNET per comunicare con la scheda bidirezionale CIO-DIO usata per il trasferimento dati. Per abilitare tali indirizzi si dovrà cambiare la riga che inizia con `$ports` nel file `/etc/Dosemu.conf` in `$ports="0x300 0x301 0x302 0x303"`.

Queste pagine nascono nella prospettiva di diventare un punto di incontro per scambi di esperienze nel campo delle risonanze magnetiche tra i colleghi specialisti e gli utenti "di tutti i giorni". Potete mettervi in contatto con il Girm all'indirizzo girm@gsk.com o cm5304@gsk.com





Non solo NMR

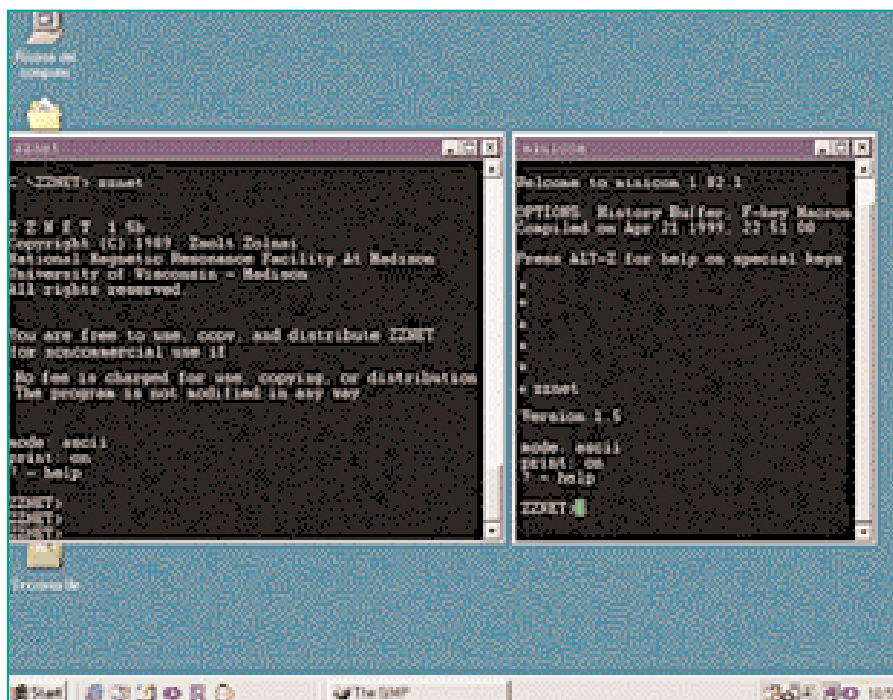


Figura 2 - Una stazione Windows collegata al sistema di Figura 1

Un modo simile sarà usato per inviare, in remoto, i comandi all'Aspect. Per fare questo basta un programma chiamato Minicom che è presente in tutte le distribuzioni Linux.

Dopo essersi collegati al PC-Linux dallo studio si darà il comando `minicom` e ci si troverà in una finestra di testo nella quale battendo il tasto "invio" si dovrebbe ottenere il *prompt* dell'Aspect. Se così non fosse è bene tenere presente che Minicom ha bisogno di sapere a quale porta seriale è collegato l'Aspect. Si dovrà dunque configurare Minicom (si entra nella configurazione con <Alt>-Z) per l'uso della COM1 o della COM2 che in Linux vengono chiamate `/dev/ttyS0` e `/dev/ttyS1` e per la velocità di trasmissione a 9600 bit/s, 7 bit, 1 bit di stop, e nessuna parità. Ottenuto il *prompt* dell'Aspect, la messa a punto del sistema potrà dirsi conclusa.

Per trasferire una FID dall'Aspect al PC-Linux pilotando il trasferimento, ad esempio da una stazione Windows remota, si dovranno aprire due sessioni di TELNET (o SSH) verso il PC-Linux (Figura 2). Nella prima (a sinistra in Figura 2) si darà il comando `dos` per entrare nell'emulatore DOS, seguito da `zznet`. Nella seconda (a destra in Figura 2) si lancerà Minicom con il comando `minicom` ed al *prompt* dell'Aspect si darà anche in questo caso il comando `zznet`. La comparsa del

prompt "ZZNET>" in entrambe le finestre sarà il segnale dell'avvenuto riconoscimento reciproco dei due programmi che potranno quindi comunicare per scambiarsi i dati mediante i normali comandi di ZZNET. Ultimato il trasferimento delle FID si uscirà da entrambi gli ZZNET con il comando `Q`. Le FID immagazzinate sul PC-Linux potranno poi essere trasferite dovunque via rete mediante un normale client FTP o con il suo equivalente criptato SCP.

Il sistema descritto in questo numero della rubrica del GIRM offre, a nostro parere, un esempio di come sia possibile andare contro le logiche di mercato che vorrebbero si rimpiazzassero macchine ancora efficienti con mezzi dalle strabilianti caratteristiche (e prezzi). "Mettendoci le mani", svitando gli strumenti che usiamo tutti i giorni non come delle "scatole nere", ma come parte integrante del nostro sapere tecnico, si possono sfruttare meglio le risorse che si hanno a disposizione.

Sperando che queste pagine possano risultare utili, rimangono a disposizione per ogni consiglio pratico su quanto descritto.

Contributo di Mauro A. Cremonini (mac@foodsci.unibo.it) e Luca Laghi (llaghi@foodsci.unibo.it), Dipartimento di Scienze degli Alimenti, Università di Bologna, Sede di Cesena.

CONVEGNI

Anche quest'anno si svolgeranno le Sapiro Conferences. Tali giornate (sei eventi) rappresentano ormai un momento di incontro per gli spettroscopisti italiani. Per informazioni potete accedere al sito www.sapiro.it/Gruppo_it/eventi/eventi.htm. Vi segnaliamo inoltre che presso l'Università di Verona dal 16 al 21 luglio 2001 si svolgerà il "1° Seminario Nazionale per dottorandi di Chimica dei Sistemi Biologici" dal titolo "Modelling e Risonanza Magnetica Nucleare: Interazioni tra macromolecole e ligandi".

Per informazioni:

Prof.ssa Henriette Molinari
(henry@icmnmr.mi.cnr.it)

Dal 19 al 22 Settembre 2001 si svolgerà a Parma il XXXI Congresso Nazionale Risonanze Magnetiche.

Lo Scopo principale del Congresso, organizzato dal Gruppo Italiano Discussione Risonanze Magnetiche GIDRM e con la partecipazione del Gruppo Interdivisionale di Risonanze Magnetiche della SCI (GIRM), è quello di favorire lo scambio di idee e promuovere la discussione sui recenti sviluppi della Spettroscopia di Risonanza Magnetica Nucleare e dell'Imaging. Quest'anno verrà dato un particolare risalto all'utilizzo di questa tecnica nell'analisi della qualità degli alimenti. Si intende inoltre agevolare e promuovere la partecipazione di giovani ricercatori, offrendo loro l'opportunità di incontrare altri scienziati esperti nello stesso settore di ricerca. Il programma completo è visibile al seguente indirizzo: www.chimorg.unifi.it/gidrm.htm.

Intermeeting

Borgo al Collegio Maria Luigia, 15
43100 Parma

Tel. 0521 231123 - fax 0521 228981
intermeeting@tin.it

Vi segnaliamo che presso il Centro Risonanze Magnetiche dell'Università di Firenze ci sarà un'attività di "Formazione Permanente NMR".
Informazioni reperibili alla pagina:
www.cerm.unifi.it/NMRcourse/NMR.htm

