

# Instal·lació del Topspin 1.3

## Preparació de TopSpin 1.3

Em descarrego el fitxer *TopSpin 1.3 pl10 & (mos13.iso)* (1390.9 MiB) del [servidor software de Bruker](#), comprovo que la seva signatura sigui la correcta,


```
sermnadmin@sermn107:~/Downloads/Topspin-1.3$ md5sum TopSpin-1.3.10.iso
802b0c4bf6f456d4674c6c3ba31352f4  TopSpin-1.3.10.iso
```

Els primers intents d'executar el programa autorun i/o install em donen errors perquè a les noves versions de Debian */bin/sh* és enllaç a */bin/dash*, un shell restringit que no és compatible amb la sintaxi emprada als programes d'instal·lació del Topspin-1.3. Per resoldre el problema, segueixo les instruccions a [Debian wiki: dash as bin](#) per configurar temporalment *bash* com a shell per defecte,

```
$ ls -l /bin/sh
lrwxrwxrwx 1 root root 4 Mar  1 2012 /bin/sh -> dash
$ sudo dpkg-reconfigure dash
[sudo] password for sermnadmin:
Removing 'diversion of /bin/sh to /bin/sh.distrib by dash'
Adding 'diversion of /bin/sh to /bin/sh.distrib by bash'
Removing 'diversion of /usr/share/man/man1/sh.1.gz to
/usr/share/man/man1/sh.distrib.1.gz by dash'
Adding 'diversion of /usr/share/man/man1/sh.1.gz to
/usr/share/man/man1/sh.distrib.1.gz by bash'
$ ls -l /bin/sh
lrwxrwxrwx 1 root root 4 Aug 24 11:20 /bin/sh -> bash
```

Llavors executo el programa */mnt/iso/autorun* per iniciar la instal·lació del Topspin, i **com a *setup type trio Data processing, acquisition and automation*** i li dic que afegeixi el directori d'instal·lació del TopSpin al PATH. **El programa s'instal·larà a */opt/topspin1.3*.**

## Creació d'usuaris

El programa d'instal·lació dóna un error un cop creat l'usuari *nmrsu*. Diu que no pot connectar-se a cap gestor de sessions, però comprovo que el compte d'usuari de *nmrsu* s'ha creat correctament.  Aquest error es pot ignorar sense problemes, però s'hauria d'actualitzar el script d'instal·lació per evitar que sortís.

## Instal·lació

Un cop completat el procés de configuració, s'obre una finestra amb la llista de programes que s'instal·laran,

 { { :informatica:debian-ts31:screenshot-0.png?400 | } }

i tot seguit comença el procés de còpia i instal·lació de les carpetes i fitxers dels programes.

Un cop completada la instal·lació es mostra en pantalla un resum del què s'ha fet, **incloent-hi alguns errors i avisos que caldrà comprovar i corregir**. Els registre de la instal·lació es guarda al fitxer `/opt/topspin1.3/install.log`.

## Errors relacionats amb el Diskless

Aquests són els missatges d'avís i error que han aparegut durant la instal·lació del mòdul Diskless.

### Fitxer creats o editats

El fitxer `/opt/topspin1.3/prog/bin/install.net/install.net` indica que es crearan o modificaran els següents fitxers,

- `/etc/hosts`
- `/etc/bootparams`
- `/etc/exports`
- `/etc/services`
- `/etc/inetd.conf`
- `/etc/sysconfig/network-scripts/ifcfg-eth1` (Linux)
- `/etc/init.d/bfsd` (if it does not exist)
- `/usr/diskless/clients/spect/swapfile`
- `/usr/diskless/clients/spect/root/dev/` dins la carpeta `opt/topspin1.3/conf/instr/autoshim/refmaps/`
- `/opt/topspin/conf/instr/servtool/cryocontrol/` dins la carpeta `opt/topspin1.3/conf/instr/servtool/`

## Posada en marxa del TopSpin 1.3 - Primer intent

Provo a posar en funcionament el TopSpin per primer cop.

Executo la comanda `cf` i trio la configuració de l'instrument *spect*. Després de passar les dues o tres primeres pantalles, surt una finestra amb el missatge *Collecting data, please wait...* i una finestra petita amb el missatge

```
Cannot read FCU BBIS data: cannot open
/opt/topspin1.3/conf/instr/spect/bbis_fcu:
error in "iiconf"
```

Comprovo que no hi ha cap fitxer `bbis_fcu` en aquesta carpeta, llavors premo el botó  i apareix la finestra amb el llistat de ports sèrie a què estan connectats els dispositius externs,

- HPPR Preamplifier 1: `tty10`
- ACB Amplifier Control Board: `tty04`
- RX22 Receiver: `tty10`
- BSMS Smart Magnet Control System: `tty02`

- Lock Signal: tty03
- LC-NMR Software HyStar: tty07
- VTU Variable Temperature Unit: tty05

Premo el botó Next i avanço fins que s'obre una altra finestra d'avís,

Warning: The 2H amplifier in the BSM uses router output 3 which is selected by the 0.5W 1H Amplifier

Tanco la finestra prement el botó Close i surten dos avisos (ja conegut dels altres espectròmetres amb GNU/Linux Debian),

```
Operation not permitted
Cannot make link
link must be done manually with
ln /opt/topspin1.3/prog/mod/go4 /opt/topspin1.3/prog/mod/acq_control
```

i

```
Operation not permitted
Cannot make link
link must be done manually with
ln /opt/topspin1.3/prog/wobble/pp_drx_X
/opt/topspin1.3/prog/wobble/pulsprog_X
```

Finalment s'obre la finestra amb la llista de nuclis i la seva freqüència a l'espectròmetre, i després s'obre la finestra amb les connexions entre els amplificadors, la sonda i els preamplificador.

La comparació del nou fitxer *uxnmr.info* amb el mateix fitxer a l'antiga estació de treball ens indica l'existència dels següents problemes

- No s'han detectat les plaques FCU (unitats de control de la freqüència)
- No s'ha detectat la placa RCU (unitat de control del receptor)
- No s'ha detectat la placa DRU (digitalitzador)

La diferència al fitxer *uxnmr.info* és que a la darrera configuració operativa s'identificaven correctament les plaques *FCU* i *RCU*

```
[teo@rmn6 spect]$ more uxnmr.info
CONFIGURATION INFORMATION
=====

Date           : Thu Dec 11 13:24:54 2014
Release        : TopSpin Acquisition Version ts_1_3pl-10
Host           : rmn6.uab.es Linux 2.4.21-9.EL #1 Thu Jan 8 17:24:12 EST 2004
i686
User           : teo (Teodor Parella,Servei RMN,935812291,972843351)
System         : DRX spectrometer
1H-frequency   : 500.13 MHz
Hardware info:  using "/opt/topspin/conf/instr/spect/hardware_list"
                  (ignoring RS device entries)
```

```
#-----
# FCU configuration:
#-----
board # 1 :
    MEMORY 0x3f000  (=63 k Words)
    PAL-Version 0x3 = new version (EC level 07 or more)
board # 2 :
    MEMORY 0x3f000  (=63 k Words)
    PAL-Version 0x3 = new version (EC level 07 or more)
board # 3 :
    MEMORY 0x3f000  (=63 k Words)
    PAL-Version 0x3 = new version (EC level 07 or more)

RCU1: DRAM = 4096 kByte, SRAM = 256 kByte, FIFO = 4 kByte
Digitizers and Filters connected to RCU1:
- HADC/2 ADC937

Gcu: GCU1

Router: 1 Avance-Router
```

i a la configuració actual no,

```
root@sermn107:/opt/topspin1.3/conf/instr/spect# more uxnmr.info
CONFIGURATION INFORMATION
=====

Date       : Fri Sep 18 17:20:46 2015
Release    : TopSpin Acquisition Version ts_1_3pl-10
Host       : sermn107 Linux 3.2.0-4-amd64 #1 SMP Debian 3.2.68-1+deb7u3
x86_64
User       : sermnadmin (SeRMN-UAB Staff,,,)
System     : DRX spectrometer
1H-frequency : 500.13 MHz
Hardware info: using "/opt/topspin1.3/conf/instr/spect/hardware_list"
              (ignoring RS device entries)

FCU-BBIS data not available due to error, assume 3 FCUs:

RCU/DRU: neither RCU nor DRU found!

Gcu: GCU1

Router: 1 Avance-Router
```

## Posada en marxa del TopSpin 1.3 - Segon intent

Comprovo que a la carpeta *spect* a l'antiga estació de treball hi ha dos fitxers *bbis\_fcu* i *bbis\_rcu1* que

no es van copiar a la nova instal·lació del TopSpin. Els copio i torno a executar la comanda `cf`, però dóna el mateix error i comprovo que han desaparegut tots dos fitxers.

Per si de cas es tracta d'un problema causat per l'absència de biblioteques de 32-bits, comprovo el contingut dels fitxers `*.rpm` de Bruker per les versions més noves de CentOS (v 6 i 7) disponibles al [servidor ftp de Bruker](#) i instal·lo els paquets de Debian que contenen aquestes biblioteques:

rpm package file by Bruker	lib files included	Debian package
bruker-compatlibs-1.3-6.el6.brk.x86_64.rpm	libcom_err.so	✔ comerr-dev
—	libcrypto.so	✔ libssl-dev
—	libssl.so	✔ libssl-dev

La resta de paquets rpm contenen programes i/o utilitats que no són necessaris per ara.

Instal·lo el programa *auditd* per monitoritzar els canvis al directori de configuració del TopSpin

- [Linux Audit](#)
- [Stump the Chump with Auditd 01](#)
- [A Brief Introduction to auditd](#)
- [Welcome to CIS Security Benchmarks](#)
- <http://askubuntu.com/questions/501965/why-isnt-auditd-logging-file-deletes>
- <http://serverfault.com/questions/320716/find-out-which-process-is-changing-a-file>
- [Auditd - Tool for Security Auditing on Linux Server](#)
- [Tuning auditd: High Performance Linux Auditing](#)

Defineixo les següents regles

```
# Monitor Bruker Topspin spectrometer configuration folder to
# find out which process deletes the bbis_fcu and bbis_rcu files
#
# -w watch /opt/topspin1.3/conf/instr
# -p warx watch for write, attribute change, execute, read events

-w /opt/topspin1.3/conf/instr/ -a exit,always -p warx -k TOPSPIN-CONF

# Monitor the bbis_fcu and bbis_rcu Bruker Topspin spectrometer
# configuration files to find out which process deletes them
#
# -w watch /opt/topspin1.3/conf/instr/spect/bbis_fcu
# -w watch /opt/topspin1.3/conf/instr/spect/bbis_rcu
# -p warx watch for write, attribute change, execute, read events

-w /opt/topspin1.3/conf/instr/spect/bbis_fcu -a exit,always -p warx -k
TOPSPIN-BBIS-FCU
-w /opt/topspin1.3/conf/instr/spect/bbis_rcu1 -a exit,always -p warx -k
TOPSPIN-BBIS-RCU

# Monitor delete files & folders by 64-bit and 32-bit applications
#
# -F arch=b32 or -F arch=b64 monitor 32- or 64-bit applications
# -S unlink watch for unlink (aka delete) system events
```

```
# -S rmdir watch for remove directory system events
# -k TOPSPIN-CONF

-a exit,always -F arch=b64 -S unlink -S unlinkat -S rmdir -k TOPSPIN-DEL-64
-a exit,always -F arch=b64 -S unlink -S unlinkat -S rmdir -k TOPSPIN-DEL-64
```

i faig que el programa torni a llegir el fitxers de configuració amb la comanda `/etc/init.d/auditd restart`. Llavors comprovo el registre a `/var/log/audit/audit.log`.

Com era d'esperar, el causant del problema és el programa `hconfserver` que, per motius encara desconeguts, esborra els fitxers `bbis_fcu` i `bbis_rcu1` fins i tot quan són propietat de `root:root` i tenen permís d'escriptura només pel propietari.

Provo a assignar l'atribut **immutable** a aquests fitxers i tornar a executar `cf`,

```
root@sermn107:/opt/topspin1.3/conf/instr/spect# chattr -V +i bbis_fcu
chattr 1.42.5 (29-Jul-2012)
Flags of bbis_fcu set as ----i-----e--

root@sermn107:/opt/topspin1.3/conf/instr/spect# chattr -V +i bbis_rcu1
chattr 1.42.5 (29-Jul-2012)
Flags of bbis_rcu1 set as ----i-----e--

root@sermn107:/opt/topspin1.3/conf/instr/spect# lsattr bbis_fcu bbis_rcu1
bbis_bla*
----i-----e-- bbis_fcu
----i-----e-- bbis_rcu1
-----e-- bbis_bla1
-----e-- bbis_bla4
-----e-- bbis_bla5
```

i finalment aconseguixo que `cf` no esborri els fitxers i completi la configuració de l'espectròmetre.

Els únics missatges d'error que es mostren durant el procés de configuració són els relacionats amb la impossibilitat de crear els enllaços d'alguns fitxers,

```
09:54:52.963 19230 error msg: hconfserver
              Operation not permitted
              Cannot make link
              link must be done manually with
                  ln /opt/topspin1.3/prog/mod/go4
/opt/topspin1.3/prog/mod/go
09:55:07.362 19230 error msg: hconfserver
              Operation not permitted
              Cannot make link
              link must be done manually with
                  ln /opt/topspin1.3/prog/mod/go4
/opt/topspin1.3/prog/mod/acq_control
09:55:11.440 19230 error msg: hconfserver
              Operation not permitted
              Cannot make link
```

```

link must be done manually with
ln /opt/topspin1.3/prog/wobble/pp_drx_X
/opt/topspin1.3/prog/wobble/pulsprog_X

```

Per resoldre'l creo un bash-script *fix\_topspin13.sh*

```

#!/bin/sh
#####
#
# Copyright (c) 2015
# SeRMN, Universitat Autònoma de Barcelona
#
#####
#
# DESCRIPTION
#
# When TopSpin 1.3 runs on a Debian GNU/Linux, the 'cf' command
# fails to create several hard links needed to run the software,
# and to (re)create the program 'shimctl'.
#
# To fix this problem,
# 1. run 'cf' and ignore all warnings and errors about not
#    being able to create hardlinks.
# 2. run this script. It requires root permissions to create, hence,
#    this script upon running the 'cf' command.
#
#####

echo ""

# link pulsprog_X to pp_drx_X
echo "creating file '/opt/topspin1.3/prog/wobble/pulsprog_X'"
ln -fv /opt/topspin1.3/prog/wobble/pp_drx_X
/opt/topspin1.3/prog/wobble/pulsprog_X
ls -li /opt/topspin1.3/prog/wobble/pp_drx_X
/opt/topspin1.3/prog/wobble/pulsprog_X
echo ""

# link go to go4
echo "creating file '/opt/topspin1.3/prog/mod/go'"
ln -fv /opt/topspin1.3/prog/mod/go4 /opt/topspin1.3/prog/mod/go
ls -li /opt/topspin1.3/prog/mod/go4 /opt/topspin1.3/prog/mod/go
echo ""

# link acq_control to go4
echo "creating file '/opt/topspin1.3/prog/mod/acq_control'"
ln -fv /opt/topspin1.3/prog/mod/go4 /opt/topspin1.3/prog/mod/acq_control
ls -li /opt/topspin1.3/prog/mod/go4 /opt/topspin1.3/prog/mod/acq_control
echo ""

```

## uxnmr.info

Aquesta és la configuració final de l'espectròmetre. Coincideix amb la que hi havia a l'antiga estació de treball.

### CONFIGURATION INFORMATION

=====

Date : Tue Sep 22 09:54:02 2015  
Release : TopSpin Acquisition Version ts\_1\_3pl-10  
Host : sermn107 Linux 3.2.0-4-amd64 #1 SMP Debian 3.2.68-1+deb7u3  
x86\_64  
User : sermnadmin (SeRMN-UAB Staff,,,)   
System : DRX spectrometer  
1H-frequency : 500.13 MHz  
Hardware info: using "/opt/topspin1.3/conf/instr/spect/hardware\_list"  
(ignoring RS device entries)

#-----

# FCU configuration:

#-----

board # 1 :  
    MEMORY 0x3f000 (=63 k Words)  
    PAL-Version 0x3 = new version (EC level 07 or more)  
board # 2 :  
    MEMORY 0x3f000 (=63 k Words)  
    PAL-Version 0x3 = new version (EC level 07 or more)  
board # 3 :  
    MEMORY 0x3f000 (=63 k Words)  
    PAL-Version 0x3 = new version (EC level 07 or more)

RCU1: DRAM = 4096 kByte, SRAM = 256 kByte, FIFO = 4 kByte  
Digitizers and Filters connected to RCU1:  
- HADC/2 ADC937

Gcu: GCU1

Router: 1 Avance-Router

Amplifier Control Board: connected to spect:/dev/tty04

- Warning: The 2H amplifier in the BSMS uses router output 3 which is  
selected by the 0.5W 1H Amplifier

Amplifiers (ACB configuration):

R0	Amplifier	Module	Nucleus	Power/W	Switchbox	PN/SN/FW
1	1	1	X	300	Y vCB=de	W1301865/564/20000509
2	1	2	1H	50	Y - - " " - -	W1301865/564/20000509
3	2	1	2H	20	Y iCB=00	- / - / -
5	3	1	X	300	vCB=ff	W1301840/1340/19990407



## ASU's (BBIS configuration):

AQ-Rack position	MOD	MULT	connected to
6	2	1	FCU-1
6	2	1	FCU-2
5	2	1	FCU-3

(Note: AQ-Rack positions are counted from right)

BSMS: device connected to spect:/dev/tty02

- absolute lockshift frequency = 13227000 Hz
- 2H Amplifier: connected to router output 3

BPSU: device connected to spect:/dev/tty07

- use BACS air = no
- BACS sx delay = 10 s
- Sample Rail fast changer mode = no

## Synthesizers :

- PTS-620DL 1MHZ : for F1/F2, 620 MHz max, doubling frequency = 309.00MHz
- PTS-620SL 1MHZ : for F3, 620 MHz max, doubling frequency = 309.00MHz

Lock: device connected to spect:/dev/tty03

Eurotherm VTU: device connected to spect:/dev/tty05

## Preamplifiers :

HPPR: - HPPR/2 preamplifier connected to spect:/dev/tty10

Type : HPPR/2

Controller: Application firmware = A0

15 LEDs for tuning, 15 LEDs for matching

Module 1 : 1H LNA

Module 2 : XBB19F 2HS

Module 3 : 2H

Module 4 : 13C

Module 5 : 15N

## Receiver :

- RX22-1 connected to spect:/dev/tty10

## Frequency generation:

- F1: for 22 MHz IF
- F2: for 22 MHz IF
- F3: direct

## expinstall, edhead, edlock, etc.

Executo la comanda `expinstall` amb l'opció *Type of acquisition: High Resolution Systems* per instal·lar els *parameter set* i *pulse programs*, compilar els programes AU, i instal·lar altres recursos necessaris per emprar l'espectròmetre:

- Install Pulse Programs
- Install Bruker Library AU Programs
- Install Library CDP Programs
- Install Library Gradiend Files
- Install Library Shape Files
- Convert Standard Parameter Sets
- Install Standard Scaling Region Files
- Enable Define Statements in Pulse Programs



El procés es completa sense problemes.

Tot seguit executo les comandes:

-  edsolv
-  edhead
-  edprosol
-  edlock
-  edscon

## Tasques pendents

Tasques pendents per més endavant:

-  cplbruk all per compilar tots els programes AU de Bruker.
-  cpluser all per compilar tots els programes AU dels usuaris.

## Còpia de les dades

Creo l'usuari *sermnuab* i la carpeta de dades */home/sermnuab/data*. Llavors copio les dades que hi havia a l'antiga estació de treball dins aquesta nova carpeta de dades.

```
# cd /home/sermnuab/
# mkdir data
# cd data
# rsync -Hvax --progress --stats /home/sermnadmin/Downloads/Topspin-1.3@old-computer/opt_topspin_data/ .
[...]
Number of files: 276808
Number of files transferred: 240678
Total file size: 12626980788 bytes
Total transferred file size: 12626980788 bytes
Literal data: 12626980788 bytes
Matched data: 0 bytes
File list size: 4490020
File list generation time: 0.001 seconds
File list transfer time: 0.000 seconds
Total bytes sent: 12643300746
Total bytes received: 4717413
```

```
sent 12643300746 bytes received 4717413 bytes 10677938.50 bytes/sec
total size is 12626980788 speedup is 1.00
```

```
# chown root:root ../data
# chown -R sermnuab:sermnuab
# chmod 755 ../data
# ls -ld ../data
drwxr-xr-x 28 root root 4096 Sep 22 16:33 ../data
```






## Còpia dels parameter-sets, pulse-programs, etc.

Amb el programa [meld](#) comparo les carpetes de parameter-sets, pulse-programs, shapes, llistes, i altres que es troben a */opt/topspin1.3/exp/stan/nmr*:

Item	Origen	Propietari	Permisos per sermnuab
Parameter-sets	TopSpin	sermnadmin	Només lectura. No els pot modificar
Parameter-sets	Usuaris	sermnuab	Lectura i escriptura. Els pot modificar
Pulse-programs	TopSpin	nmrsu	Només lectura. No els pot modificar
Pulse-programs	Usuaris	sermnuab	Lectura i escriptura. Els pot modificar
Pulse-shapes	TopSpin	nmrsu	Només lectura. No els pot modificar
Pulse-shapes	Usuaris	sermnuab	Lectura i escriptura. Els pot modificar
Composite-pulses	TopSpin	nmrsu	Només lectura. No els pot modificar
Composite-pulses	Usuaris	sermnuab	Lectura i escriptura. Els pot modificar
Gradient-pulse	TopSpin	nmrsu	Només lectura. No els pot modificar
Gradient-pulse	Usuaris	sermnuab	Lectura i escriptura. Els pot modificar
Llistes varies (vc, vd, f1...)	Usuaris	sermnuab	Lectura i escriptura. Les pot modificar

## Còpia dels fitxers que hi havia a /home/teo

### Ús del TopSpin

- **EDHEAD / LOCK / GRADSHIM:** problemes amb edhead i la definició de la sonda: no coincideix amb l'existent a l'anterior estació de treball i dóna errors amb els fitxers de shim, a l'hora d'agafar el lock, i amb la comanda gradshim. Afegeixo l'antiga definició de la sonda i els problemes semblen resoldre's.
-  **EDTE** funciona
-  **LOCK-display** funciona
-  **BMSM-display** funciona, però sembla que sigui possible treure la finestra fora del topspin
-  **RGA** funciona
-  **ZG** no funciona! (veure més avall)

Quan provo d'adquirir un espectre amb la comanda zg em surt el missatge d'error **No acquisition hardware available for: 192.168.2.7** que està relacionat amb el problema de la compilació de programes AU.

```
No acquisition hardware available for: 192.168.2.7
```

(Original message = `NO\_ACQUISITION\_AVAILABLE1` 192.168.2.7)

=====

Wed Sep 23 16:30:56 CEST 2015

Topspin Version 1.3 (of July 13 2009)

No acquisition running.

ConfigProp.get: ACQ\_DISCFUNC

de.bruker.nmr.jutil.except.MfrException: No acquisition running.

ConfigProp.get: ACQ\_DISCFUNC

at de.bruker.nmr.prsc.cpr.ConfigProp.get(ConfigProp.java:91)

at de.bruker.nmr.sc.acq.AcqUtil.getAcqFileName(AcqUtil.java:53)

at de.bruker.nmr.sc.acq.Acq.checkAcquisitionRunning(Acq.java:591)

at de.bruker.nmr.sc.acq.Acq.showAcqWindow(Acq.java:631)

at sun.reflect.NativeMethodAccessorImpl.invoke0(Native Method)

at

sun.reflect.NativeMethodAccessorImpl.invoke(NativeMethodAccessorImpl.java:39)

at

sun.reflect.DelegatingMethodAccessorImpl.invoke(DelegatingMethodAccessorImpl.java:25)

at java.lang.reflect.Method.invoke(Method.java:585)

at

de.bruker.nmr.mfw.base.CmdThreadImpl.doJmethod(CmdThreadImpl.java:535)

at de.bruker.nmr.mfw.base.CmdThreadImpl.exec(CmdThreadImpl.java:439)

at de.bruker.nmr.mfw.base.CmdThreadImpl.run(CmdThreadImpl.java:393)

Class versions

=====

Class: de.bruker.nmr.prsc.cpr.ConfigProp

Version: \$Id: ConfigProp.java,v 1.81 2005/01/11 09:51:11 prs Exp

Class: de.bruker.nmr.sc.acq.AcqUtil

Version: \$Id: AcqUtil.java,v 1.61.2.3 2005/01/13 15:15:47 es Exp

Class: de.bruker.nmr.sc.acq.Acq

Version: \$Id: Acq.java,v 1.151.2.19 2005/01/24 13:03:26 es Exp

Class: de.bruker.nmr.mfw.base.CmdThreadImpl

Version: \$Id: CmdThreadImpl.java,v 1.107.2.1 2006/06/30 12:40:12 pavel Exp

## go no funciona, exit(127)

L'error `exit(127)` està causat perquè el programa `go` no troba totes les biblioteques que necessita. És un error semblant a l'esmentat a [l'Item #8702 What can I do if the Plot Editor does not start?](#). Aplico la solució esmentada per trobar quines biblioteques no es troben,

```
$ /opt/topspin1.3/topspin -e ldd /opt/topspin1.3/prog/mod/go
```

```
linux-gate.so.1 => (0xf779d000)
ConvSf.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/ConvSf.so (0xf7796000)
[...]
libXmu.so.6 => not found
libXpm.so.4 => not found
[...]
libXdmcp.so.6 => /usr/lib/i386-linux-gnu/libXdmcp.so.6 (0xf704e000)
```

Comprovo que les biblioteques *libXmu.so* i *libXpm.so* estan disponibles, però que són de 64-bits, o sigui que instal·lo les biblioteques equivalents de 32-bits disponibles als paquets *libxpm4:i386* i *libxmu6:i386*. Un cop instal·lats els paquets, comprovo si go troba totes les biblioteques,

```
$ /opt/topspin1.3/topspin -e ldd /opt/topspin1.3/prog/mod/go
linux-gate.so.1 => (0xf779d000)
ConvSf.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/ConvSf.so (0xf7796000)
[...]
libXmu.so.6 => /usr/lib/i386-linux-gnu/libXmu.so.6 (0xf73f3000)
libXpm.so.4 => /usr/lib/i386-linux-gnu/libXpm.so.4 (0xf73e2000)

[...]
libXdmcp.so.6 => /usr/lib/i386-linux-gnu/libXdmcp.so.6 (0xf704e000)
```

Per evitar problemes, comprovo si estan disponibles totes les biblioteques cridades pels programes,

```
$ for PROG in /opt/topspin1.3/prog/mod/*;
do
    echo $PROG;
    /opt/topspin1.3/topspin -e ldd $PROG | grep "not found";
done
```

i trobo que només el programa *xwinplot* no troba dues biblioteques,

```
/opt/topspin1.3/prog/mod/xwinplot.mod
libdpstk.so.1 => not found
libdps.so.1 => not found
```

Per resoldre el problema hauria d'instal·lar aquestes biblioteques, però no estan disponibles a cap versió de GNU/Linux relativament moderna (veure [Item #7044](#) i [Item #7301](#)). La única possibilitat seria provar a copiar unes biblioteques procedents d'una versió de GNU/Linux més antiga, tot i que a [l'Item #8702](#) es recomana no fer-ho per possibles problemes d'incompatibilitat.

Tanmateix, podria provar a descarregar-les del magatzem [Archive Debian](#) i comprovar si són compatibles. Les darreres versions disponibles són les que es varen distribuir amb el paquet [libdps1 \(4.3.0.dfsg.1-14sarge7\)](#) de la versió 7 (aka Sarge) de Debian.

## Compilació dels programes AU

Aquesta part és tan llarga i específica que l'he mogut a una pàgina a part:

- [hp\\_xw4300\\_500\\_topspin13\\_au\\_compilation](#)

## Manquen solvents a la comanda lock

Quan executo la comanda `lock`, la llista de solvents que surt en pantalla és massa curta i no conté, entre altres, l'acetona. **Temporalment, per resoldre el problema** copio el fitxer `/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/lists/2Hlock` a `/opt/topspin1.3/conf/instr/spect`, tot i que és un fitxer més vell que inclou menys solvents.

La causa de l'error podria estar a la inconsistència dels noms d'alguns solvents a diferents fitxers. Per exemple, en alguns llocs surt *acetone* i en altres *acetona*.

Comprovar a la Bruker Knowledge Base els [registres relacionats amb edlock](#), per exemple:

- [https://www.bruker.com/cgi-bin/bkb/show\\_bug.cgi?id=10711](https://www.bruker.com/cgi-bin/bkb/show_bug.cgi?id=10711)
- [https://www.bruker.com/cgi-bin/bkb/show\\_bug.cgi?id=8259](https://www.bruker.com/cgi-bin/bkb/show_bug.cgi?id=8259)
- [https://www.bruker.com/cgi-bin/bkb/show\\_bug.cgi?id=5956](https://www.bruker.com/cgi-bin/bkb/show_bug.cgi?id=5956)
- [https://www.bruker.com/cgi-bin/bkb/show\\_bug.cgi?id=2375](https://www.bruker.com/cgi-bin/bkb/show_bug.cgi?id=2375)



Explicar la solució final:



- copiar el fitxer *solvents.all* del TS31
- editar els fitxers del TS13 per corregir els noms dels solvents segons el fitxer de solvents del TS31
- afegir la informació dels solvents afegits després de la versió TS13

## Còpia dels programes AU compilats a l'antic ordinador

Mentres cerco la forma de compilar els programes AU en aquesta versió de GNU/Linux, intento una solució més immediata: copiar els fitxers AU ja compilats a l'antic ordinador i comprovar si funcionen al nou ordinador. Provo alguns programes (*iexpno*, *paropt*, *dosy*) i tots funcionen. Així doncs, mentre no es trobi una solució millor, aquesta serà la forma de poder executar programes AU al nou ordinador.



Caldrà compilar a l'antic ordinador tots els programes AU disponibles o, com a mínim, tots els que previsiblement es podrien fer servir.

From:

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

Permanent link:

[https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp\\_xw4300\\_500\\_topspin13](https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp_xw4300_500_topspin13)

Last update: **2020/07/09 13:02**

