

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 **Ok** 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 Magnetic 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 BMSM 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=b32 -S unlink -S unlinkat -S rmdir -k TOPSPIN-DEL-32
```

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 'shimcntl'.
#
# 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

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`

Compilació dels programes AU

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 dona errors amb els fitxers de shim, a l'hora d'agafar el lock, i amb la comanda gradshim. Afegixo 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
```

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](#)

Canvis addicionals al programa 'makeau'

Per poder compilar els programes AU des de dins el TopSpin, caldrà comprovar si cal afegir al programa *makeau* les definicions de variables d'entorn

- LD_LIBRARY_PATH=/usr/lib32
- LIBRARY_PATH=/usr/lib32:\$LIBRARY_PATH

o si n'hi ha prou amb definir-les al fitxer de configuració de l'entorn de l'usuari (fitxers *~/.bashrc* o *~/.bash_profile*).

Consultar:

- <http://tldp.org/HOWTO/Program-Library-HOWTO/shared-libraries.html>
- <https://wiki.debian.org/Multiarch/LibraryPathOverview>
- <http://askubuntu.com/questions/275965/how-to-list-all-variables-names-and-their-current-values/356973#356973>
 - hint: emprar la comanda `declare -xp` per veure les variables d'entorn definides a la sessió de Gnome.
- <http://askubuntu.com/questions/438150/scripts-in-etc-profile-d-being-ignored>
- <https://wiki.debian.org/EnvironmentVariables>
- <http://unix.stackexchange.com/questions/117467/how-to-permanently-set-environmental-variables>

Canvis al TopSpin

/opt/topspin1.3/prog/bin/topspin

Afegeixo la variable `$LD_LIBRARY_PATH` al final de la definició de la variable `LD_LIBRARY_PATH`,

```
# diff topspin topspin.Orig-20150824
62c62
< export
LD_LIBRARY_PATH="$szProgPath"/pvshlib:"$szProgPath"/shlib:$LD_LIBRARY_PATH
---
> export LD_LIBRARY_PATH="$szProgPath"/pvshlib:"$szProgPath"/shlib
```

/etc/profile.d/topspin_compile_au.sh

Creo el fitxer `/etc/profile.d/topspin_compile_au.sh` que contindrà la definició de les variables d'entorn necessàries perquè funcioni la compilació dels programes AU,

```
# MCE - 20150925 - Library path environment variables added to allow  
# compiling TopSpin 1.3 AU programs in newer GNU/Linux versions
```

```
export PATH=$PATH:/opt/topspin1.3/gnu/bin  
export LIBRARY_PATH=/usr/lib32:$LIBRARY_PATH  
export LD_LIBRARY_PATH=/usr/lib32:/lib32:$LD_LIBRARY_PATH
```

Compilació dels programes AU

Executo la comanda `cplbruk all` per compilar tots els programes AU i els compila tots excepte els esmentats a l'Item#: 9641. [Some AU programs do not compile with native compiler](#)

```
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/coiltemp:42:5: error: conflicting types  
for 'coiltemp_program'  
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/coiltemp:43:1: note: an argument type  
that has a default promotion can't match an empty parameter name list  
declaration  
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/coiltemp:31:9: note: previous implicit  
declaration of 'coiltemp_program' was here  
exit 1  
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/decra: In function 'AU_program':  
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/decra:112:12: error: invalid storage  
class for function 'DECRA_program'  
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/decra: At top level:  
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/decra:293:12: error: static declaration  
of 'DECRA_program' follows non-static declaration  
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/decra:115:9: note: previous implicit  
declaration of 'DECRA_program' was here  
exit 1  
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/disconv: In function 'AU_program':  
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/disconv:128:12: error: invalid storage  
class for function 'DISNMR_program'  
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/disconv: At top level:  
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/disconv:878:12: error: static  
declaration of 'DISNMR_program' follows non-static declaration  
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/disconv:131:9: note: previous implicit  
declaration of 'DISNMR_program' was here  
exit 1  
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/disinfo: In function 'AU_program':  
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/disinfo:106:12: error: invalid storage  
class for function 'DISNMR_program'  
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/disinfo: At top level:
```

```
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/disinfo:832:12: error: static
declaration of 'DISNMR_program' follows non-static declaration
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/disinfo:109:9: note: previous implicit
declaration of 'DISNMR_program' was here
exit 1
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/lcsino:46:7: error: conflicting types
for 'lcsino'
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/lcsino:40:7: note: previous implicit
declaration of 'lcsino' was here
exit 1
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/multi_zgvd: In function 'AU_program':
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/multi_zgvd:47:13: error: invalid storage
class for function 'PrintExpTime'
exit 1
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/multi_zgvt: In function 'AU_program':
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/multi_zgvt:54:13: error: invalid storage
class for function 'PrintExpTime'
exit 1
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/multicmd: In function 'AU_program':
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/multicmd:39:13: error: invalid storage
class for function 'PrintExpTime'
exit 1
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/multiexpt: In function 'AU_program':
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/multiexpt:29:13: error: invalid storage
class for function 'PrintExpTime'
exit 1
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/multizg: In function 'AU_program':
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/multizg:38:13: error: invalid storage
class for function 'PrintExpTime'
exit 1
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/noemult: In function 'AU_program':
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/noemult:53:13: error: invalid storage
class for function 'PrintExpTime'
exit 1
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/pulsecalib: In function 'AU_program':
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/pulsecalib:123:16: error: invalid
storage class for function 'pulsecalib'
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/pulsecalib: At top level:
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/pulsecalib:290:1: error: static
declaration of 'pulsecalib' follows non-static declaration
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/pulsecalib:124:12: note: previous
implicit declaration of 'pulsecalib' was here
exit 1
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/setproj:149:5: error: conflicting types
for 'sorter'
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/setproj:35:5: note: previous declaration
of 'sorter' was here
exit 1
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/simplex: In function 'AU_program':
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/simplex:262:12: error: invalid storage
class for function 'SIMPLEX_program'
```

```
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/simplex: At top level:  
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/simplex:468:12: error: static  
declaration of 'SIMPLEX_program' follows non-static declaration  
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/simplex:265:9: note: previous implicit  
declaration of 'SIMPLEX_program' was here  
exit 1
```

<note important> Ara que els programes AU s'han compilat correctament, el problema és que quan els executo, tots donen el següent missatge d'error:

```
ILLEGAL TERMINATION of process 28469  
due to signal 11
```

potser pels motius explicats [aquí](#): *ldd with 32-bit binaries on 64-bit system - runs but won't report.*
</note>

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.

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=8259
- https://www.bruker.com/cgi-bin/bkb/show_bug.cgi?id=5956
- https://www.bruker.com/cgi-bin/bkb/show_bug.cgi?id=2375

Canvi de `/lib32` a `/lib/i386-linux-gnu`?

Fins ara he provat a compilar/enllaçar els programes amb les biblioteques disponibles a `/lib32/`, però a les futures versions de Debian multiarquitectura (per exemple, 32- i 64-bits) les biblioteques de 32-bits estaran a `/lib/i386-linux-gnu/`.

Potser convindria redefinir les variables d'entorn `LIBRARY_PATH` i `LD_LIBRARY_PATH` per fer servir aquesta nova carpeta, i recompilar els programes AU amb les noves biblioteques. Podria ser que això resolgués els problemes de segmentation fault?

La definició actual de la variable d'entorn `LD_LIBRARY_PATH` és

```
# topspin -e echo $LD_LIBRARY_PATH
/usr/lib32:/lib32::/opt/topspin1.3/prog/shlib:/opt/topspin1.3/prog/lib:/opt/
topspin1.3/prog/shlib:/opt/topspin1.3/prog/lib:/opt/topspin1.3/gnu/lib
```

i les biblioteques emprades pel programa AU au_zg estan disponibles a */lib32* i */lib/i386-linux-gnu/*

```
# ls -l /lib32/libm* /lib/i386-linux-gnu/libm*
-rw-r--r-- 1 root root 148920 Feb 22 2015 /lib32/libm-2.13.so
-rw-r--r-- 1 root root 13884 Feb 22 2015 /lib32/libmemusage.so
lrwxrwxrwx 1 root root 12 Feb 22 2015 /lib32/libm.so.6 -> libm-2.13.so
-rw-r--r-- 1 root root 148992 Feb 22 2015 /lib/i386-linux-gnu/libm-2.13.so
-rw-r--r-- 1 root root 13960 Feb 22 2015 /lib/i386-linux-
gnu/libmemusage.so
lrwxrwxrwx 1 root root 12 Feb 22 2015 /lib/i386-linux-gnu/libm.so.6 ->
libm-2.13.so

# ls -l /lib32/libdl* /lib/i386-linux-gnu/libdl*
-rw-r--r-- 1 root root 9768 Feb 22 2015 /lib32/libdl-2.13.so
lrwxrwxrwx 1 root root 13 Feb 22 2015 /lib32/libdl.so.2 -> libdl-2.13.so
-rw-r--r-- 1 root root 9844 Feb 22 2015 /lib/i386-linux-gnu/libdl-2.13.so
lrwxrwxrwx 1 root root 13 Feb 22 2015 /lib/i386-linux-gnu/libdl.so.2 ->
libdl-2.13.so

# ls -l /lib32/libc* /lib/i386-linux-gnu/libc*
-rwxr-xr-x 1 root root 1445980 Feb 22 2015 /lib32/libc-2.13.so
-rw-r--r-- 1 root root 185852 Feb 22 2015 /lib32/libcidn-2.13.so
lrwxrwxrwx 1 root root 15 Feb 22 2015 /lib32/libcidn.so.1 ->
libcidn-2.13.so
-rw-r--r-- 1 root root 38336 Feb 22 2015 /lib32/libcrypt-2.13.so
lrwxrwxrwx 1 root root 16 Feb 22 2015 /lib32/libcrypt.so.1 ->
libcrypt-2.13.so
lrwxrwxrwx 1 root root 12 Feb 22 2015 /lib32/libc.so.6 -> libc-2.13.so
-rwxr-xr-x 1 root root 1360008 Feb 22 2015 /lib/i386-linux-gnu/libc-2.13.so
-rw-r--r-- 1 root root 185928 Feb 22 2015 /lib/i386-linux-
gnu/libcidn-2.13.so
lrwxrwxrwx 1 root root 15 Feb 22 2015 /lib/i386-linux-gnu/libcidn.so.1
-> libcidn-2.13.so
lrwxrwxrwx 1 root root 17 Feb 22 2015 /lib/i386-linux-
gnu/libcom_err.so.2 -> libcom_err.so.2.1
-rw-r--r-- 1 root root 13836 Feb 22 2015 /lib/i386-linux-
gnu/libcom_err.so.2.1
-rw-r--r-- 1 root root 38416 Feb 22 2015 /lib/i386-linux-
gnu/libcrypt-2.13.so
lrwxrwxrwx 1 root root 16 Feb 22 2015 /lib/i386-linux-
gnu/libcrypt.so.1 -> libcrypt-2.13.so
lrwxrwxrwx 1 root root 12 Feb 22 2015 /lib/i386-linux-gnu/libc.so.6 ->
libc-2.13.so
```

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

Permanent link:
https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp_xw4300_500_topspin13&rev=1443526541

Last update: **2015/09/29 13:35**

