

# 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 afegixi 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 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. 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

## 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 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 *acetone*.

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)

## 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/libcidsn-2.13.so
lrwxrwxrwx 1 root root 15 Feb 22 2015 /lib32/libcidsn.so.1 ->
libcidsn-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/libcidsn-2.13.so
lrwxrwxrwx 1 root root 15 Feb 22 2015 /lib/i386-linux-gnu/libcidsn.so.1
-> libcidsn-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=1443526585](https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp_xw4300_500_topspin13&rev=1443526585)

Last update: 2015/09/29 13:36

