

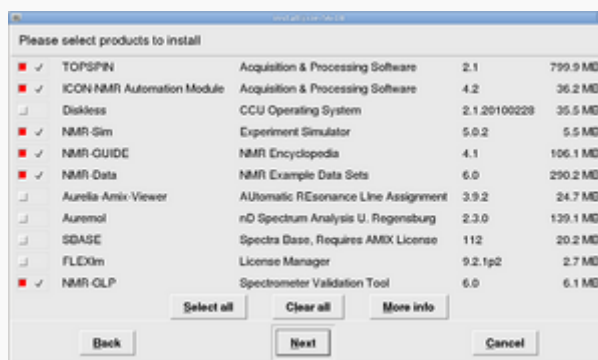
Instal·lació del Topspin 2.1

El primer problema és que, per seguratat, el DVD d'instal·lació es munta per defecte amb permís *noexec* fet que impedeix executar el programa d'instal·lació. Això es resol fàcilment amb la comanda,

```
root@cie-56-18:/opt# mount -o remount,exec /media/cdrom0
```

Llavors ja es pot executar el programa *autorun* per iniciar la instal·lació del Topspin.

Com que ja està instal·lat el Topspin 3.1, trio l'opció *Customized* per podeu excloure de la instal·lació els components *Diskless* i *FLEXlm* i fer servir els instal·lats amb el Topspin 3.1.

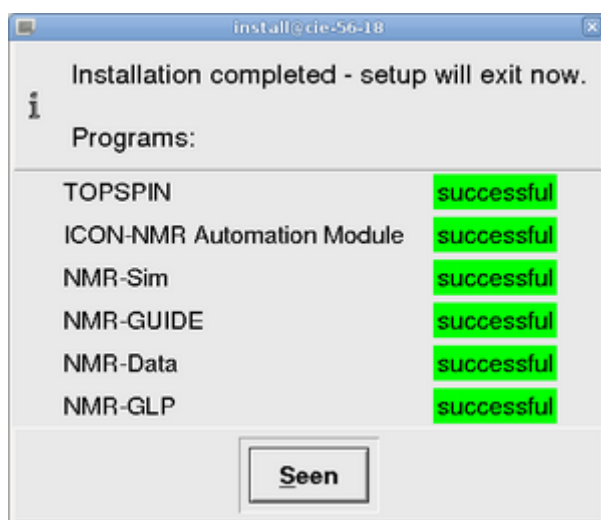


A continuació, a la finestra *Select a spectrometer configuration to import* trio l'opció *spect in /opt/topspin3.1*



Contesto **no** a la pregunta de si vull afegir la carpeta d'instal·lació del Topspin a la variable *PATH* general, on ja està definit el directori del Topspin-3.1. Això vol dir si escrivim *topspin* en una terminal, accedirem a la versió 3.1.

Després de triar l'usuari *nmrsu* (que ja existeix) i de definir el password de l'usuari d'administració, comença la instal·lació del Topspin-2.1... i poc després finalitza sense cap missatge d'error,



Configuració del Topspin 2.1

<note important> Comentar breument la configuració del programa un cop connectat a la consola, i afegir alguna captura de pantalla </note>

Aquestes són les tasques realitzades,

- ✓ ha, i verificar els mòduls detectats
- ✓ cf funciona correctament i el fitxer de configuració final (**afegir-ho!**) coincideix amb el del Topspin 2.1 de l'ordinador vell
- ✓ recuperació de la configuració del Topspin 2.1 amb `nmr_restore` a partir del fitxer creat amb `nmr_save` al Topspin 2.1 de l'ordinador vell. Inicialment donava un error de compilació, però ja s'ha resolt (veure més avall).
- ✓ `expinstall`
- ✓ `edhead`, `edprosol`, i la resta de comandos no donen cap problema. Cal importar a mà els *parameter sets* i altres fitxers de configuració que no s'hagin transferit.
- ✓ `cplbruk all` per compilar tots els programes AU de Bruker.
- ✓ `cpluser all` per compilar tots els programes AU de la carpeta *user*.

Problemes de compilació

Llibreria libpthread

Al compilar els programes AU dona un error perquè no troba la llibreria *libpthread*. Per resoldre el problema cal copiar els fitxers d'aquesta llibreria de la carpeta `/opt/topspin3.x/gnu/lib` a `/opt/topspin2.x/gnu/lib`,

```
# find ./topspin3.1/ -name libpthread* -exec ls -l {} \;  
lrwxrwxrwx 1 root root 34 Feb 21 2012  
./topspin3.1/prog/shlib/libpthread.so.0 \  
-> ../../gnu/lib/libpthread-2.11.3.so  
lrwxrwxrwx 1 root root 20 Feb 21 2012 ./topspin3.1/gnu/lib/libpthread.so.0
```

```
\
-> libpthread-2.11.3.so
-rwxr-xr-x 1 root root 116809 Feb 21 2012
./topspin3.1/gnu/lib/libpthread-2.11.3.so

# cp --archive /opt/topspin3.1/gnu/lib/libpthread-2.11.3.so
/opt/topspin2.1/gnu/lib

# ls -l /opt/topspin2.1/gnu/lib/libpthread*
-rwxr-xr-x 1 root root 116809 Feb 21 2012
/opt/topspin2.1/gnu/lib/libpthread-2.11.3.so
lrwxrwxrwx 1 root root 20 Feb 21 2012
/opt/topspin2.1/gnu/lib/libpthread.so.0 \
-> libpthread-2.11.3.so

# cp --archive /opt/topspin3.1/prog/shlib/libpthread.so.0
/opt/topspin2.1/prog/shlib

# ls -l /opt/topspin2.1/prog/shlib/libpthread*
lrwxrwxrwx 1 root root 34 Feb 21 2012
/opt/topspin2.1/prog/shlib/libpthread.so.0 \
-> ../../gnu/lib/libpthread-2.11.3.so
```

llibries de 32-bits en un entorn de 64-bits

Per compilar els programes AU en un entorn de 64-bits i enllaçar-los amb les llibreries de 32-bits, cal modificar el fitxer *makeau*. Aparentment el programa d'instal·lació s'encarrega de resoldre aquest problema per instal·lacions del Topspin a ordinadors que facin servir la distribució GNU/Linux RHEL o distribucions derivades (CentOS, Fedora), però no el resol en el cas de distribucions GNU/Linux Debian i derivades (Ubuntu).

Les modificacions a fer al fitxer */opt/topspin2.1/exp/stan/nmr/au/makeau* són,

```
*** makeau 2012-02-21 16:50:34.000000000 +0100
--- makeau.ts216 2012-02-21 13:26:27.000000000 +0100
***** if (($opersys ne "Windows_NT")) {
*** 104,116 ****
$CC      = $GCC . ' -B' . $GCC_EXEC_PREFIX;
$LPATH    = ' -L' . $GCC_LIB;
$LD       = $GCC_PLUS . ' -B' . $GCC_EXEC_PREFIX . $LPATH;
!
!  ##
!  # Extend with 32Bit library path on debian/ubuntu
!  $LD .= '-B/lib32 -B/usr/lib32' if ( -d '/usr/lib32' or -d '/lib32' );
!
!  $ld_out  = '-o ';
!  $cc_info = 'gcc (Bruker)';
!  if (open(FD,"/etc/redhat-release"))
!  {
my $redhat = <FD>;
```

```
--- 104,111 ----
$CC      = $GCC . ' -B' . $GCC_EXEC_PREFIX;
$LPATH    = ' -L' . $GCC_LIB;
$LD       = $GCC_PLUS . ' -B' . $GCC_EXEC_PREFIX . $LPATH;
! $ld_out = '-o ';
! $cc_info = 'gcc (Bruker)';
  if (open(FD,"/etc/redhat-release"))
  {
    my $redhat = <FD>;
***** $IndexStaticExt = 6;
*** 346,352 ****
    );
    ##
    %ldopt = (
!   'LINUX'    => ' -m32 -Wl,-warn-common,-warn-constructors' .
                $LIBSTD . $v_gcc,
    'Windows_GCC'=> ' -Wl,-warn-common,-warn-constructors' .
                ' -Wl,--stack,0x8000000' . $v_gcc,
--- 341,347 ----
    );
    ##
    %ldopt = (
!   'LINUX'    => ' -Wl,-warn-common,-warn-constructors' .
                $LIBSTD . $v_gcc,
    'Windows_GCC'=> ' -Wl,-warn-common,-warn-constructors' .
                ' -Wl,--stack,0x8000000' . $v_gcc,
```

Compilació de poptau

La compilació del programa AU *poptau* al Topspin 2.x genera un executable que dóna un error de segmentació quan s'executa. Començo per comprovar les llibreries que crida el programa,

```
# ldd /opt/topspin2.1/prog/au/bin/poptau
linux-gate.so.1 => (0xf76fd000)
auliba.so => not found
aulibp.so => not found
chparmod.so => not found
librrs.so => not found
liblrs.so => not found
editpar.so => not found
libacq.so => not found
util.so => not found
uni.so => not found
par.so => not found
libPath.so => not found
libcb.so => not found
libdl.so.2 => /lib32/libdl.so.2 (0xf76df000)
libstdc++.so.6 => /usr/lib32/libstdc++.so.6 (0xf75ea000)
```

```
libm.so.6 => /lib32/libm.so.6 (0xf75c4000)
libgcc_s.so.1 => /usr/lib32/libgcc_s.so.1 (0xf75a6000)
libc.so.6 => /lib32/libc.so.6 (0xf745f000)
/lib/ld-linux.so.2 (0xf76fe000)
```

i veig que hi ha moltes que no troba, però una comprovació d'altres programes AU que sí funcionen en aquesta versió 2.x de Topspin, i a la versió 3.x, i a la versió 2.x en altres espectròmetres, m'indica que aquest és un fet comú a tots ells i que no impedeix el correcte funcionament dels programes. Així doncs, la causa del problema ha d'ésser una altra.

From:

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

Permanent link:

https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp_z400_600_topspin21&rev=1360757096

Last update: **2013/02/13 13:04**

