

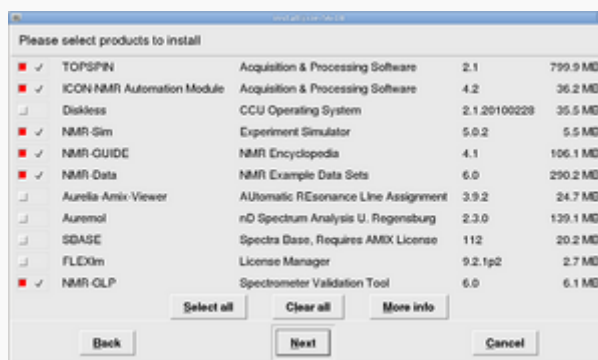
# Instal·lació del Topspin 2.1

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 comandes 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
```

## Problemes de compilació - Llibreries 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,0x800000' . $v_gcc,
--- 341,347 ----
!     );
!     ##
!     %ldopt      = (
!         'LINUX'      =>      ' -Wl,-warn-common,-warn-constructors' .
!             $LIBSTD . $v_gcc,
!         'Windows_GCC'=>      ' -Wl,-warn-common,-warn-constructors' .
!             ' -Wl,--stack,0x800000' . $v_gcc,
```

## Problemes de compilació - Compilació de poptau i paropt

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 biblioteques 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.

Si executo la comanda `ldd -r` em dona un missatge d'error semblant al que surt en executar el programa,

```
# ldd -r poptau
linux-gate.so.1 => (0xf770d000)
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 (0xf76ef000)
libstdc++.so.6 => /usr/lib32/libstdc++.so.6 (0xf75fa000)
libm.so.6 => /lib32/libm.so.6 (0xf75d4000)
libgcc_s.so.1 => /usr/lib32/libgcc_s.so.1 (0xf75b6000)
libc.so.6 => /lib32/libc.so.6 (0xf746f000)
/lib/ld-linux.so.2 (0xf770e000)
/usr/bin/ldd: line 118: 15004 Segmentation fault
LD_TRACE_LOADED_OBJECTS=1 LD_WARN=yes LD_BIND_NOW=yes
LD_LIBRARY_VERSION=$verify_out LD_VERBOSE= "$@"
```

mentre que a l'Avancell 400sb no dona cap missatge d'error,

```
[root@cie-55-32 bin]# ldd -r poptau
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 => /lib/libdl.so.2 (0x00d7f000)
libstdc++.so.6 => /usr/lib/libstdc++.so.6 (0x0760b000)
```

```
libm.so.6 => /lib/tls/libm.so.6 (0x00d5a000)
libgcc_s.so.1 => /lib/libgcc_s.so.1 (0x00ccb000)
libc.so.6 => /lib/tls/libc.so.6 (0x00101000)
/lib/ld-linux.so.2 (0x00524000)
undefined symbol: ssleep      (./poptau)
undefined symbol: PathXWinNMRProg  (./poptau)
undefined symbol: Change_object (./poptau)
undefined symbol: Start_unimar  (./poptau)
undefined symbol: DurationToAscii (./poptau)
undefined symbol: setcurdat (./poptau)
undefined symbol: RemoveTree    (./poptau)
undefined symbol: Gets         (./poptau)
undefined symbol: CPR_exec     (./poptau)
undefined symbol: Show_status  (./poptau)
undefined symbol: fetchstor   (./poptau)
undefined symbol: getcurdat   (./poptau)
undefined symbol: Proc_err    (./poptau)
undefined symbol: Exit_unimar  (./poptau)
undefined symbol: PathSystemTemp (./poptau)
undefined symbol: getparamunit (./poptau)
undefined symbol: Get_command  (./poptau)
undefined symbol: GetCPR_object (./poptau)
undefined symbol: PathXWinNMRCurDir (./poptau)
undefined symbol: execau      (./poptau)
```

Per altra banda, el programa *paropt* també dona un error semblant de *segmentation fault* quan s'executa i quan se li aplica la comanda `ldd -r`. Això podria servir per identificar el problema.

Una cerca de `compile*` a la *Knowledge Database* de Bruker proporciona una possible pista,

- item 9577 - workaround - TOPSPIN - 1.3.10 - non-critical - CentOS5 TopSpin 1.3pl10 cannot compile AU programs under CentOS 5. Proporciona una nova versió del programa *makeau*, derivada de la versió distribuïda amb el TS-3.x, i esmenta que, si el directori d'instal·lació del Topspin no és */opt/topspin*, cal modificar la primera línia del programa *makeau*

que, en el nostre cas, no és la causa, ja que la primera línia al fitxer *makeau* és correcte.

Al fitxer *opt/topspin2.1/topspin* que s'executa per configurar l'entorn de treball del Topspin i posar en marxa tots els programes i serveis requerits per executar el Topspin, `LD_LIBRARY_PATH` està definida com

```
Insert Codexport LD_LIBRARY_PATH="$szProgPath"/pvshlib:"$szProgPath"/shlib
```

on

```
szProgPath=`"$XWINNMRHOME"/pathScript prog`
szExpPath=`"$XWINNMRHOME"/pathScript exp`
```

és a dir, en el cas de Topspin `LD_LIBRARY_PATH` es defineix com la carpeta

/opt/topspin2.1/prog/shlib on es troben totes les biblioteques que les comandes ldd de més amunt indicaven que els programes AU compilats no troben,

```
# ls -F
Atma.so*      ipsoRout.so*      libCUtil.so*      libhttp_channel.so
libpthread.so.0@ libtcl3.so
auliba.so*    libacb.so*        libDatPath.so     libhttp_transport.so
libpvacq.so    libTimer.so*
aulibp.so*    libacq.so*        libDispClient.so* libJJCamp.so*
libPvPath.so    lib_tty.so*
Bird.so*      libap.so*          libDispNMR.so*    libJVMAgent.so*
libPvUtil.so    libTxBbis.so*
Bis.so*       libAqRack.so*      libDisp.so*        liblrs.so*
libQTP.so*     libUpnpClient.so*
chparamod.so* libArg.so*          libDispX.so*       libMo.so*
libRcuBbis.so* libUtil.so*
convpw_deb.so* libAsuBbis.so*      libDppPars.so*
libomniCodeSets4.so.1* librrs.so*      libVtu.so*
convpw.so*    libaxis_client.so  libDPP.so*         libomniORB4.so.1*
librx22.so*   libWrap.so*
ConvSf.so*    libaxis_xerces.so  libEdte.so*        libomnisslTP4.so.1*
lib_sbsb.so*   libxerces-c.so.27
editpar.so*   libBbis.so*        libError.so*       libomnithread.so.3*
libSe451Bbis.so* par.so*
Error.so*     libBmpc.so*        libFcuBbis.so*     libParxBase.so
libShapeIO.so* sxutil.so*
gc.so*        libBpsu.so*        libFunc.so*        libParx.so
libssl.so.0.9.8* uni.so*
Gilson.so*    libcb.so*          libgcc_s.so.@      libPath.so*
libstdc++.so.@ util.so*
golibipso.so* libCf.so*          libgcc_s.so.1@     libpreamp.so*
libstdc++.so.6@
gosim.so*     libcrypto.so.0.9.8* libGoRec.so*       libPreemp.so*
libSwish.so*
Hppr.so*      libCt.so*          libhpcu.so*        libPsTul.so
libtbcload1.4.so
```

\*\*Potser la solució passi per emprar i/o adaptar el fitxer makeau del TS-3x al TS-2x, o fer servir el makeau de l'item #9577. Però abans de provar-ho comparo els fitxers makeau del TS-2x, TS-3x, i de l'item #9577, i trobo que potser seria convenient afegir -m32 a les següents definicions per LINUX de les opcions del compilador, tal i com s'ha fet als fitxers de les versions posteriors i adaptada,

```
#
# basic cc- options
#
%ccopt =(
    'LINUX'      =>    ' -g -m32 -w' . $v_gcc,
    'Windows_GCC' =>    ' -g -w' . $v_gcc,
    'Windows_NT' =>    ' /nologo /MD /w',
);
```

```
%errop =(  
    'LINUX'      =>    '-g -m32 -pedantic-errors -Wall',  
    'Windows_GCC' =>    '-g -pedantic-errors -Wall',  
    'Windows_NT' =>    '',  
);  
  
%warnopt =(  
    'LINUX'      =>    '-g -m32 -pedantic -Wall',  
    'Windows_GCC' =>    '-g -pedantic -Wall',  
    'Windows_NT' =>    '-W3',  
);  
##
```

Per altra banda, no estic segur de si caldria afegir aquesta definició que surt al makeau del TS-3x,

```
my @alwaysSharedLibs = qw  
(  
    libxerces-c  
);
```

però que a la versió de l'itej #9577 surt com,

```
my @alwaysSharedLibs = ();
```

en tot cas, caldria tenir present que la variable definida al TS-2x seria @alwaysSharedLibs.

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

Permanent link:  
[https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp\\_z400\\_600\\_topspin21&rev=1360773520](https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp_z400_600_topspin21&rev=1360773520)

Last update: **2013/02/13 17:38**

