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 correcte,

```
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 Tospin, 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,

Fix Me! {{ :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 Magnetc 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=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 aconsegueixo 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 Autonoma 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):
  RO  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 = AO
                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 Libray 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 vàries (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:i368* 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 *aceton* 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=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

Fix Me!

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

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