

# 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,

 {{ :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\_fc* 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:

<b>rpm package file by Bruker</b>	<b>lib files included</b>	<b>Debian package</b>
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_fc 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_fc and bbis_rcu Bruker Topspin spectrometer
# configuration files to find out which process deletes them
#
# -w watch /opt/topspin1.3/conf/instr/spect/bbis_fc
# -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_fc -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 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 'shimctl'.
#
# 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 = 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 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`

## 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 dóna 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](#)

## Registres a la Bruker Knowledge Base relacionat amb la compilació de programes AU

A la base de dades Bruker Knowledge Base hi ha dos registres relacionats amb la compilació de programes AU,

- [Item#: 9577. With TopSpin 1.3pl10 it is not possible to compile AU programs under CentOS5 \(or RedHat Enterprise Linux 5\)](#)
- [Item#: 9641. Some AU programs do not compile with native compiler](#)

## Primer intent de compilació

Executo la comanda `cplbruk` per compilar programes AU de Bruker i provo a compilar el programa `2df1shift` però dóna el següent error,

```
/opt/topspin1.3/gnu/bin/./lib/gcc-lib/i686-pc-linux-gnu/3.3.5/./././././././i686-pc-linux-gnu/bin/ld: crt1.o: No such file: No such file or directory
collect2: ld returned 1 exit status
```

Aquest error està relacionat amb [l'Item #9557](#) esmentat més amunt, i per resoldre'l em descarrego la nova versió del programa `makeau`.

Per evitar altres problemes, també em descarrego les noves versions d'algunes programes AU disponibles a [l'Item #9641](#)

## Segon intent de compilació

L'intent de compilació amb la nova versió del programa `makeau` tampoc funciona, però en aquest cas la solució és trivial: a la nova versió s'assumeix que el directori d'instal·lació del TopSpin és `/opt/topspin` mentre que en el nostre cas és `/opt/topspin1.3`. L'error es resol editant la primera línia del programa `makeau`,

```
# diff makeau makeau.BKUP-20150923
1c1
< #! /opt/topspin1.3/perl/bin/perl -I/opt/topspin1.3/perl/lib/perl5
---
```

```
> #!/opt/topspin/perl/bin/perl -I/opt/topspin/perl/lib/perl5
```

Per altra banda, per tenir més informació sobre el procés de compilació, decideixo executar el programa makeau directament des d'una terminal i no des de dins del TopSpin. Per això cal definir algunes variables d'entorn,

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

# printenv LIBRARY_PATH LD_LIBRARY_PATH XWINMRHOME PATH
/usr/lib32:
/usr/lib32
/opt/topspin1.3
/usr/local/sbin:/usr/local/bin:/usr/sbin:/usr/bin:/sbin:/bin:/opt/topspin1.3
/gnu/bin/
```

Un cop definides aquestes variables, torno a executar el programa, però encara no aconseguieix compilar el programa i dóna el següent error,

```
# ./makeau -show -verbose au_zg
makeau ($Revision: 1.108.2.2 $ )
  OperatingSystem=LINUX
Using GNU Compiler /opt/topspin1.3/gnu/bin/gcc and
/opt/topspin1.3/gnu/bin/c++
Setup for native compiler
  CC=gcc
  LD=c++
:
/opt/topspin1.3/gnu/bin/./lib/gcc-lib/i686-pc-linux-
gnu/3.3.5/././././././././i686-pc-linux-gnu/bin/ld:/usr/lib32/libc.so: file
format not recognized; treating as linker script
/opt/topspin1.3/gnu/bin/./lib/gcc-lib/i686-pc-linux-
gnu/3.3.5/././././././././i686-pc-linux-gnu/bin/ld:/usr/lib32/libc.so:5: parse
error
collect2: ld returned 1 exit status
exit status is: 256 1
```

Provo el suggeriment que trobo [aquí](#) i [aquí](#), i faig el següent canvi al fitxer `/usr/lib32/libc.so`

```
# diff libc.so libc.so.BKUP-20150924
5c5
< GROUP ( /lib32/libc.so.6 /usr/lib32/libc_nonshared.a )
---
> GROUP ( /lib32/libc.so.6 /usr/lib32/libc_nonshared.a AS_NEEDED (
/lib32/ld-linux.so.2 ) )
```

Llavors, finalment aconseguieix compilar el programa `au_zg`,

```
# ./makeau -show -verbose au_zg
makeau ($Revision: 1.108.2.2 $ )
  OperatingSystem=LINUX
Using GNU Compiler /opt/topspin1.3/gnu/bin/gcc and
/opt/topspin1.3/gnu/bin/c++
Setup for native compiler
  CC=gcc
  LD=c++

Installed RPM packages:
Can't exec "rpm": No such file or directory at ./makeau line 312.

used kernel release: 3.2.0-4-amd64
Known paths:
Known paths:
.
/usr/local/sbin
/usr/local/bin
/usr/sbin
/usr/bin
/sbin
/bin
/opt/topspin1.3/gnu/bin/
/opt/topspin1.3/prog/bin
Current environment:
HOME=/root
XAUTHORITY=/var/run/gdm3/auth-for-sermnadmin-MBTzen/database
SUDO_GID=1000
LD_LIBRARY_PATH=/usr/lib32:/lib32
DISPLAY=:0
LIBRARY_PATH=/usr/lib32
_RLD_ARGS=-ignore_unresolved
MAIL=/var/mail/root
PWD=/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au
LANG=en_US.utf8
USER=root
XWINNMRHOME=/opt/topspin1.3
LOGNAME=root
USERNAME=root
SHLVL=1
OLDPWD=/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr
_=./makeau
PATH=./usr/local/sbin:/usr/local/bin:/usr/sbin:/usr/bin:/sbin:/bin:/opt/top
spin1.3/gnu/bin:/opt/topspin1.3/prog/bin
  COLORTERM=gnome-terminal
  SUDO_USER=sermnadmin
LS_COLORS=rs=0:di=01;34:ln=01;36:mh=00:pi=40;33:so=01;35:do=01;35:bd=40;33;0
1:cd=40;33;01:or=40;31;01:su=37;41:sg=30;43:ca=30;4
1:tw=30;42:ow=34;42:st=37;44:ex=01;32:*.tar=01;31:*.tgz=01;31:*.arj=01;31:*.
taz=01;31:*.lzh=01;31:*.lzma=01;31:*.tlz=01;31:*.txz=
01;31:*.zip=01;31:*.z=01;31:*.Z=01;31:*.dz=01;31:*.gz=01;31:*.lz=01;31:*.xz=
```

```
01;31:*.bz2=01;31:*.bz=01;31:*.tbz=01;31:*.tbz2=01;31
:*.tz=01;31:*.deb=01;31:*.rpm=01;31:*.jar=01;31:*.war=01;31:*.ear=01;31:*.sa
r=01;31:*.rar=01;31:*.ace=01;31:*.zoo=01;31:*.cpio=01
;31:*.7z=01;31:*.rz=01;31:*.jpg=01;35:*.jpeg=01;35:*.gif=01;35:*.bmp=01;35:*
.pbm=01;35:*.pgm=01;35:*.ppm=01;35:*.tga=01;35:*.xbm=
01;35:*.xpm=01;35:*.tif=01;35:*.tiff=01;35:*.png=01;35:*.svg=01;35:*.svgz=01
;35:*.mng=01;35:*.pcx=01;35:*.mov=01;35:*.mpg=01;35:*
.mpeg=01;35:*.m2v=01;35:*.mkv=01;35:*.webm=01;35:*.ogm=01;35:*.mp4=01;35:*.m
4v=01;35:*.mp4v=01;35:*.vob=01;35:*.qt=01;35:*.nuv=01
;35:*.wmv=01;35:*.asf=01;35:*.rm=01;35:*.rmvb=01;35:*.flc=01;35:*.avi=01;35:
*.fli=01;35:*.flv=01;35:*.gl=01;35:*.dl=01;35:*.xcf=0
1;35:*.xwd=01;35:*.yuv=01;35:*.cgm=01;35:*.emf=01;35:*.axv=01;35:*.anx=01;35
:*.ogv=01;35:*.ogx=01;35:*.aac=00;36:*.au=00;36:*.fla
c=00;36:*.mid=00;36:*.midi=00;36:*.mka=00;36:*.mp3=00;36:*.mpc=00;36:*.ogg=0
0;36:*.ra=00;36:*.wav=00;36:*.axa=00;36:*.oga=00;36:*
.spx=00;36:*.xspf=00;36:
    SHELL=/bin/bash
    TERM=screen
    SUDO_COMMAND=/bin/bash
    SUDO_UID=1000
LibraryExtension: .so
StaticLibraryExtension: .a
SharedLibraryExtension: .so
LibraryPath: shlib
StaticLibraryPath: lib
SharedLibraryPath: shlib
ObjectExtension: .o
BinaryExtension:
BinaryExtension:
Check for /opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/paravision_1.3.pl
Check for /opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/user_1.3.pl
submacro(/opt/topspin1.3/prog/include/inc
/opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/src/au_zg
/opt/topspin1.3/prog/au/bin/au_zg.E)
No INC_FLAGS found: using default library list
Used libraries:
    auliba
    aulibp
    chparmod
    sxutil
    libhpcu
    libBpsu
    ConvSf
    libSwish
    libVtu
    lib_sbsb
    lib_tty
    librrs
    liblrs
```

```
Bis
convpw
editpar
libacq
util
aulibp
uni
par
libPath
libcb
libUtil
libCUtil
libShapeIO
libFunc
libJCamp
libCt
libQTP
```

#### Included Libraries

```
auliba.so
aulibp.so
chparmod.so
sxutil.so
libhpcu.so
libBpsu.so
ConvSf.so
libSwish.so
libVtu.so
lib_sbsb.so
lib_tty.so
librrs.so
liblrs.so
Bis.so
convpw.so
editpar.so
libacq.so
util.so
aulibp.so
uni.so
par.so
libPath.so
libcb.so
libUtil.so
libCUtil.so
libShapeIO.so
libFunc.so
libJCamp.so
libCt.so
libQTP.so
auliba.a
aulibp.a
chparmod.a
```

```
libacq.a
editpar.a
util.a
uni.a
libPath.a
libcb.a
Combine /opt/topspin1.3/exp/stan/nmr/au/vorspann
/opt/topspin1.3/prog/au/bin/au_zg.E > /opt/topspin1.3/prog/au/bin/au_zg.c

Include Option: -I/opt/topspin1.3/prog/include

chdir /opt/topspin1.3/prog/au/bin
Opersys=LINUX
gcc -c -DLINUX_INTEL -D_REENTRANT -D_FILE_OFFSET_BITS=64 -D_LARGEFILE_SOURCE
-g -m32 -w -v -I/opt/topspin1.3/prog/include au_zg
.c
Using built-in specs.
COLLECT_GCC=gcc
Target: x86_64-linux-gnu
Configured with: ../src/configure -v --with-pkgversion='Debian 4.7.2-5' --
with-bugurl=file:///usr/share/doc/gcc-4.7/README.Bugs -
-enable-languages=c,c++,go,fortran,objc,obj-c++ --prefix=/usr --program-
suffix=-4.7 --enable-shared --enable-linker-build-id --wi
th-system-zlib --libexecdir=/usr/lib --without-included-gettext --enable-
threads=posix --with-gxx-include-dir=/usr/include/c++/4.
7 --libdir=/usr/lib --enable-nls --with-sysroot=/ --enable-clocale=gnu --
enable-libstdcxx-debug --enable-libstdcxx-time=yes --ena
ble-gnu-unique-object --enable-plugin --enable-objc-gc --with-arch-32=i586 -
-with-tune=generic --enable-checking=release --build=
x86_64-linux-gnu --host=x86_64-linux-gnu --target=x86_64-linux-gnu
Thread model: posix
gcc version 4.7.2 (Debian 4.7.2-5)
COLLECT_GCC_OPTIONS='-c' '-D' 'LINUX_INTEL' '-D' '_REENTRANT' '-D'
'_FILE_OFFSET_BITS=64' '-D' '_LARGEFILE_SOURCE' '-g' '-m32' '-
w' '-v' '-I' '/opt/topspin1.3/prog/include' '-mtune=generic' '-march=i586'
/usr/lib/gcc/x86_64-linux-gnu/4.7/cc1 -quiet -v -I
/opt/topspin1.3/prog/include -imultilib 32 -imultiarch i386-linux-gnu -D
LINU
X_INTEL -D _REENTRANT -D _FILE_OFFSET_BITS=64 -D _LARGEFILE_SOURCE au_zg.c -
quiet -dumpbase au_zg.c -m32 -mtune=generic -march=i5
86 -auxbase au_zg -g -w -version -o /tmp/cc4rFa4B.s
GNU C (Debian 4.7.2-5) version 4.7.2 (x86_64-linux-gnu)
    compiled by GNU C version 4.7.2, GMP version 5.0.5, MPFR version
3.1.0-p10, MPC version 0.9
GGC heuristics: --param ggc-min-expand=100 --param ggc-min-heapsize=131072
ignoring nonexistent directory "/usr/local/include/i386-linux-gnu"
ignoring nonexistent directory "/usr/lib/gcc/x86_64-linux-
gnu/4.7/../../../../x86_64-linux-gnu/include"
```

```

ignoring nonexistent directory "/usr/include/i386-linux-gnu"
#include "...": search starts here:
#include <...> search starts here:
 /opt/topspin1.3/prog/include
 /usr/lib/gcc/x86_64-linux-gnu/4.7/include
 /usr/local/include
 /usr/lib/gcc/x86_64-linux-gnu/4.7/include-fixed
 /usr/include
End of search list.
GNU C (Debian 4.7.2-5) version 4.7.2 (x86_64-linux-gnu)
    compiled by GNU C version 4.7.2, GMP version 5.0.5, MPFR version
3.1.0-p10, MPC version 0.9
GGC heuristics: --param ggc-min-expand=100 --param ggc-min-heapsize=131072
Compiler executable checksum: 7fa7c2a970be5e19ce72b2057c14800d
COLLECT_GCC_OPTIONS='-c' '-D' 'LINUX_INTEL' '-D' '_REENTRANT' '-D'
'_FILE_OFFSET_BITS=64' '-D' '_LARGEFILE_SOURCE' '-g' '-m32' '-
w' '-v' '-I' '/opt/topspin1.3/prog/include' '-mtune=generic' '-march=i586'
as -v -W -I /opt/topspin1.3/prog/include --32 -o au_zg.o /tmp/cc4rFa4B.s
GNU assembler version 2.22 (x86_64-linux-gnu) using BFD version (GNU
Binutils for Debian) 2.22
COMPILER_PATH=/usr/lib/gcc/x86_64-linux-gnu/4.7:/usr/lib/gcc/x86_64-linux-
gnu/4.7:/usr/lib/gcc/x86_64-linux-gnu:/usr/lib/gcc/x
86_64-linux-gnu/4.7:/usr/lib/gcc/x86_64-linux-gnu/
LIBRARY_PATH=/usr/lib32/./lib32:/usr/lib/gcc/x86_64-linux-
gnu/4.7/32:/usr/lib/gcc/x86_64-linux-gnu/4.7/././././i386-linux-gnu
:/usr/lib/gcc/x86_64-linux-gnu/4.7/./././././lib32:/lib/i386-linux-
gnu:/lib/./lib32:/usr/lib/i386-linux-gnu:/usr/lib/./l
ib32:/usr/lib32:/usr/lib/gcc/x86_64-linux-gnu/4.7:/usr/lib/gcc/x86_64-
linux-gnu/4.7/././././i386-linux-gnu:/usr/lib/gcc/x86_
64-linux-gnu/4.7/./././././lib/i386-linux-gnu:/lib:/usr/lib/i386-linux-
gnu:/usr/lib/
COLLECT_GCC_OPTIONS='-c' '-D' 'LINUX_INTEL' '-D' '_REENTRANT' '-D'
'_FILE_OFFSET_BITS=64' '-D' '_LARGEFILE_SOURCE' '-g' '-m32' '-
w' '-v' '-I' '/opt/topspin1.3/prog/include' '-mtune=generic' '-march=i586'
    exit=0 sig=0 dump=0
Used Libraries
auliba.so aulibp.so chparamod.so sxutil.so libhpcu.so libBpsu.so ConvSf.so
libSwish.so libVtu.so lib_sbsb.so lib_tty.so librrs.so
liblrs.so Bis.so convpw.so editpar.so libacq.so util.so aulibp.so uni.so
par.so libPath.so libcb.so libUtil.so libCUtil.so libSha
peIO.so libFunc.so libJCamp.so libCt.so libQTP.so auliba.a aulibp.a
chparamod.a libacq.a editpar.a util.a uni.a par.a libPath.a li
bcb.a
c++ -m32 -Wl,-warn-common,-warn-constructors -L/opt/topspin1.3/prog/shlib -
lstdc++ -v -s /opt/topspin1.3/prog/au/bin/au_zg.o
/opt/topspin1.3/prog/shlib/auliba.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/aulibp.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/chparamod.so /opt/topspin1.3/
prog/shlib/sxutil.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/libhpcu.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/libBpsu.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/ConvS
f.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/libSwish.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/libVtu.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/lib_sbsb.so

```

```
/opt/tops
pin1.3/prog/shlib/lib_tty.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/librrs.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/liblrs.so /opt/topspin1.3/prog/shlib
/Bis.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/convpw.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/editpar.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/libacq.so
/opt/tops
pin1.3/prog/shlib/util.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/aulibp.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/uni.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/par.s
o /opt/topspin1.3/prog/shlib/libPath.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/libcb.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/libUtil.so /opt/topspin1.3
/prog/shlib/libCUtil.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/libShapeI0.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/libFunc.so /opt/topspin1.3/prog/shlib
/libJCamp.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/libCt.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/libQTP.so /opt/topspin1.3/prog/lib/auliba.a
/opt/tops
pin1.3/prog/lib/aulibp.a /opt/topspin1.3/prog/lib/chparamod.a
/opt/topspin1.3/prog/lib/libacq.a /opt/topspin1.3/prog/lib/editpar.a
/opt/topspin1.3/prog/lib/util.a /opt/topspin1.3/prog/lib/uni.a
/opt/topspin1.3/prog/lib/par.a /opt/topspin1.3/prog/lib/libPath.a
/opt/topspin1.3/prog/lib/libcb.a -lm -ldl -o au_zg
c++ -m32 -Wl,-warn-common,-warn-constructors -L/opt/topspin1.3/prog/shlib -
lstdc++ -v -s /opt/topspin1.3/prog/au/bin/au_zg.o
/opt/topspin1.3/prog/shlib/auliba.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/aulibp.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/chparamod.so /opt/topspin1.3/
prog/shlib/sxutil.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/libhpcu.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/libBpsu.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/ConvS
f.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/libSwish.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/libVtu.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/lib_sbsb.so
/opt/tops
pin1.3/prog/shlib/lib_tty.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/librrs.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/liblrs.so /opt/topspin1.3/prog/shlib
/Bis.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/convpw.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/editpar.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/libacq.so
/opt/tops
pin1.3/prog/shlib/util.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/aulibp.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/uni.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/par.s
o /opt/topspin1.3/prog/shlib/libPath.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/libcb.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/libUtil.so /opt/topspin1.3
/prog/shlib/libCUtil.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/libShapeI0.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/libFunc.so /opt/topspin1.3/prog/shlib
/libJCamp.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/libCt.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/libQTP.so /opt/topspin1.3/prog/lib/auliba.a
/opt/tops
pin1.3/prog/lib/aulibp.a /opt/topspin1.3/prog/lib/chparamod.a
/opt/topspin1.3/prog/lib/libacq.a /opt/topspin1.3/prog/lib/editpar.a
/opt/topspin1.3/prog/lib/util.a /opt/topspin1.3/prog/lib/uni.a
/opt/topspin1.3/prog/lib/par.a /opt/topspin1.3/prog/lib/libPath.a
/opt/topspin1.3/prog/lib/libcb.a -lm -ldl -o au_zg
Reading specs from /opt/topspin1.3/gnu/bin/./lib/gcc-lib/i686-pc-linux-
```

```

gnu/3.3.5/specs
Configured with: ../gcc-3.3.5/configure --prefix=/pr/gnu --enable-
threads=posix --enable-__cxa_atexit --enable-languages=c,c++ --
with-cpu=pentium4
Thread model: posix
gcc version 3.3.5
 /opt/topspin1.3/gnu/bin/./lib/gcc-lib/i686-pc-linux-gnu/3.3.5/collect2 --
eh-frame-hdr -m elf_i386 -dynamic-linker /lib/ld-linux
.so.2 -o au_zg -s /usr/lib32/crt1.o /usr/lib32/crti.o
/opt/topspin1.3/gnu/bin/./lib/gcc-lib/i686-pc-linux-gnu/3.3.5/crtbegin.o -
L/opt/topspin1.3/prog/shlib -L/opt/topspin1.3/gnu/bin/./lib/gcc-lib/i686-
pc-linux-gnu/3.3.5 -L/opt/topspin1.3/gnu/bin/./lib/gcc
-lib -L/usr/lib32 -L/opt/topspin1.3/gnu/bin/./lib/gcc-lib/i686-pc-linux-
gnu/3.3.5/./././././i686-pc-linux-gnu/lib -L/opt/topsp
in1.3/gnu/bin/./lib/gcc-lib/i686-pc-linux-gnu/3.3.5/./././.. -warn-common -
warn-constructors -lstdc++ /opt/topspin1.3/prog/au/bi
n/au_zg.o /opt/topspin1.3/prog/shlib/auliba.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/aulibp.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/chparmod.so
/opt/t
opspin1.3/prog/shlib/sxutil.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/libhpcu.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/libBpsu.so /opt/topspin1.3/prog/s
hlib/ConvSf.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/libSwish.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/libVtu.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/lib_sbsb.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/lib_tty.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/librrs.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/liblrs.so /opt/topspin1.3/
prog/shlib/Bis.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/convpw.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/editpar.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/libacq.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/util.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/aulibp.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/uni.so /opt/topspin1.3/prog/s
hlib/par.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/libPath.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/libcb.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/libUtil.so
/opt/
topspin1.3/prog/shlib/libCUtil.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/libShapeIO.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/libFunc.so /opt/topspin1.3/
prog/shlib/libJCamp.so /opt/topspin1.3/prog/shlib/libCt.so
/opt/topspin1.3/prog/shlib/libQTP.so /opt/topspin1.3/prog/lib/auliba.a
/opt/topspin1.3/prog/lib/aulibp.a /opt/topspin1.3/prog/lib/chparmod.a
/opt/topspin1.3/prog/lib/libacq.a /opt/topspin1.3/prog/lib
/editpar.a /opt/topspin1.3/prog/lib/util.a /opt/topspin1.3/prog/lib/uni.a
/opt/topspin1.3/prog/lib/par.a /opt/topspin1.3/prog/lib
/libPath.a /opt/topspin1.3/prog/lib/libcb.a -ldl -lstdc++ -lm -lgcc_s -lgcc
-lc -lgcc_s -lgcc /opt/topspin1.3/gnu/bin/./lib/gcc-
lib/i686-pc-linux-gnu/3.3.5/crtend.o /usr/lib32/crtn.o
exit status is: 0 0

```

i quan comprovo el fitxer creat trobo que és un executable de 32-bits

```

# file /opt/topspin1.3/prog/au/bin/au_zg
/opt/topspin1.3/prog/au/bin/au_zg: ELF 32-bit LSB executable, Intel 80386,
version 1 (SYSV), dynamically linked (uses shared libs), for GNU/Linux
2.6.26, stripped

```

i si afegim a la variable `LD_LIBRARY_PATH` les carpetes definides a l'entorn d'execució del TopSpin (veure fitxer `/opt/topspin1.3/prog/bin/topspin`)

### export

```
LD_LIBRARY_PATH=$LD_LIBRARY_PATH:/opt/topspin1.3/prog/pvshlib:/opt/topspin1.3/prog/shlib
```

el programa ldd ens mostra que totes les biblioteques emprades pel programa `au_zg` estan disponibles,

```
# ldd /opt/topspin1.3/prog/au/bin/au_zg
linux-gate.so.1 => (0xf77e0000)
libstdc++.so.5 => /opt/topspin1.3/prog/shlib/libstdc++.so.5
(0xf7723000)
auliba.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/auliba.so (0xf76ed000)
aulibp.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/aulibp.so (0xf76df000)
chparmod.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/chparmod.so (0xf76d7000)
sxutil.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/sxutil.so (0xf7681000)
libhpcu.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/libhpcu.so (0xf7671000)
libBpsu.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/libBpsu.so (0xf7666000)
ConvSf.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/ConvSf.so (0xf7660000)
libSwish.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/libSwish.so (0xf7657000)
libVtu.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/libVtu.so (0xf764e000)
lib_sbsb.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/lib_sbsb.so (0xf763a000)
lib_tty.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/lib_tty.so (0xf762a000)
librrs.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/librrs.so (0xf7621000)
liblrs.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/liblrs.so (0xf761f000)
Bis.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/Bis.so (0xf75f5000)
convpw.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/convpw.so (0xf75ef000)
editpar.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/editpar.so (0xf757c000)
libacq.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/libacq.so (0xf754f000)
util.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/util.so (0xf7535000)
uni.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/uni.so (0xf7527000)
par.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/par.so (0xf751b000)
libPath.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/libPath.so (0xf7510000)
libcb.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/libcb.so (0xf7505000)
libUtil.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/libUtil.so (0xf74df000)
libCUtil.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/libCUtil.so (0xf74dd000)
libShapeIO.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/libShapeIO.so
(0xf74ca000)
libFunc.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/libFunc.so (0xf7491000)
libJCamp.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/libJCamp.so (0xf745e000)
libCt.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/libCt.so (0xf745a000)
libQTP.so => /opt/topspin1.3/prog/shlib/libQTP.so (0xf744c000)
libdl.so.2 => /lib32/libdl.so.2 (0xf7448000)
libm.so.6 => /lib32/libm.so.6 (0xf7422000)
libgcc_s.so.1 => /usr/lib32/libgcc_s.so.1 (0xf7404000)
libc.so.6 => /lib32/libc.so.6 (0xf729f000)
/lib/ld-linux.so.2 (0xf77e1000)
```

De totes formes, ara hauré d'esperar a tenir accés al TopSpin per poder comprovar si realment funciona el programa `au_zg` i l'adquisició d'espectres.

## 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 `#!/bin/sh more /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](#): *Idd 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=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/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=1443526415](https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp_xw4300_500_topspin13&rev=1443526415)

Last update: **2015/09/29 13:33**

