

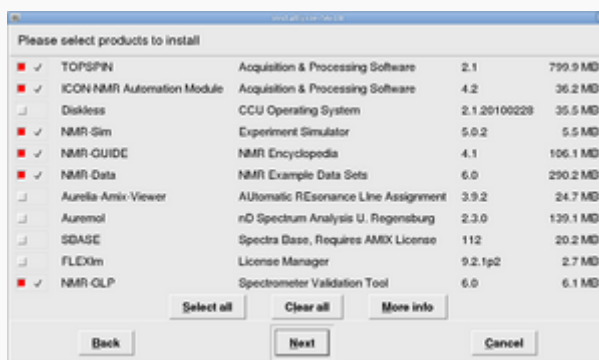
Instal·lació del Topspin 2.1

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



Configuració del Topspin 2.1

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

Aquestes són les tasques realitzades,

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

Problemes de compilació - Llibreria libpthread

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

```
# find ./topspin3.1/ -name libpthread* -exec ls -l {} \;  
lrwxrwxrwx 1 root root 34 Feb 21 2012  
./topspin3.1/prog/shlib/libpthread.so.0 \  
-> ../../gnu/lib/libpthread-2.11.3.so  
lrwxrwxrwx 1 root root 20 Feb 21 2012 ./topspin3.1/gnu/lib/libpthread.so.0  
\  
-> libpthread-2.11.3.so  
-rwxr-xr-x 1 root root 116809 Feb 21 2012
```

```

./topspin3.1/gnu/lib/libpthread-2.11.3.so

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

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

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

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

```

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 llibreries que crida el programa,

```
# ldd /opt/topspin2.1/prog/au/bin/poptau
linux-gate.so.1 => (0xf76fd000)
auliba.so => not found
aulibp.so => not found
chparmod.so => not found
librrs.so => not found
liblrs.so => not found
editpar.so => not found
libacq.so => not found
util.so => not found
uni.so => not found
par.so => not found
libPath.so => not found
libcb.so => not found
libdl.so.2 => /lib32/libdl.so.2 (0xf76df000)
libstdc++.so.6 => /usr/lib32/libstdc++.so.6 (0xf75ea000)
libm.so.6 => /lib32/libm.so.6 (0xf75c4000)
libgcc_s.so.1 => /usr/lib32/libgcc_s.so.1 (0xf75a6000)
libc.so.6 => /lib32/libc.so.6 (0xf745f000)
```

`/lib/ld-linux.so.2 (0xf76fe000)`

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

Si executo la comanda `ldd -r` em dóna 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'Avancelll 400sb no dóna 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)
```

P

```
# readelf -d ./poptau
```

Dynamic section at offset 0xf014 contains 36 entries:

Tag	Type	Name/Value
0x00000001	(NEEDED)	Shared library: [auliba.so]
0x00000001	(NEEDED)	Shared library: [aulibp.so]
0x00000001	(NEEDED)	Shared library: [chparmod.so]
0x00000001	(NEEDED)	Shared library: [librrs.so]
0x00000001	(NEEDED)	Shared library: [liblrs.so]
0x00000001	(NEEDED)	Shared library: [editpar.so]
0x00000001	(NEEDED)	Shared library: [libacq.so]
0x00000001	(NEEDED)	Shared library: [util.so]
0x00000001	(NEEDED)	Shared library: [uni.so]
0x00000001	(NEEDED)	Shared library: [par.so]
0x00000001	(NEEDED)	Shared library: [libPath.so]
0x00000001	(NEEDED)	Shared library: [libcb.so]
0x00000001	(NEEDED)	Shared library: [libdl.so.2]
0x00000001	(NEEDED)	Shared library: [libstdc++.so.6]
0x00000001	(NEEDED)	Shared library: [libm.so.6]
0x00000001	(NEEDED)	Shared library: [libgcc_s.so.1]
0x00000001	(NEEDED)	Shared library: [libc.so.6]
0x0000000c	(INIT)	0x8048db8

0x0000000d (FINI)	0x8055974
0x00000004 (HASH)	0x8048148
0x00000005 (STRTAB)	0x8048798
0x00000006 (SYMTAB)	0x8048368
0x0000000a (STRSZ)	834 (bytes)
0x0000000b (SYMENT)	16 (bytes)
0x00000015 (DEBUG)	0x0
0x00000003 (PLTGOT)	0x8057164
0x00000002 (PLTRELSZ)	448 (bytes)
0x00000014 (PLTREL)	REL
0x00000017 (JMPREL)	0x8048bf8
0x00000011 (REL)	0x8048be0
0x00000012 (RELSZ)	24 (bytes)
0x00000013 (RELENT)	8 (bytes)
0x6fffffff (VERNEED)	0x8048b60
0x6fffffff (VERNEEDNUM)	2
0x6fffffff0 (VERSYM)	0x8048ada
0x00000000 (NULL)	0x0

Un problema semblant apareix amb el programa *paropt*

Una cerca de `compile*` a la *Knowledge Database* de Bruker proporciona certes pistes,

- 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*. **La primera línia al fitxer *makeau* és correcte.**
- ...

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

Permanent link:
https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp_z400_600_topspin21&rev=1360765467

Last update: 2013/02/13 15:24

