

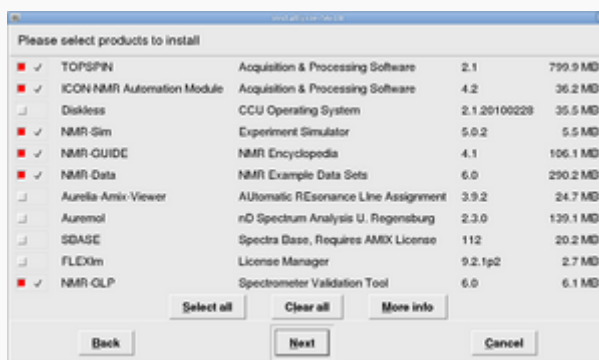
Instal·lació del Topspin 2.1

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 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 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'Avancell 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)
```

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.

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

Permanent link:
https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp_z400_600_topspin21&rev=1360771709

Last update: **2013/02/13 17:08**

