Estació de treball HP Z400 pel Macromodel

Aquest ordinador és un ordinador comú destinat als programes de càlcul d'estructures i, en particular, al programa Macromodel de Schrödinger.

Descripció tècnica

Dades per l'inventari

Descripció	Estació de treball HP Z400 HDD 1TB
Marca	Hewlett Packard
Model	HP Z400 HDD 1TB
Núm. sèrie	CZC152FC7M
Núm. referència	KK719ET#ABE
Potència	200 W
Emplaçament	c2/-135
Núm. inventari	016552110

Estació de treball pel MACROMODEL

PC HP Z400 - MACROMODEL	
Data de compra	2012-05-11
DHCP UAB	
Data d'alta	2012-06-07
Adreça MAC	082E5F1DEE86
Hostname	cie-48-184
Adreça IP	158.109.48.184
DADES TÈCNIQUES	
Descripció	Estació de treball
Marca	Hewlett Packard
Model	HP Z400 HDD 1TB
Núm. sèrie	CZC152FC7M
Núm. referència	KK719ET#ABE
Potència	200 W
Emplaçament	c2/-135 (sala de l'Avance 360MHz)
HP Care Pack	no cal. Garantia de 3 anys inclosa al producte
WINDOWS 7 PROFESSIONAL 64-BITS	
Product Key	VP349 - 9K3TH - WTK2D - WCMP7 - D2YXV
—	X16 - 96076
Barcode	00186-142-971-036
HP Barcode	584048-001

Targeta gràfica

La targeta gràfica instal·lada és una **NVIDIA Quadro FX600, 1024MB, PCI-E**,

- Manual: NVIDIA Quadro 600
- Drivers: Linux x64 (AMD64/EM64T) Display Driver

Windows 7 Professional 64-bits

L'ordinador ve amb Microsoft Windows 7 Professional 64-bits preinstal·lat en dues particions,

- **SYSTEM** (label: boot) de 2GB, i
- **OS (C:)** que ocupa la resta del disc, però que està pràcticament buida.

Després de desactivar la memòria virtual i la recuperació del sistema a totes les particions (instruccions a How to shrink Windows 7 boot partition with unmovable files) amb l'eina *Partition Manager* del Windows redueixo la 2a partició fins a 37 GB.

Llavors amb l'eina GParted (PartedMagig 11.11.11) he mogut ambudes particions al final del disc per tal d'alliberar espai per la instal·lació del GNU/Linux Debian.

Per finalitzar el procés de còpia de seguretat del Windows-7, faig una còpia del MBR amb la comanda

```
dd if=/dev/sda of=mbrcontent.bin bs=512 count=1
```

i copio el fitxer dins la partició **OS (C:)**.

Instal·lació de Debian GNU/Linux

La distribució de GNU/Linux instal·lada és la **Debian version 6.0.3, released on October 8th, 2011, codenamed squeeze, AMD64 architecture.**

Configuració inicial

- Language: English
- Country: Spain
- Locale: en_US.UTF-8
- Keymap: Spanish
- Host name: cie-48-184 (assignat automàticament per DHCP)
- Domain name: uab.es (assignat automàticament per DHCP)
- User name: sermnuab (SeRMN-UAB Users)
- Time zone: Madrid

Partició del disc

Partició a l'AvanceIII-400sb

```
[root@cie-55-32 ~]# df -hT -t ext3
```

```
Filesystem    Type    Size  Used Avail Use% Mounted on
/dev/sda2     ext3     16G  7.4G  7.3G  51% /
/dev/sda1     ext3    122M   17M   99M  15% /boot
/dev/sda4     ext3    124G   49G   69G  42% /opt
```

Partició a l'AvanceII+-600

```
[nmrsu@cie-55-31 ~]$ df -hT -t ext3
Filesystem    Type    Size  Used Avail Use% Mounted on
/dev/sda2     ext3     16G  7.9G  6.8G  54% /
/dev/sda1     ext3    122M   17M   99M  15% /boot
/dev/sda4     ext3    124G  117G  765M 100% /opt
```

Partició al servidor amb Debian-AMD64

```
sermn@cie-59-222:~/Debian DVD$ df -hT -t ext3
Filesystem    Type    Size  Used Avail Use% Mounted on
/dev/sda1     ext3    312M  271M   26M  92% /
/dev/sda9     ext3     74G   54G   17G  77% /home
/dev/sda8     ext3    896M   18M  833M   3% /tmp
/dev/sda5     ext3    8.6G  4.1G  4.2G  50% /usr
/dev/sda6     ext3    129G  891M  121G   1% /var
```

A partir d'aquests esquemes de partició decideixo crear les següents particions:

- Partició primària **/ (root)** de 20 GB. Inclou `/usr` i `/tmp`
- Partició lògica **/var** de 5 GB.
- Partició swap de 12 GB.
- Partició lògica **/opt** de 20 GB. Pel Topspin i altre programari Bruker.
- Partició lògica **/home** de 907,5 GB (resta d'espai al disc). Entre altres, és on es guardaran les dades dels usuaris.

```
root@cie-56-18:/# sfdisk -l

Disk /dev/sda: 121601 cylinders, 255 heads, 63 sectors/track
Warning: extended partition does not start at a cylinder boundary.
DOS and Linux will interpret the contents differently.
Units = cylinders of 8225280 bytes, blocks of 1024 bytes, counting from 0

   Device Boot Start     End   #cyls    #blocks   Id  System
/dev/sda1     117257+ 117517-    261-   2096128    7  HPFS/NTFS
/dev/sda2     117518  121600    4083   32796697+   7  HPFS/NTFS
/dev/sda3   *      0+   2431-   2432-  19530752   83  Linux
/dev/sda4       2431+ 117257- 114826- 922334209    5  Extended
/dev/sda5       2431+   3039-    608-   4881408   83  Linux
/dev/sda6       3039+   4498-   1459-  11717632   82  Linux swap / Solaris
/dev/sda7       4498+   6929-   2432-  19529728   83  Linux
/dev/sda8       6929+ 117257- 110328- 886202368   83  Linux
```

Les particions *sda1* i *sda2* contenen la instal·lació original de Windows 7.

Instal·lació i configuració de Debian

Instal·lació bàsica de programes

Les *col·leccions* de programes a instal·lar seleccionades són:

- Desktop Environment
- Standard System

La resta de programes que poguessin ser necessaris, s'instal·laran més endavant.

GRUB Boot Loader

GRUB Boot Loader s'instal·la al MBR.

Reiniciar per primer cop

Un cop s'han instal·lat tots els paquets, reinicio l'ordinador i entro a la sessió de GNU/Debian Squeeze.

Simplificació de l'escriptori

Simplifico l'escriptori:

- Elimino el panel inferior. Abans de fer-ho, moc els applets *Window List* i *Workspace Switcher* al panel superior.
- Elimino els applets *Notification Area* i *Window Selector* al panel superior, el primer perquè no vull que els usuaris enredin les connexions a la xarxa, i el segon perquè és redundant amb el *Window List*.
- Al *Workspace Switcher* redueixo el nombre d'escriptoris a 2. Els usuaris de MS-Windows no coneixen el concepte d'escriptoris i tenen tendència a perdre's.
- Canvio la configuració del *Workpsace Switcher*
  - Show windows from all workspaces
  - Group windows when space is limited
  - Restore to native workspace (les finestres minimitzades s'obren a l'escriptori on es van tancar)
- Afegeixo els applets *Lock Screen Button* per bloquejar la pantalla, i *Log Out Button* per sortir de la sessió o per canviar a un altre usuari.

Edito el menú per amagar les aplicacions que no vull que vegin els usuaris (jocs i altres entreteniments). Més endavant miraré d'esbrinar cóm es poden desinstal·lar algunes d'aquestes aplicacions innecessàries. Entre altres:

- L'usuari “normal” no hauria de veure el menú *System* | *Administration*
- L'usuari “normal” no hauria de veure moltes de les opcions disponibles al menú *System* | *Preferences*
- …

Addició d'altres magatzems (repositories) de programes

Afegeixo altres magatzems (repositories) de programes:

- deb http://backports.debian.org/debian-backports/ squeeze-backports main
- deb http://www.debian-multimedia.org/ squeeze main contrib non-free

i la signatura (debian-multimedia-keyring) del magatzem *debian-multimedia*, i instal·lo:

- Adobe Acrobat Reader

Altres paquets i programes de Debian

Afegeixo els següents paquets o programes (aquest no és un llistat exhaustiu, només inclou els dimonis i servidors de xarxa, i altres programes importants):

- ssh (openssh-server, openssh-client)
- mc (midnight commander)
- rsync
- ftp-ssl en comptes de ftp
- denyhosts
- nfs-kernel-server
- tftp-hpa
- tftpd-hpa Cal reconfigurar!
- bootparamd Cal reconfigurar!
- xinetd (en comptes del programa per defecte: openbsd-inetd)

Elimino els paquets o programes:

- telnet
- ...

Elimino els següents metapackages per poder eliminar altres paquets o programes que depenen d'ells sense haver de desinstal·lar altres paquets que sí que m'interessen,

- gnome
- gnome-desktop-environment
- gnome-office

Llavors desinstal·lo:

- gnome-games, gnome-games-data, gnome-games-extra-data
- simple-scan, xsane, xsane-common, i les biblioteques relacionades
- ...

Substitueixo la versió lliure de Java (`java-6-openjdk` i paquets que en dependen) per la versió oficial (`sun-java6-jdk` i paquets que en depenen).

Configuració de la xarxa

Actualment la configuració de la xarxa de la UAB la proporciona un servidor de DHCP. Per evitar que la caiguda de la xarxa afecti el funcionament de l'espectròmetre, **la configuració s'haurà de canviar a estàtica.** Els paràmetres són,

- Hostname: cie-56-18
- Domain: uab.es
- IP address: 158.109.56.18
- Broadcast: 158.109.63.255
- Netmask: 255.255.240.0
- DNS:
  - domain uab.es
  - search uab.es
  - nameserver 158.109.0.9
  - nameserver 158.109.254.130
  - nameserver 158.109.0.1

La configuració de més amunt és l'emprada per la targeta de xarxa de la placa basse,

```
eth0      Link encap:Ethernet  HWaddr 3c:d9:2b:73:ea:93
          inet addr:158.109.56.18  Bcast:158.109.63.255  Mask:255.255.240.0
          inet6 addr: fec0::a:3ed9:2bff:fe73:ea93/64 Scope:Site
          inet6 addr: 2002:9e6d:3b49:a:3ed9:2bff:fe73:ea93/64 Scope:Global
          inet6 addr: fe80::3ed9:2bff:fe73:ea93/64 Scope:Link
          UP BROADCAST RUNNING MULTICAST  MTU:1500  Metric:1
          RX packets:91257 errors:0 dropped:0 overruns:0 frame:0
          TX packets:1609 errors:0 dropped:0 overruns:0 carrier:0
          collisions:0 txqueuelen:1000
          RX bytes:23348532 (22.2 MiB)  TX bytes:123310 (120.4 KiB)
          Interrupt:17
```

i ha estat obtinguda del servidor de DHCP de la universitat, a l'igual que la configuració de servidors de noms,

```
# more resolv.conf
# Generated by NetworkManager
domain uab.es
search uab.es
nameserver 158.109.0.9
nameserver 158.109.254.130
nameserver 158.109.0.1
```

La targeta de xarxa addicional també es reconeix,

```
eth1      Link encap:Ethernet  HWaddr 1c:7e:e5:10:90:0a
          UP BROADCAST MULTICAST  MTU:1500  Metric:1
          RX packets:0 errors:0 dropped:0 overruns:0 frame:0
          TX packets:0 errors:0 dropped:0 overruns:0 carrier:0
          collisions:0 txqueuelen:1000
```

```
          RX bytes:0 (0.0 B)  TX bytes:0 (0.0 B)
          Interrupt:21 Base address:0x6000
```

però no té una configuració assignada. Caldrà configurar-la de forma estàtica amb els paràmetres de connexió emprats actualment per la connexió de l'estació de treball a la consola.

Paquets i programes de Debian

Com que la configuració de la xarxa és estàtica, per evitar problemes elimino,

- network-manager i network-manager-gnome, i
- isc-dhcp i isc-dhpc-common,

i instal·lo

- net-tools, i
- ifupdown-extra, que alhora arrossega els paquets
  - ethtools, i
  - iputils-arping

Configuració de les targetes de xarxa

Per evitar que en algun moment es pugui bescanviar la configuració de les targetes de xarxa poso en pràctica les opcions esmentades a How to reorder or rename logical interface names in Linux.

Una opció seria fer servir el programa `nameif` (paquet *net-tools*) per assignar un nom de dispositiu en funció de l'adreça física de la targeta; i després emprar el nom de dispositiu assignat al fitxer de configuració *etc/network/interface*.

Però una consulta al fitxer */etc/udev/rules.d/70-persistent-net.rules* indica que l'assignació del nom de dispositiu, *eth0* o *eth1* feta pel programa udev és fixe, i que no hi ha perill de que canviï en reiniciar l'ordinador,

```
root@cie-56-18:/etc/udev/rules.d# more 70-persistent-net.rules
# This file was automatically generated by the /lib/udev/write_net_rules
# program, run by the persistent-net-generator.rules rules file.
#
# You can modify it, as long as you keep each rule on a single
# line, and change only the value of the NAME= key.

# PCI device 0x14e4:0x1684 (tg3)
SUBSYSTEM=="net", ACTION=="add", DRIVERS=="?*",
ATTR{address}=="3c:d9:2b:73:ea:93",
  ATTR{dev_id}=="0x0", ATTR{type}=="1", KERNEL=="eth*", NAME="eth0"

# PCI device 0x1186:0x4300 (r8169)
SUBSYSTEM=="net", ACTION=="add", DRIVERS=="?*",
ATTR{address}=="1c:7e:e5:10:90:0a",
  ATTR{dev_id}=="0x0", ATTR{type}=="1", KERNEL=="eth*", NAME="eth1"
```

Així doncs, podem fer servir *eth0* i *eth1* al fitxer de configuració *etc/network/interfaces* sense preocupacions.

Bibliografia

- Network Configuration a la wiki de Debian.
- NetworkManager a la wiki de Debian.
- Chapter 5. Network setup, a *Debian Reference,* by Osamu Aoki.
- Disable NetworkManager
- ...

Fitxers de configuració provissionals

Aquesta és la configuració de xarxa provissional emprada per la instal·lació i configuració del sistema operatiu i del programa TopSpin.

/etc/hosts

```
127.0.0.1   localhost
127.0.1.1   cie-56-18.uab.es    cie-56-18
```

/etc/resolv.conf

```
# Generated by NetworkManager
domain uab.es
search uab.es
nameserver 158.109.0.9
nameserver 158.109.254.130
nameserver 158.109.0.1
```

/etc/network/interfaces

```
# This file describes the network interfaces available on your system
# and how to activate them. For more information, see interfaces(5).

# The loopback network interface
auto lo
iface lo inet loopback

# Ethernet interfaces are assigned to physical devices in a
# persistent way according to rules in file:
#
#   /etc/udev/rules.d/70-persistent-net.rules
#
# Hence, each of eth0 and eth1 will **always** correspond to
# the same device. The configuration below assumes that,
#
#   eth0 -> lan (internet)
```

```
#   eth1 -> nmr (spectrometer ccu or ipso)
#
auto eth0 eth1

# LAN / INTERNET - Assigned to the primary network interface,
# which usually will be the motherboard integrated NIC.
#
iface eth0 inet static
    address 158.109.56.18
    netmask 255.255.240.0
    broadcast 158.109.63.255
    gateway 158.109.0.3

# NMR CONSOLE LAN - Assigned to the secondary network interface,
# which usually will be the added NIC.
#
iface eth1 inet static
    address 149.236.99.1
    netmask 255.255.255.0
    network 149.236.99.0
    broadcast 10.10.255.255
```

/etc/udev/rules.d/70-persistent-net.rules

```
# This file was automatically generated by the /lib/udev/write_net_rules
# program, run by the persistent-net-generator.rules rules file.
#
# You can modify it, as long as you keep each rule on a single
# line, and change only the value of the NAME= key.

# PCI device 0x14e4:0x1684 (tg3)
SUBSYSTEM=="net", ACTION=="add", DRIVERS=="?*",
ATTR{address}=="3c:d9:2b:73:ea:93",
  ATTR{dev_id}=="0x0", ATTR{type}=="1", KERNEL=="eth*", NAME="eth0"

# PCI device 0x1186:0x4300 (r8169)
SUBSYSTEM=="net", ACTION=="add", DRIVERS=="?*",
ATTR{address}=="1c:7e:e5:10:90:0a",
  ATTR{dev_id}=="0x0", ATTR{type}=="1", KERNEL=="eth*", NAME="eth1"
```

Configuració de serveis

Avahi

Fix Me! S'ha de configurar (fitxer `/etc/avahi/avahi-daemon.conf`) per tal de restringir la difusió dels serveis disponibles a l'ordinador i, potser, la cerca de serveis a la xarxa.

Trivial FTP daemon

Enllaços sobre la configuració del *tftpd*

- http://chschneider.eu/linux/server/tftpd-hpa.shtml
- http://diablo.craem.net/wordpress/?p=171
- ...

Bootparam

Cal configurar-lo per servir el sistema operatiu de la consola.

NFS

Cal configurar-lo per servir el sistema operatiu de la consola.

NTP

Instal·lo el paquet *ntp* i al final del fitxer */etc/ntp.conf* afegeixo els següents servidors de temps,

- server swisstime.ethz.ch
- server ntp.uab.es
- server ntp.univ-lyon1.fr

Altres programes no procedents de Debian

Afegeixo els programes:

- Firefox del lloc web de Mozilla
- Filezilla? potser no cal, perquè el gestor de fitxers ja incorpora un client de ftp/ssh.
- ...

Hardware especial

Drivers per la targeta gràfica

Instal·lo els drivers més actuals disponibles a debian-backports.

Per més informació consultar:

- http://wiki.debian.org/NvidiaGraphicsDrivers#non-free_drivers
- http://www.nvidia.com/object/unix.html
- http://www.nvidia.com/object/linux-display-amd64-290.10-driver.html
- http://packages.debian.org/search?keywords=nvidia-glx

- ...

Per veure si es poden connectar dos monitors consultar:

- http://en.gentoo-wiki.com/wiki/X.Org/Dual_Monitors/Nvidia
- http://www.nvidia.com/object/feature_twinview.html
- http://ubuntuforums.org/showthread.php?t=1817622
- http://www.ublug.org/ubuntu/twinview/twinview-howto-breezy.html
- http://us.download.nvidia.com/solaris/96.43.21/README/appendix-g.html
- http://defindit.com/readme_files/x_windows_dual_monitor.html
- http://forums.nvidia.com/
- ...

Configuració de la BIOS

Fix Me! Quan tot estigui funcionant caldrà verificar la configuració de la BIOS, per exemple, per protegir l'accés amb una contrasenya.

Securing Debian GNU/Linux

- Debian SELinux support. The Debian packaged Linux kernels have had SELinux support compiled in (but disabled by default) since version 2.6.9.
    - SELinux Setup
- Security-Enhanced_Linux
- SELinux Project Wiki
- SELINUX (Security-Enhanced Linux)
- Securing and Hardening Red Hat Linux Production Systems. A Practical Guide to Basic Linux Security in Production Enterprise Environments. Written by Werner Puschitz.

Altres millores a Debian

Devil's pie

- Devil's Pie is a window-matching utility, inspired by Sawfish's “Matched Windows” option and the lack of the functionality in Metacity. Metacity lacking window matching is not a bad thing — Metacity is a lean window manager, and window matching does not have to be a window manager task. Devil's Pie can be configured to detect windows as they are created, and match the window to a set of rules. If the window matches the rules, it can perform a series of actions on that window. For example, I can make all windows created by X-Chat appear on all workspaces, and the main Gkrellm1 window does not appear in the pager or task list.
- Devilspie is a non-gui utility that lets you make applications start in specified workplaces, in specified sizes and placements, minimized or maximized and much more based on simple config files.
- GDevilspie is a user friendly interface to the devilspie window matching daemon, to create rules easily.
    - How do I tell a start up program to start minimized?

Teamviewer

- TeamViewer the All-In-One Solution for Remote Access and Support over the Internet. TeamViewer connects to any PC or server around the world within a few seconds. You can remote control your partner's PC as if you were sitting right in front of it.

Configuració de GNOME

Consultar els següents enllaços sobre cóm millorar o personalitzar el comportament de Gnome

- GNOME at ArchLinux
  - GNOME Tips
  - Configuring GDM 2.28

Instal·lació del Macromodel

- Instal·lació de la Schrodinger Suite 2012 per Linux-x86 de 64 bits.

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

Permanent link:
https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp_z400_macromodel

Last update: **2016/04/19 17:18**