Non solo NMR



Hands on, ovvero mettiamoci le mani!!!

Nella scorsa rubrica di "Non solo NMR" abbiamo discusso brevemente i problemi del collegamento in modo grafico dal proprio PC ad uno spettrometro NMR remoto governato da un sistema operativo Unix ed abbiamo concluso che l'uso di un *server* Xwindows non è probabilmente la miglior cosa da farsi se la macchina è lenta, ha poca memoria o la rete è troppo intasata.

Gruppo Internazionale Risonanze Magnetiche

Questo mese continuiamo il discorso portando alla vostra attenzione un programma che sposa l'eleganza della risoluzione del problema del collegamento grafico tra i computer alla versatilità d'uso, alla compattezza e alla velocità: VNC (http://www.uk.research.att.com/ vnc). VNC (Virtual Network Computer) rovescia il concetto di *client-server* già visto per il protocollo X. Con VNC il *client* è il vostro PC (o MAC), verosimilmente il lato debole del collegamento, mentre il *server* è attivo come "demone" (ovvero "servizio" nel gergo Unix) sulla stazione NMR.

Essendo stato creato per girare su macchine che non devono essere necessariamente dei computer completi (fu scritto in origine per la "videotile", un terminale dotato solo di uno schermo, una penna per l'inserimento dati e una scheda di rete), VNC necessita di pochissime risorse dal lato cliente. Tutto ciò che il server invia al cliente è infatti una sequenza di semplici istruzioni del tipo: "Accendi il punto alle coordinate X,Y del tuo schermo e usa il colore Z". Questo è ben diverso da quello che avviene in una sessione Xwindows nella quale il programma remoto può chiedere al vostro PC: "Apri una finestra, disegna una riga dal punto X.Y al punto M.N della finestra e scrivi la parola 'HMBC' in Times 12 giallo a partire dal punto P,Q della finestra 2", che presuppone la capacità del PC di effettuare le operazioni richieste e di avere inoltre in memoria un database di tutti i caratteri e i simboli utilizzabili dal programma remoto. In

(seconda parte)

VNC, dunque, il *server* si occupa di tutto: sa come è fatto il vostro *display*, ne tiene una copia in memoria ed ogni volta che muovete il mouse o usate la tastiera aggiorna la sua copia e chiede infine al PC di cambiare il colore dei soli pixel (i "punti grafici" che compongono le immagini sullo schermo) modificati dalla vostra azione.

Un sistema così progettato ha un'utilissima proprietà collaterale: il *display* è, come si dice, "privo di stato". In pratica, se anche il vostro computer dovesse improvvisamente bloccarsi (strano?!) o spegnersi mentre lavorate (chi non è mai inciampato nel cavo di alimen-

tazione?) nulla sarà perso e un successivo collegamento riproporrà la stessa videata che avevamo lasciato prima della "catastrofe" (a patto, ovviamente che il server rimanga acceso e funzionante). L'uso che si può fare di questa possibilità del programma è, ad esempio, quella di continuare a lavorare sullo stesso spettro dovendo spostarsi da uno studio ad un altro (o anche da una città ad un'altra!) senza mai "uscire" dal proprio account sulla stazione NMR. Basterà ricordare di portare con se il dischetto contenente il client VNC (meno di 200Kb per la versione Win9X!) e potrete trasformare qualsiasi computer nella vostra "stazione NMR portatile". Ma c'è di più: quand'anche ci si dimenticasse il programma *client* e non si avesse voglia di scaricarlo nuovamente dal sito di VNC oppure si dovesse usare come client una macchina per la quale non fosse disponibile un eseguibile precompilato, sarà sempre possibile collegarsi al server usando un qualsiasi browser abilitato all'esecuzione di applet Java (Netscape o Explorer) e si potrà visualizzare l'intera sessione all'interno della



Figura 1 - Il browser Netscape collegato al server VNC in funzione sulla stazione Sun di uno spettrometro Varian. L'applet Java consente di utilizzare il programma Vnmr all'interno della finestra del browser

finestra del *browser* stesso (Figura 1). Comodo, vero?

Vediamo ora brevemente come installare il server sulla stazione Unix del nostro strumento NMR. Premetto che anche se è possibile fare ciò senza conoscere la password di root è consigliabile chiedere a chi gestisce lo strumento di coadiuvarvi nell'operazione, in modo che tutto funzioni subito come si deve. Chiedete anche al root manager se l'interprete Perl è installato e, se non lo fosse, fatelo installare (http://www.perl.org). Al momento in cui scrivo l'ultima versione disponibile del server VNC è la 3.3.3r2. Si andrà allora all'indirizzo: http://www.uk.research.att.com/vnc/dow nload.html e si scaricherà il file vnc-3.3.3r2-unixsrc.tar.Z dopo avere spuntato il quadratino corrispondente "unixsources". Dopo averlo scompattato (uncompress vnc-3.3.3r2-unixsrc.tar.Z; tar -xvf vnc-3.3.3r2-unixsrc.tar) si darà la seguente lista di comandi Unix (tratti dal file ReadMe presente nel pacchetto):

cd vnc_unixsrc xmkmf make World

Queste pagine, così come la costituenda pagina web del Girm, nascono nella prospettiva di diventare un punto di incontro per scambi di esperienze nel campo delle risonanze magnetiche tra i colleghi specialisti e gli utenti "di tutti i giorni". Potete mettervi in contatto con il Girm all'indirizzo it_girm@gsk.com o cm5304@gsk.com

Æ.

Non solo NMR



Figura 2

cd Xvnc make World cd .. **Si chiederà ora al** *root manager* **di dare i**

comandi seguenti: ./vncinstall/usr/local/bin

mkdir-p/usr/local/vnc/classes
cp classes/*/usr/local/vnc/classes

e il server sarà installato! Per lanciare il server nel vostro account date semplicemente il comando vncserver. La prima volta vi verrà chiesta solo una password che dovrete inserire ogni volta che vi collegherete dal vostro PC. Ribattendo il comando per la seconda e ultima volta otterrete in risposta (ad esempio):

New 'X' desktop is nome_stazione NMR:5

Starting applications specified in/vostra_directory/.vnc/xstartup Log file is /vostra_directory/ .vnc/nome stazione NMR:5.log

Attenzione al numerino che appare dopo il nome della stazione NMR e i due punti. Questo indica univocamente la vostra sessione e a questo farete riferi-

Anche quest'anno si svolgeranno le SAPIO Conferences. Tali giornate (sei eventi) rappresentano ormai un momento di incontro per gli spettroscopisti italiani. Per eventuali informazioni potete accedere al sito http://www.sapio.it/Gruppo_it/eventi/ eventi.htm

Vi segnaliamo inoltre che presso l'Università di Verona dal 16 al 21 luglio 2001 si svolgerà il "1° Seminario Nazionale per dottorandi di Chimica dei Sistemi Biologici" dal titolo" Modelling e Risonanza Magnetica Nucleare: Interazioni tra macromolecole e ligandi".

Per informazioni potete contattare Prof.ssa Henriette Molinari (henry@icmnmr.mi.cnr.it).

Æ.

mento collegandovi mediante il cliente. L'installazione del cliente è fortunatamente molto più veloce. Basta scaricare il file vnc-3.3.3r7_x86_win32.zip (o l'equivalente per il MAC) usando la stessa procedura vista prima per il *server*, scompattarlo con WinZip o simili, entrare nella cartella vnc*viewer* e lanciare il programma omonimo (Figura 2). Una finestrella vi chiederà di digitare il nome del *server* seguito da due punti e il numero della vostra sessione VNC (ad esempio, come si è visto prima, la numero 5).

Se il nome della macchina e il numero della sessione sono corretti, vi verrà ora chiesta la *password* definita al momento del lancio del *server* e si aprirà infine una "finestrona" dalla quale potrete finalmente lavorare ai vostri spettri. È importante ricordare che se invece preferite usare come cliente il *browser* dovrete dare come indirizzo il nome della macchina seguito da due punti e il numero 5800 + il numero della sessione. Nell'esempio riportato in Figura 1 http://nmr.unibo.it:5805 corrisponde a nmr.unibo.it:5 in Figura 2.

Come direbbero gli anglosassoni, abbiamo solo scalfito la superficie delle possibilità di questo utilissimo programma. A tutti gli interessati posso solo dire di fare riferimento al sito di VNC per conoscere ulteriori applicazioni, alcune impensabili con il normale software in dotazione con la stazione NMR o il proprio PC (avete mai pensato come fare per lavorare in due sullo stesso spettro mentre spiegate al telefono ad un collega il vostro lavoro o per utilizzare il vostro PC in remoto dal PC di casa?). Vi ricordo infine che VNC è rilasciato sotto la licenza GPL ed è quindi liberamente e gratuitamente usabile anche nelle aziende e non solo nel mondo accademico. Rimanendo a disposizione all'indirizzo del Girm auguro a tutti "buoni collegamenti remoti" e buon lavoro!

Mauro A. Cremonini

Vi segnaliamo che presso il Centro Risonanze Magnetiche dell'Università di Firenze ci sarà un'attività di "Formazione Permanente NMR". Tutte le informazioni sono reperibili alla pagina: http://www.cerm.unifi.it/NMRcourse/ NMR.htm

