

可视化软件的安装

1 Xcrysden

Xcrysden 是 WIEN2k 软件常用的可视化工具，这里给的是 xcrysden-1.5.53-linux_x86_64-shared 的安装方案：

由于 Xcrysden 对 Tcl/Tk、Mesa 和 FFTW 库有依赖，如果没有装这些，建议用 semishared 版，该版在 external 目录下自带了 Tcl/Tk、OpenGL 和 FFTW 库

- 解压缩 `tar -xvzf xcrysden-1.5.53-linux_x86_64-shared.tar.gz`
- 安装所需数据库
在 Ubuntu 环境下，命令为
`sudo apt-get install tk`
`sudo apt-get install tcl`
★ 有关 OpenGL 的安装见附录
- 进入目录，运行 `./xcrysden`

运行命令后发现有 `fhi_coord2xcr` 提示库函数指向不明，用命令
`ldd fhi_coord2xcr`
提示有缺库 `libgfortran.so`，安装后即可
`sudo apt-get install libgfortran3`

2 p4vasp

p4vasp 是 VASP 软件常用的可视化工具，这里给的是 p4vasp-0.3.29 的安装方案：

- 解压缩 `tar -xvzf p4vasp-0.3.29.tar.gz`
- 根据 README 提示，在 Ubuntu 系统中，运行命令：
`sudo apt-get install python-dev g++ libx11-dev mesa-common-dev libglu1-mesa-dev python-numpy python-glade2`
- 进入目录，运行 `./install.sh` 或 `./install_local.sh`，安装
- 运行命令 `p4v`
- 提示有缺库 `libgnome.so`，安装后即可
`sudo apt-get install libgnomeui-dev`

3 pymatgen

pymatgen 是 MIT 开发的强大的进程控制软件，其安装步骤如下：

当前的 pymatgen 需要 Python2.7 或 Python3 及以上版本，因此系统必须装有相应版本的 Python

- 运行 `pmg_install.py`, 安装各种 Python 工具
- 手动安装 Python 工具
`sudo pip install prettyplotlib`
 *pymatgen 所需 Python 工具, 详见 requirements.txt 和 requirements-optional.txt 所列内容
- 进入目录, 运行 setup.py 完成安装

pymatgen 的可视化 (如 DOS 等) 对 VTK 有依赖, 为正常实现可视化, 必须安装 python-vtk

`sudo apt-get install python-vtk sudo apt-get install libpng-dev`

此外, pymatgen 对 Matlab 有一定的依赖, 有必要安装 matplotlib 和 brewer2mpl

A

Ubuntu 安装 OpenGL

OpenGL 是一套由 SGI 公司发展出来的绘图函数库, 它是一组 C 语言的函数, 用于 2D 与 3D 图形应用程序的开发上。OpenGL 让程式开发人员不需要考虑到各种显示卡底层运作是否相同的问题, 硬件由 OpenGL 核心去沟通, 因此只要显示卡支援 OpenGL, 那么程式就不需要重新再移植, 而程式开发人员也不需要重新学习一组函数库来移植程式。

- 首先不可或缺的就是编译器与基本的函数库, 如果系统没有安装的话, 依照下面的方式安装:

`sudo apt-get install build-essential`

- 安装 OpenGL Library

`sudo apt-get install libgl1-mesa-dev`

- 安装 OpenGL Utilities

`sudo apt-get install libglu1-mesa-dev`

OpenGL Utilities 是一组建构于 OpenGL Library 之上的工具组, 提供许多很方便的函数, 使 OpenGL 更强大且更容易使用。

- 安装 OpenGL Utility Toolkit

`sudo apt-get install libglut-dev`

OpenGL Utility Toolkit 是建立在 OpenGL Utilities 上面的工具箱, 除了强化了 OpenGL Utilities 的不足之外, 也增加了 OpenGL 对于视窗介面支援。

注意: 在这一步的时候, 可能会出现以下情况, shell 提示:

Reading package lists...Done

Building dependency tree

Reading state information...Done E: Unable to locate package libglut-dev

将上述 `sudo apt-get install libglut-dev` 命令改成 `sudo apt-get install freeglut3-dev` 即可。

B ffmpeg 合并多个视频

- 安装: `sudo apt-get install ffmpeg`
 ffmpeg 依赖的库主要有三个: yasm, sdl1.2 和 sdl2.0
 安装 yasm: `sudo apt-get install yasm`
 安装 sdl1.2: `sudo apt-get install libsdl1.2-dev`
 安装 yasm: `sudo apt-get install libsdl2-dev`
- 待合并的视频文件名写入文件 to_be_merged.txt, 文件内容:
例如:

```
file /home/jun_jiang/Videos/探索发现_紫禁城/01-宫门大开.mp4
file /home/jun_jiang/Videos/探索发现_紫禁城/02-明成祖建殿.mp4
file /home/jun_jiang/Videos/探索发现_紫禁城/03-康熙皇帝.mp4
file /home/jun_jiang/Videos/探索发现_紫禁城/04-帝后生活.mp4
file /home/jun_jiang/Videos/探索发现_紫禁城/05-深宫动乱.mp4
file /home/jun_jiang/Videos/探索发现_紫禁城/06-古代名画.mp4
file /home/jun_jiang/Videos/探索发现_紫禁城/07-书香墨宝.mp4
file /home/jun_jiang/Videos/探索发现_紫禁城/08-宫藏贡品.mp4
file /home/jun_jiang/Videos/探索发现_紫禁城/09-玉苑珍宝.mp4
file /home/jun_jiang/Videos/探索发现_紫禁城/10-宫廷青铜.mp4
```

- 运行命令: `ffmpeg -f concat -safe 0 -i to_be_merged.txt -c copy output.mp4`即可