

MEM用GUIの使用法

- ・(wx)Pythonで開発をしたものを、Pyinstallerで実行形式(exe)に変換しています。色々なライブラリーが実行形式ファイルに含まれますので、ファイルサイズが少々大きくなっています。
- ・実行形式ファイルはwindows版のみです。
- ・スクリプト自体は、LinuxでもMacでも動く事を確認しています。((wx)Python必要)
- ・スクリプト(ソースコード)は、いかんせん素人なので公開する勇気がありません。
- ・なので、LinuxもしくはMacで使いたい方は、個別にご相談ください。
- ・このGUIは、現在のところ、PrimaとDysnomiaに対応しています。
- ・64bit版 MEMプログラムを使用される場合は、32bit版プログラムを別名で保存しておいて、64bit版プログラムの名前から64を消してください。
(例) dysnomia64.exe を dysnomia.exe に変更。
- ・本プログラムを使用した結果、生じた様々な不具合の責任はおりませんのでご注意ください。
- ・DL後、必ずウイルスチェックをした後で、ご使用願います。

MEM_GUI.ZIP には3つのファイルが含まれます。

mem.bat mem.ini PreparPrfD.exe

この3つのファイルを適当なフォルダーに保存してください。

おススメは

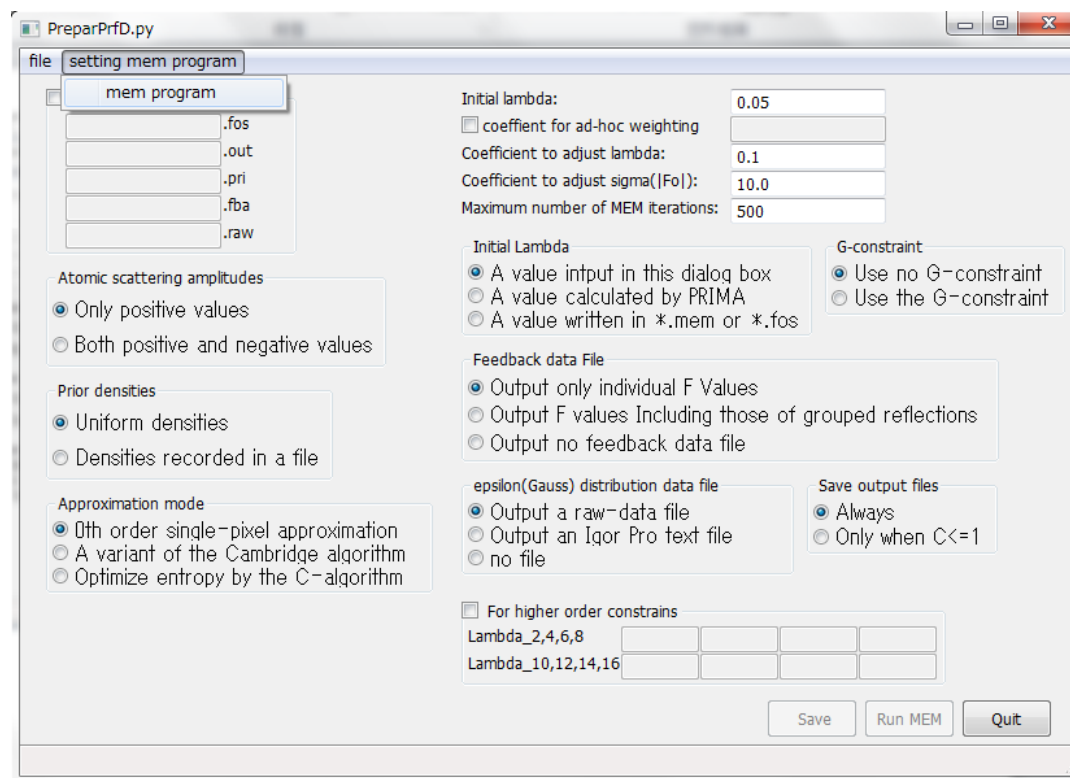
c:¥Program Files¥RIETAN_VENUS

フォルダーに日本語(全角文字)を含まない方がたぶんいいです。

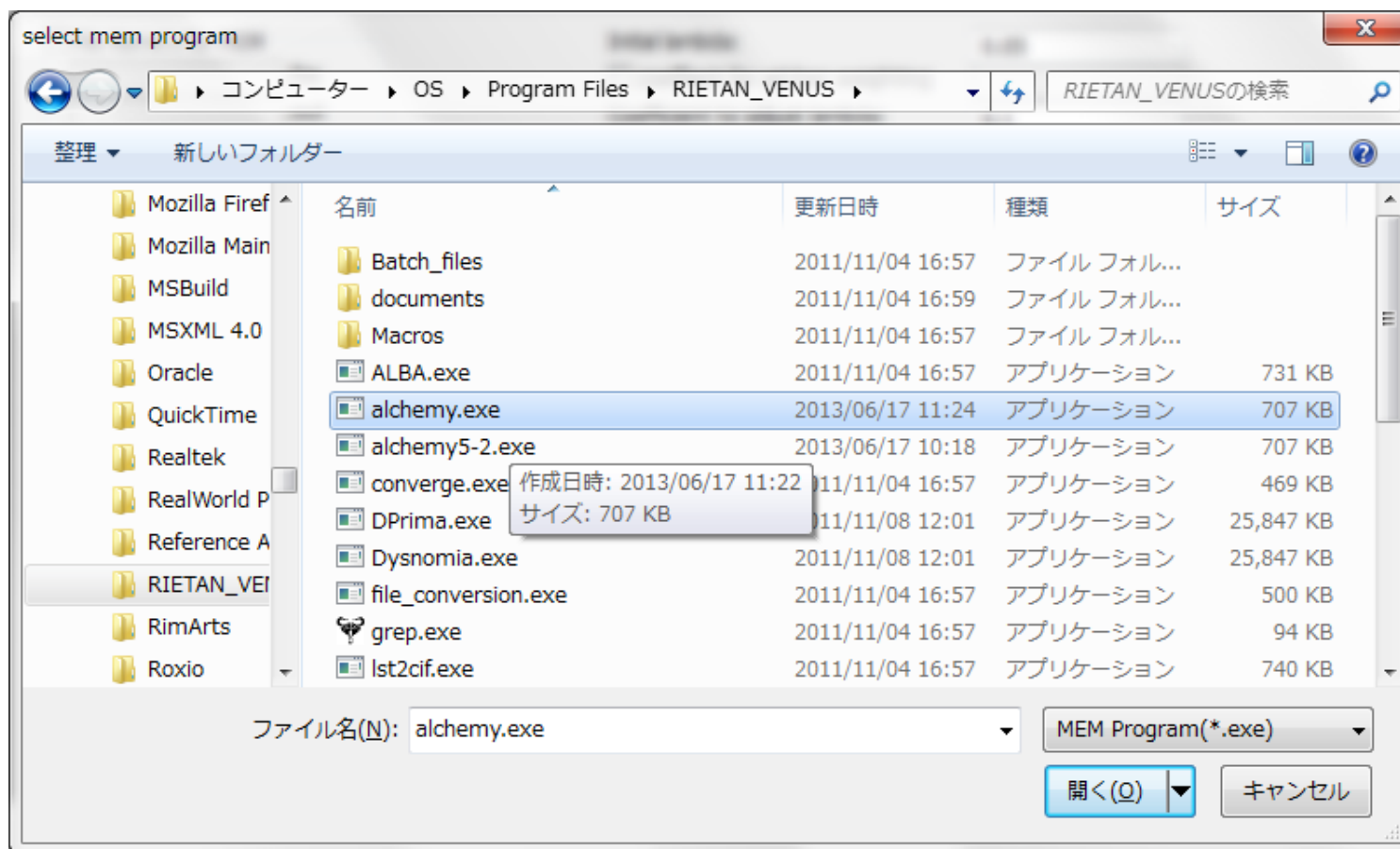
いつでも使いやすいように、PreparPrfD.exe のショートカットをデスクトップに作成しておくことをお勧めします。

設定

使用するMEMプログラムを指定します。
この操作は、本プログラムを初めて実行する時だけ必要です。



ツールバーの [setting mem program]-[mem program]を選択します。

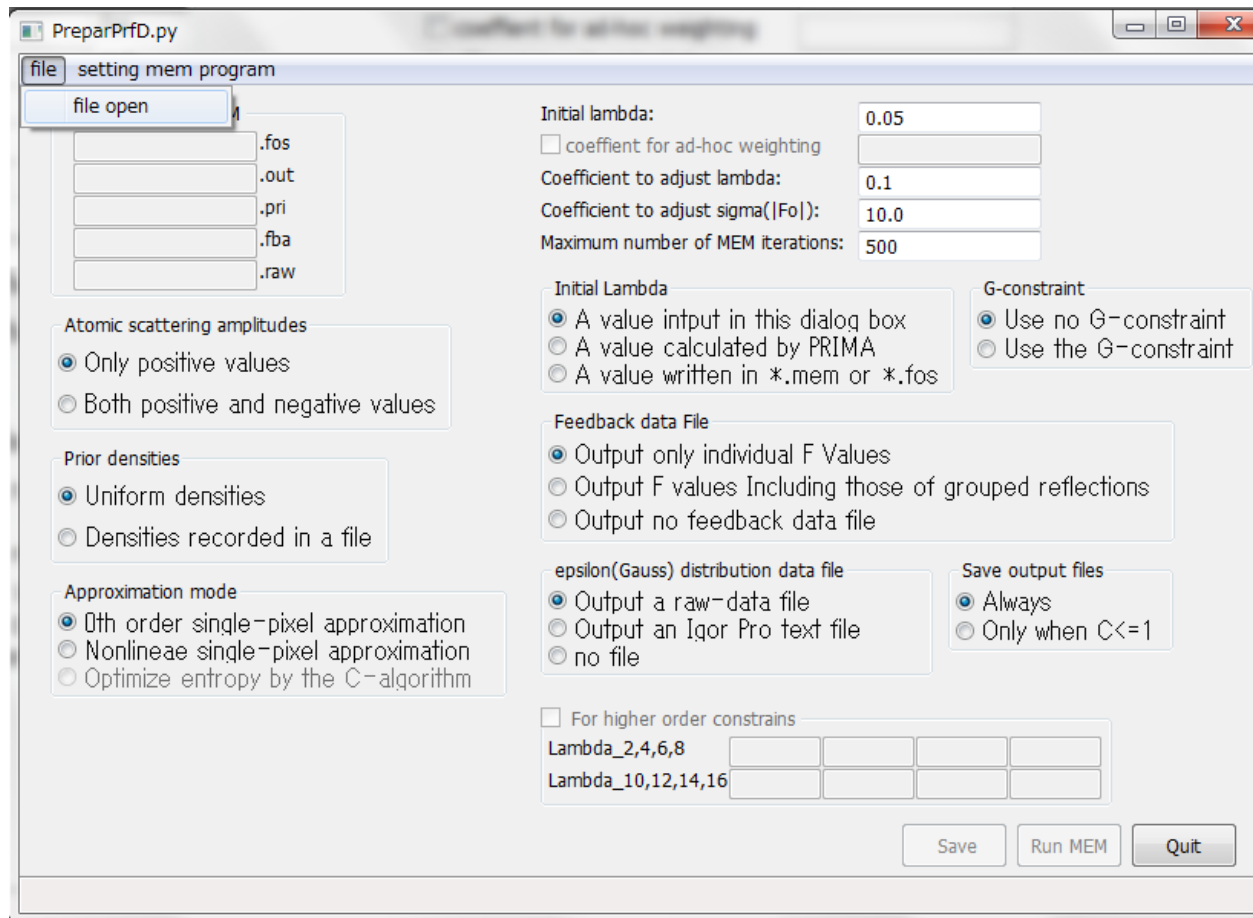


ダイアログボックスが立ち上がるので、alchemy.exeを選択してください。
選択した後、開くをクリックします。mem.iniに使用するプログラムと保存されている
フォルダーが記述されます

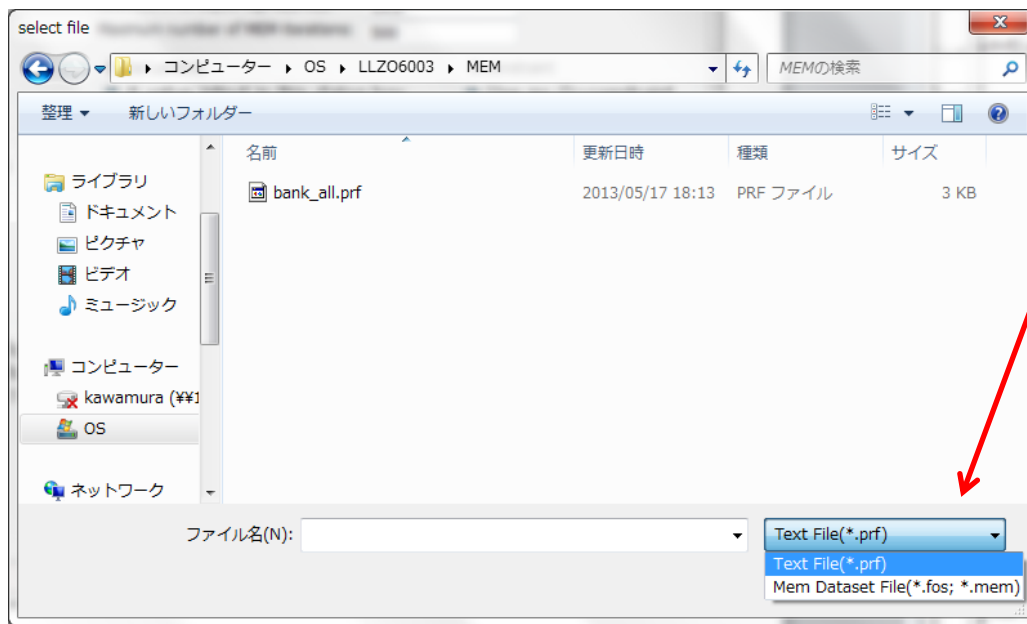
prima.exeを選択した場合、GUIが変化します。

mem.iniファイルが存在しない場合、PreparPrfD.exeを実行した時には、
このダイアログが先に立ち上がります。

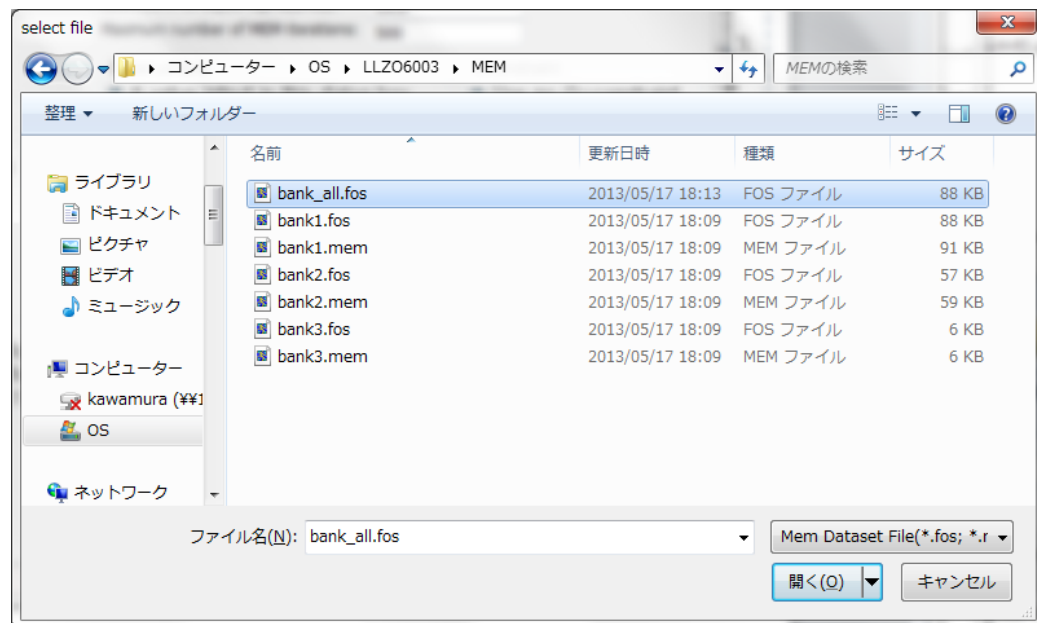
MEM解析の実行



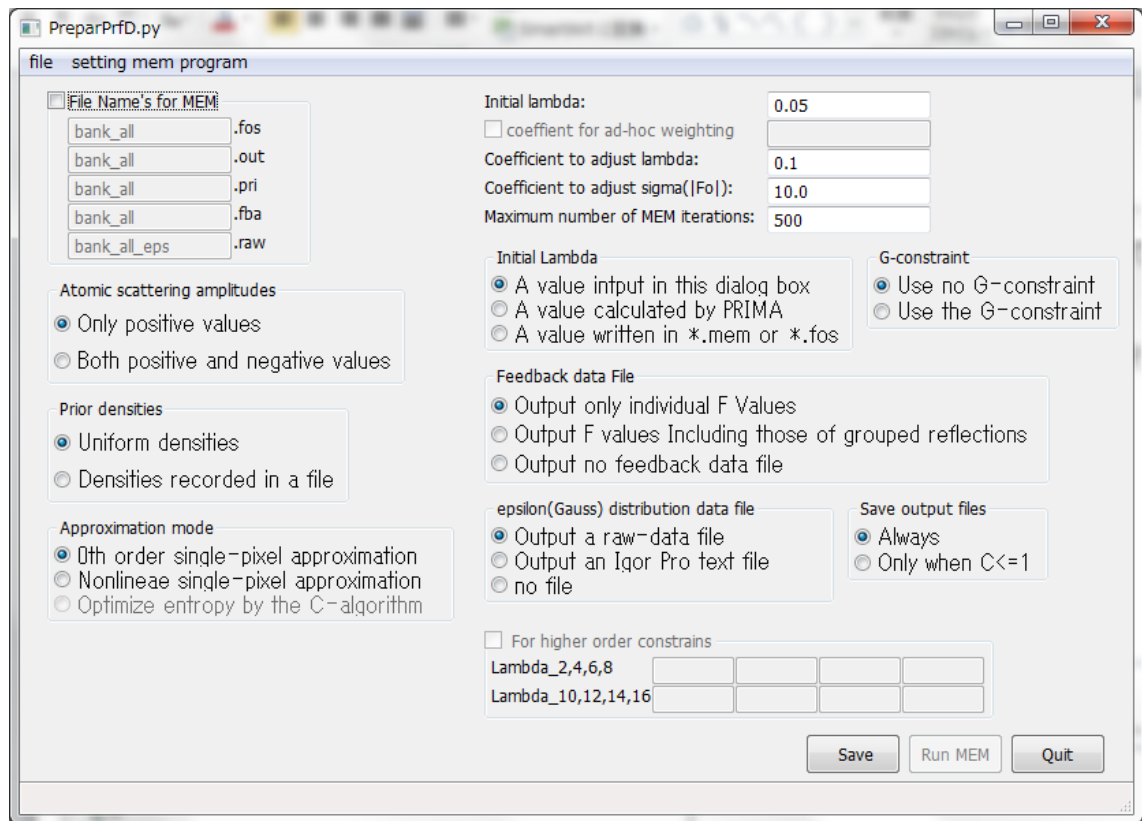
ツールバーから[file]-[file open]を選択



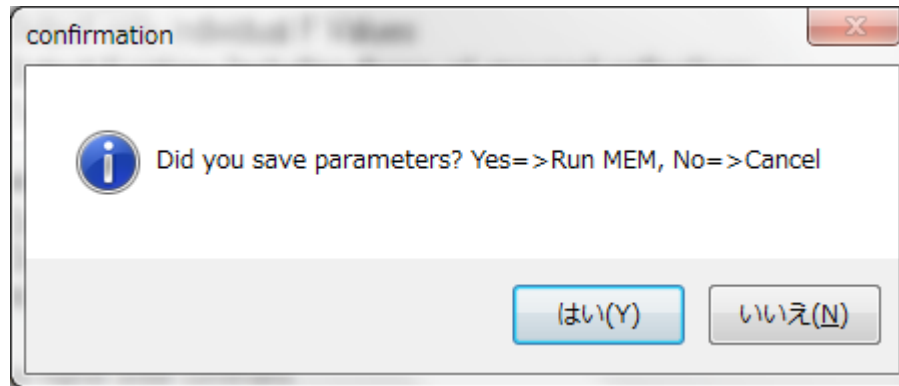
結晶構造解析の後、初めて mem解析を行う場合、mem入力ファイル (*.prf)が存在しないので、タブをクリックして、MEM Dataset Fileを選択する。
.prfがある場合は、.prfを選択する。



mem解析に使用するデータ
.fos(もしくは.mem)を選択する。



出力ファイル名は*.fosの*の部分自動ではいる。個別に変更したい場合は、File Name's for MEM にチェックを入れると、テキストボックスが編集可能になる。Ad-hoc weightind とhiger order constrains を変更したいときも、チェックすることで可能になる。詳細はDysnomia のマニュアルを参照されたいし。Save ボタンを押すことで、MEM 入力ファイルが作成or上書き保存される。*.fos を読み込んだ時は、Save ボタンを押さないとRun MEM ボタンがアクティブにならない。



Run MEM ボタンをクリックすると、パラメータをSaveしかたどうかを聞かれるので、Saveした条件によければ、はい(Y)をクリックすると、MEMプログラムが実行される。いいえ(N)をクリックするとメイン画面に戻るのでパラメータを変更した後で、Saveをして再度実行する。

```
C:\Python27\python.exe
DELTA = -1.0364469E-002  RF = 0.054658  wRF = 0.067185
CYCLE 189: lambda=2.962383E+000
CONSTR = 1.0349316E+000  CONF = 8.3932953E+002  CONG = 0.0000000E+000
DELTA = -1.0301184E-002  RF = 0.054446  wRF = 0.066853
CYCLE 190: lambda=2.962383E+000
CONSTR = 1.0246952E+000  CONF = 8.3102782E+002  CONG = 0.0000000E+000
DELTA = -1.0236383E-002  RF = 0.054234  wRF = 0.066521
CYCLE 191: lambda=2.962383E+000
CONSTR = 1.0145251E+000  CONF = 8.2277986E+002  CONG = 0.0000000E+000
DELTA = -1.0170112E-002  RF = 0.054022  wRF = 0.066190
CYCLE 192: lambda=2.962383E+000
CONSTR = 1.0044227E+000  CONF = 8.1458680E+002  CONG = 0.0000000E+000
DELTA = -1.0102416E-002  RF = 0.053809  wRF = 0.065860
CYCLE 193: lambda=2.962383E+000
CONSTR = 9.9438934E-001  CONF = 8.0644976E+002  CONG = 0.0000000E+000
DELTA = -1.0033343E-002  RF = 0.053598  wRF = 0.065530
dx = 1.0000000E+001  dS = 7.9154903E+001  6.2503963E-302  Q = -8.0221828
E+000  CONSTRw = 9.9438934E-001  mu = 8.0030661E+000  5.3665076E+000
```

正常にMEMが実行されたとき、背後にあるコマンドプロンプトに上記のようなログが表示され、ログの流れが止まっていればMEMは終了している。

トラブルシューティング

もし、なんらかのエラーが出る場合、本プログラムをコピーはシステムフォルダー以外の場所にフォルダーを作成し保存してください。

それでも、ダメなら、本プログラムを起動するときに、プログラムを選択して、右クリックの管理者権限で実行を選択してください。

それでも、動かないときは、症状やエラーメッセージや画面のスナップショットをとってお知らせください。