

プログラムを動かすために必要なこと

<http://conf.msl.titech.ac.jp/D2MatE/tutorial2022.html>

を参考に python、モジュール、本チュートリアル資料ZIPファイルをインストール

推奨動作環境: Anaconda / python3x

Windows & Anaconda の場合、**python 3.6 仮想環境**

必要なモジュール:

Anaconda標準環境: **numpy, scipy, pandas, openpyxl, matplotlib**

追加必須: **chardet**

本チュートリアル資料ZIPファイル:

展開したルートディレクトリを **[tkProg]** と書きます

環境変数:

- ・ Launcher.pyから起動する場合は、環境変数の設定は不要と思います
(必要だった場合、連絡をください)
- ・ 直接 bayes_gp_plain/gui.py を実行する場合は、以下の環境変数の設定が必要

PYTHONPATH=[tkProg]¥tklib¥python

[tkProg] は、本チュートリアル資料ZIPファイルを展開したルートディレクトリに置き換え
これにより、神谷作成GUIプログラムで使っている python ライブラリ tklibを
[tkProg]¥tklib¥python¥tklib から読み込めるようになります。

Anacondaで設定されている環境変数

自作のバッチファイル、シェルスクリプトから `anaconda` を実行する場合

以下の環境変数を参考にして設定してください。

ここでは、Anacondaを `C:\Anaconda3` にインストールしています。

```
set CONDA_DEFAULT_ENV=base
set CONDA_EXE=C:\Anaconda3\Scripts\conda.exe
set CONDA_PREFIX=C:\Anaconda3
set CONDA_PROMPT_MODIFIER=(base)
set CONDA_PYTHON_EXE=C:\Anaconda3\python.exe
set CONDA_SHLVL=1
set Path=C:\Anaconda3;%PATH%
PROMPT=(base) $P$G
```

Python 3.6仮想環境下で実行するバッチファイルの注意

`conda`がバッチファイルのため、直接呼び出すと、`conda`の実行終了時にバッチファイルが終了します。

Linuxの場合も、`conda`で設定された環境変数が、親のシェルスクリプトに反映されません。

そのため、`call`あるいは`source`コマンドで呼び出す必要があります。

仮想環境名を `py36` としています

- Windowsのバッチファイル

 - `call conda activate py36`

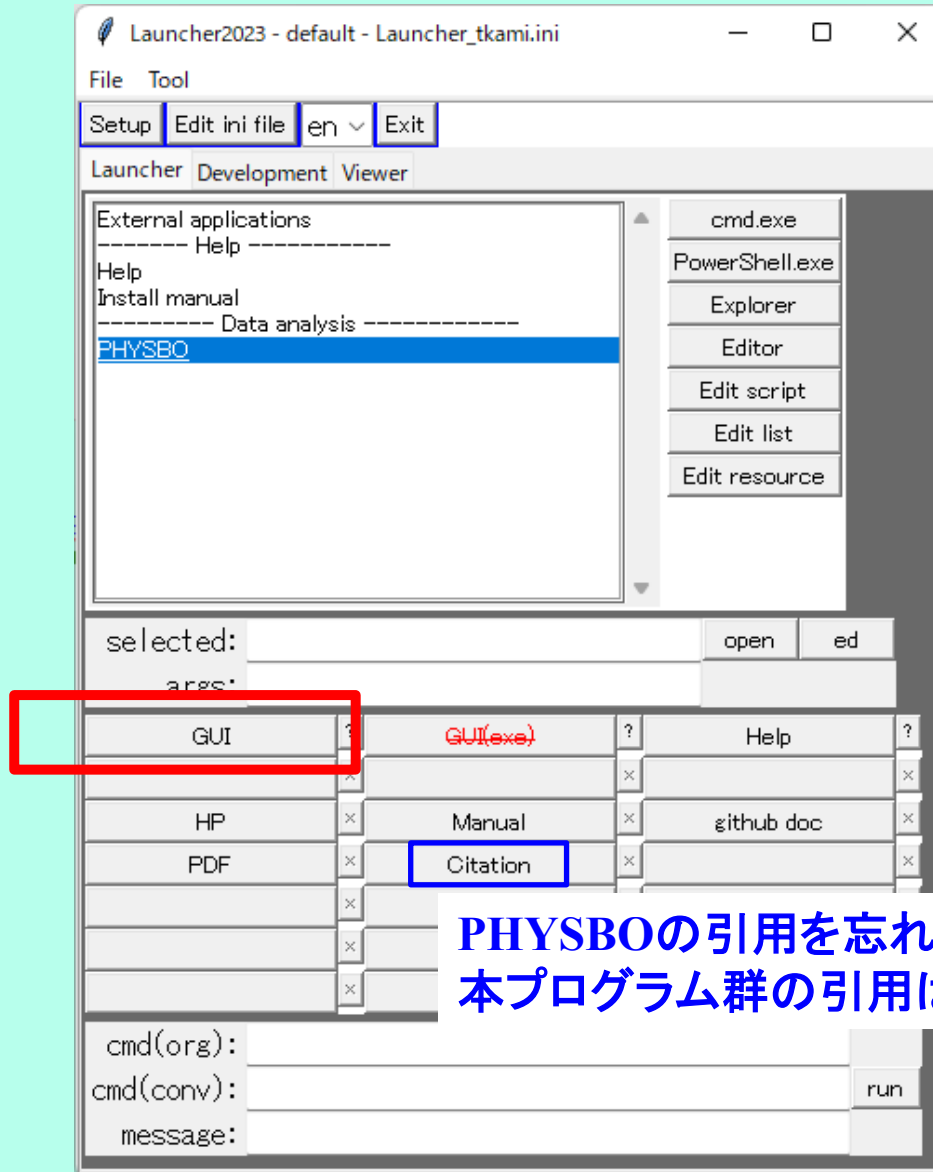
- Linuxのシェルスクリプト

 - `source conda activate py36`

ラウンチャ

[tkProg]¥[tkprog_X]¥Launcher

[tkprog_X] は配布バージョンごとに異なる。本チュートリアルではtkprog_tutorial
Launcher.py



ラウンチャ: コマンドプロンプトを残さないために

Launcher.bat

```
set CONDA_DEFAULT_ENV=base
set CONDA_EXE=C:\Anaconda3\Scripts\conda.exe
set CONDA_PREFIX=C:\Anaconda3
set CONDA_PROMPT_MODIFIER=(base)
set CONDA_PYTHON_EXE=C:\Anaconda3\python.exe
set CONDA_SHLVL=1
set Path=C:\Anaconda3;%PATH%
PROMPT=(base) $PSG
```

```
:cmd.exe /C python Launcher.py
cmd.exe /K python Launcher.py
```

/Cオプションは、python..以下の実行を終了したときにcmd.exeを閉じる
/Kオプションは、python..以下の実行を終了してmcmd.exeを閉じない

Launcher.pyを閉じたときにコマンドプロンプトを閉じるためには、最後の2行を以下のように修正する

```
cmd.exe /C python Launcher.py
:cmd.exe /K python Launcher.py
```

Launcherメニューの組み換え

起動時: 日常使うものに限定

2022年度チュートリアル版

Launcher2023 - ./config/Launcher/tutorial.list - Launcher...

設定 | 設定ファイル編集 | ja | 終了

ランチャ 開発者用 ビュー

外部プログラム

- Help
- ヘルプ
- インストールマニュアル等
- Data analysis
- ベイズ最適化(PHYSBO)
- フィッティング
- スペクトル解析
- Links
- リンク

cmd.exe
PowerShell.exe
Explorer
エディタ
スクリプト編集
スクリプト編集
リソース編集

ファイル: 選択 app

引数:

| | | | |
|----------------|----------------|-------------------|---|
| 初期状態Launcher | 全項目Launcher | VASP関連Launcher | ? |
| 電気物性関連Launcher | 電子分光関連Launcher | 光学物性関連Launcher | ? |
| | | チュートリアル/Launcher | ? |
| Launcher.exe | Launcher.pl | TkPlotLauncher.pl | ? |
| マニュアル | Update Inf | | ? |
| 再読み込み | 再起動 | 再起動(/K) | ? |

cmd(org): \$(start) "\$(python_path)" "\$(script_full
cmd(conv): start C:¥Anaconda3¥python.exe D:¥tkProg¥ 実行
message:

Launcher2023 - tutorial2022 - Launcher_tkami.ini

設定 | 設定ファイル編集 | ja | 終了

ランチャ 開発者用 ビュー

外部プログラム

- Help
- ヘルプ
- インストールマニュアル等
- Data analysis
- ベイズ最適化(PHYSBO)
- フィッティング
- スペクトル解析
- Links
- リンク

cmd.exe
PowerShell.exe
Explorer
エディタ
スクリプト編集
スクリプト編集
リソース編集

ファイル: 選択 app

引数:

| | | | |
|--------------------------|--------------------------|-------------------|---|
| newton-raphson1d | newton-raphson1d#2 | | × |
| minimize step 1 | minimize step 2 | minimize step 3 | ? |
| minimize by given func 4 | minimize by given func 5 | | × |
| peakfit step 1 | peakfit step 2 | peakfit step 3 | ? |
| optimize.py | peakfit (scipy.minimize) | peakfit (simplex) | ? |
| marquart2d (console) | | | × |
| newton-raphson1d | newton-raphson2d | テキスト | ? |

cmd(org): \$(start) "\$(file_path)"
cmd(conv): start D:¥tkProg¥tkProg¥tkprog_tutorial¥ 実行
message: