

# Model2SAS 使用说明

## 一、概述

本软件是一种小角散射理论数据计算软件。软件可输入通过三维建模软件或者 `python` 语言实现的数学描述的一个或多个模型文件计算这些模型组合得到的形状的理论小角散射曲线,方便研究人员对实验得到的小角散射数据进行快速验证。软件实现功能主要分为两个步骤:(1)将输入的所有模型文件计算为模型占据的空间点阵;(2)计算空间点阵模型的小角散射曲线。现对本软件的使用进行说明。

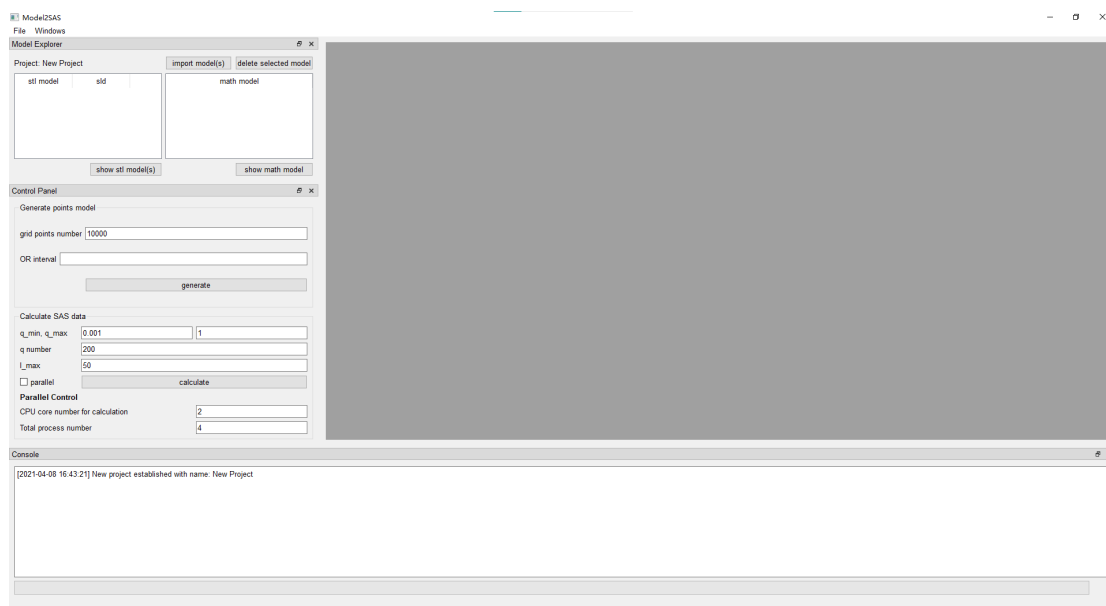
## 二、运行环境

运行环境: Python 3.8.5

第三方库: `numpy` 1.19.2, `scipy` 1.5.2, `matplotlib` 3.3.2, `numpy-stl` 2.13.0, `tqdm` 4.50.2, `pyqt5` 5.15.2

非以上版本号可能也可运行,但是未经验证。只要可以安装 `python` 环境与以上第三方库应该均可通过源码运行,不受处理器架构与操作系统限制。

## 三、软件图形界面

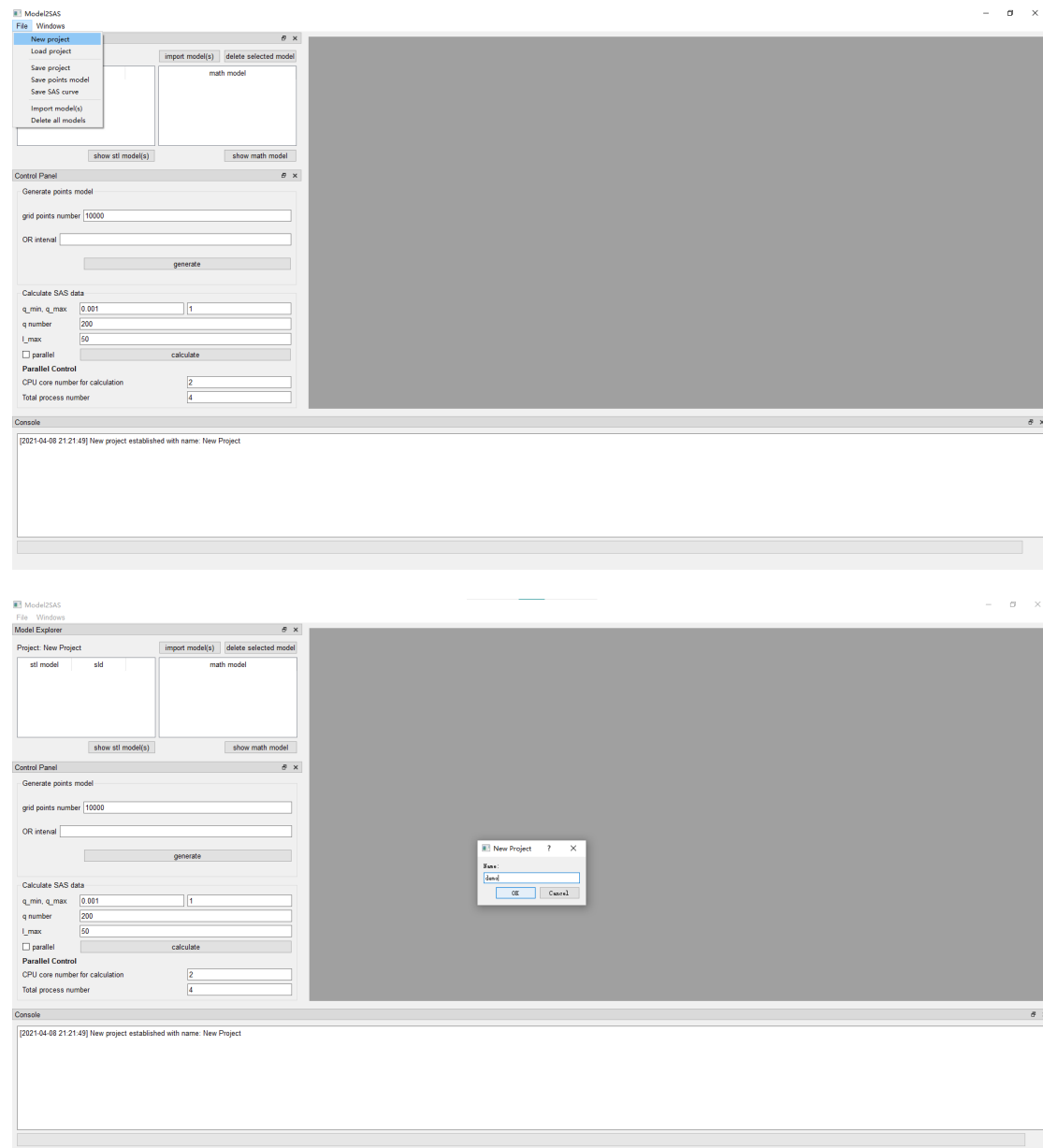


软件界面分为以下几个部分：（1）最上方的菜单栏；（2）左侧上方的模型浏览面板；（3）左侧下方的控制面板；（4）中间的图像显示区域；（5）下方的控制台。

## 四、软件操作

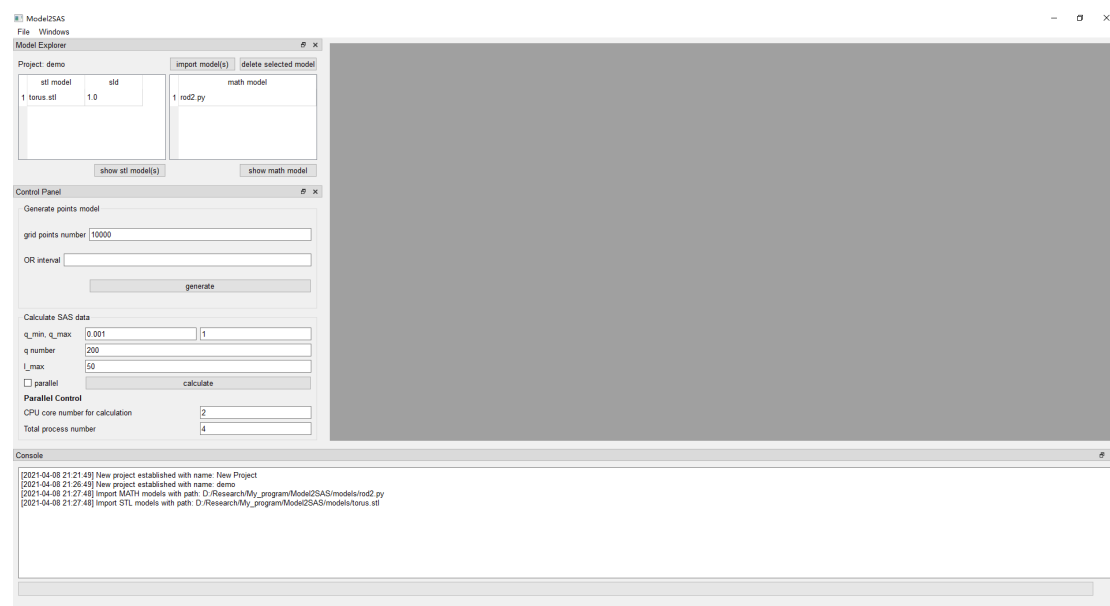
### 1. 建立 project

在一次计算中，所有的模型文件、后续的计算结果统一在一个 `project` 下。软件打开后会默认生成一个名为 `New Project` 的 `project`，也可按照下述操作新建 `project`。

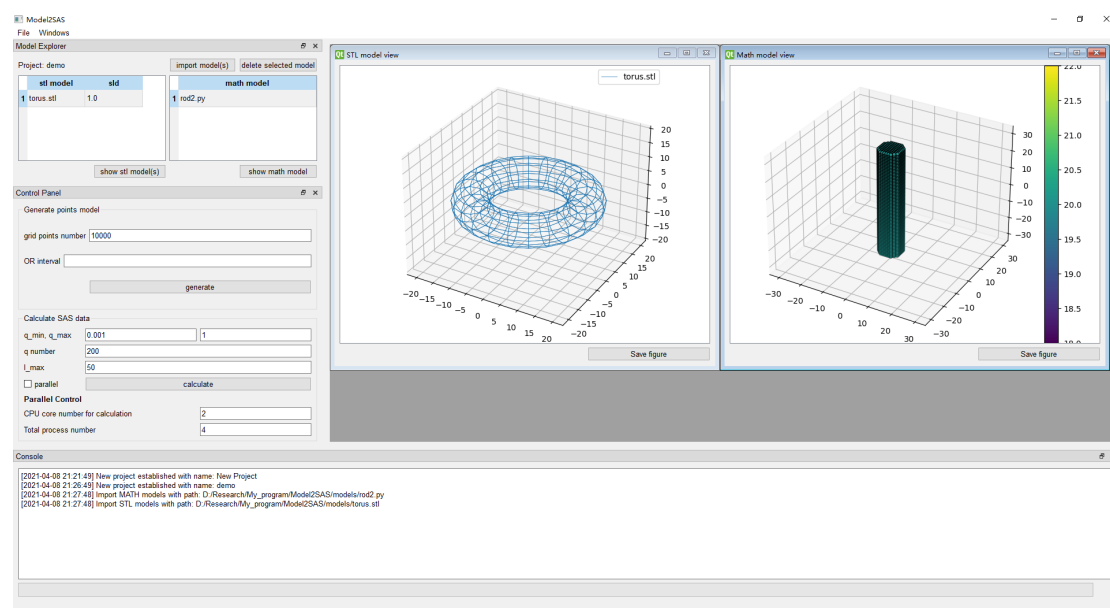


菜单栏点击 File-New project，会弹出对话框要求输入 project 名称，输入后点击 OK 即可建立相应名称的 project。

## 2. 导入模型文件与模型文件相关操作

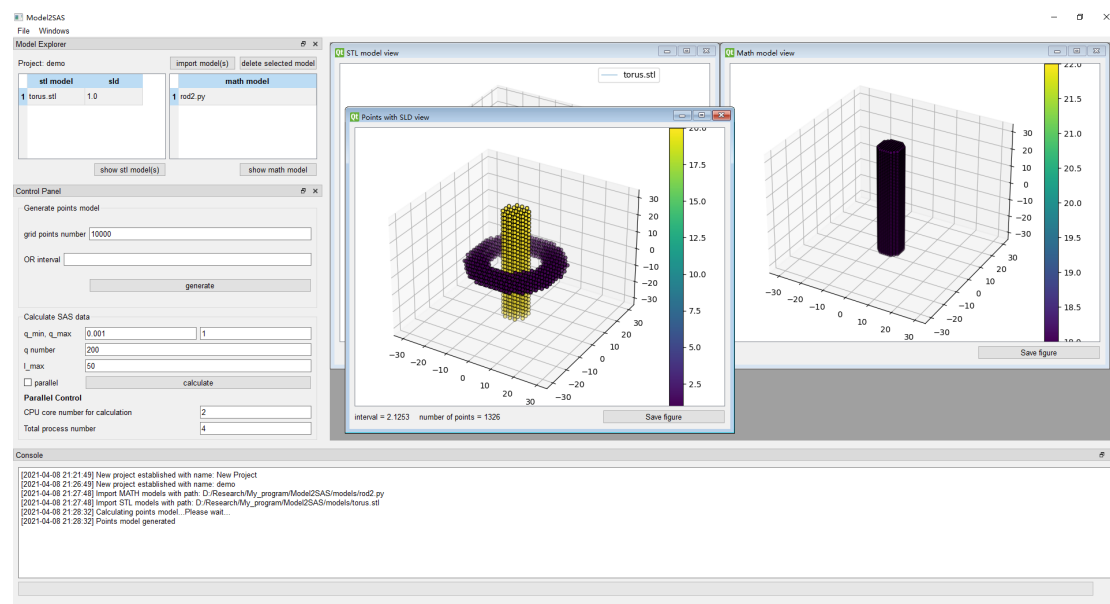


点击模型浏览面板的“import model(s)”按钮或菜单栏 File- import model(s) 按钮，会弹出文件选择对话框，在里面选择所需的模型文件，可一次性选择多个文件。支持的文件类型有 STL 文件与 py 文件。导入成功后会在模型浏览面板的两个表格中显示，如上图所示。左侧表格是 STL 模型的列表，并且可以直接在列表中更改 STL 模型的散射长度密度（SLD）。右侧是数学模型（即 py 文件）的列表。每个列表均支持浏览模型的三维图像，选中相应模型后点击列表下方的“show stl model(s)”或“show math model”即可在图像显示区域展示三维图像，如下图所示。



如需删除模型，可选中相应的模型，然后点击模型列表上方的“delete selected model”按钮即可。如需删除所有模型，可点击菜单栏 File-Delete all models 进行清空。

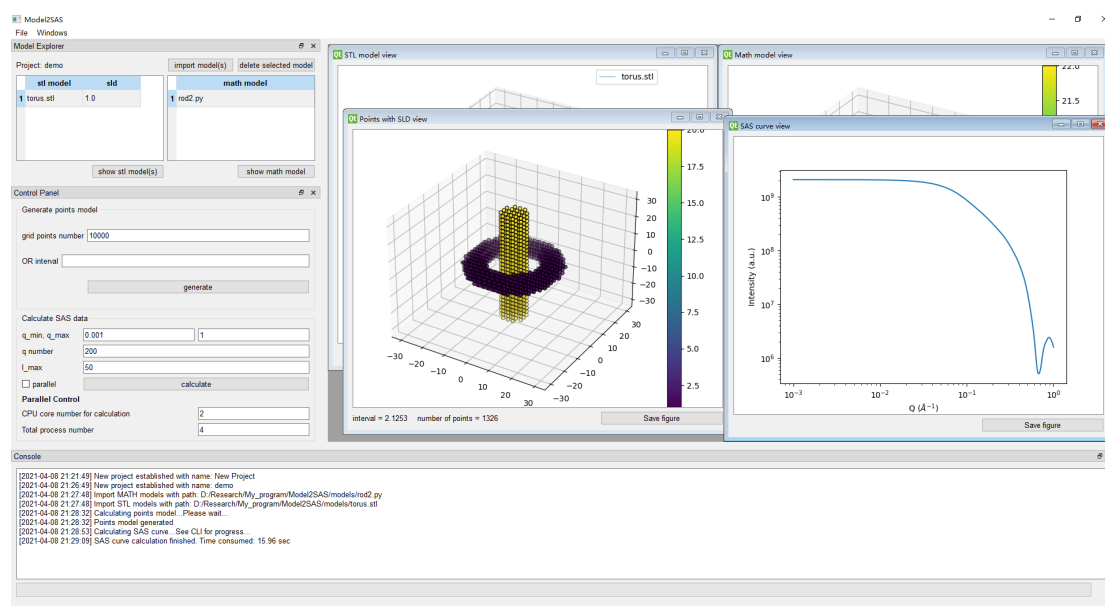
### 3. 生成空间点阵



模型导入与设置完毕后，可开始生成空间点阵。在控制面板上方是控制空间点阵生成的参数，主要有全空间点的数目与点阵间隔，两个参数设置一个即可。全空间点数越大，或间隔越小，最后生成的空间点阵点的数量越多，模型越准确，

但计算消耗的时间与资源也会越大。设置完毕后点击“generate”按钮即可，计算完毕后会自动在图像展示区域显示计算得到的空间点阵。如果对结果不满意，可重新设置参数后再次计算，软件会使用最后一次计算的结果。

## 4. 计算小角散射曲线

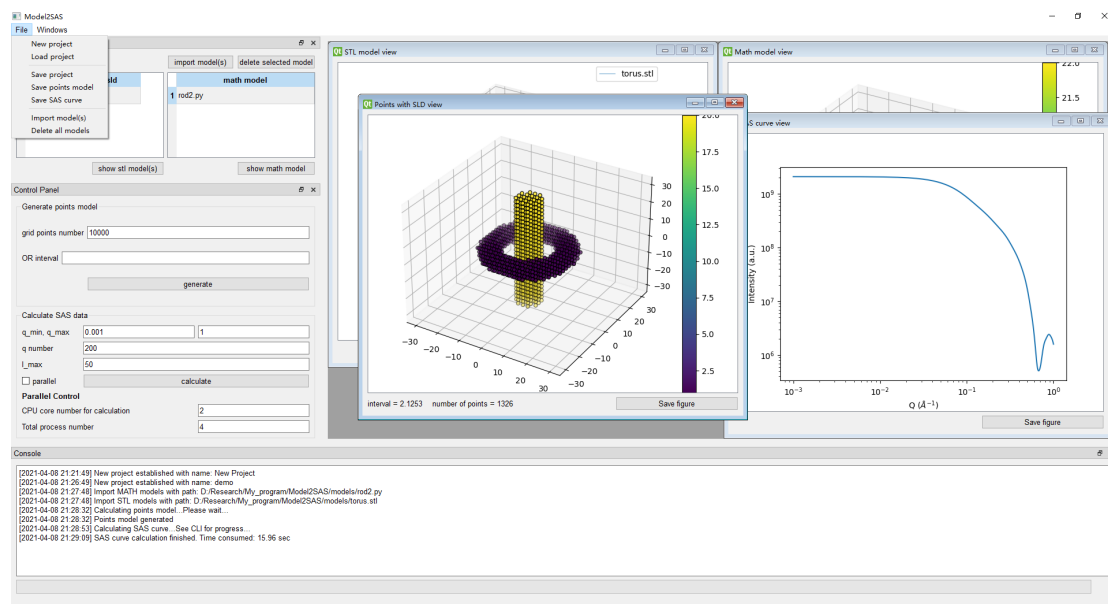


生成点阵模型后，可开始计算该模型的小角散射曲线。模型计算的参数在控制面板的下半部分区域。各参数意义如下：“q\_min”与“q\_max”控制生成散射曲线的范围。“q number”控制曲线中数据点的数目，点数越多曲线越平滑，但是计算消耗的时间与资源也会越大。“l\_max”控制计算中所使用球谐函数展开的展开项数目，该项越大计算结果越准确，但是计算消耗的时间与资源也会越大。

“parallel”复选框勾选后会使用并行计算，反之则使用单进程计算。并行计算可在多核处理器上加快计算进程。下方的 Parallel control 控制并行计算的相关参数。

“CPU core number for calculation”控制并行计算时使用的 CPU 核数。“Total process number”控制将计算任务进行切分的总份数。一般来说“Total process number”应大于等于“CPU core number for calculation”。各参数设置完成后点击“calculate”按钮即可开始小角散射曲线的计算。计算完成后在图像展示区域会自动展示计算得到的小角散射曲线。

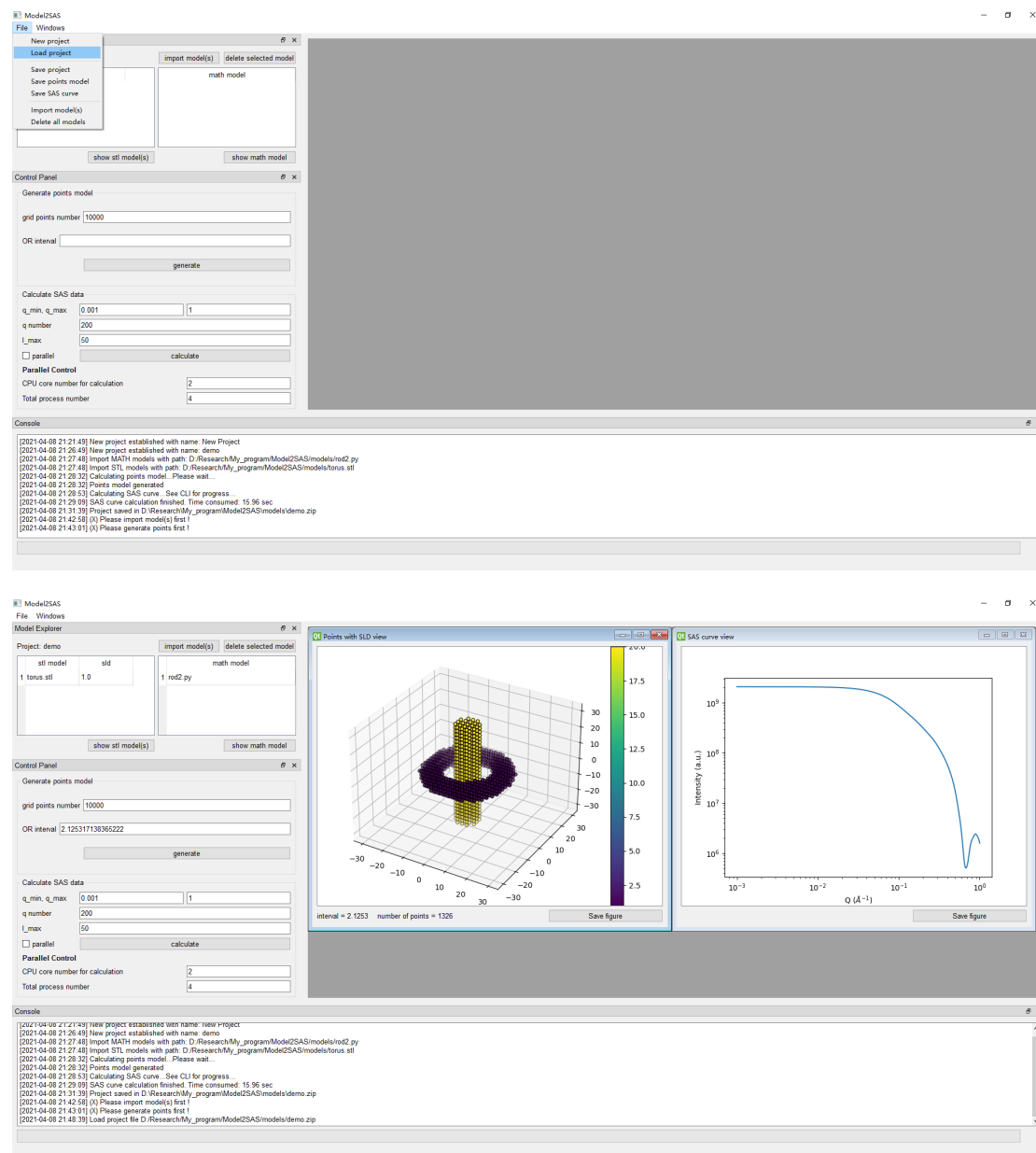
## 5. 数据与图片保存



菜单栏 File 栏下有“save project”、“save points model”、“save SAS curve”三个按钮可以用来保存数据。其中“save project”会将该 project 下的所有模型文件、空间点阵、计算得到的散射曲线以及所使用的参数一起打包为一个 zip 文件，并弹出对话框询问保存位置。save points model”与“save SAS curve”则分别将空间点阵与散射曲线保存为 ASCII 文件。

每个图像显示窗口的右下角均有“Save figure”按钮，点击此按钮可将该页面所显示的图像保存为图片，会弹出文件保存对话框询问文件保存位置。

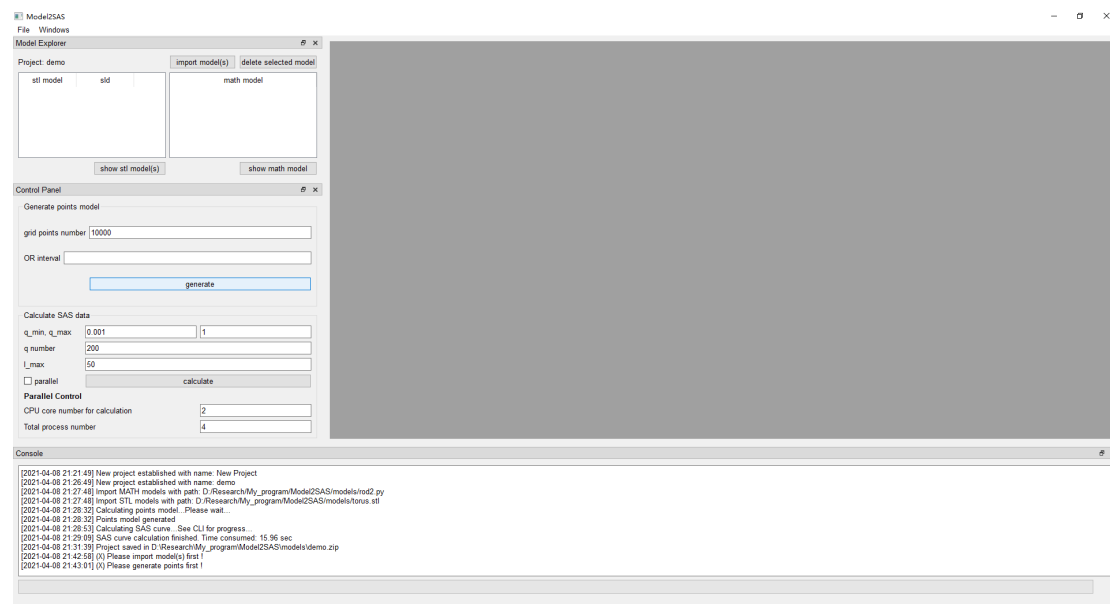
## 6. 加载以前保存的 project



菜单栏 File-Load project 可以加载以前保存的 project。点击按钮会弹出文件选择对话框，选择以前保存的 zip 文件即可加载。

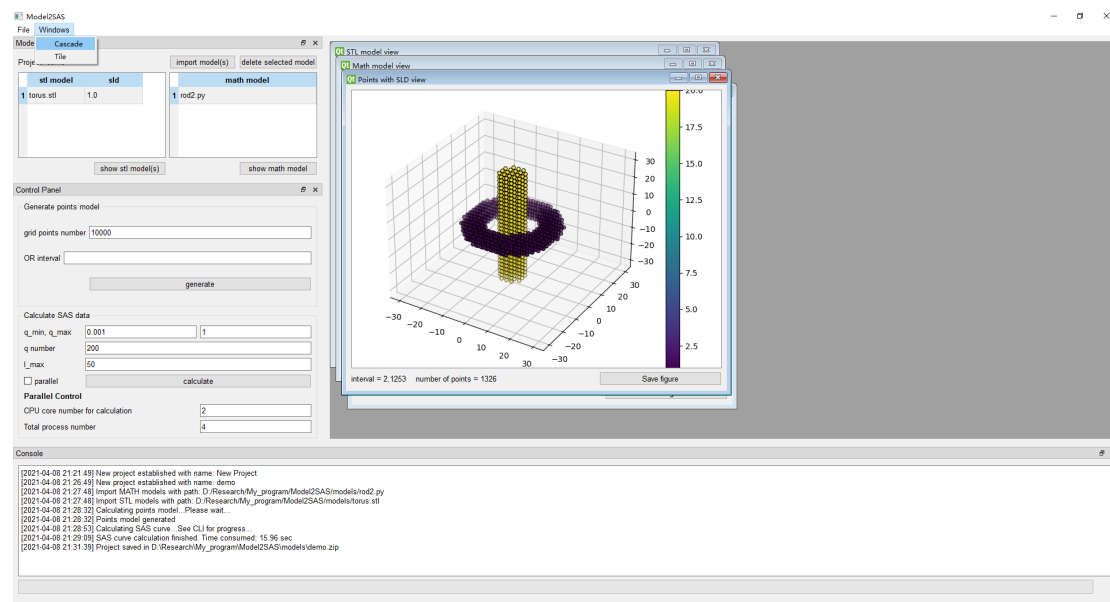


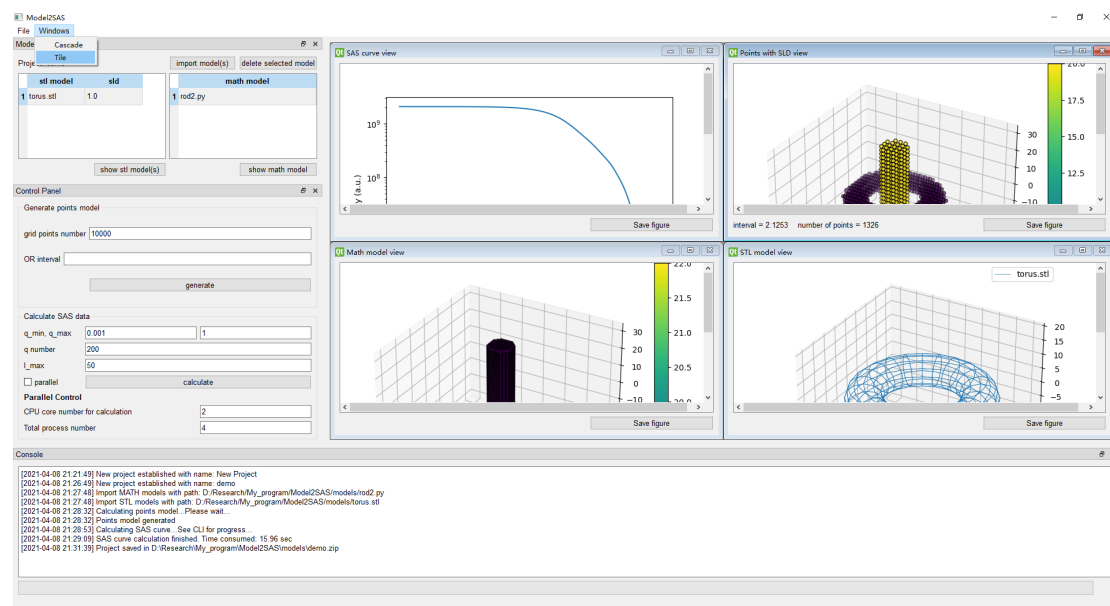
## 7. 控制台信息



每个操作后控制台均会有相应输出，可获得每次操作的信息。如有错误操作控制台会输出以“(X)”开头的错误信息。

## 8. 窗口排布





菜单栏 Windows 栏可进行窗口自动排布。Cascade 按钮可将图像窗口瀑布排布。Tile 按钮可将窗口平铺排布。