

软件说明

主动学习材料优化软件：BgoFace

刘思远<sup>1</sup>，曹斌<sup>1</sup>，张统一<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 广州市材料信息学重点实验室，香港科技大学（广州）。

BgoFace

**BgoFace** 是一个可以便捷使用的主动学习材料优化软件，包括了 **Bgolearn** 库的几乎所有功能。**BgoFace** 支持上传训练样本和生成虚拟样本，利用现有的实验数据来搜索最优的材料组成设计，以最大化或最小化所需的性能指标。**BgoFace** 支持多种效用函数，如期望提升函数、高斯上确界函数和预测熵搜索函数等，用于回归和分类的贝叶斯优化材料设计问题。**BgoFace** 还添加了 **MultiBgolearn** 模块。**MultiBgolearn** 是一个专为多目标贝叶斯全局优化（MOBO）设计的 Python 包，专门针对材料设计。它扩展了专注于单目标优化的 **Bgolearn** 包的功能，可以同时优化多种材料特性。

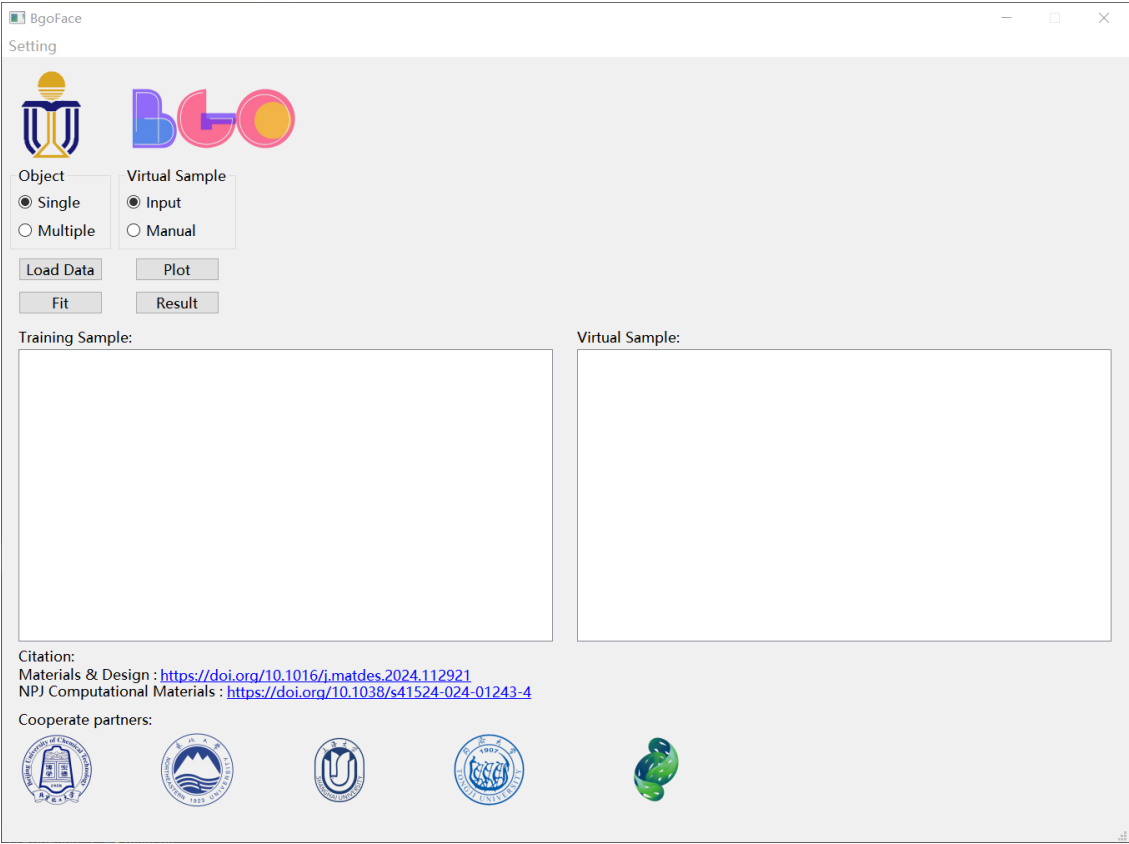


图 1：BgoFace 软件界面

软件可以实现输入样本的处理、特征分析、回归分类任务选择和最优材料成分推荐。本说明书就软件各个功能展开介绍。说明书首先给出单目标优化的步骤，然后说明多目标优化的流程。

数据上传

上传的训练样本文件和虚拟样本文件支持“xls”，“xlsx”和“csv”格式。默认输入的训练样本的最后一列为预测目标，前几列为材料组成成分/工艺参数等特征。虚拟样本也可以通过上传训练样本文件然后手动生成。上传和处理训练样本和虚拟样本的步骤如下：

（数据上传模式 1，直接上传训练样本和虚拟样本）

选择“Input”模式时，点击“Load Data”按钮加载文件上传界面。

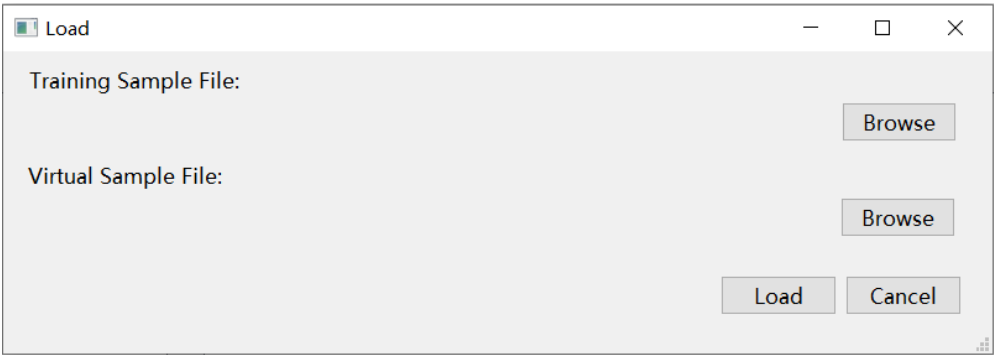


图 2：上传文件

点击“Browse”按钮选择训练样本和虚拟样本进行上传。

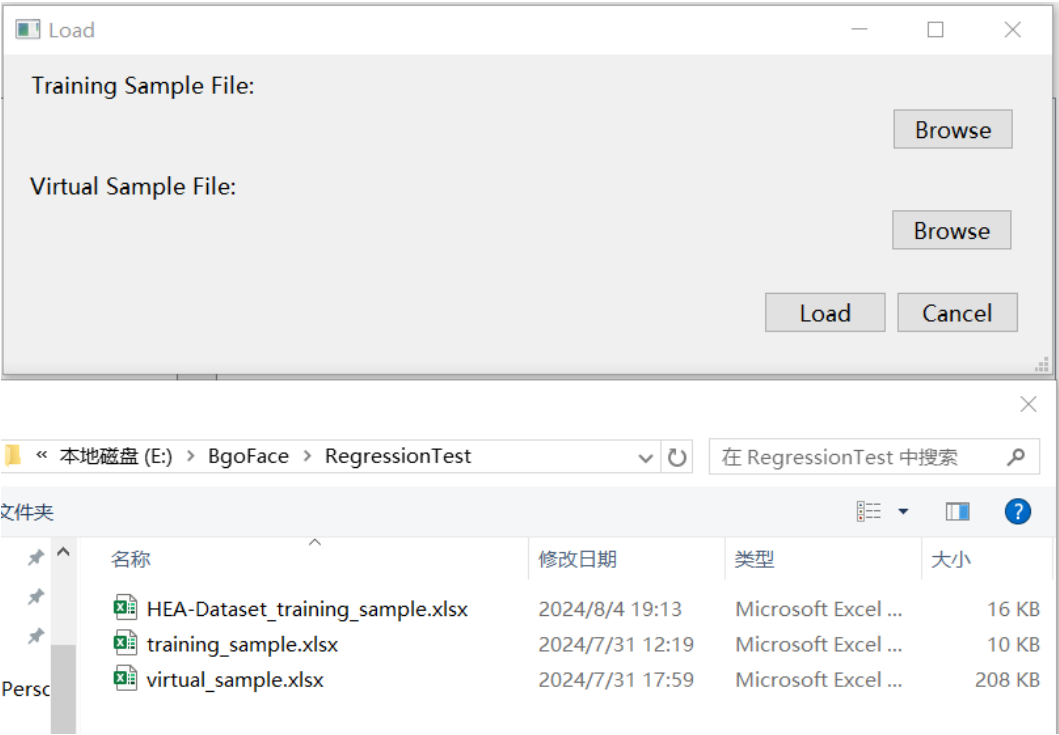


图 3：选择上传文件

选择训练样本和虚拟样本后，文件路径显示在上传窗口中。

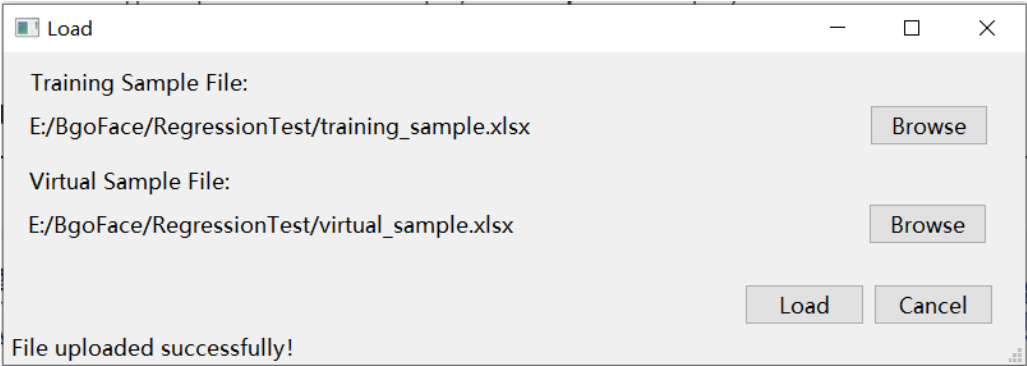


图 4：文件路径显示

点击“Load Data”按钮，文件将被上传并加载到主窗口。

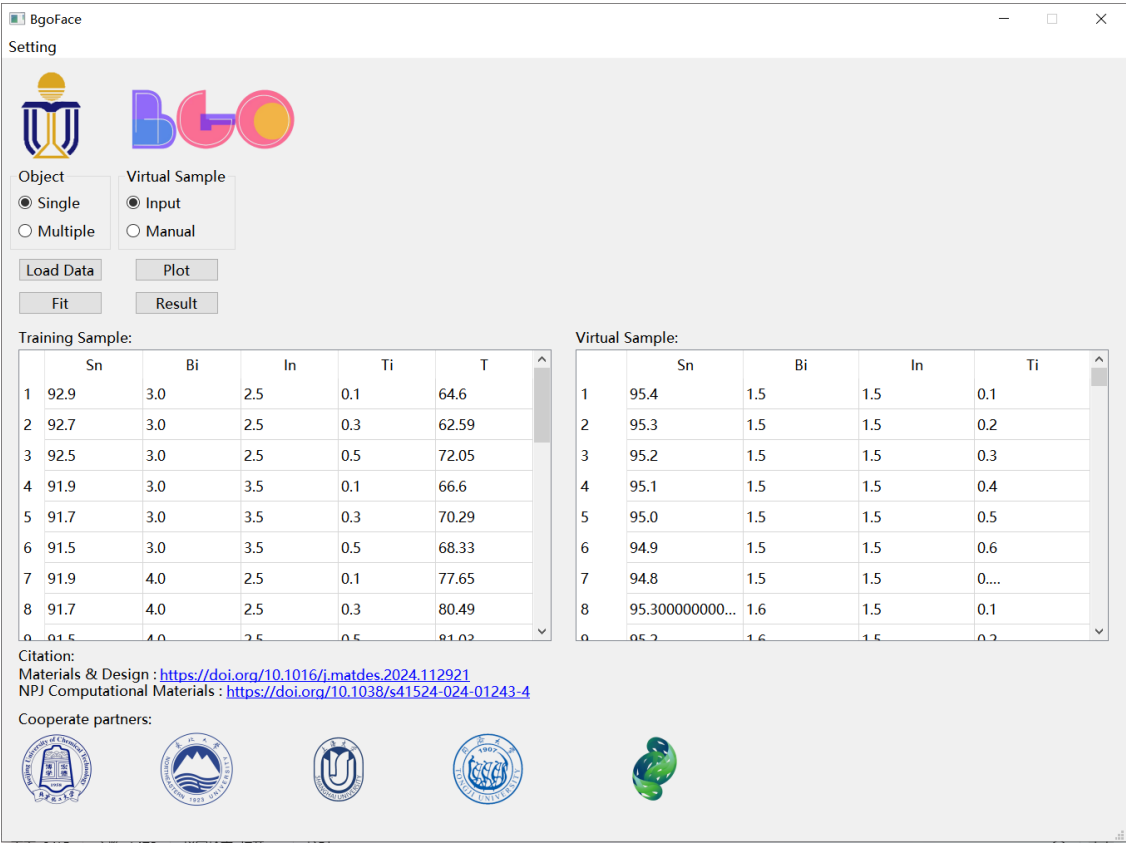


图 5：显示样本文件

（数据上传模式 2，直接上传训练样本，通过 BgoFace 合成虚拟样本）

选择“Manual”模式时，点击“Load Data”按钮加载训练样本文件上传界面。

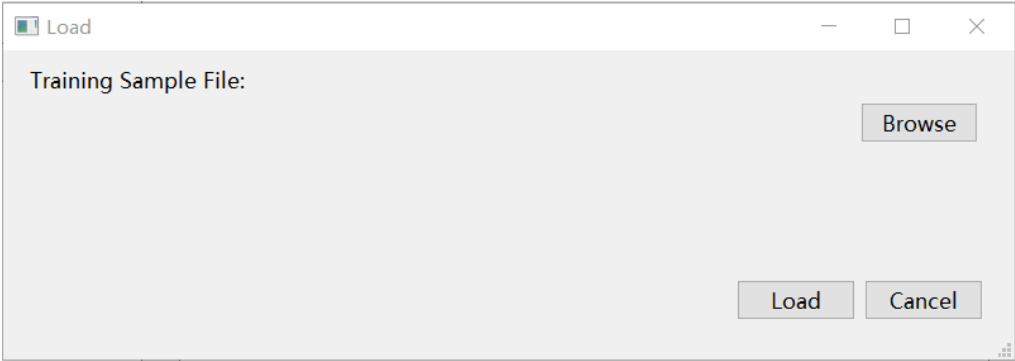


图 6：上传训练样本

和前面的步骤类似，上传并加载训练样本到主窗口。

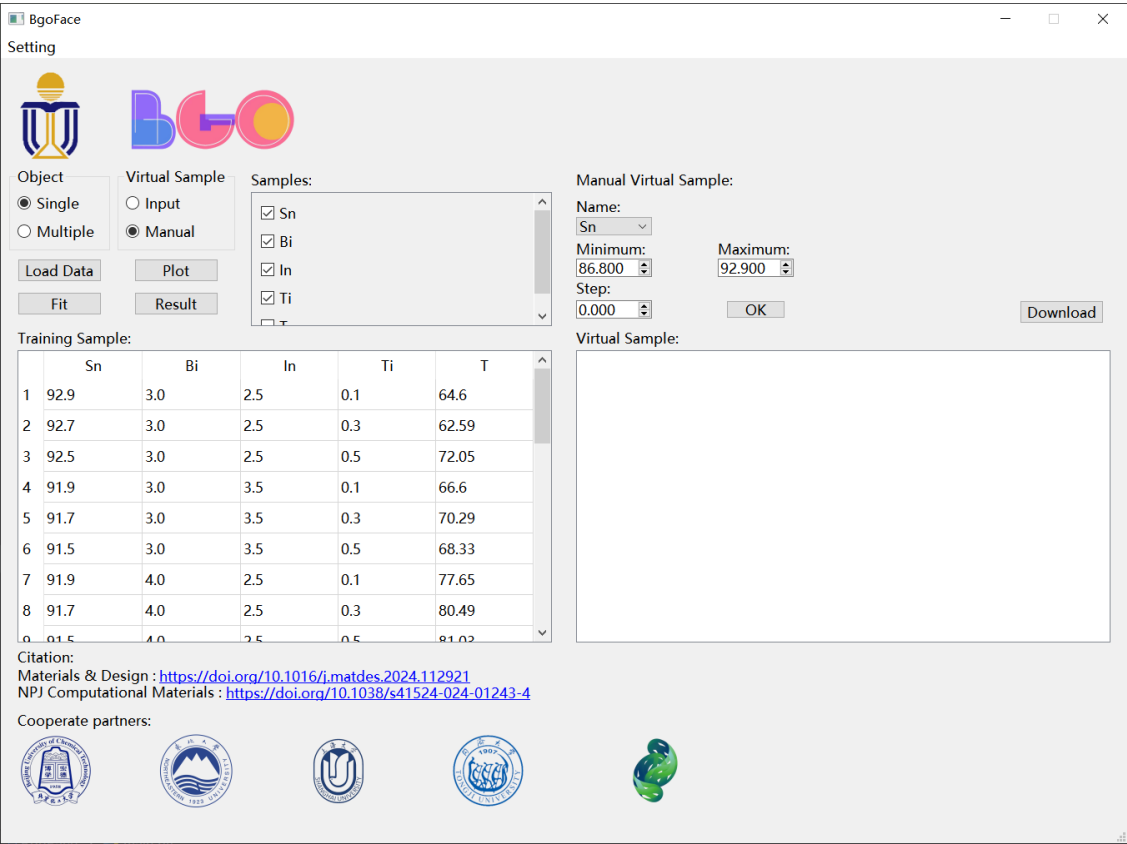


图 7：训练样本显示

在样本区域可以看到被选中的样本，使用这些来生成虚拟样本。

例如，使用“Sn”、“Bi”、“In”和“Ti”来生成虚拟样本。

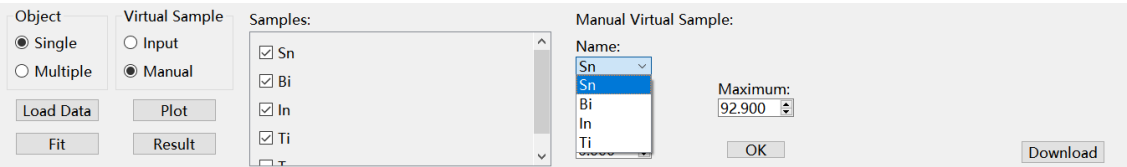


图 8 ： 生成虚拟样本

选择一种样本，通过调节最小值、最大值和步长来生成对应的虚拟样本。

Samples:

☒ Sn☒ Bi☒ In☒ Ti☐ T

Manual Virtual Sample:

Name:

Sn

Minimum:

86.800

Maximum:

92.900

Step:

2.000

OK

Download

图 9 ： 调节值生成虚拟样本

点击“OK”按钮来选择下一个样本。当所有样本都被处理完成时，生成虚拟样本并在主窗口中显示。

Manual Virtual Sample:

Name:

Sn

Minimum:

86.800

Maximum:

92.900

Step:

2.000

OK


Download

Virtual Sample:

	Sn	Bi	In	Ti
1	86.8	1.5	2.5	0.1
2	86.8	1.5	2.5	0....
3	86.8	1.5	2.5	0....
4	86.8	1.5	2.5	0....
5	86.8	1.5	4.5	0.1
6	86.8	1.5	4.5	0....
7	86.8	1.5	4.5	0....
8	86.8	1.5	4.5	0....
9	86.8	1.5	6.5	0.1

图 10 ： 虚拟样本显示

虚拟样本被生成后，可以选择点击“Download”按钮来选择下载的文件夹来下载虚拟样本，则下次执行软件无需重新生成，通过方式 1 上传数据。



香港科技大学 (广州)  
THE HONG KONG UNIVERSITY OF SCIENCE  
AND TECHNOLOGY (GUANGZHOU)

BgoFace

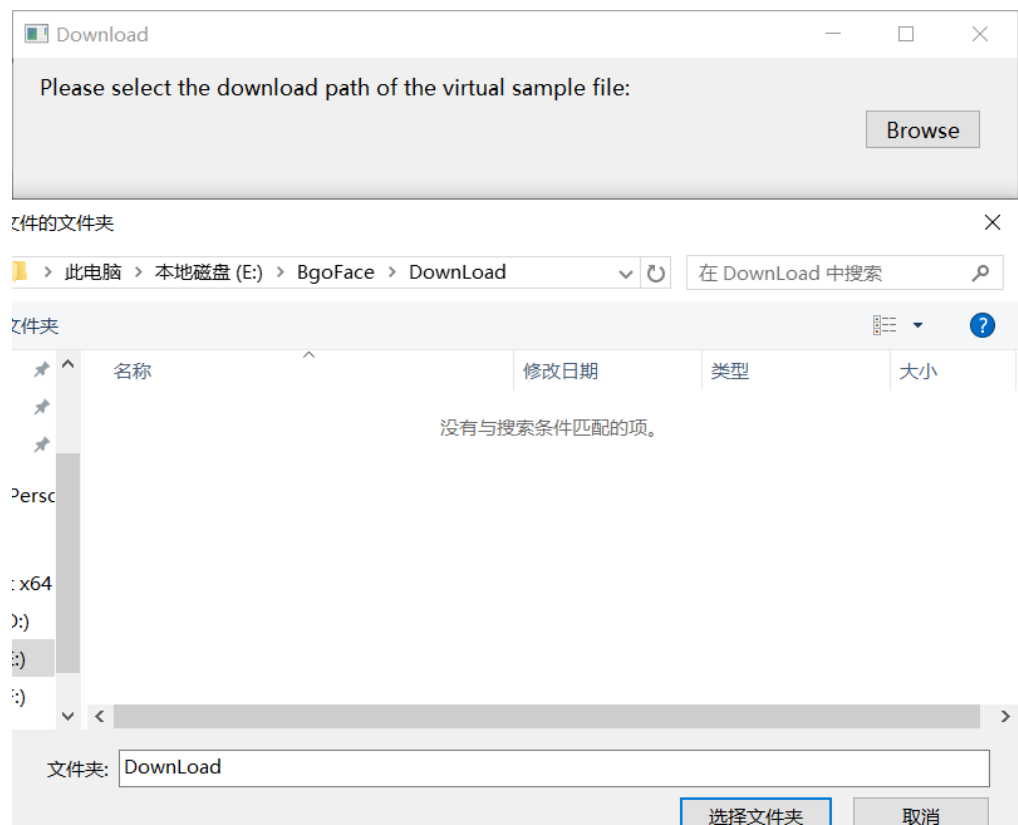


图 11：下载虚拟样本

点击“OK”按钮来下载虚拟样本到指定的文件夹。

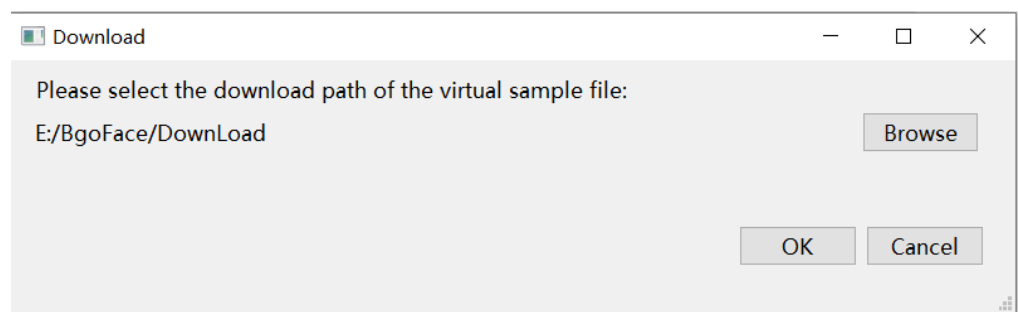


图 12：下载路径

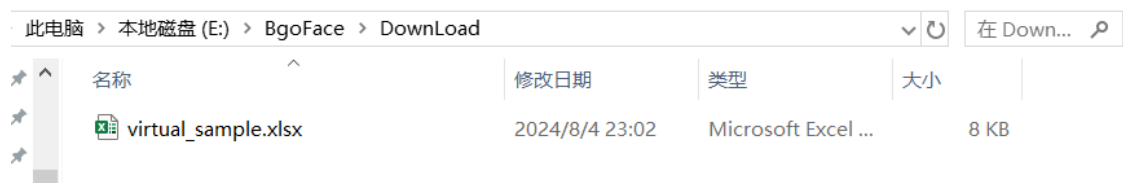


图 13：下载成功

数据统计

上传训练样本后，点击“Plot”按钮来生成特征统计图。

例如，这是“Sn”样本的分布图。

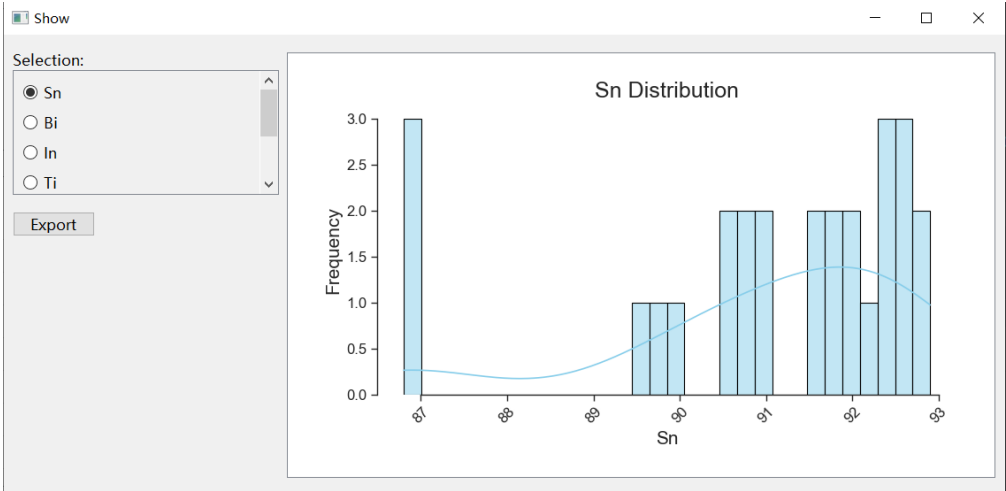


图 14 ： 样本分布图

这是单目标标签的分布图（主要针对分类变量标签统计）。

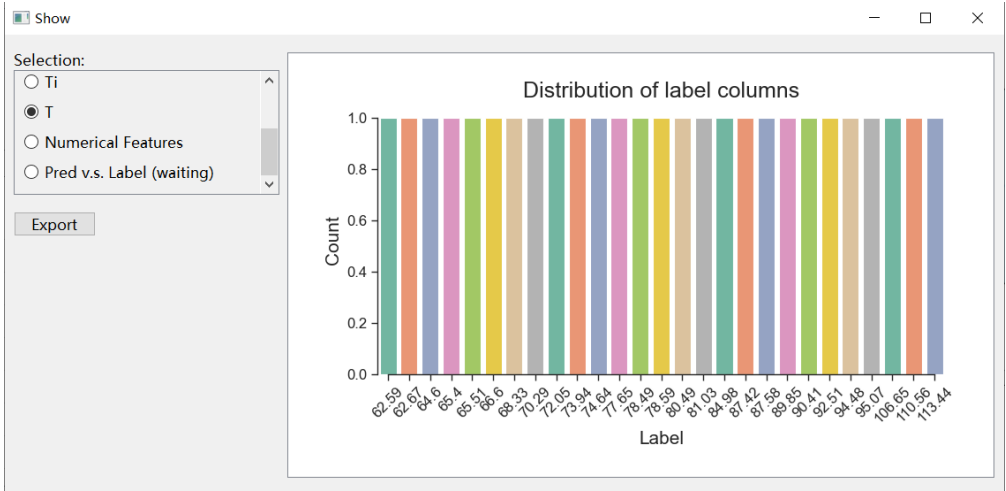


图 15 ： 标签分布图

这是特征的分布箱线图。

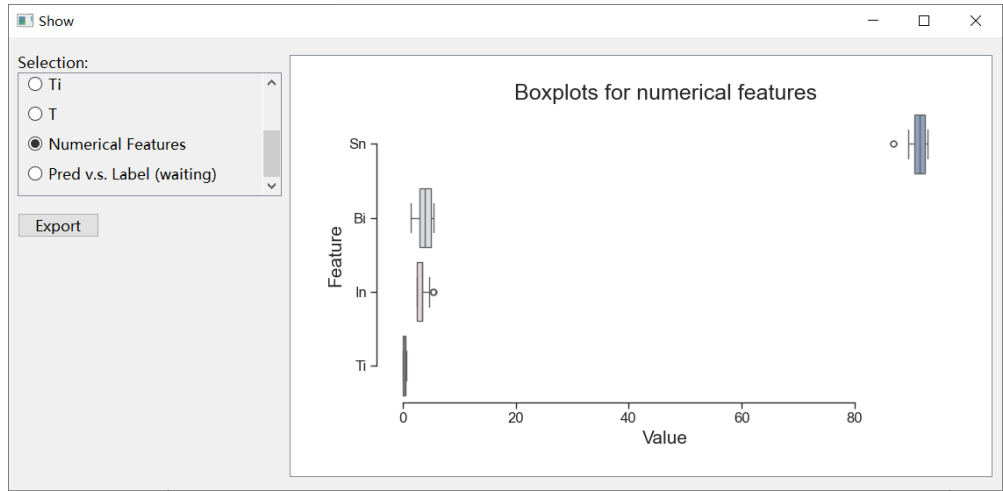


图 16：箱线图

使用留一法交叉验证来评估内置高斯过程回归模型的预测性能，并绘制模型预测值和真实值的散点图。

当选择“Pred vs. Label”这张图时，会进行大量的计算，可能需要较长时间来加载完成（需耐心等待）。

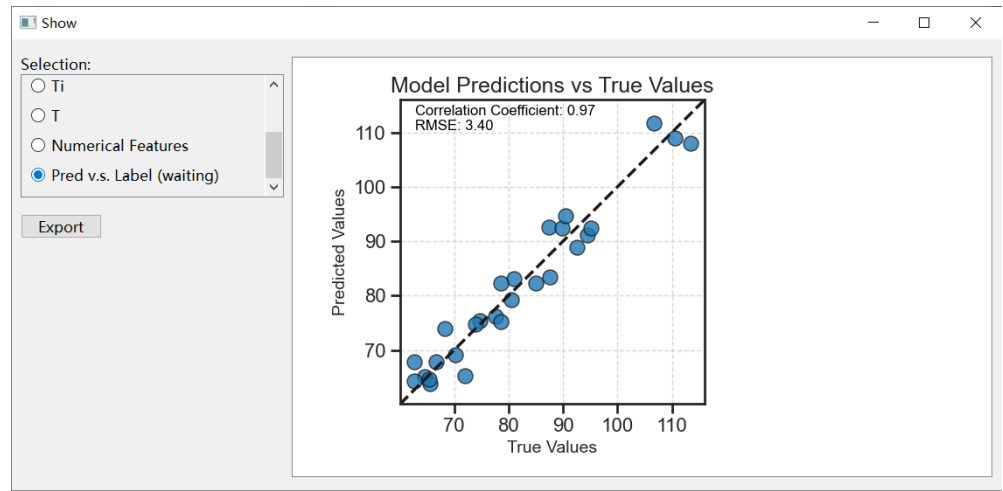


图 17：预测值和真实值的对比

与前面类似，点击“**Export**”按钮来下载这些图片到指定的文件夹。



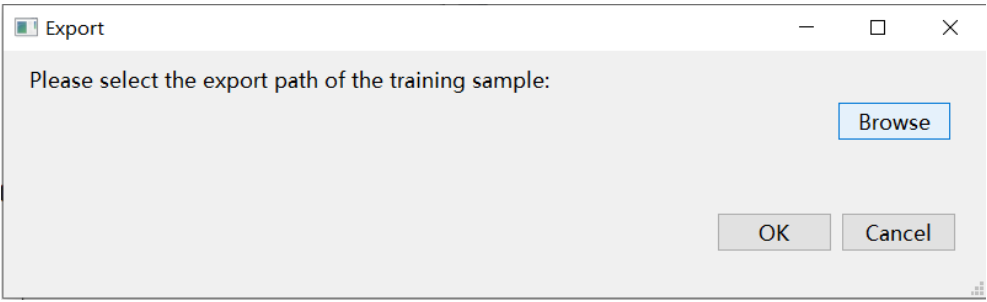


图 18 ： 导出图片

参数设置

获取训练样本和虚拟样本后，设置操作参数。

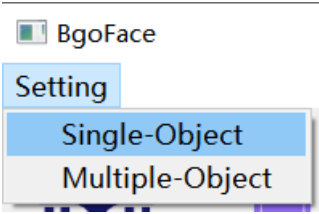


图 19 ： 设置参数

在菜单栏中点击 “Single-Object” 在参数窗口中设置参数。

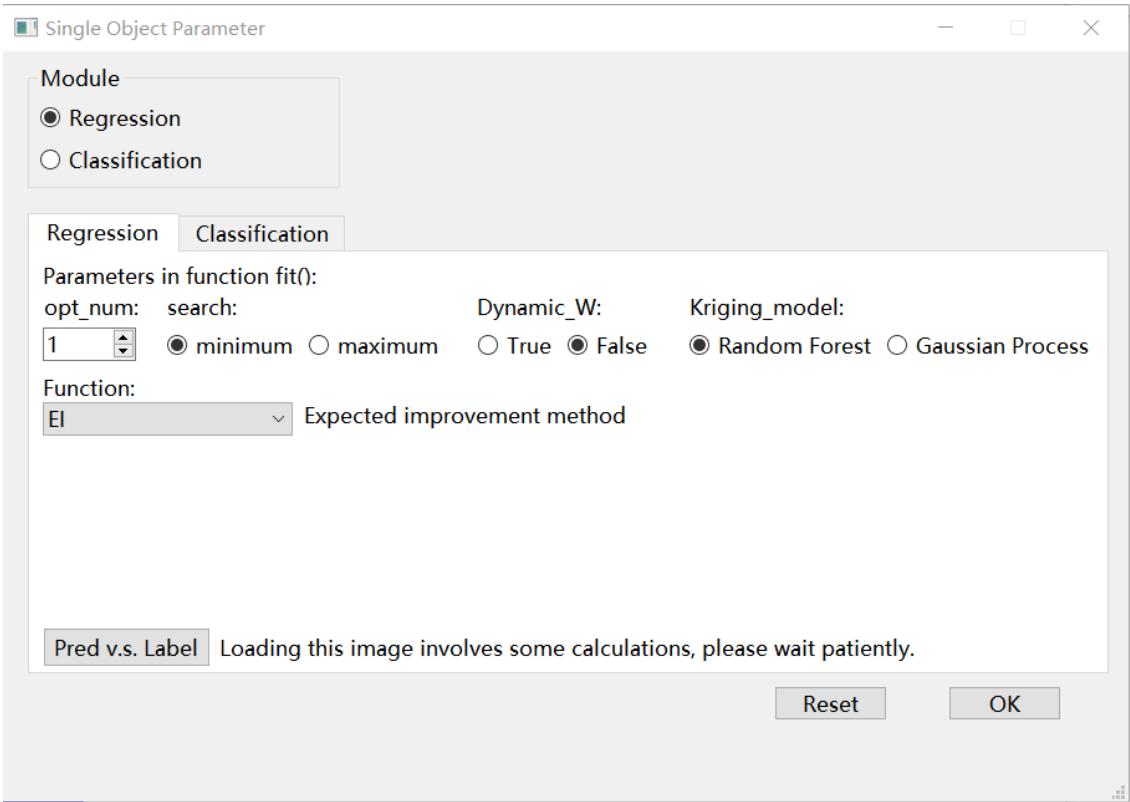


图 20 ： 参数设置界面

选择 “Regression” 模式，即回归任务，选择不同的函数进行相关的参数设置。

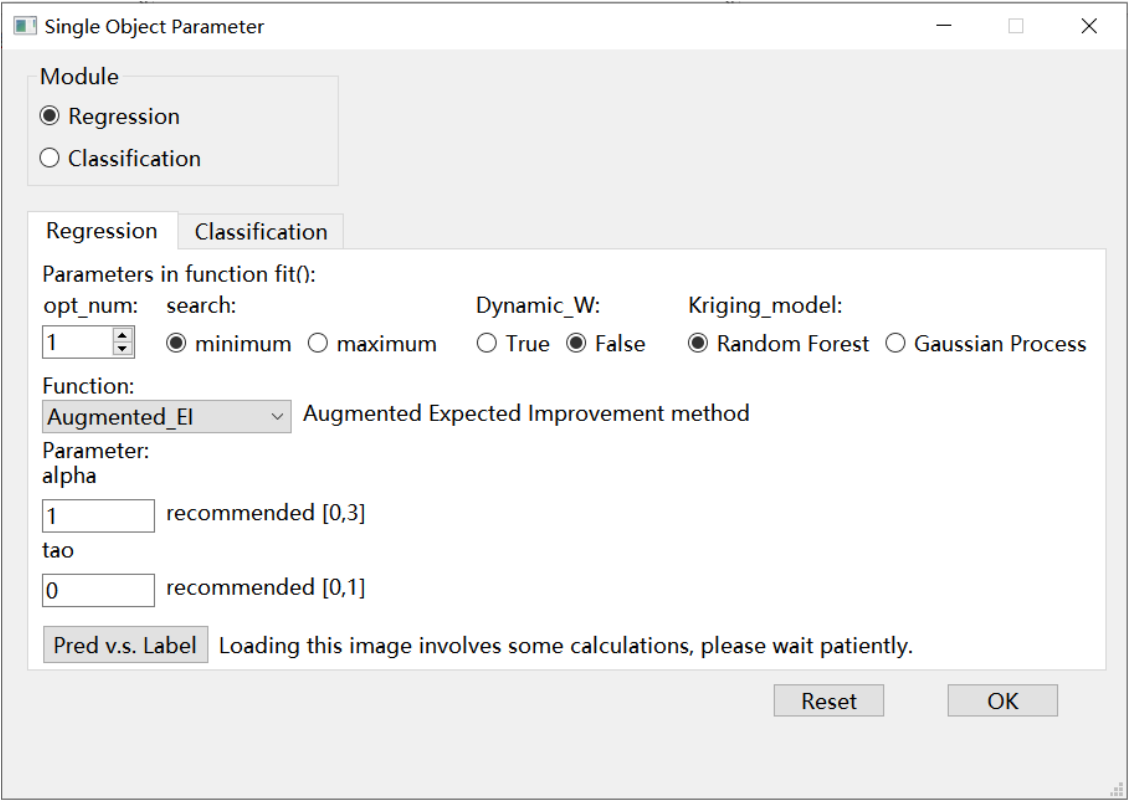


图 21：回归任务

点击“Reset”按钮，参数将被重置。

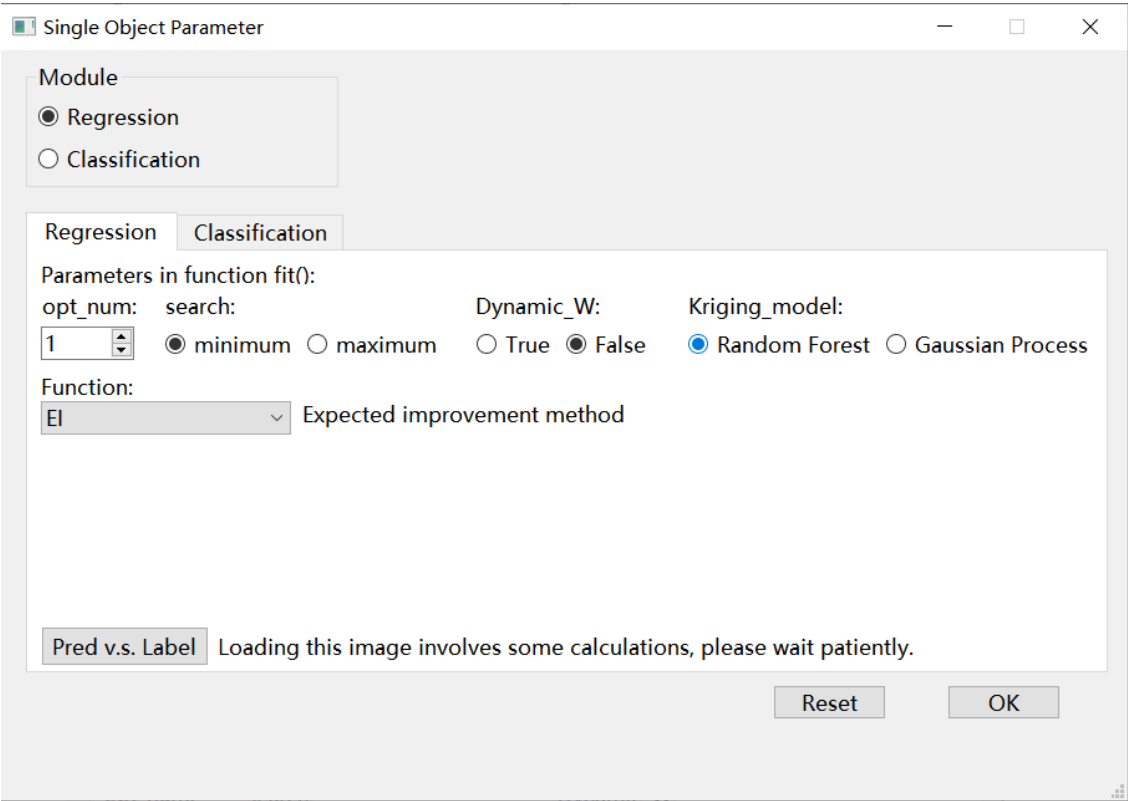


图 22 ： 重置参数

点击“OK”按钮来完成参数设置。

选择“Classification”模式，即分类任务，选择函数并设置参数。

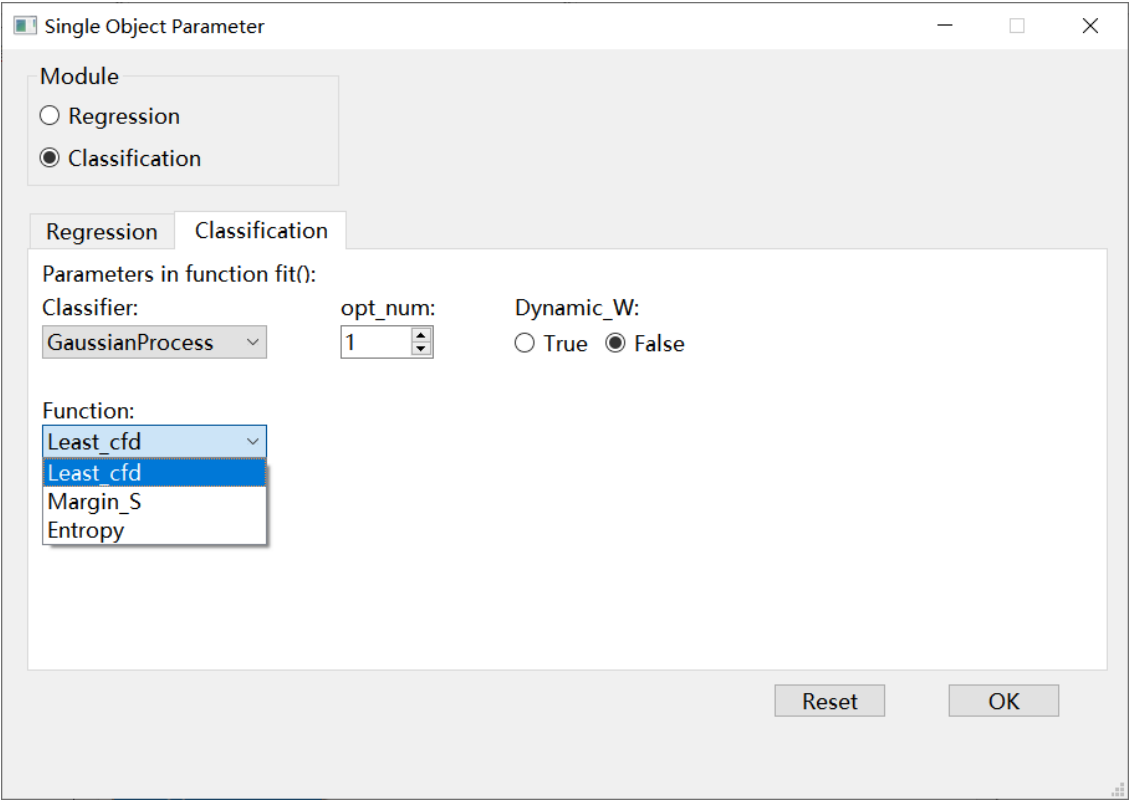


图 23 ： 分类任务

点击“Reset”按钮，参数将被重置。

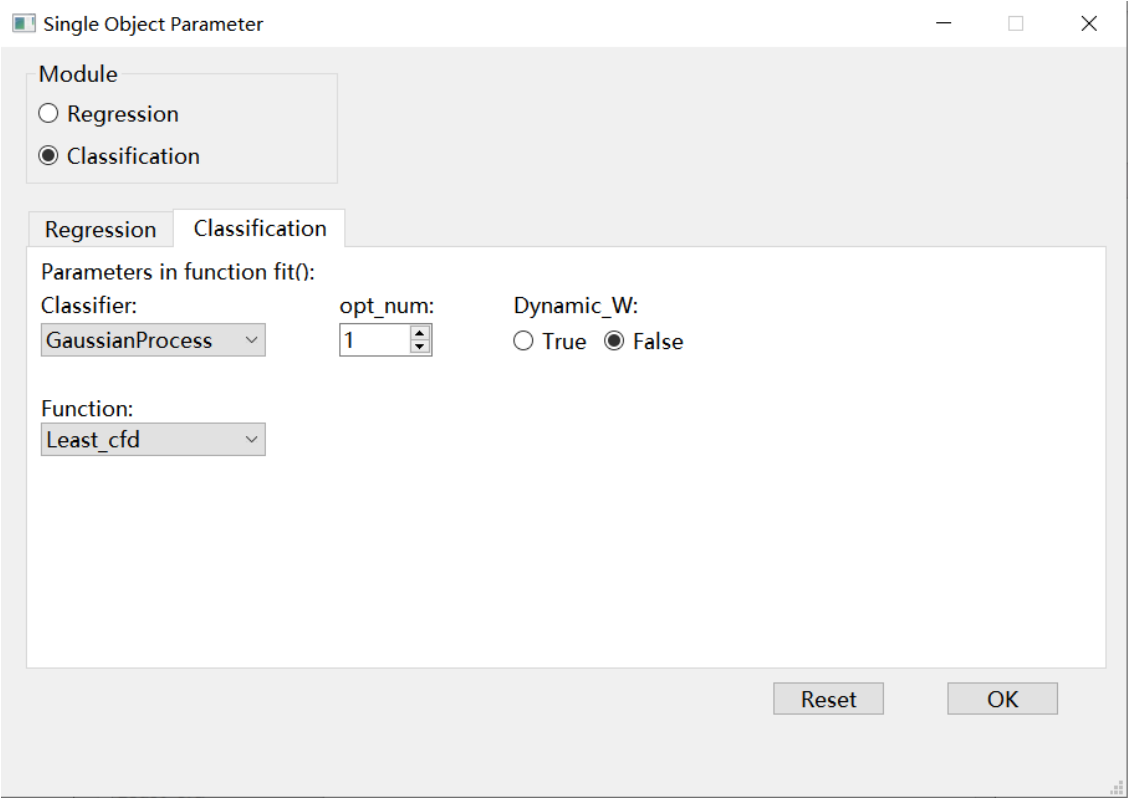


图 24 ： 重置参数

点击“OK”按钮来完成参数设置。

拟合

完成参数设置后，点击“Fit”按钮在结果窗口中查看结果。

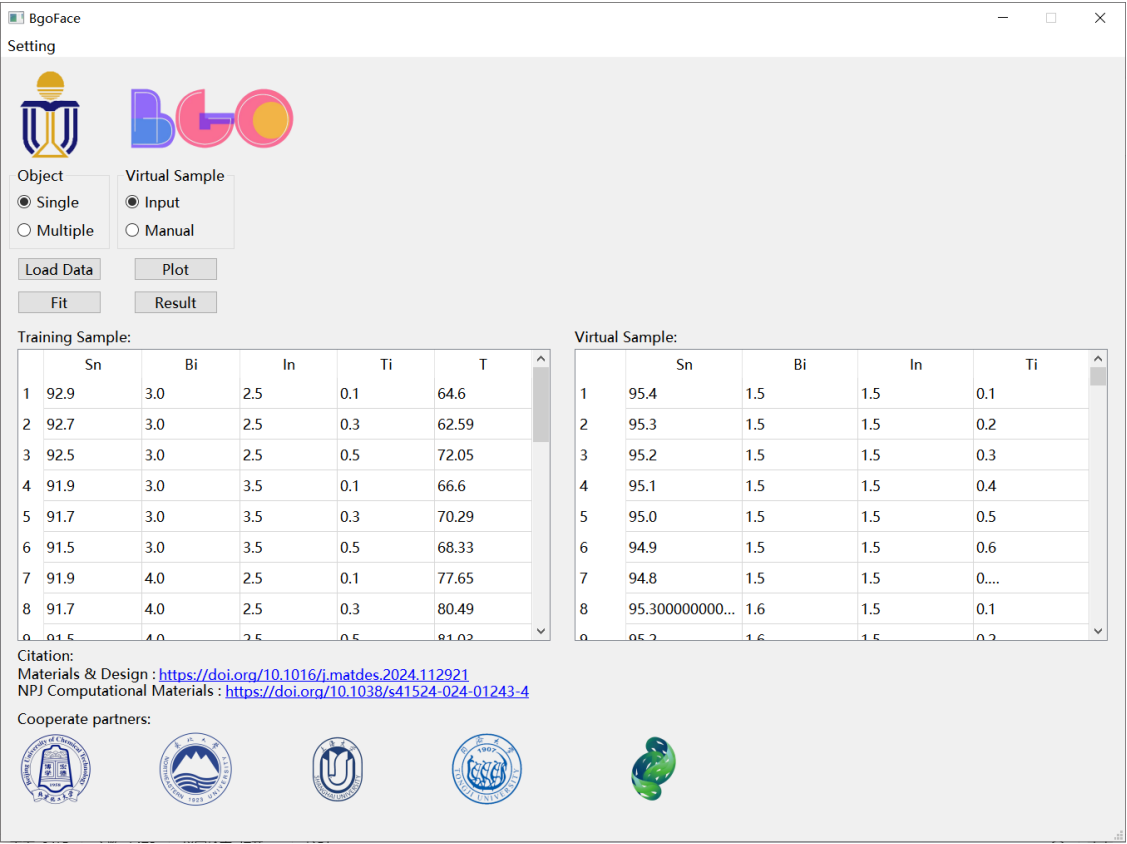


图 25 : 加载训练样本和虚拟样本

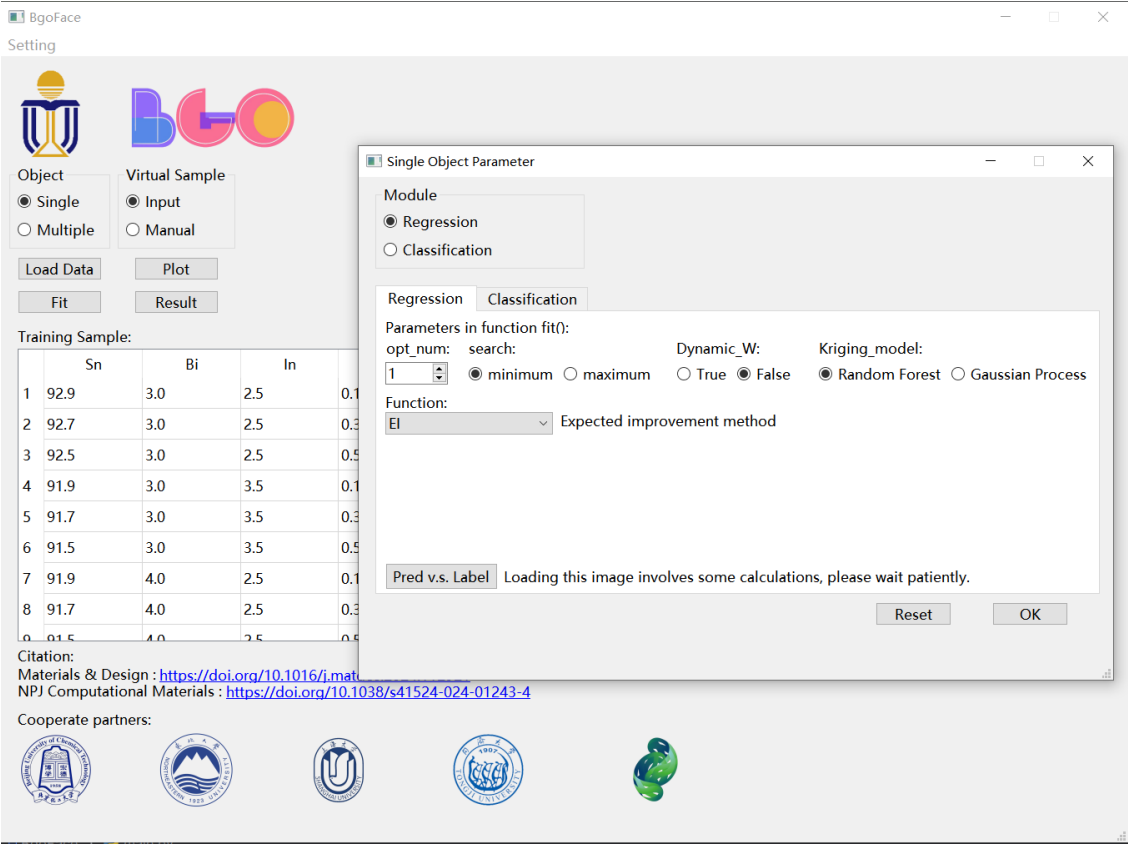


图 26：单目标参数设置

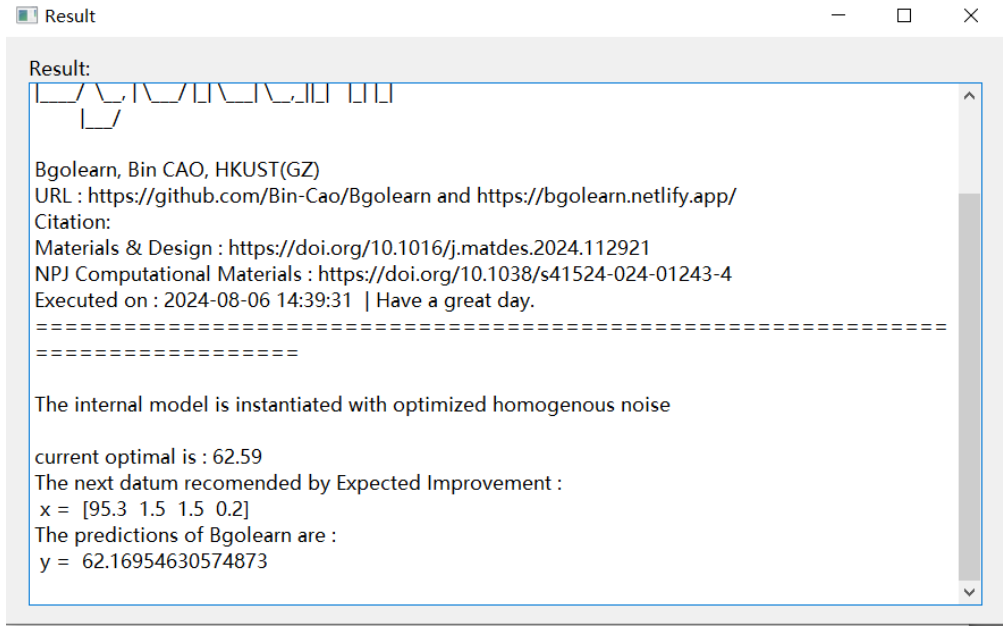


图 27：预测结果显示

多目标优化

软件也可以进行多目标贝叶斯优化材料设计，在主页选择“Multiple”模式。

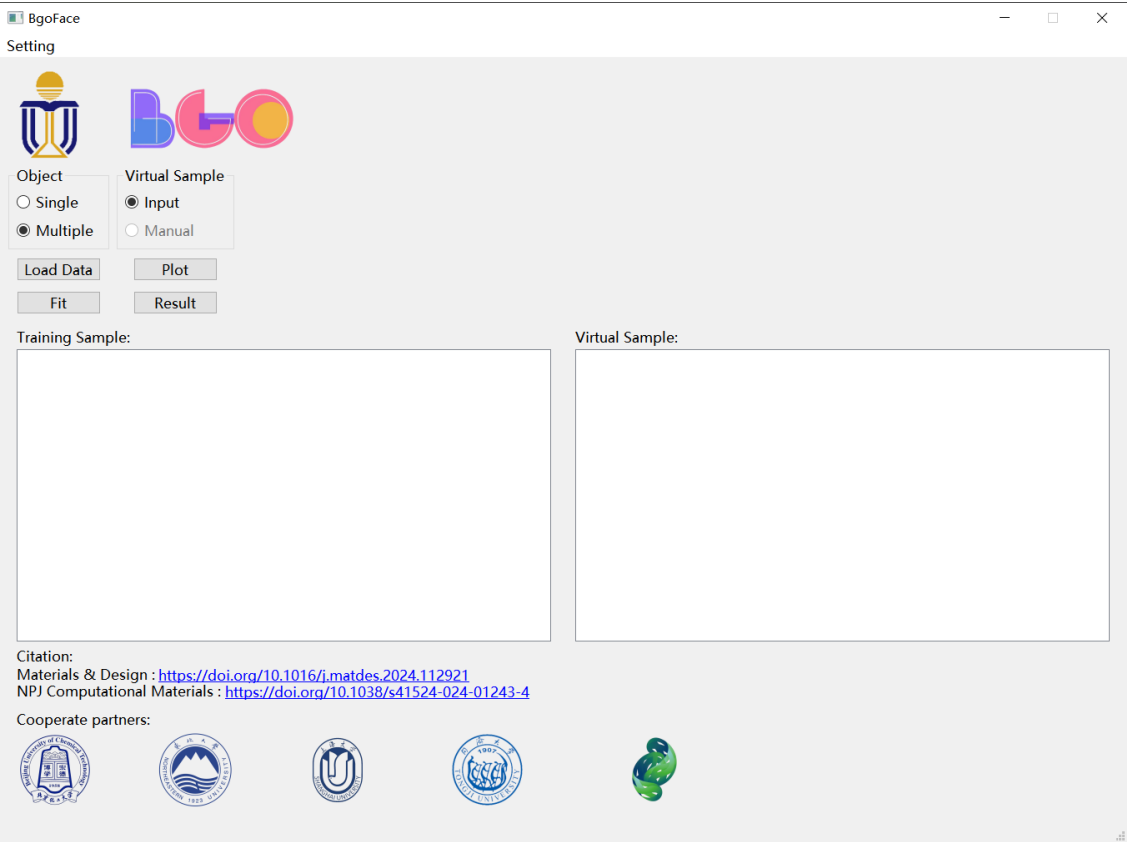


图 28 : Multiple 模式

然后点击“Load Data”按钮上传用于多目标优化的训练样本文件和虚拟样本文件，步骤同上。

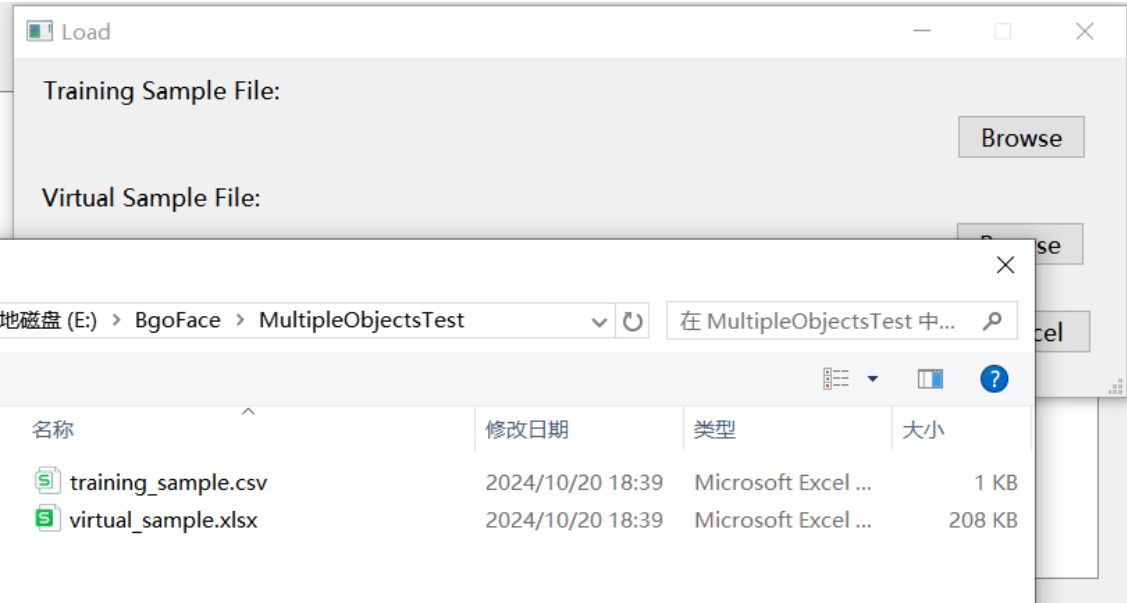




图 29 ： 选择多目标文件

选择文件并上传后如下所示。

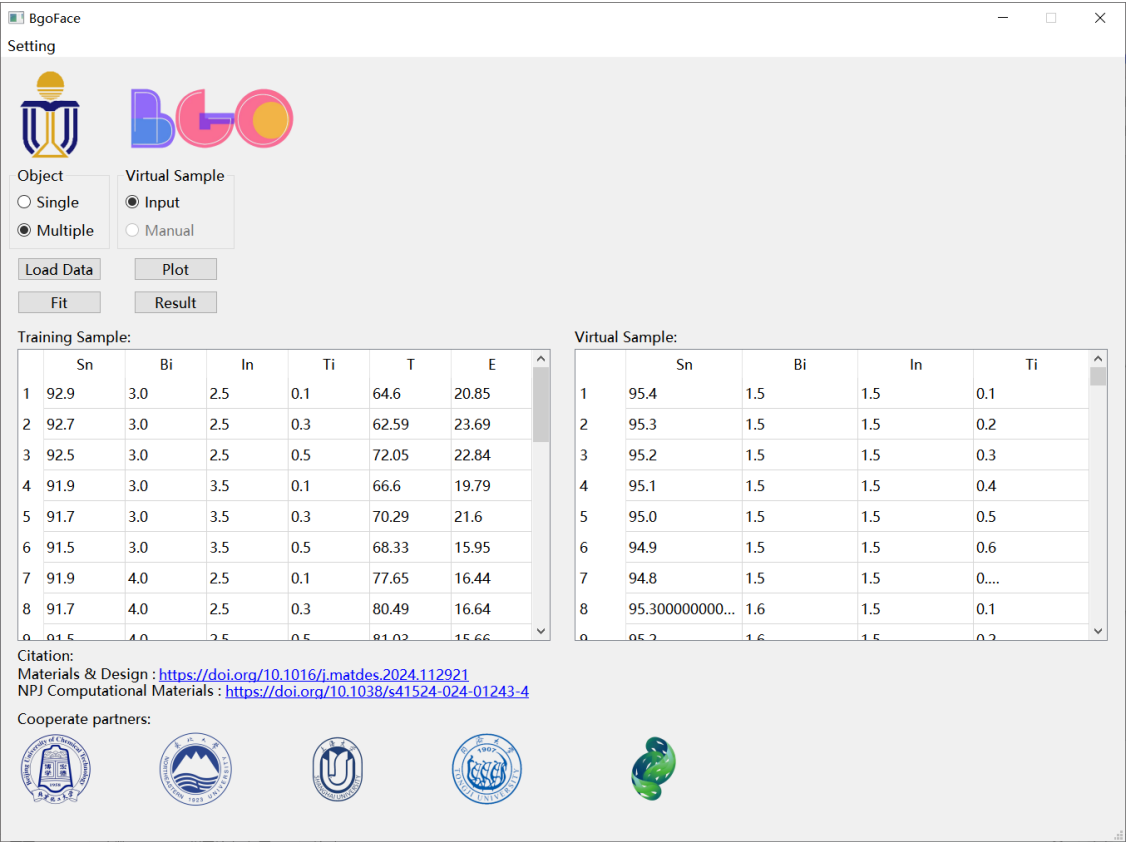


图 30 ： 多目标的训练样本和虚拟样本

点击“Setting”下的“Multiple-Object”进行多目标的参数设置。

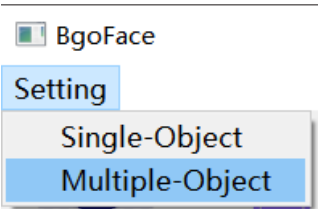


图 31 ： 参数设置

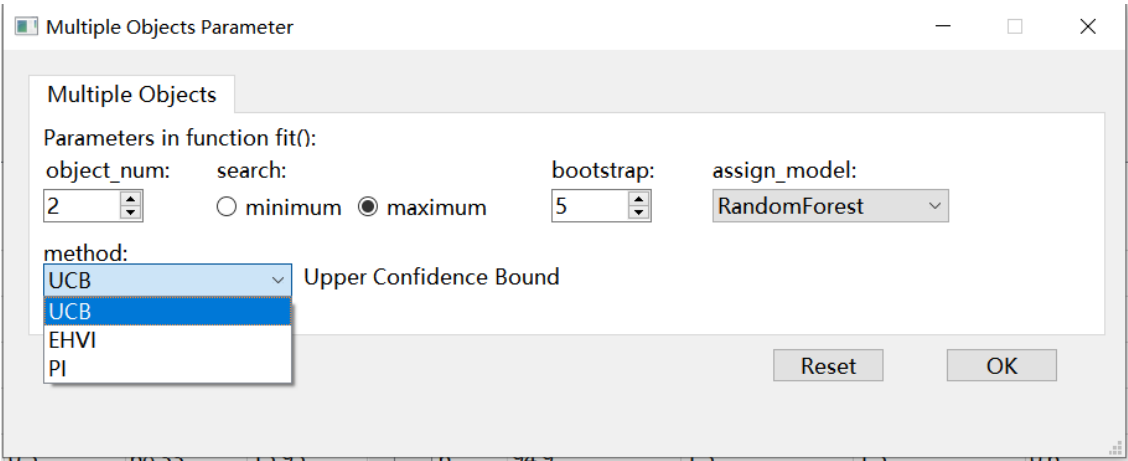


图 32：多目标优化参数设置

设置好参数后点击“OK”按钮，也可以点击“Reset”按钮将参数重置。

返回主页点击“Fit”按钮，进行多目标的优化，可以点击“Result”在窗口中查看优化结果。

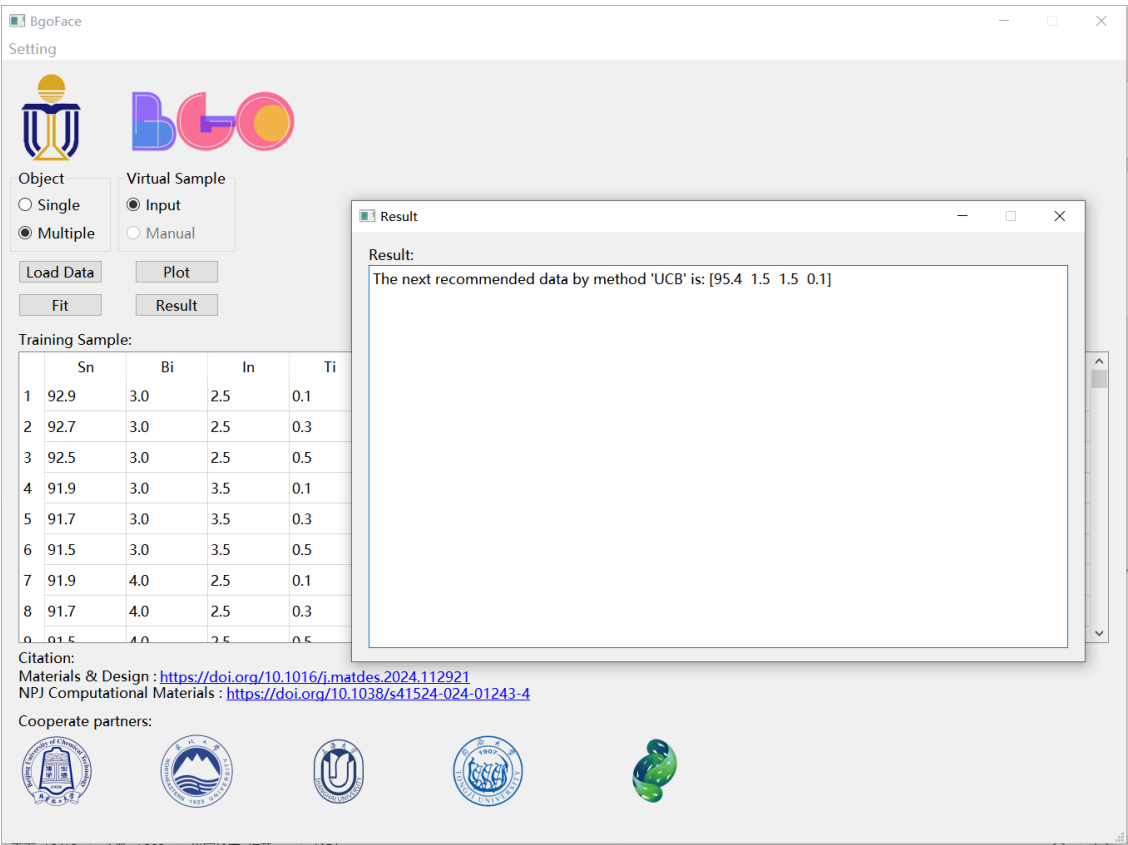


图 33：多目标优化的结果