

化学机器学习应用软件 V1.0

用户手册

目录

用户登录.....	3
功能描述	3
首页.....	5
功能描述	5
模型训练管理	6
功能描述	6
用户设置.....	10
功能描述	10
数据集管理.....	11
功能描述	11
模型评估分析	14
功能描述	14
系统设置.....	16
功能描述	16

预测结果管理	17
功能描述	17
日志管理.....	19
功能描述	19

用户登录

功能描述

用户登录是系统访问的第一步，只有通过登录验证的用户才能访问系统内的各项功能。以下是用户登录的详细步骤和说明：

1. 登录界面

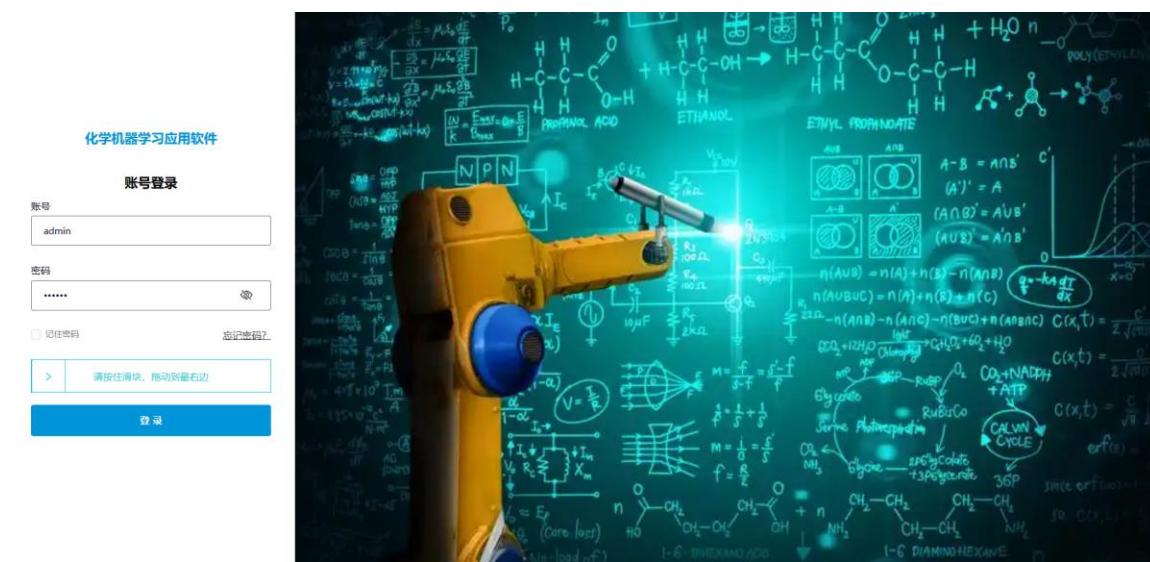
打开系统后，用户将看到登录界面。登录界面上包含以下元素：

用户名输入框：用于输入用户的注册名。

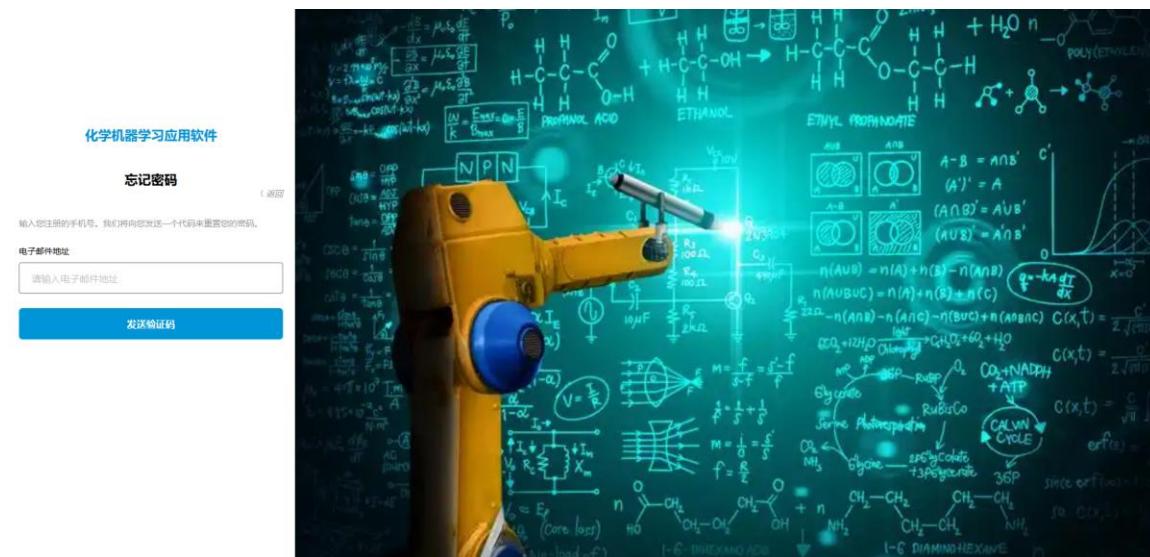
密码输入框：用于输入用户的密码。

登录按钮：点击后进行用户验证。

记住账号：下一次自动填写用户名和密码。



忘记密码：密码丢失时可通过电子邮箱重置密码



2. 输入用户名和密码

在用户名输入框中输入您的用户名，在密码输入框中输入您的密码。请确保输入的用户名和密码准确无误。

3. 点击登录按钮

输入正确的用户名和密码后，点击登录按钮。系统将验证用户信息的正确性。

4. 登录成功

如果用户名和密码正确，系统将自动跳转至系统主界面，用户可以开始使用系统内的各项功能。

5. 登录失败

如果用户名或密码错误，系统将提示登录失败，并要求用户重新输入正确的用户名和密码。

6. 忘记密码

如果密码错误，可以点击忘记密码通过电子邮箱发送的验证码进行重置密码操作

首页

功能描述

首页主要展示了化学机器学习应用软件的关键数据指标。通过卡片形式直观呈现了模型训练准确率、测试准确率、训练时间和预测时间等重要信息，让用户快速了解模型的基本性能和运行效率。同时，利用柱状图对比了训练准确率和测试准确率，折线图展示了模型更新频率与准确率的变化趋势，帮助用户分析模型的稳定性和改进效果。此外，还通过表格详细列出了多个数据指标的名称、值和描述，方便用户全面查看和了解软件的各项数据情况。

The screenshot shows the main interface of the software. At the top, there is a dark header bar with the title '化学机器学习应用软件' on the left and a user icon with '管理员' (Administrator) on the right. Below the header, the page is divided into several sections:

- 模型训练准确率:** Includes two cards: '训练准确率: 92%' (Model training accuracy: 92%) and '测试准确率: 88%' (Model testing accuracy: 88%).
- 训练时间:** Card showing '训练耗时: 45分钟' (Training time: 45 minutes).
- 预测时间:** Card showing '预测耗时: 12毫秒' (Prediction time: 12 milliseconds).
- 今日天气:** A weather forecast card for July 7, 2025, showing '23°' (Temperature) and '晴' (Sunny).
- 模型准确率对比:** A bar chart comparing '模型A' (Model A) and '模型B' (Model B). Model A has a higher accuracy rate than Model B.
- 模型更新频率与准确率变化:** A line chart showing the relationship between model update frequency and accuracy over four weeks.
- 数据列表:** A table listing various data metrics, such as '模型训练准确率' (92%), '模型在训练数据集上的预测准确率为92%，表现良好' (The prediction accuracy on the training dataset is 92%, performance is good).
- 日程:** A calendar for July 2025, with the 7th highlighted in blue.
- 最新通知公告:** A section with the text '发布日期: 2025年07月07日' (Release date: July 7, 2025).

At the bottom of the page, there is a navigation bar with links: 首页 (Home), 模型训练管理 (Model Training Management), 用户设置 (User Settings), 数据集管理 (Dataset Management), 模型评估分析 (Model Evaluation Analysis), 系统设置 (System Settings), 预测结果管理 (Prediction Result Management), and 日志管理 (Log Management).

把鼠标轻轻运动悬浮于【首页】功能展示页面的图表上，会出现浮窗显示详细数据，如图所示

This screenshot shows the Home page of the application. It features several data cards and charts. A tooltip for the 'Model Accuracy Comparison' card provides detailed information about training and testing accuracy. Another tooltip for the 'Model Update Frequency vs. Accuracy Change' chart shows a steady increase over four weeks. The 'Data List' section contains multiple entries with detailed descriptions. On the right side, there's a weather widget showing 23°C and a calendar for July 2025.

当页面内容过多，无法在当前视窗内完整显示时，您可以尝试滑动页面。这一操作将帮助您逐步浏览隐藏的内容，确保您能够全面、清晰地查看并分析页面中的每一项数据和信息。

This screenshot shows the same Home page as above, but with more content visible due to scrolling. The 'Data List' section now displays four items instead of two. The overall layout remains consistent with the first screenshot, including the charts, weather widget, and calendar.

模型训练管理

功能描述

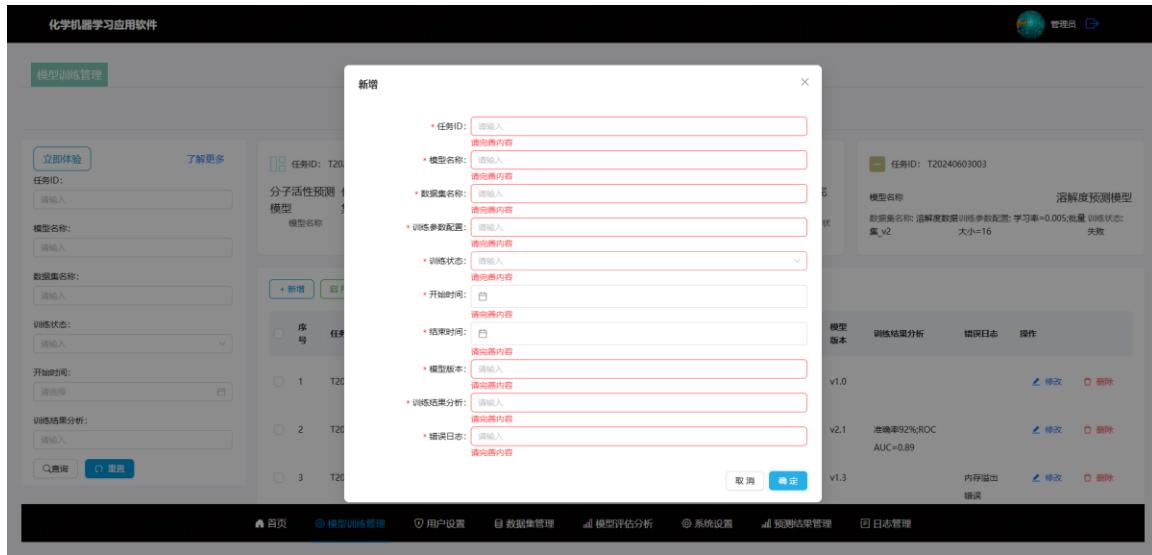
用于管理化学机器学习模型训练任务，可录入任务 ID、模型名称等筛选。呈现任务对应的数据集、训练参数、状态（训练中、已完成等）及开始 / 结束时间，支持任务新增、停用，跟踪模型训练进度与效果，保障模型迭代优化。

序号	任务ID	模型名称	数据集名称	训练参数配置	训练状态	开始时间	结束时间	模型版本	训练结果分析	错误日志	操作
1	T20240601001	分子活性预测模型	化合物活性数据集 v1	学习率=0.01;批量大小=32	训练中	2024-06-01 09:00:00		v1.0			修改 删除
2	T20240602002	毒性预测模型	毒性测试数据集 v3	学习率=0.001;批量大小=64	已完成	2024-06-02 10:30:00	2024-06-02 14:45:00	v2.1	准确率92%;ROC AUC=0.89		修改 删除
3	T20240603003	溶解度预测模型	溶解度数据集 v2	学习率=0.005;批量大小=16	失败	2024-06-03 14:00:00	2024-06-03 15:30:00	v1.3	内存溢出错误		修改 删除

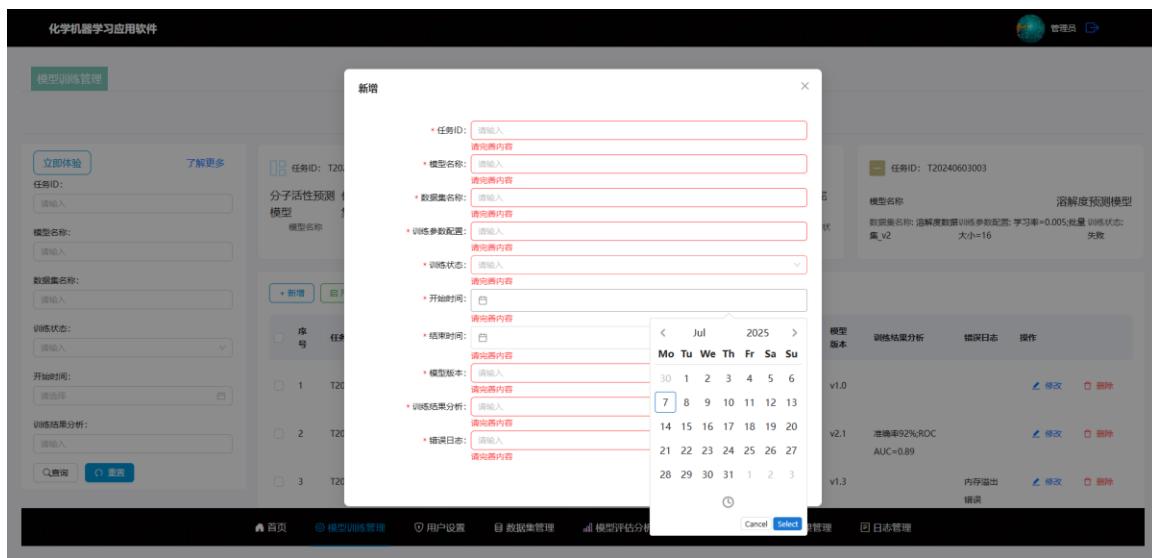
1.增加

从导航菜单栏转到该功能页面，点击页面内容新增按钮，页面会显示【任务 ID、模型名称、数据集名称】等信息，即可开始录入新的信息或数据，轻松实现信息的增加和管理的便捷化。如图所示

新增信息中，录入新的信息或数据时带红色星号的栏目是必填项，当有必填项空缺时，无法进行确定添加操作。如图所示

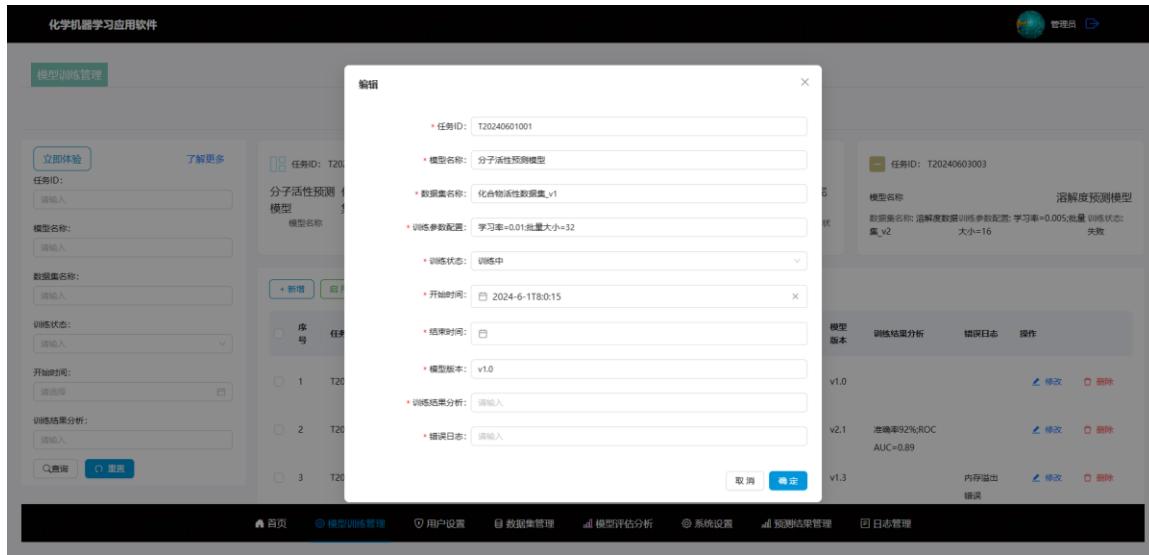


在功能页面的新增信息中，点击表格中时间栏一侧图标，可以根据需求选择相应时间，如图所示

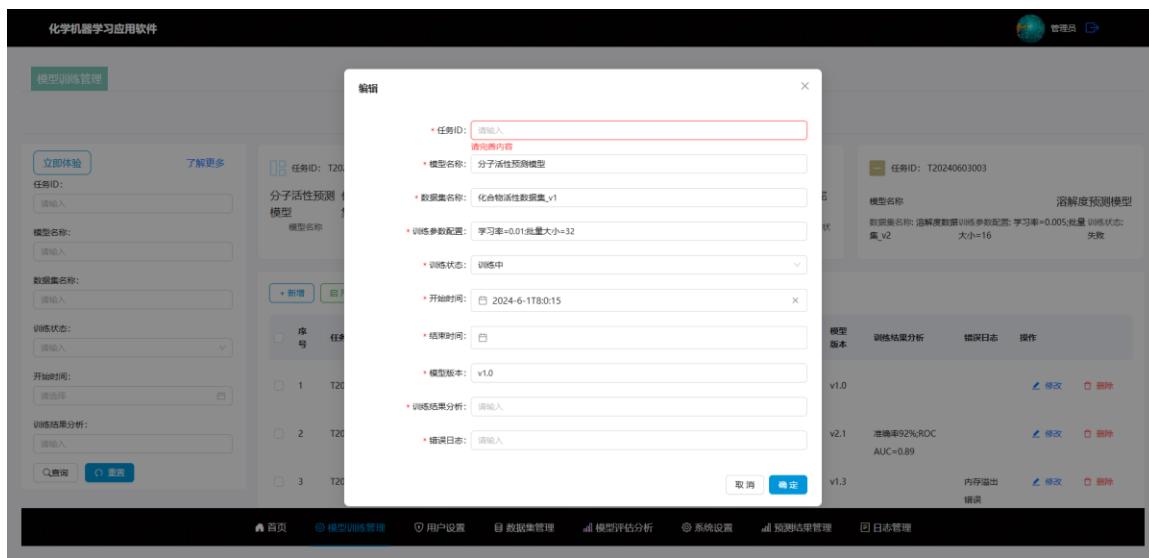


2. 修改

从导航菜单栏转到该功能页面，点击页面内容操作栏编辑修改按钮，页面会显示修改信息，即可开始编辑修改信息或数据。如图所示



编辑修改信息时带红色星号的栏目是必填项，当必填项出现空缺时，无法进行确定编辑修改操作。如图所示



3. 删除

从导航菜单栏转到该功能页面，点击页面内容操作栏删除按键，页面显示是否确定删除提示。如图所示

The screenshot shows the 'Model Training Management' section of the application. It displays three completed training tasks:

- 任务ID: T20240601001**: 分子活性预测 化合物活性数据 学习率=0.01;批量大小=32. 模型名称: 分子活性预测模型 数据集名称: 数据集 v1. 训练参数配置: 学习率=0.01;批量大小=32.
- 任务ID: T20240602002**: 毒性预测 毒性测试数据 学习率=0.001;批量大小=64. 模型名称: 毒性预测模型 数据集名称: 毒性测试数据 配置: 学习率=0.001;批量大小=64.
- 任务ID: T20240603003**: 溶解度预测模型 溶解度数据训练参数配置: 学习率=0.005;批量大小=16. 模型名称: 溶解度预测模型 数据集名称: 溶解度数据 配置: 学习率=0.005;批量大小=16.

A modal dialog box is open in the center, asking "确定删除这条数据吗?" (Are you sure you want to delete this data?).

用户设置

功能描述

管理用户账号信息与安全配置，展示用户名、账号 ID、登录时间等基础信息，可设置登录密码、密保问题、安全手机等，进行实名认证，保障用户账号安全，适配个性化使用需求。

The screenshot shows the 'User Settings' page. At the top, it displays basic account information:

- 用户名: 管理员
- 账号ID: admin
- 登录时间: 2025年7月7日 11:41
- 实名认证: 已认证
- 手机号:

Below this, there are three tabs: 安全配置 (Security Configuration), 基础信息 (Basic Information), and 实名认证 (Real Name Authentication). The 安全配置 tab is selected.

Under 安全配置, the following status indicators are shown:

- 登录密码: 已设置。密码至少6位字符，支持数字、字母和除空格外的特殊字符，且必须同时包含数字和大小写字母。
- 密保问题: 您暂未设置密保问题。密保问题可以有效的保护账号的安全。
- 安全手机: 已绑定:155*****99安全手机。
- 安全邮箱: 您暂未设置邮箱。绑定邮箱可以用来找回密码、接收通知等。

数据集管理

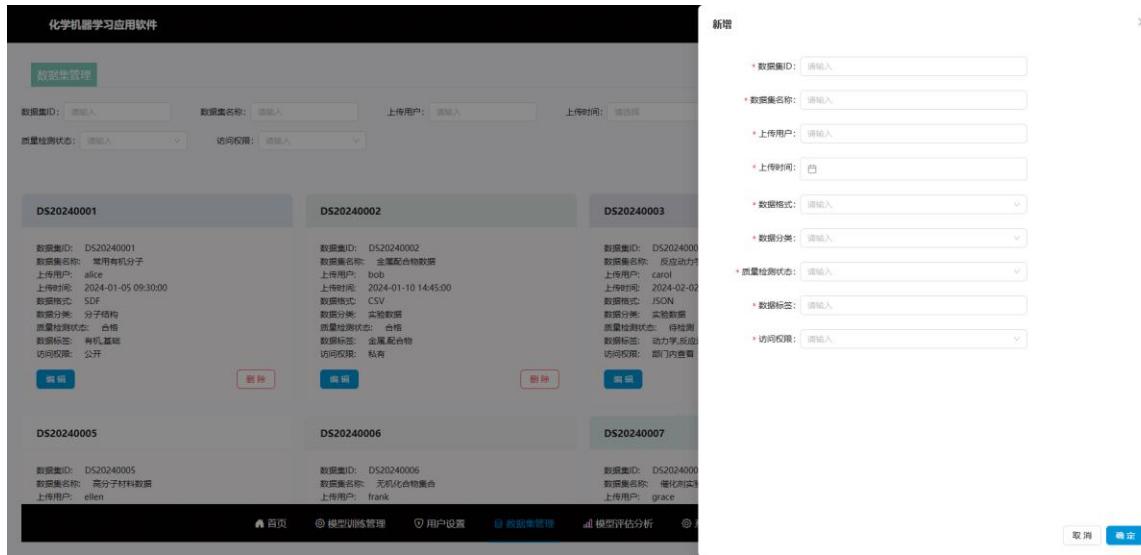
功能描述

统筹化学相关数据集，可按数据集 ID、名称等查询。展示数据集上传用户、时间、格式、质量状态等，支持数据集编辑、删除，规范数据管理流程，为模型训练提供高质量数据支撑。

ID	Name	Upload User	Time	Format	Status
DS20240001	常用有机分子	alice	2024-01-05 09:30:00	SDF	可信
DS20240002	金属配合物数据	bob	2024-01-10 14:45:00	CSV	可信
DS20240003	反应动力学数据集	carol	2024-02-02 11:10:00	JSON	待检测
DS20240004	药物分子化学性质	david	2024-02-15 16:20:00	SMILES	可信
DS20240005	高分子材料数据	ellen			可信
DS20240006	无机化合物集合	frank			可信
DS20240007	催化剂实验数据	grace			可信
DS20240008	分子动力学模拟	harry			可信

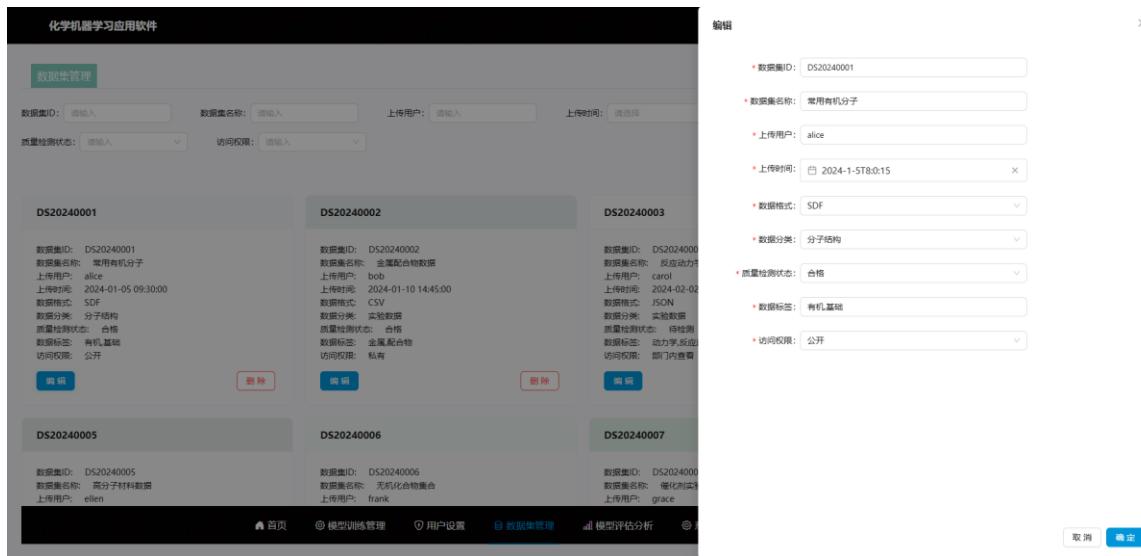
1. 增加

从导航菜单栏转到该功能页面，点击页面内容新增按钮，页面会显示【数据集 ID、数据集名称、上传用户】等信息，即可开始录入新的信息或数据，轻松实现信息的增加和管理的便捷化。如图所示



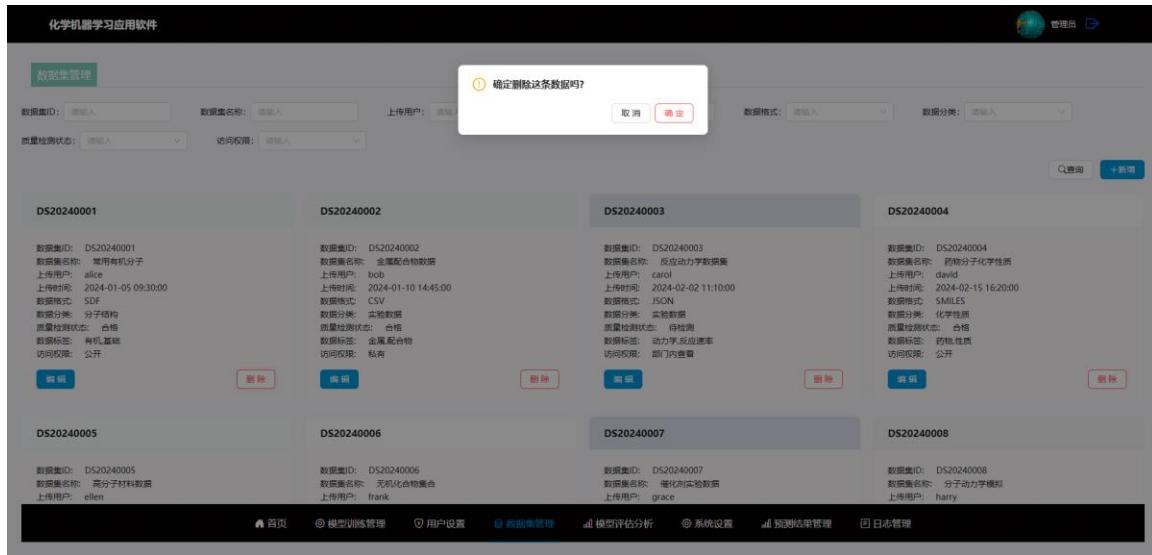
2. 修改

从导航菜单栏转到该功能页面，点击页面内容操作栏编辑按钮，页面会显示修改信息，即可开始编辑修改信息或数据。如图所示

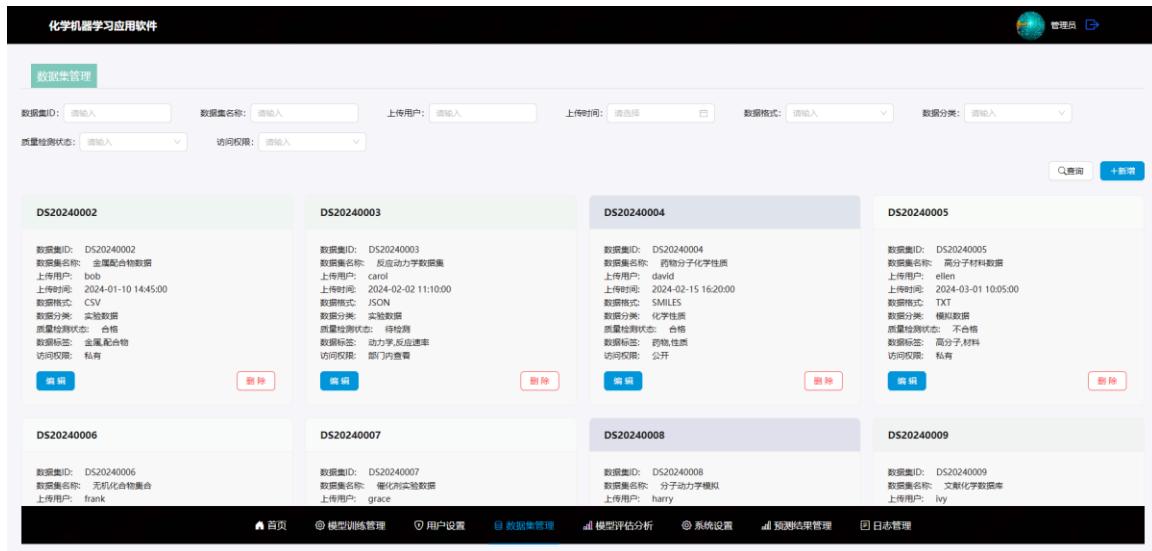


3. 删除

从导航菜单栏转到该功能页面，点击页面内容操作栏删除按键，页面显示是否确定删除提示。如图所示



从导航菜单栏转到该功能页面，点击页面内容操作栏删除按键，页面显示是否确定删除提示，点击确定按钮，展示已成功执行删除操作后的页面效果



4. 下拉

从导航菜单栏转到该功能页面，页面展示内容筛选框中可以点击选择下拉框选项，进行自由灵活筛选。如图所示

Detailed dataset information:

- DS20240002**: 反应动力学数据集, 上传用户: bob, 上传时间: 2024-01-10 14:45:00, 数据格式: CSV, 分类: 金属配合物, 状态: 合格, 权限: 私有.
- DS20240003**: 催化剂实验数据集, 上传用户: carol, 上传时间: 2024-02-02 11:10:00, 数据格式: JSON, 分类: 实验数据, 状态: 待检测, 权限: 部门内查看.
- DS20240004**: 药物分子化学性质数据集, 上传用户: david, 上传时间: 2024-02-15 16:20:00, 数据格式: SMILES, 分类: 化学性质, 状态: 合格, 权限: 公开.
- DS20240005**: 高分子材料数据集, 上传用户: elen, 上传时间: 2024-03-01 10:05:00, 数据格式: TXT, 分类: 模型数据, 状态: 不合格, 权限: 高分子材料.
- DS20240006**: 无机化合物集合, 上传用户: frank, 上传时间: 2024-03-05 13:30:00, 数据格式: grace, 分类: 无机化合物, 状态: 合格, 权限: 公开.

模型评估分析

功能描述

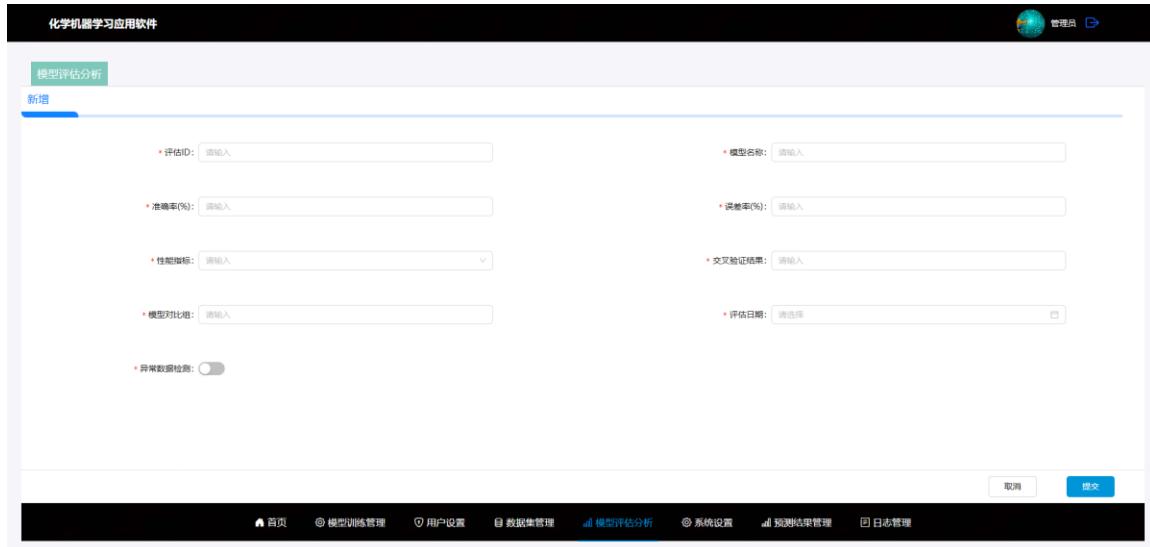
对训练完成的模型进行评估，录入评估 ID、模型名称等筛选。呈现模型准确率、误差率、交叉验证结果、评估日期等，标记异常检测状态，支持评估结果编辑、删除，助力判断模型性能，指导模型优化。

Evaluation details:

- EVAL20240101**: Model: MolModel_A, Accuracy(%): 92.5, Error(%): 7.5, Cross-validation: 5折交叉验证, 平均准确率 92.1%, Model对比组: MolModel_B, 评估日期: 2024-01-15. 异常数据检测: true.
- EVAL20240102**: Model: MolModel_B, Accuracy(%): 89.3, Error(%): 10.7, Cross-validation: 10折交叉验证, 平均召回率 88.7%, Model对比组: MolModel_A, 评估日期: 2024-01-20. 异常数据检测: false.

1. 增加

从导航菜单栏转到该功能页面，点击页面内容新增按钮，页面会显示【评估 ID、模型名称、准确率(%)】等信息，即可开始录入新的信息或数据，轻松实现信息的增加和管理的便捷化。如图所示



Model Evaluation Analysis (模型评估分析)

New (新增)

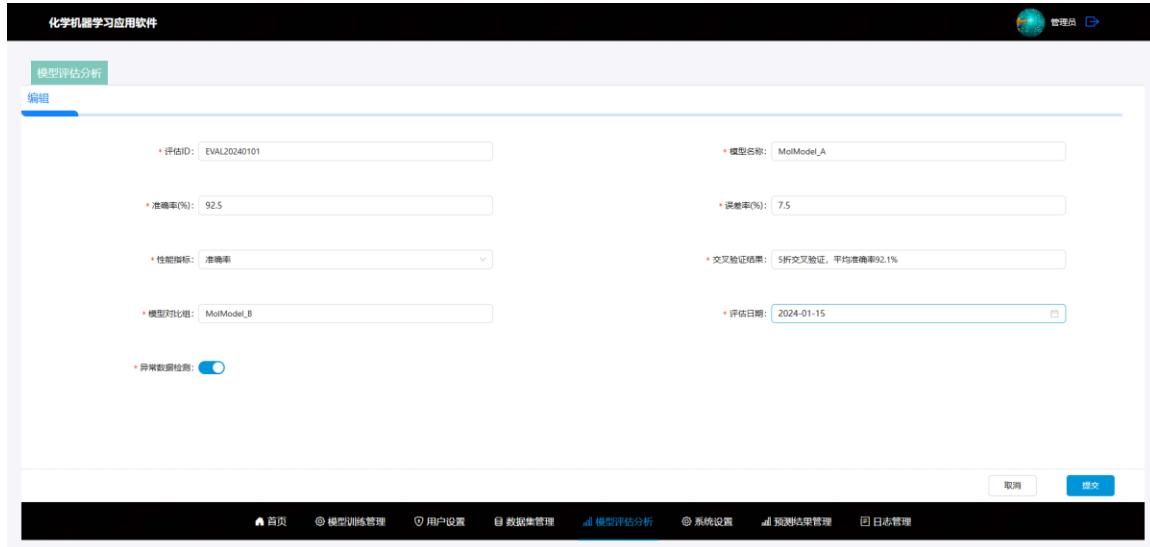
Evaluation ID: Model Name:
Accuracy (%): Error Rate (%):
Performance Indicator: Cross-validation Accuracy:
Model Comparison: Evaluation Date:
Anomaly Detection:

Cancel Submit

Home Model Training Management User Settings Data Set Management Model Evaluation Analysis System Settings Prediction Result Management Log Management

2. 修改

从导航菜单栏转到该功能页面，点击页面内容操作栏编辑修改按钮，页面会显示修改信息，即可开始编辑修改信息或数据。如图所示



Model Evaluation Analysis (模型评估分析)

Edit (编辑)

Evaluation ID: EVAL20240101 Model Name: MolModel_A
Accuracy (%): 92.5 Error Rate (%): 7.5
Performance Indicator: Accuracy Cross-validation Accuracy: 5-fold cross-validation, average accuracy 92.1%
Model Comparison: MolModel_B Evaluation Date: 2024-01-15
Anomaly Detection:

Cancel Submit

Home Model Training Management User Settings Data Set Management Model Evaluation Analysis System Settings Prediction Result Management Log Management

3. 删除

从导航菜单栏转到该功能页面，点击页面内容操作栏删除按键，页面显示是否确定删除提

示。如图所示

The screenshot shows the 'Model Evaluation Analysis' section of the software. A modal dialog box in the center asks '确定删除这条数据吗?' (Confirm deletion of this data?). Below the dialog, there are two rows of evaluation details:

评估ID:	EVAL20240101	模型名称:	MolModel_A	准确率(%):	92.5	误差率(%):	7.5
性能指标:	准确率	交叉验证结果:	5折交叉验证, 平均准确率 92.1%	模型对比组:	MolModel_B	评估日期:	2024-01-15

Below these rows, there is a note: '异常数据检测: true'. At the bottom right of the page, there are '编辑' (Edit) and '删除' (Delete) buttons.

系统设置

功能描述

配置软件系统参数，涵盖基本设置（字体、语言）、通知设置（邮件、消息提醒）、隐私设置（权限控制）、用户安全（密码策略）、备份与恢复、数据同步等，保障系统适配业务需求，稳定高效运行。

The screenshot shows the 'System Settings' page. It includes several sections:

- 基本设置**: Includes themes (Light mode, Dark mode), font sizes (Small, Medium, Large), and language selection (English dropdown).
- 通知设置**: Options for email notifications, push notifications, and short message notifications.
- 隐私设置**: Options for sharing data, location permissions, camera permissions, and microphone permissions.
- 备份与恢复**: Buttons for '备份数据' (Backup Data) and '恢复数据' (Restore Data), and a '上传备份文件' (Upload Backup File) button.
- 账户安全**: Fields for old password, new password, and confirm new password, with '更改密码' (Change Password) and '启用两步验证' (Enable Two-step Verification) buttons.
- 数据同步**: Options for cloud sync and automatic sync, with a '立即同步' (Sync Now) button.
- 显示设置**: A horizontal slider for brightness adjustment.
- 关于我们**: A section with the text '欢迎使用我们的应用程序!' (Welcome to our application!).

At the bottom, there is a navigation bar with links: 首页 (Home), 模型训练管理 (Model Training Management), 用户设置 (User Settings), 数据集管理 (Dataset Management), 模型评估分析 (Model Evaluation Analysis), 系统设置 (System Settings), 预测结果管理 (Prediction Result Management), and 日志管理 (Log Management).

预测结果管理

功能描述

管理化学模型预测任务结果，可录入预测 ID、模型名称等查询。展示预测时间、数据集、结果准确率、历史预测记录关联等信息，支持预测结果编辑、删除，便于追溯与分析模型预测性能。

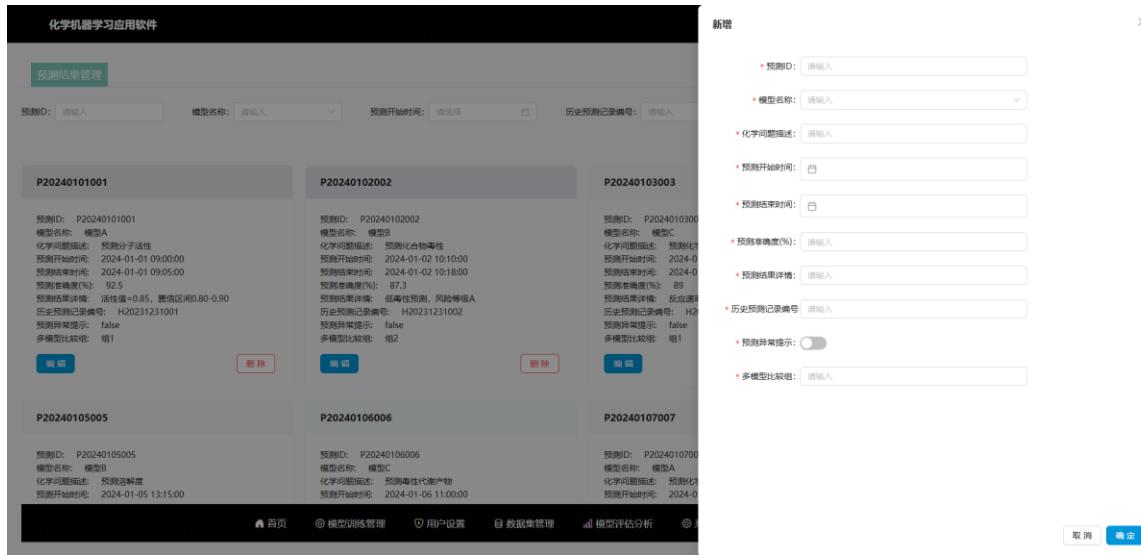
The screenshot shows the 'Prediction Result Management' page of the 'Chemical Machine Learning Application Software'. The page has a header with search and filter fields for 'Prediction ID', 'Model Name', 'Prediction Start Time', 'Historical Prediction Record ID', and 'Prediction Error Alert'. Below the header is a table displaying six prediction records, each with a 'Edit' and 'Delete' button.

Prediction ID	Model Name	Prediction Start Time	Historical Prediction Record ID	Prediction Error Alert
P20240101001	模型A 预测分子活性	2024-01-01 09:00:00		
P20240102002	模型B 预测化合物毒性	2024-01-02 10:10:00		
P20240103003	模型C 预测化学反应速率	2024-01-03 14:20:00		
P20240104004	模型D 预测材料耐热性	2024-01-04 08:00:00		
P20240105005	模型E 预测溶剂极性	2024-01-05 13:15:00		
P20240106006	模型F 预测产物分布	2024-01-06 11:00:00		
P20240107007	模型G 预测化学反应副产物	2024-01-07 09:45:00		
P20240108008	模型H 预测分子稳定性	2024-01-08 15:20:00		

At the bottom of the page, there is a navigation bar with links: 首页 (Home), 模型训练管理 (Model Training Management), 用户设置 (User Settings), 数据集管理 (Dataset Management), 模型评估分析 (Model Evaluation Analysis), 预测结果管理 (Prediction Result Management) (highlighted in blue), and 日志管理 (Log Management).

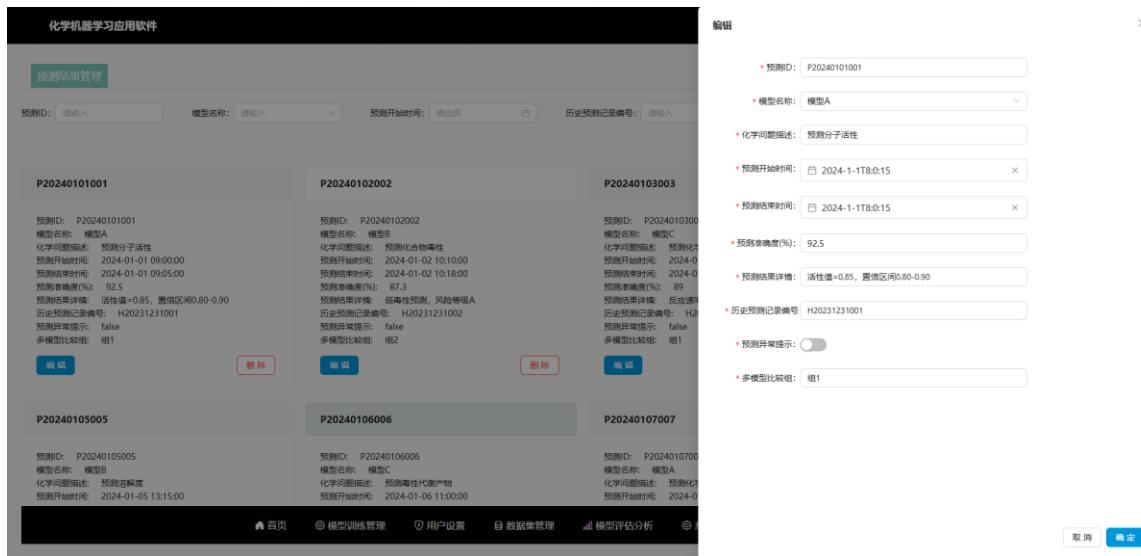
1. 增加

从导航菜单栏转到该功能页面，点击页面内容新增按钮，页面会显示【预测 ID、模型名称、化学问题描述】等信息，即可开始录入新的信息或数据，轻松实现信息的增加和管理的便捷化。如图所示



2. 修改

从导航菜单栏转到该功能页面，点击页面内容操作栏编辑按钮，页面会显示修改信息，即可开始编辑修改信息或数据。如图所示



3. 删除

从导航菜单栏转到该功能页面，点击页面内容操作栏删除按键，页面显示是否确定删除提示。如图所示

The screenshot shows the 'Prediction Result Management' section of the software. It displays a grid of prediction records with columns for ID, Model Name, Start Time, and other details. A modal dialog box is open in the center, asking '确定删除这条数据吗?' (Are you sure you want to delete this data?). The dialog has '取消' (Cancel) and '确定' (Confirm) buttons. The background grid shows records P20240101001 through P20240104004.

从导航菜单栏转到该功能页面，点击页面内容操作栏删除按键，页面显示是否确定删除提示，点击确定按钮，展示已成功执行删除操作后的页面效果

This screenshot shows the same 'Prediction Result Management' page after the deletion operation from the previous screenshot has been completed. The grid now only contains records P20240102002, P20240103003, P20240104004, and P20240105005, indicating that the record P20240101001 has been removed.

日志管理

功能描述

记录软件操作日志，可按日志 ID、类型、用户等筛选。展示操作时间、内容、状态、IP 地址等，支持日志编辑、删除，实现操作行为追溯与审计，保障系统操作合规性与问题排

查。

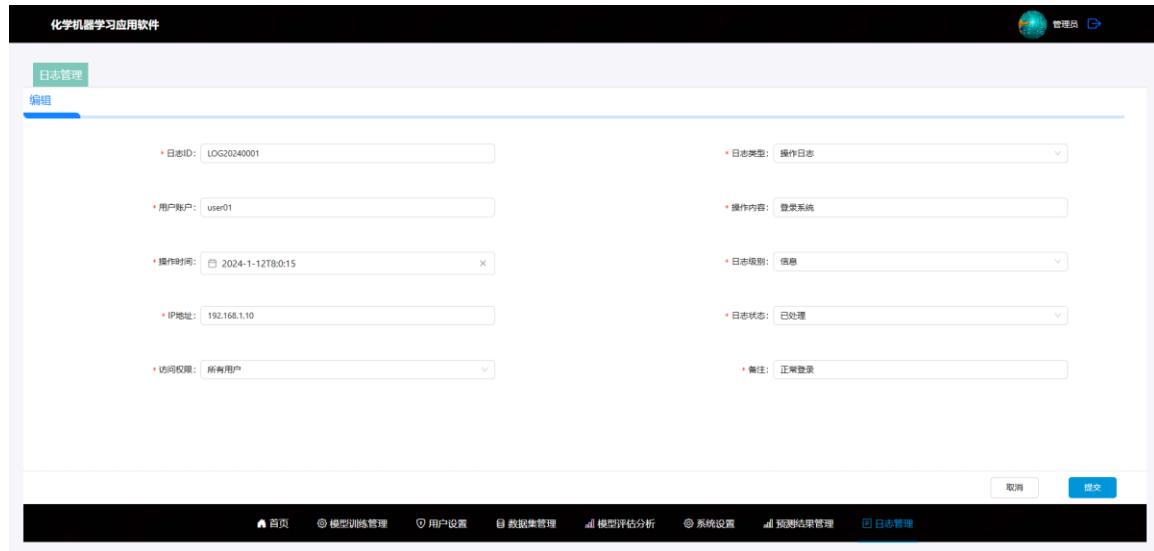
日志ID	日志类型	用户账户	操作内容
LOG20240001	操作日志	user01	登录系统
操作时间	2024-01-12 09:15:23	日志级别	信息
访问权限	所有用户	IP地址	192.168.1.10
		备注	正常登录
LOG20240002	异常日志	user02	模型训练失败
操作时间	2024-01-12 10:45:55	日志级别	错误
访问权限	所有用户	IP地址	192.168.1.12
		备注	模型训练失败

1. 增加

从导航菜单栏转到该功能页面，点击页面内容新增按钮，页面会显示【日志 ID、日志类型、用户账户】等信息，即可开始录入新的信息或数据，轻松实现信息的增加和管理的便捷化。如图所示

2. 修改

从导航菜单栏转到该功能页面，点击页面内容操作栏编辑修改按钮，页面会显示修改信息，即可开始编辑修改信息或数据。如图所示



3. 删除

从导航菜单栏转到该功能页面，点击页面内容操作栏删除按键，页面显示是否确定删除提示。如图所示

