

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

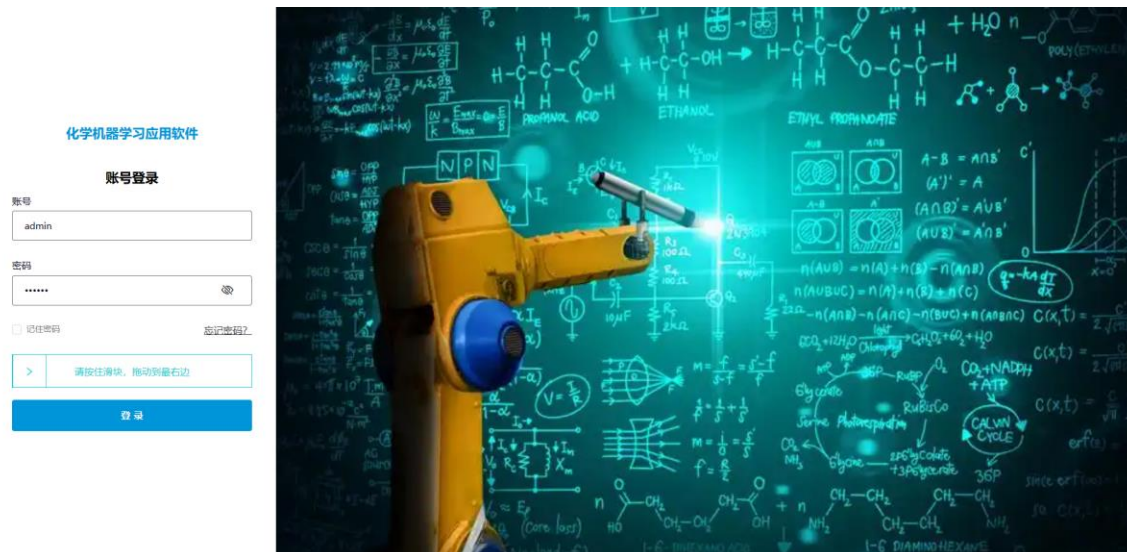
打开系统后，用户将看到登录界面。登录界面包含以下元素：

用户名输入框：用于输入用户的注册名。

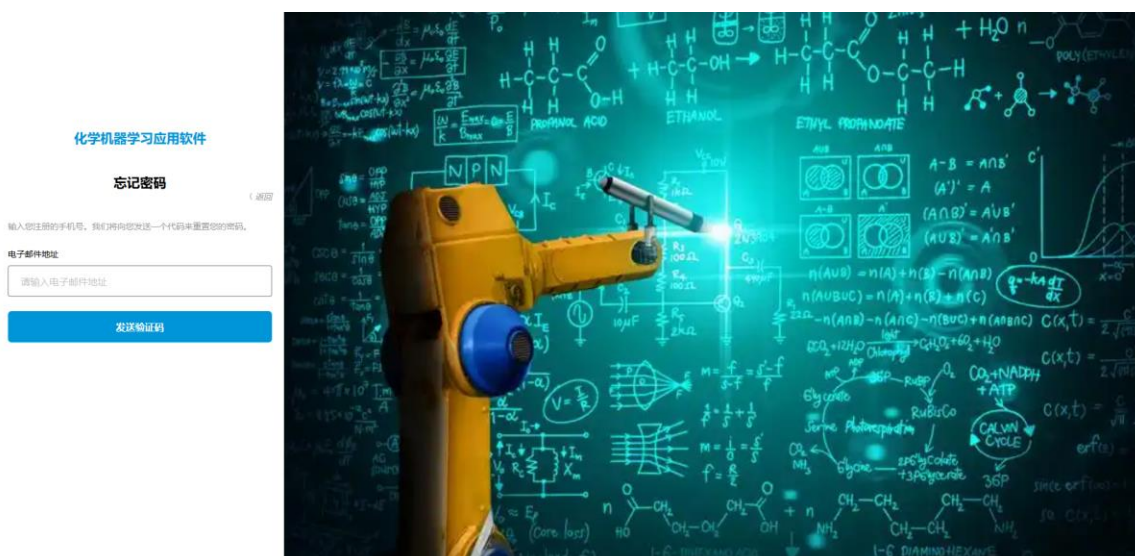
密码输入框：用于输入用户的密码。

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

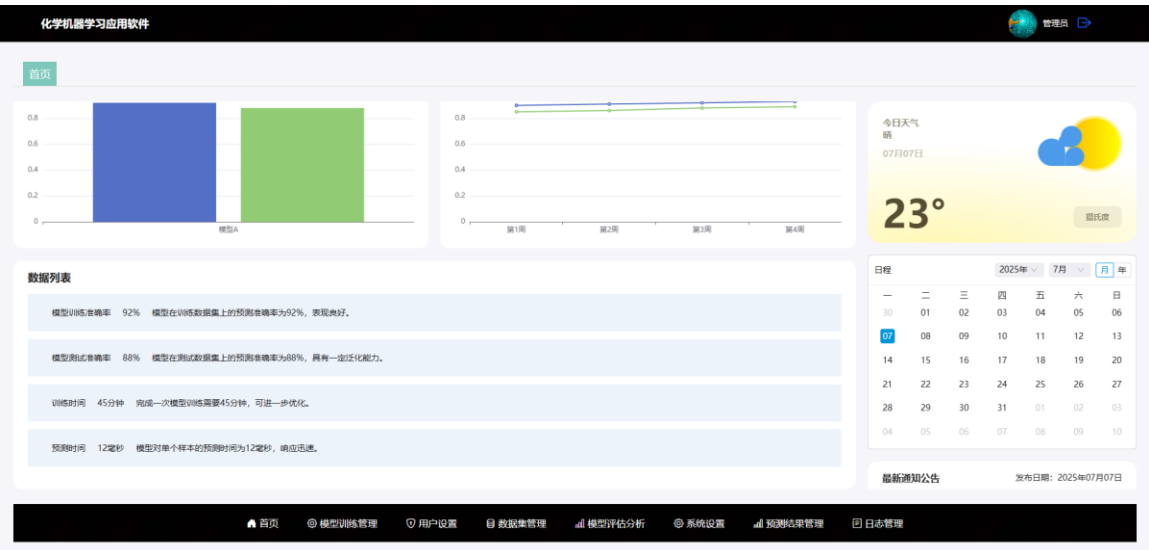
首页主要展示了化学机器学习应用软件的关键数据指标。通过卡片形式直观呈现了模型训练准确率、测试准确率、训练时间和预测时间等重要信息，让用户快速了解模型的基本性能和运行效率。同时，利用柱状图对比了训练准确率和测试准确率，折线图展示了模型更新频率与准确率的变化趋势，帮助用户分析模型的稳定性和改进效果。此外，还通过表格详细列出了多个数据指标的名称、值和描述，方便用户全面查看和了解软件的各项数据情况。



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



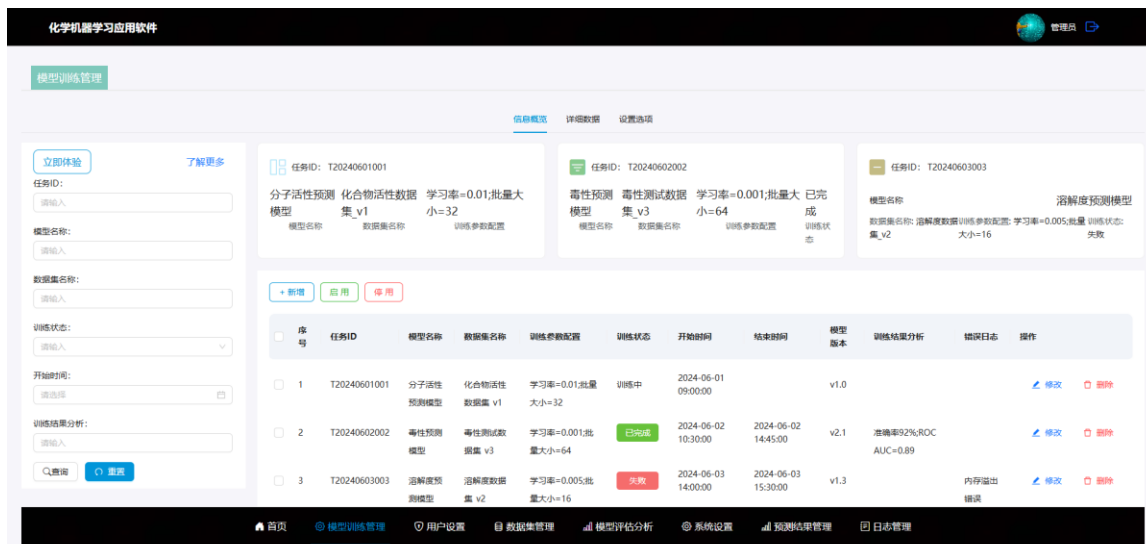
当页面内容过多，无法在当前视窗内完整显示时，您可以尝试滑动页面。这一操作将帮助您逐步浏览隐藏的内容，确保您能够全面、清晰地查看并分析页面中的每一项数据和信息。



模型训练管理

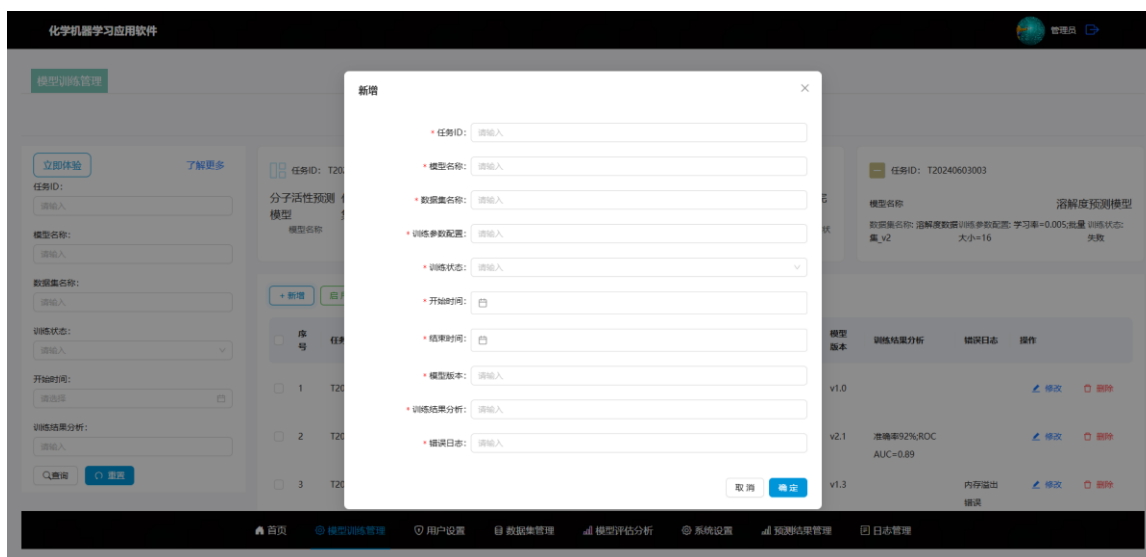
功能描述

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。

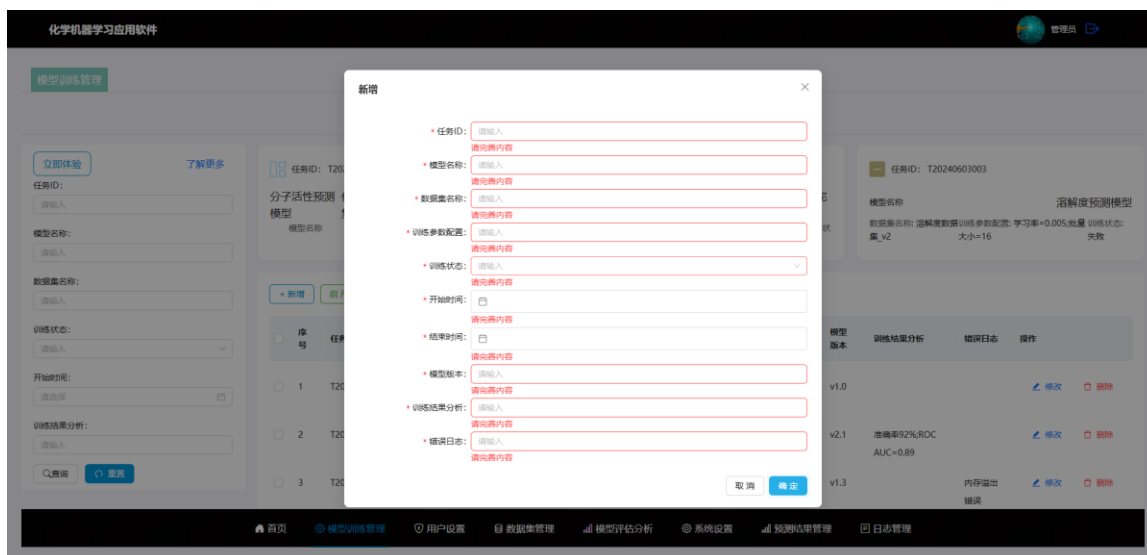


1. 增加

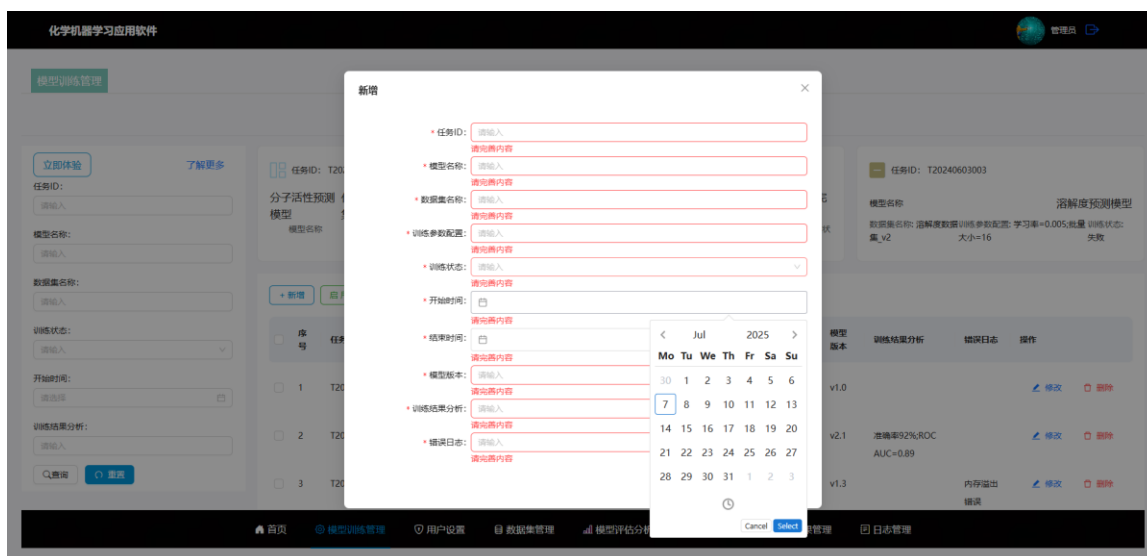
从导航菜单栏转到该功能页面，点击页面内容新增按钮，页面会显示【任务 ID、模型名称、数据集名称】等信息，即可开始录入新的信息或数据，轻松实现信息的增加和管理的便捷化。如图所示



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

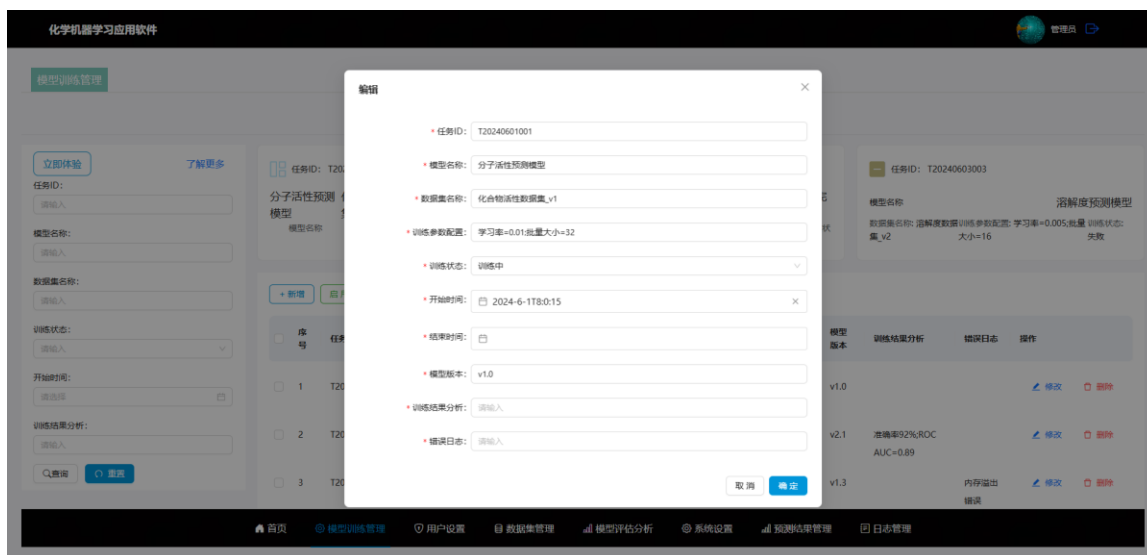


在功能页面的新增信息中，点击表格中时间栏一侧图标，可以根据需求选择相应时间，如图所示

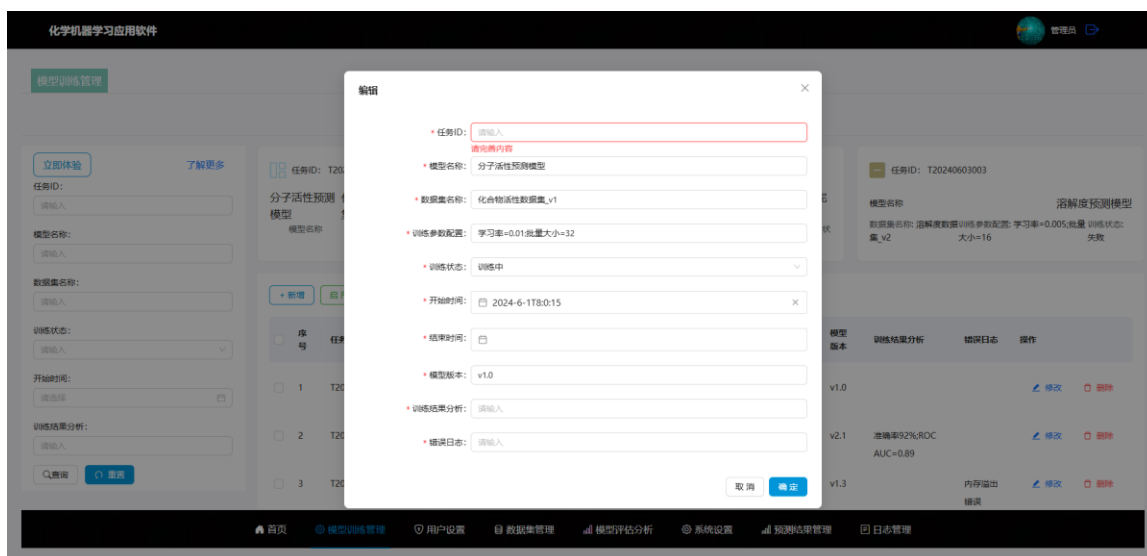


2. 修改

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

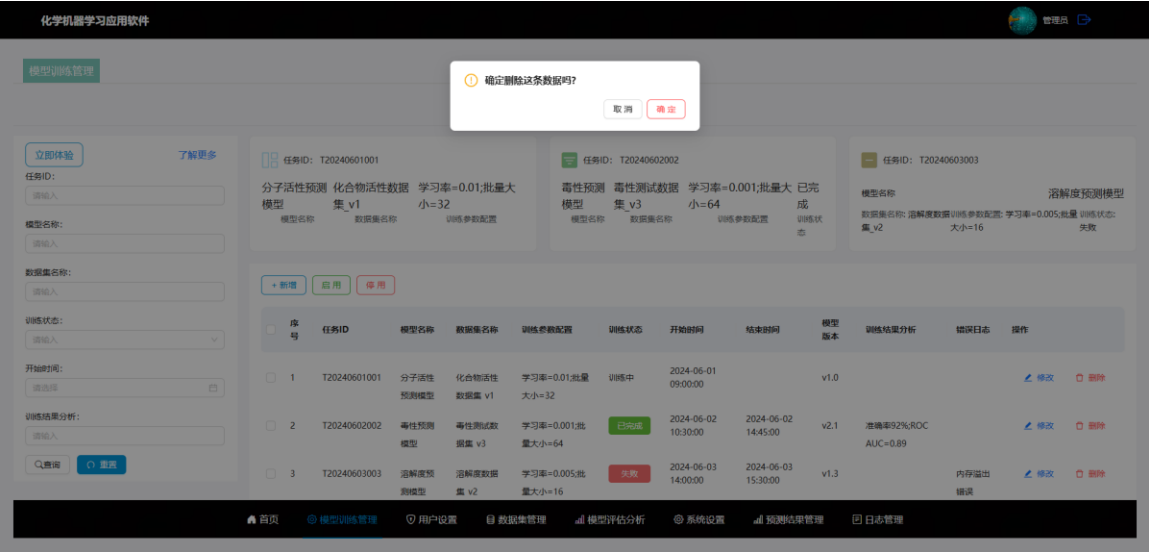


编辑修改信息时带红色星号的栏目是必填项，当必填项出现空缺时，无法进行确定编辑修改操作。如图所示



3. 删除

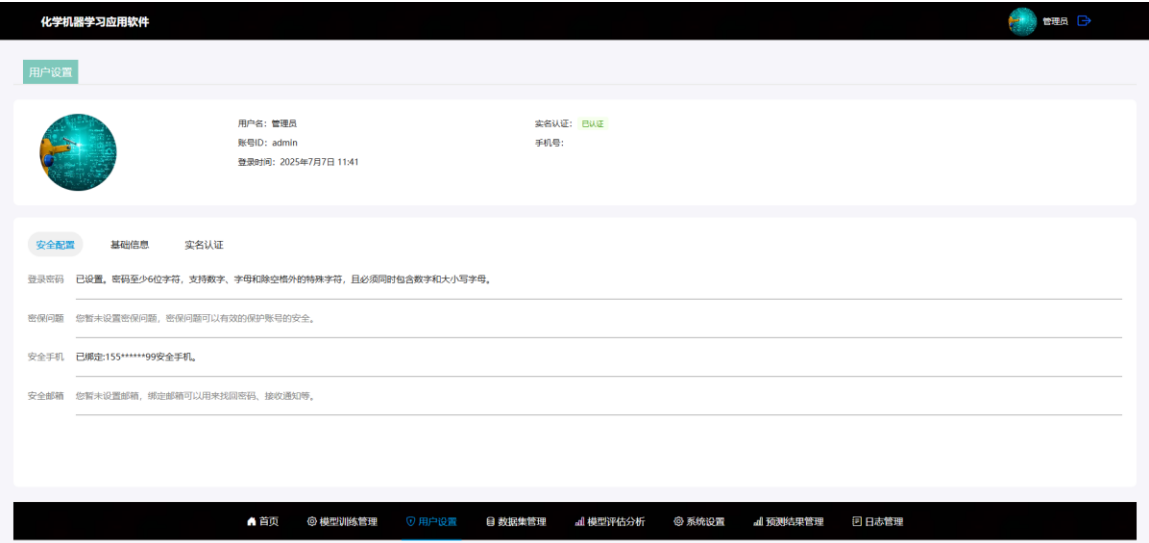
从导航菜单栏转到该功能页面，点击页面内容操作栏删除按键，页面显示是否确定删除提示。如图所示



用户设置

功能描述

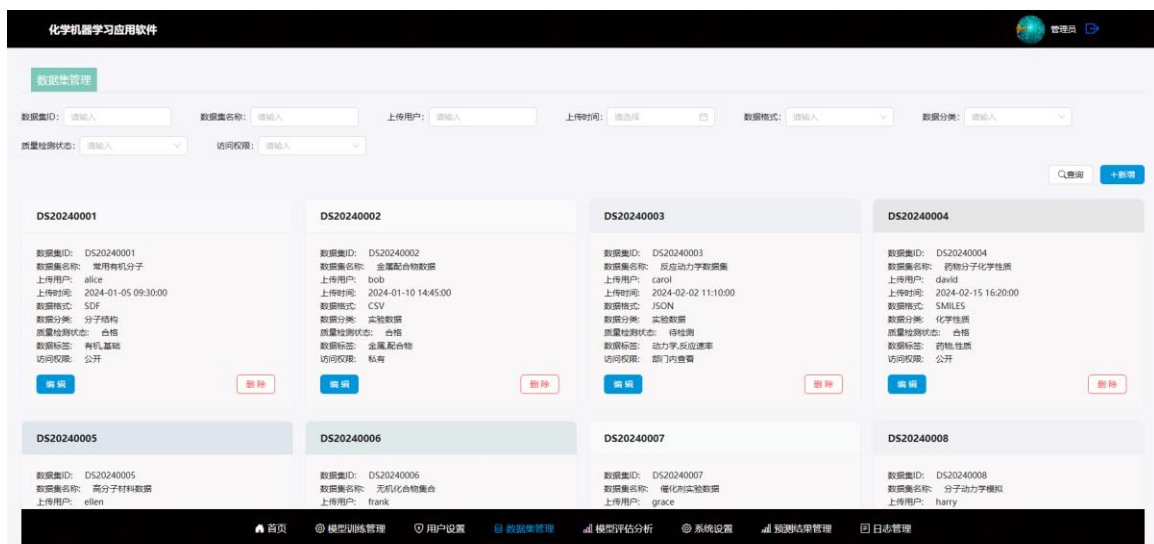
管理用户账号信息与安全配置，展示用户名、账号 ID、登录时间等基础信息，可设置登录密码、密保问题、安全手机等，进行实名认证，保障用户账号安全，适配个性化使用需求。



数据集管理

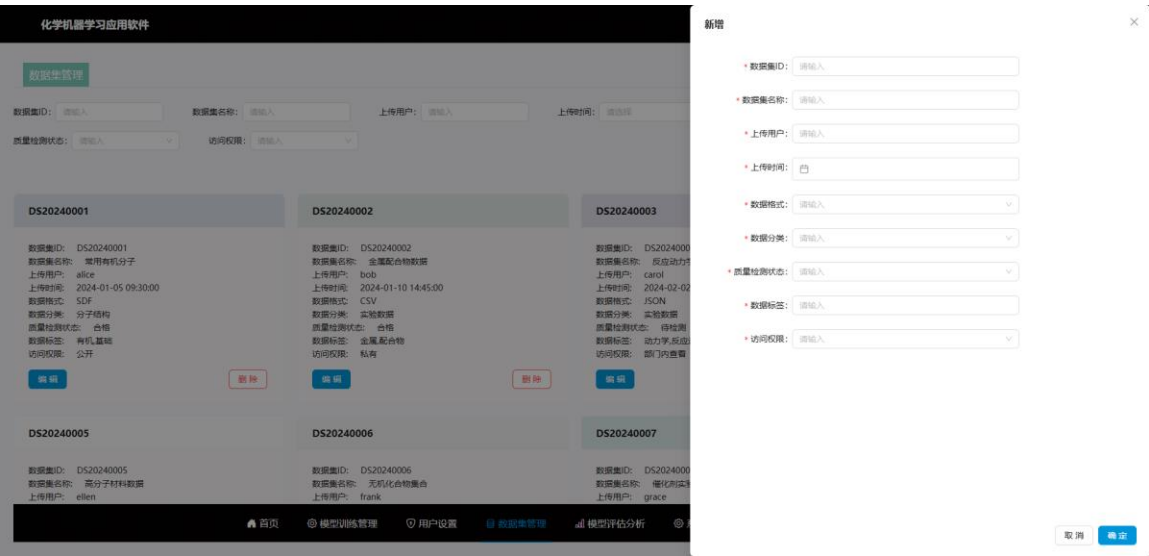
功能描述

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。



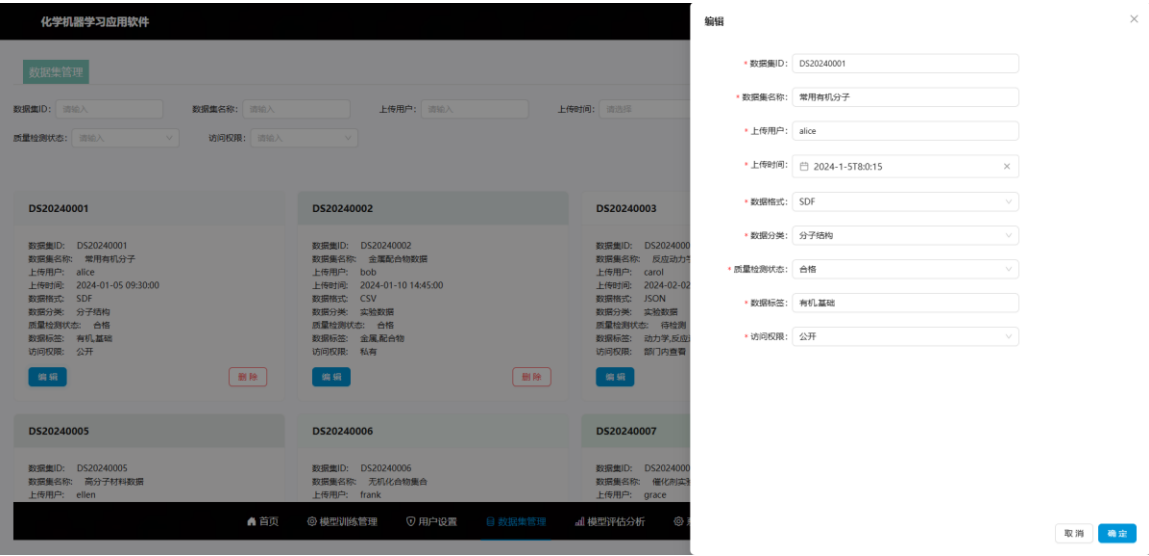
1. 增加

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



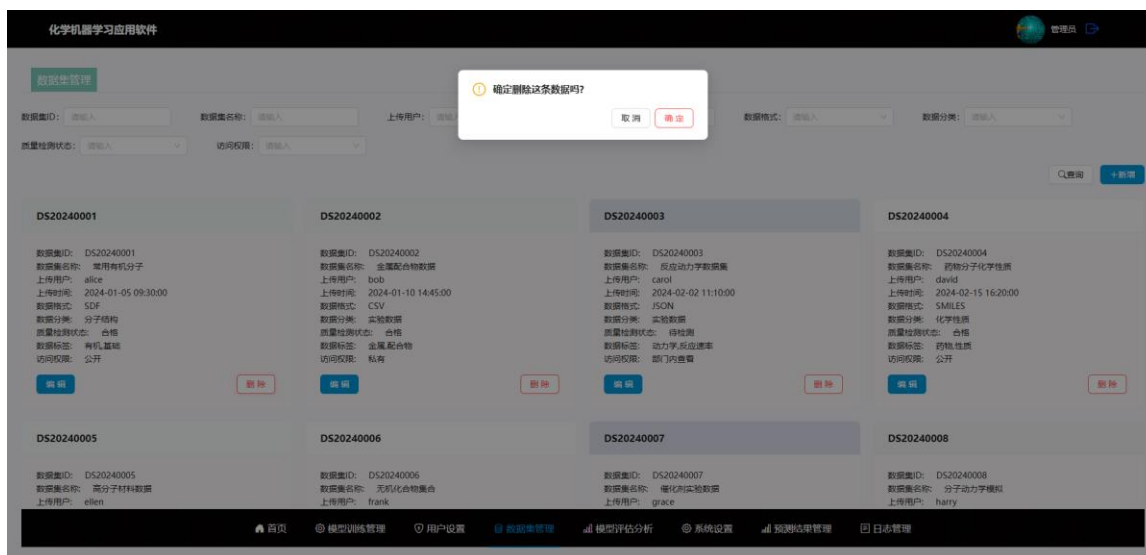
2. 修改

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

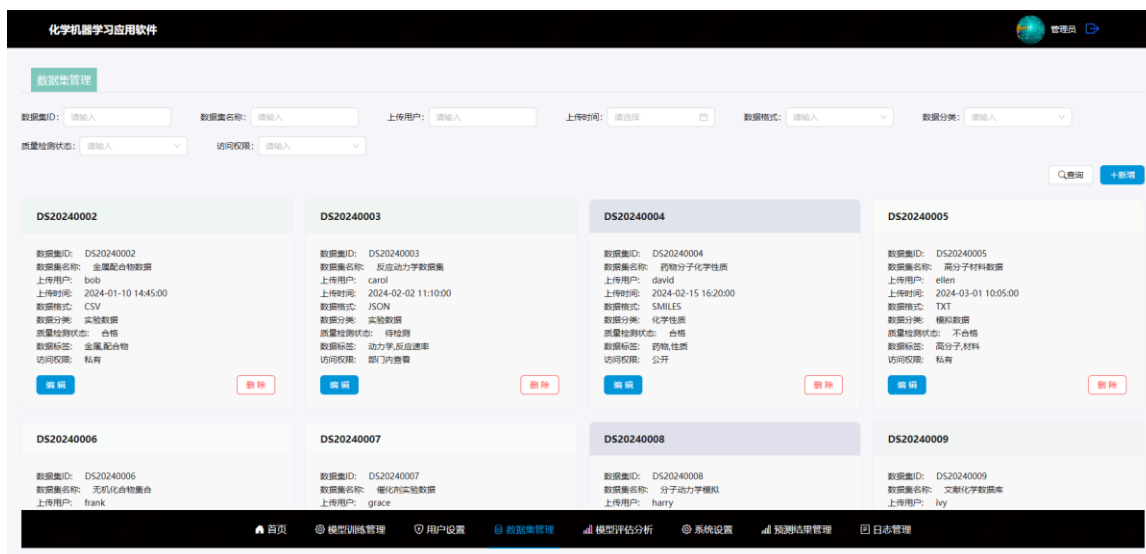


3. 删除

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

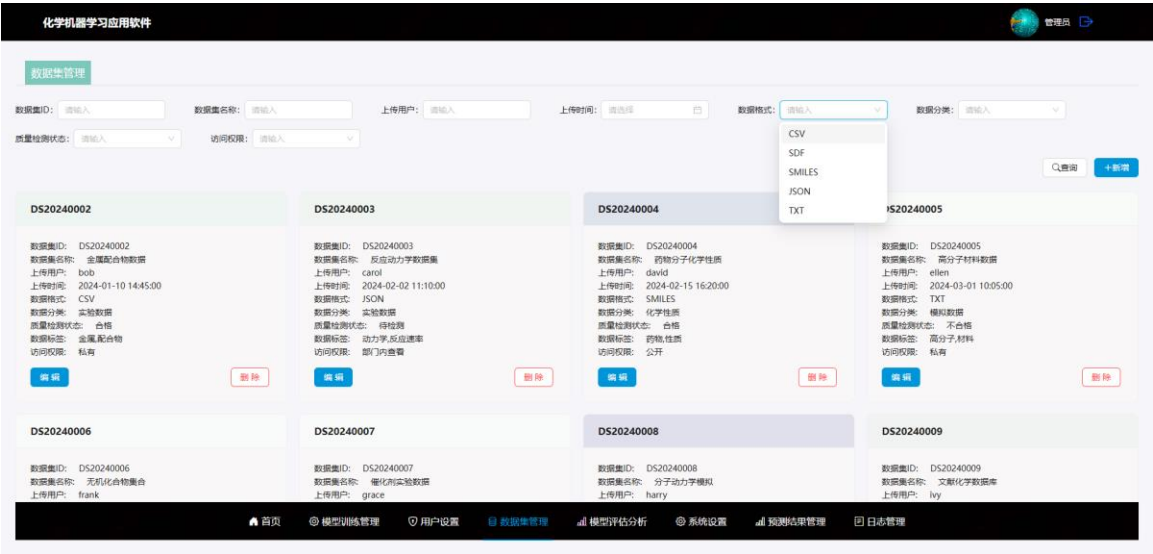


从导航菜单栏转到该功能页面，点击页面内容操作栏删除按键，页面显示是否确定删除提示，点击确定按钮，展示已成功执行删除操作后的页面效果



4. 下拉

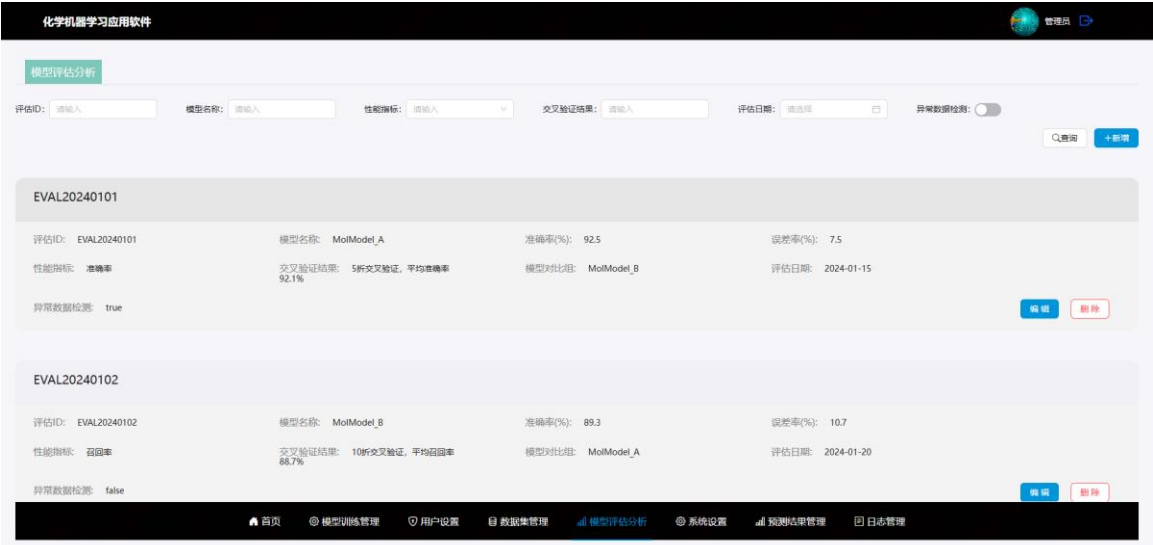
从导航菜单栏转到该功能页面，页面展示内容筛选框中可以点击选择下拉框选项，进行自由灵活筛选。如图所示



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。



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

化学机器学习应用软件

管理员

模型评估分析

新增

评估ID: 请输入

模型名称: 请输入

准确率(%): 请输入

性能指标: 请输入

模型对比组: 请输入

异常数据检测: ☐

误差率(%): 请输入

交叉验证结果: 请输入

评估日期: 请选择

取消

保存

首页

模型训练管理

用户设置

数据集管理

模型评估分析

系统设置

预测结果管理

日志管理

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

化学机器学习应用软件

管理员

模型评估分析

编辑

评估ID: EVAL20240101

模型名称: MolModel_A

准确率(%): 92.5

性能指标: 准确率

模型对比组: MolModel_B

异常数据检测: ☒

误差率(%): 7.5

交叉验证结果: 5折交叉验证, 平均准确率92.1%

评估日期: 2024-01-15

取消

保存

首页

模型训练管理

用户设置

数据集管理

模型评估分析

系统设置

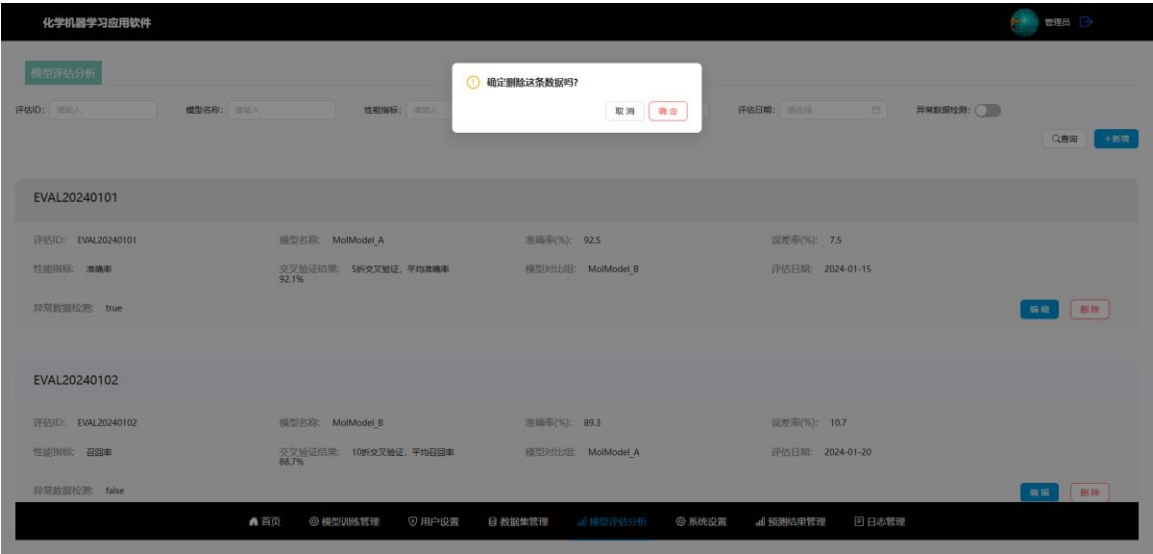
预测结果管理

日志管理

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

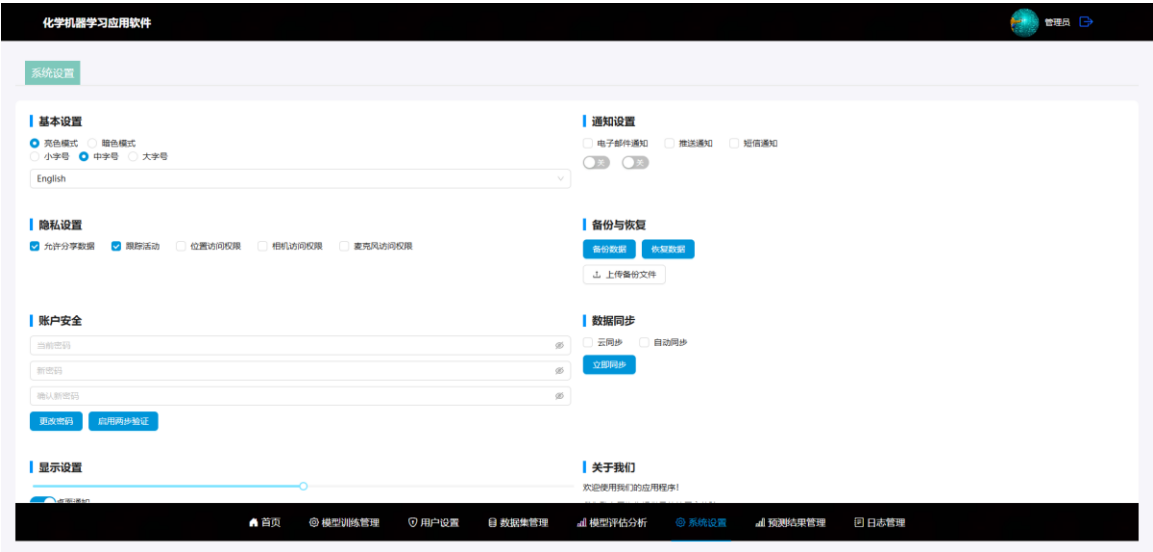
示。如图所示



系统设置

功能描述

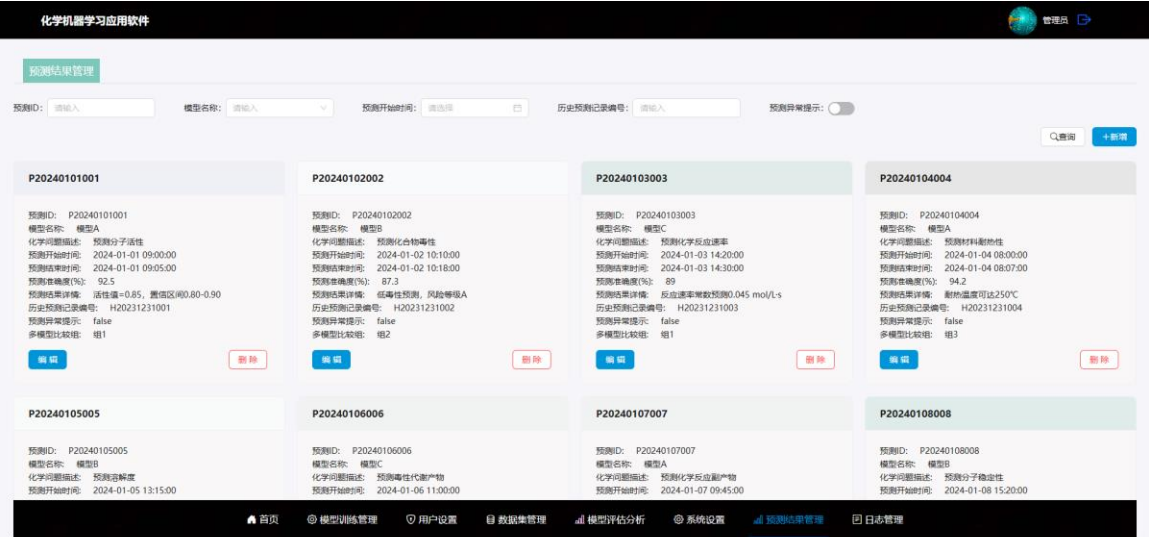
配置软件系统参数，涵盖基本设置（字体、语言）、通知设置（邮件、消息提醒）、隐私设置（权限控制）、用户安全（密码策略）、备份与恢复、数据同步等，保障系统适配业务需求，稳定高效运行。



预测结果管理

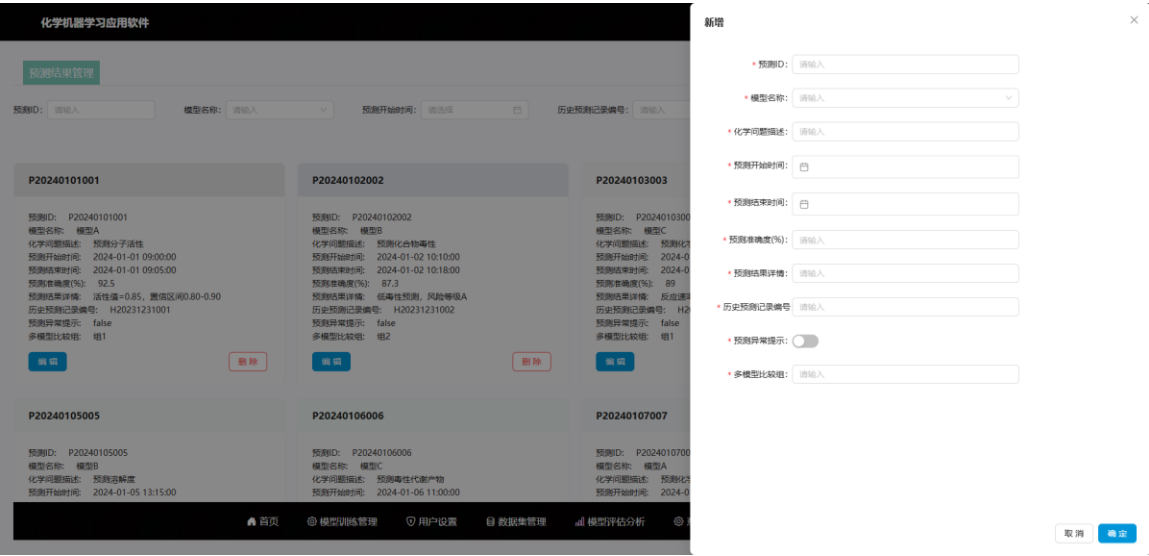
功能描述

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。



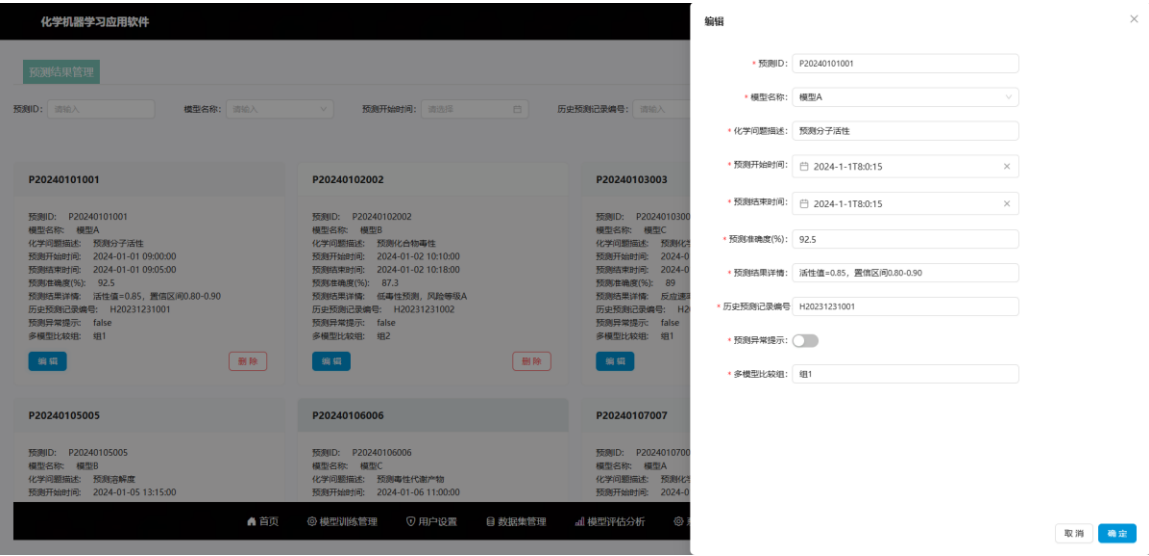
1. 增加

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



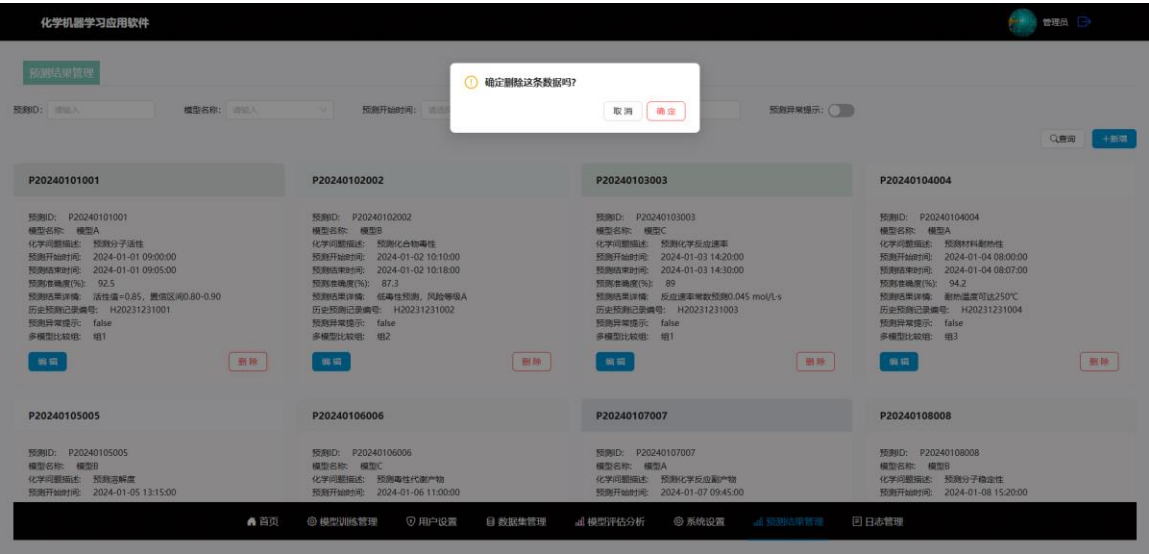
2. 修改

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

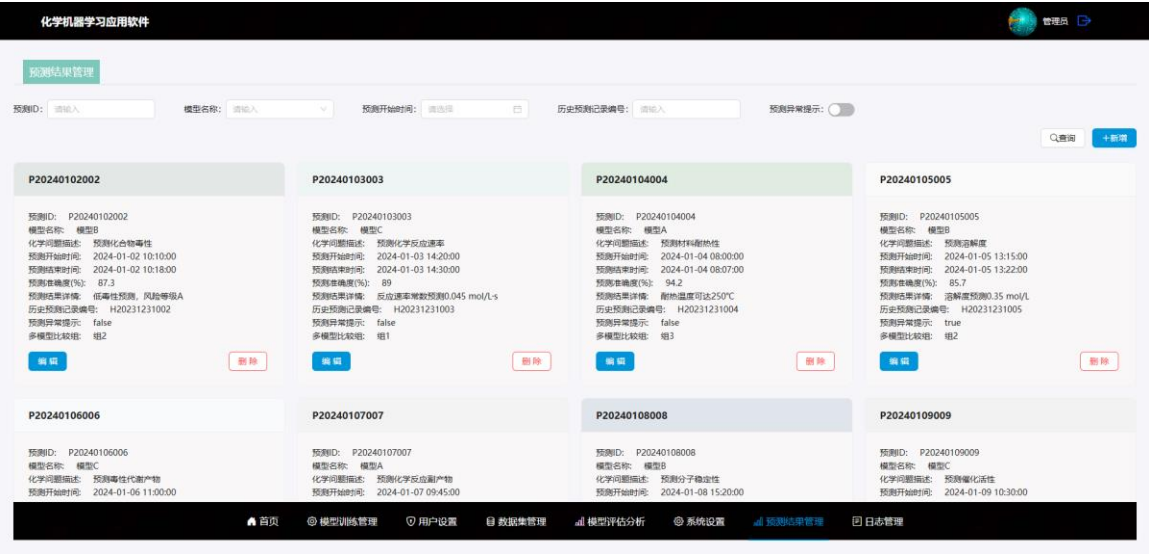


3. 删除

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



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

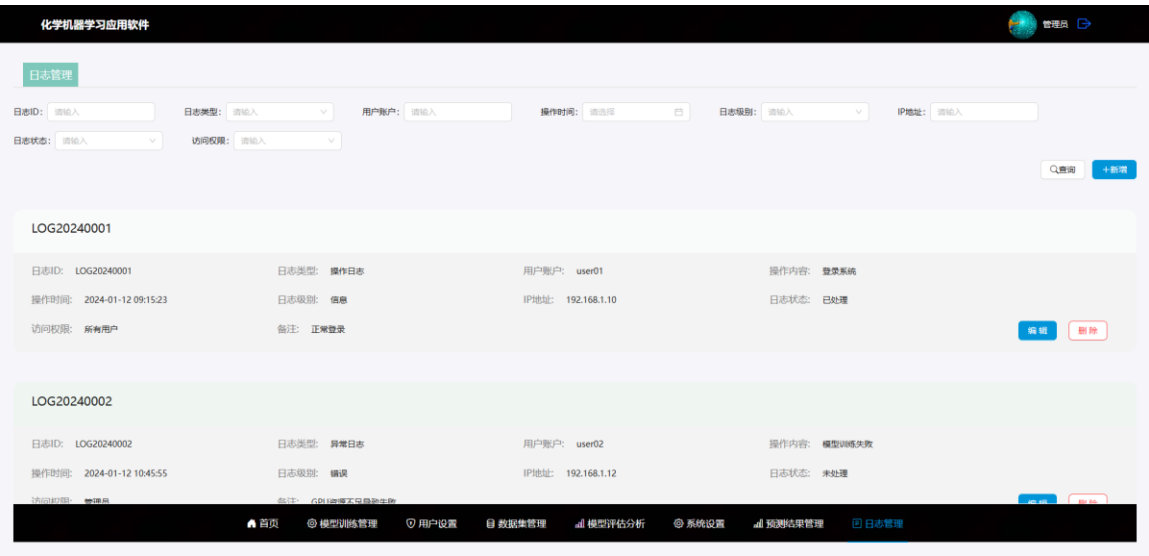


日志管理

功能描述

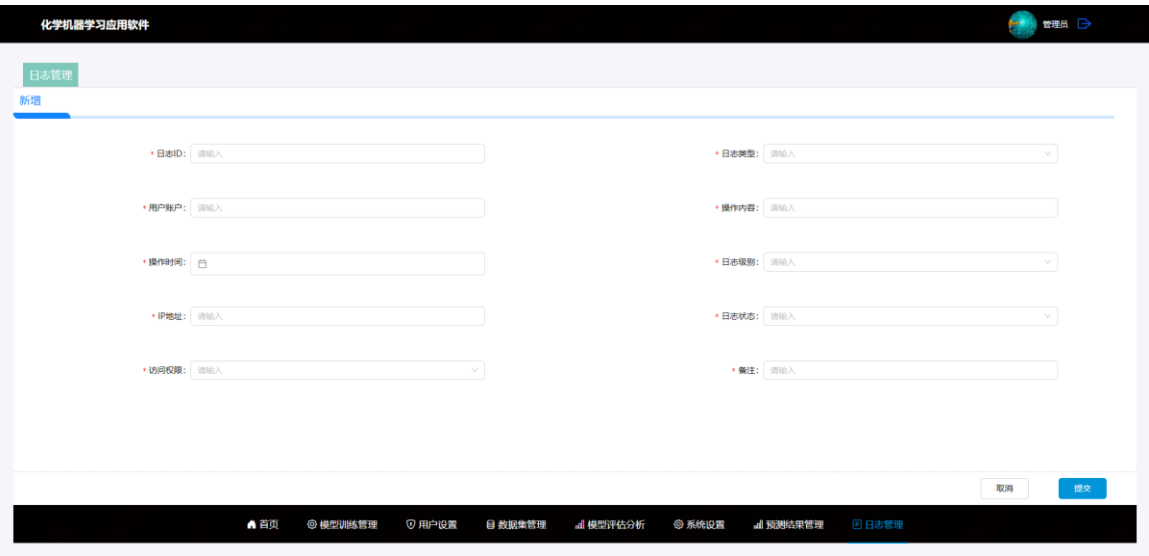
记录软件操作日志，可按日志 ID、类型、用户等筛选。展示操作时间、内容、状态、IP 地址等，支持日志编辑、删除，实现操作行为追溯与审计，保障系统操作合规性与问题排

查。



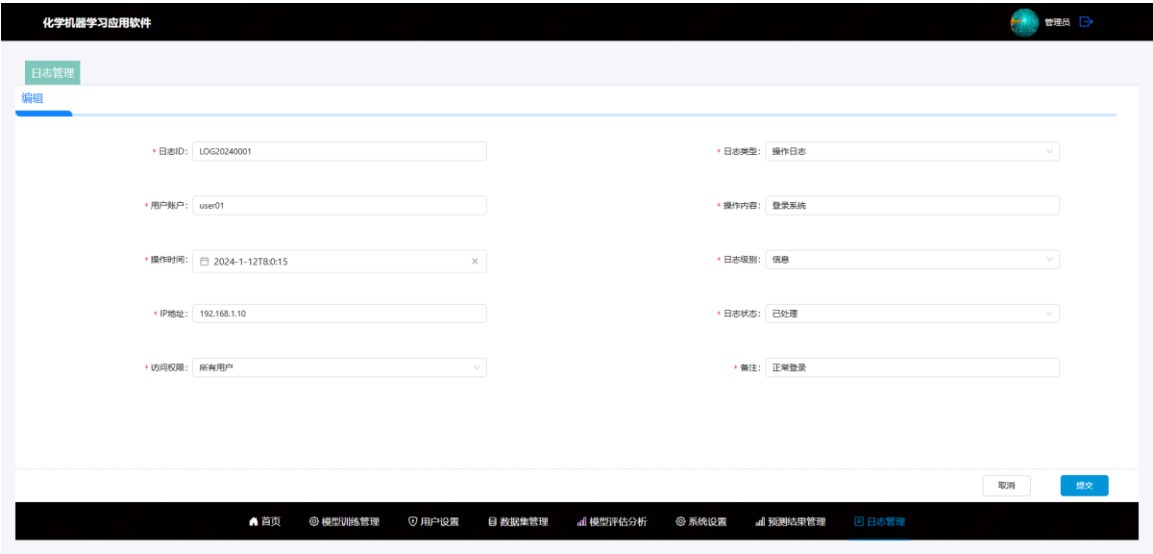
1. 增加

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

