

# 设计说明

## 设计说明

- 功能
- 模型训练参数设置
- 类关系视图

## 功能

- 模型训练参数设置
  - 参数格式检查（类型，范围）
  - 参数导出，导入(\*.json格式)
- 训练过程可视化展示
- 训练结果保存

## 模型训练参数设置

- 训练参数页面，训练指标页面内容根据 `./Ui_window/stdSetting.json` 文件加载
- `stdSetting.json` 文件相关说明

```
1  {
2      "name": {                                #对应参数 name
3          "name": "模型名称",                  #展示给用户的名称，若名称为空则加载参数
4          "help": "",                          #为用户书写的帮助，该参数的用途，规范
5          "type": "str",                       #该参数的类型，此为字符串
6          "value": "metrics"},                #该参数的值 字符串文件路径加括号，空则
7      "params": {                              #对应参数 params 该参数为字典
8          "PRETRAIN_GEN_EPOCHS": {            #子参数名
9              "name": "生成器预训练批次",
10             "help": "",
11             "type": "int",                   #该类型为整数
12             "value": 240},
13         "DIS_FILTER_SIZES": {
14             "name": "判别器池化层过滤器大小",
15             "help": "",
16             "type": "list-int",              #该类行为整数列表
17             "value": [5, 10, 15]},
18         "DIS_L2REG": {
19             "name": "l2范数损失系数",
20             "help": "",
21             "type": "float",                 #该类行为小数/浮点数
```

```

22     "check": "0\\. [0-9]*[1-9]|1", #用于检查参数值的正则表达式 此处筛选范围
    (0, 1]
23     "value": 0.2},
24
25     .....
26     #此处省略可自行添加，页面会自动改变，不得空行
27     #此处类添加参数
28     #必写     "name" 同上
29     #         "help" 同上
30     #         "type" 同上，共五种整数"int" 小数"float" 可为空整数"int
null"
31     #                                     整数列表"list-int" 路径"path"
32     #         "value"
33     #选写 "check" 可使用正则表达式精确限制
34
35
36     "CHK_PATH": {
37         "name": "模型保存路径",
38         "help": "",
39         "type": "path", #该类行为路径/文件/文件夹
40         "value": "./ORGANIC/model/checkpoints/"},
41     "data_set": { #对应参数 data_set
42         "name": "训练数据集",
43         "help": "",
44         "type": "path",
45         "value": "./ORGANIC/data/trainingsets/value_Ki.smi"},
46     "metrics": { #此处子参数为可选指标
47         "validity": {
48             "name": "",
49             "help": "",
50             "recommend": 0, #该指标是否推荐使用 推荐为 1 不推荐为 0
51             "value": null, #该参数建议step
52
53             .....
54             #此处省略可自行添加，页面会自动改变，不得空行，默认为整数
55             #此处类添加参数
56             #必写     "name" "help" "value" "recommend"
57             #选写 "check" 可使用正则表达式精确限制
58
59         "logP": {
60             "name": "",
61             "help": "",
62             "recommend": 1,
63             "value": 5}
64     }

```

### 3. 参数使用前会自动检查类型，

- 如有 "check" 则优先检查 "check"，再检查类型
- 参数检查前会自动去除前后空字符

### 4. 用户可自行加载和保存参数于 ./setting/\*.json 文件，仅包含参数与参数值，不建议自行修改，样例如下：

```

1  {
2      "name": "metrics",
3      "params": {
4          "TRAIN_LOOP": 10,

```

```

5      "PRETRAIN_GEN_EPOCHS": 240,
6      "PRETRAIN_DIS_EPOCHS": 50,
7      "GEN_ITERATIONS": 2,
8      "GEN_BATCH_SIZE": 64,
9      "SEED": null,
10     "DIS_BATCH_SIZE": 64,
11     "DIS_EPOCHS": 3,
12     "EPOCH_SAVES": 20,
13     "GEN_EMB_DIM": 32,
14     "GEN_HIDDEN_DIM": 32,
15     "SAMPLE_NUM": 6400,
16     "BIG_SAMPLE_NUM": null,
17     "LAMBDA": 0.5,
18     "MAX_LENGTH": null,
19     "DIS_EMB_DIM": 64,
20     "DIS_FILTER_SIZES": [
21         5,
22         10,
23         15
24     ],
25     "DIS_NUM_FILTERS": [
26         100,
27         100,
28         100
29     ],
30     "DIS_DROPOUT": 0.75,
31     "DIS_L2REG": 0.2,
32     "START_TOKEN": 0,
33     "CHK_PATH": "./ORGANIC/model/checkpoints/"
34 },
35 "data_set": "./ORGANIC/data/trainingsets/value_ki.smi",
36 "metrics": {
37     "metrics": [
38         "lipinski",
39         "logP"
40     ],
41     "steps": [
42         5,
43         5
44     ]
45 }
46 }

```

## 类关系视图

---

