**代码方面：从可读性、可复用性、速度角度优化。**经过一周的优化，从数据集预处理，预保存；增加缓存机制；优化模型。三个方面，目前已经将原先训练一次需要两三天修改到现在只需要几个小时（以qmof为例）。

**实验方面：**

1. 跑了无机晶体数据集和mof数据集，实验效果是比较好的，这两个数据集分别是无机晶体的形成能属性和qmof的带隙属性，误差比较好.
2. 同时跑了一遍cof的甲烷吸附数据集,第一次的效果不是很好,误差基本上有4-5,比较大,可能是因为卷积的层数设置的比较小,所以出现了欠拟合的情况.
3. 由于有些数据集(甲烷吸附数据集)的cif文件不是元胞而是超胞,因为将晶格重复了数倍,这导致了原子数比较大,所以实验2中甲烷吸附数据只跑了一遍(这一遍甚至没有跑完,因为太费时间了).**本周六写好了将cif文件从超胞还原为元胞的代码**,运行了大概一天已经将这些数据转换为元胞了.
4. 周日运行了两个实验,一个是无机晶体数据集,感觉性能有所提升(多跑几个实验观察一下结果);另一个是甲烷吸附数据集,修改一下卷积层数再跑一边(数据缩小了,跑起来应该会快很多)

**理论方面:**

1. 本周看了一些**图对比学习**方面的理论,准备从**数据增强**的角度采用图对比学习来训练一个编码器.**数据增强**准备采用动力学的方式,使用力场扰动晶体产生多个数据.
2. 拓扑神经网络,还在思考如何将COFs或者是MOFs的拓扑结构引入到消息传递框架里面..这块目前的经验还不足.