Framework

│ acquisition\_function\_tot.py

│ gen\_test\_init\_train.py

│ framework.docx

│

├─target\_property

│ ├─target\_property\_v1\_sep

│ │ cut\_and\_pred\_target\_property\_sep.py

│ │ main.py

│ │ test\_index.py

│ │

│ ├─target\_property\_v1\_sep\_batch

│ │ cut\_and\_pred\_target\_property\_batch\_diversity\_sep.py

│ │ main.py

│ │ test\_index.py

│ │

│ ├─target\_property\_v2\_sep

│ │ cut\_and\_pred\_target\_property\_sep.py

│ │ main.py

│ │ test\_index.py

│ │

│ └─target\_property\_v2\_sep\_batch

│ cut\_and\_pred\_target\_property\_batch\_diversity\_sep.py

│ main.py

│ test\_index.py

│

├─uncertainty

│ ├─pure\_uncertainty\_20000

│ │ cut\_and\_pred.py

│ │ main.py

│ │ test\_index.py

│ │

│ ├─similarity

│ │ A\_score\_cal.py

│ │ cut\_and\_pred\_target\_property.py

│ │ main.py

│ │ test\_index.py

│ │

│ ├─substructure

│ │ cut\_and\_pred\_sub.py

│ │ main.py

│ │ test\_index.py

│ │

│ └─threhold\_test

│ ├─5\_02

│ │ cut\_and\_pred\_batch\_diversity.py

│ │ main.py

│ │ test\_index.py

│ │

│ ├─5\_04

│ │ cut\_and\_pred\_batch\_diversity.py

│ │ main.py

│ │ test\_index.py

│ │

│ ├─5\_06

│ │ cut\_and\_pred\_batch\_diversity.py

│ │ main.py

│ │ test\_index.py

│ │

│ └─5\_08

│ cut\_and\_pred\_batch\_diversity.py

│ main.py

│ test\_index.py

│

└─uncertainty\_target

├─expected\_impovement

│ ├─expected\_impovement\_001

│ │ cut\_and\_pred\_expected\_improvement.py

│ │ main.py

│ │ test\_index.py

│ │

│ ├─expected\_impovement\_003

│ │ cut\_and\_pred\_expected\_improvement.py

│ │ main.py

│ │ test\_index.py

│ │

│ └─expected\_impovement\_005

│ cut\_and\_pred\_expected\_improvement.py

│ main.py

│ test\_index.py

│

├─synthesizability

│ ├─synthesizability\_v1

│ │ ├─uncertainty\_1\_target\_7\_batch

│ │ │ cut\_and\_pred\_batch\_diversity.py

│ │ │ cut\_and\_pred\_target\_property.py

│ │ │ main.py

│ │ │ test\_index.py

│ │ │

│ │ ├─uncertainty\_2\_target\_6\_batch

│ │ │ cut\_and\_pred\_batch\_diversity.py

│ │ │ cut\_and\_pred\_target\_property.py

│ │ │ main.py

│ │ │ test\_index.py

│ │ │

│ │ ├─uncertainty\_4\_target\_4\_batch

│ │ │ cut\_and\_pred\_batch\_diversity.py

│ │ │ cut\_and\_pred\_target\_property.py

│ │ │ main.py

│ │ │ test\_index.py

│ │ │

│ │ └─uncertainty\_target\_batch

│ │ cut\_and\_pred\_target\_batch\_diversity.py

│ │ main.py

│ │ test\_index.py

│ │

│ └─synthesizability\_v2

│ ├─uncertainty\_1\_target\_7\_batch

│ │ cut\_and\_pred\_batch\_diversity.py

│ │ cut\_and\_pred\_target\_property.py

│ │ main.py

│ │ test\_index.py

│ │

│ ├─uncertainty\_2\_target\_6\_batch

│ │ cut\_and\_pred\_batch\_diversity.py

│ │ cut\_and\_pred\_target\_property.py

│ │ main.py

│ │ test\_index.py

│ │

│ ├─uncertainty\_4\_target\_4\_batch

│ │ cut\_and\_pred\_batch\_diversity.py

│ │ cut\_and\_pred\_target\_property.py

│ │ main.py

│ │ test\_index.py

│ │

│ └─uncertainty\_target\_batch

│ cut\_and\_pred\_target\_batch\_diversity.py

│ main.py

│ test\_index.py

│

├─uncertainty\_target\_average\_combination\_batch\_diversity

│ cut\_and\_pred\_target\_property.py

│ main.py

│ test\_index.py

│

├─uncertainty\_target\_discrete\_combination\_batch\_diversity

│ ├─uncertainty\_1\_target\_7\_batch

│ │ cut\_and\_pred\_batch\_diversity.py

│ │ cut\_and\_pred\_target\_property.py

│ │ main.py

│ │ test\_index.py

│ │

│ ├─uncertainty\_2\_target\_6\_batch

│ │ cut\_and\_pred\_batch\_diversity.py

│ │ cut\_and\_pred\_target\_property.py

│ │ main.py

│ │ test\_index.py

│ │

│ └─uncertainty\_4\_target\_4\_batch

│ cut\_and\_pred\_batch\_diversity.py

│ cut\_and\_pred\_target\_property.py

│ main.py

│ test\_index.py

│

└─uncertainty\_target\_discrete\_combination\_nobatch\_diversity

└─uncertainty\_nobatch\_target\_batch

├─nobatch1\_batch7

│ cut\_and\_pred\_target\_property.py

│ main.py

│ test\_index.py

│

├─nobatch2\_batch6

│ cut\_and\_pred\_target\_property.py

│ main.py

│ test\_index.py

│

└─nobatch4\_batch4

cut\_and\_pred\_target\_property.py

main.py

test\_index.py