Jupter虚拟环境更换kernel

pip install jupyter

pip install ipykernel

python -m ipykernel install --user --name=rgpe

autogluon虚拟环境

cd Desktop\autogulon\autogulon\Scripts

activate

pip install -i https://pypi.tuna.tsinghua.edu.cn/simple seaborn

pip install seaborn

Linux普通操作

Cd .. 返回上级目录 cd \ 返回根目录 cd home/dachuang2022

cd ~ 返回用户主目录

Ctrl + d 退出解释器

* Ls 列出当前文件夹
* Rm 删除，删除文件夹rm -r
* Cd 进入文件
  + Cd .. ：cd出去
* 运行pucharm
  + cd pycharm-community-2023.1.3
  + cd bin
  + ./pycharm.sh

本地和终端传输文件： rz和sz

进入虚拟环境

source activate

conda deactivate

conda activate oer

conda env list

文件改名

mv oer oer1

oer优化

conda activate oer

Oer 把 train.py里的.cuda（）都删掉

rm -r oer

rm -r oer.zip

rz

unzip oer.zip

cd oer

cd ..

rm -r oer.zip

zip -r oer.zip oer

sz oer.zip

mkdir result

mv recommend\_compRu0.7.pkl.csv result/

mv recommend\_compRu0.8.pkl.csv result/

mv recommend\_compRu0.9.pkl.csv result/

zip -r result.zip result

sz result.zip

原始迁移代码复现尝试

conda activate rgpe

/home/dachuang2022/transfer-hpo-framework-main/scripts/generate\_commands.py

运行脚本文件

/1/send\_folder.sh

Transfer 虚拟环境配置

conda create --name transfer

pip install emukit==0.4.9

pip install numpy==1.22.4

pip install pandas==2.0.0

pip install GPy==1.10.0

pip install matplotlib==3.5.3

conda install -c conda-forge/label/cf201901 pydoe==0.3.8

pip install -i https://pypi.tuna.tsinghua.edu.cn/simple matplotlib==3.5.3

运行pycharm

cd aryl-linux/1

cd 1

./run\_pycharm.sh

### chmod +x run\_pycharm.sh

合金数据迁移

运行transfer-bo-single-linux.py

source activate

conda activate transfer

cd aryl-linux

python transfer-bo-single-linux.py --num 2 --maxiter 80

运行合金数据代码

cd alloy-a

python base\_model.py --var 0.1

传输文件

cd 1

./send\_folder.sh

合金数据plan-b添加描述符代码 运行

python add-matminer.py --comp\_mode auto --comp\_dims 0.98 --exp\_mode auto --exp\_dims 0.95 --store

-exp\_mode assigned --exp\_dims 3

合金虚拟数据迁移— 7.8w个

195.3万个格点

source activate

conda activate transfer

rm -r plan-b-linux

rm -r plan-b-linux.zip

rz

unzip plan-b-linux.zip

cd plan-b-linux2

python gene\_data.py

python standard-bo.py --bs 1 --top 1 --num\_restarts 3 --maxiter 50 --n\_loop 10 --num\_x\_init 3

--------------------------------------------- Fe Co Ni others base\_model\_1

python transfer-bo-sing.py --model\_name 'base\_model\_1' --bs 1 --top 1 --num\_restarts 3 --maxiter 50 --n\_loop 10 --num\_x\_init 3

python transfer-bo-mult.py --bs 1 --top 1 --num\_restarts 3 --maxiter 50 --n\_loop 10 --num\_x\_init 3

cd ..

rm -r plan-b-linux.zip

zip -r plan-b-linux.zip plan-b-linux

sz plan-b-linux.zip

钙钛矿虚拟数据迁移---4.6w

unzip perov-linux.zip

source activate

conda activate transfer

cd perov-linux

python standard-bo.py --num\_restarts 5 --maxiter 150 --n\_loop 20

python standard-bo.py --num\_restarts 5 --maxiter 150 --n\_loop 20--------61min58s

python standard-bo.py --num\_restarts 10 --maxiter 100 --n\_loop 1,--------2min36s

python standard-bo.py --num\_restarts 5 --maxiter 100 --n\_loop 1,--------1min28s

python standard-bo.py --num\_restarts 5 --maxiter 150 --n\_loop 1,--------3min01s

python standard-bo.py --num\_restarts 5 --maxiter 150 --n\_loop 2 --------5min42s

python transfer-bo-NLCB.py --num\_restarts 5 --maxiter 150 --n\_loop 20

python transfer-bo-NLCB.py --num\_restarts 5 --maxiter 150 --n\_loop 20 --------88min37s

zip -r perov-linux.zip perov-linux