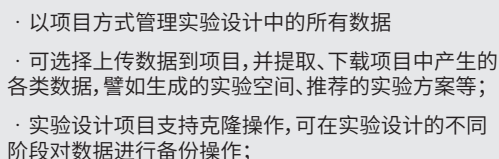


► 实验项目的管理

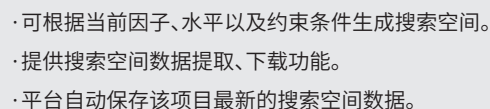


- 支持从头开始的实验设计。
- 提供包括因子、水平、约束条件设定, 响应设定以及实验空间生成在内的初始化操作工具。

- 支持包括连续型、非连续型数值以及分类型三种不同类型因子水平设置。
- 支持通过拷贝Excel表格数据的方式完成输入。
- 支持因子属性设定。
- 支持迭代过程中,关于因子、水平、约束条件的调整,并可根据调整后的实验空间,继续进行实验设计,不影响使用已产生的实验数据构建因子与响应的关系。



- 支持对因子水平、属性间的关系进行约束。
- 支持包括加和值、比例关系、大小关系以及可否为0等四种约束条件。
- 多个约束条件间可以同时存在, 提供“与”、“或”两种逻辑关系。



序例	base	ligand	solvent	concentration
1	K2Mg	Jac-Sn(Ph) ₃	DMAc	0.057
2	K2Mg	Jac-Sn(Ph) ₃	DMAc	0.1
3	K2Mg	Jac-Sn(Ph) ₃	DMAc	0.153
4	K2Mg	Jac-Sn(Ph) ₃	BuCN	0.057
5	K2Mg	Jac-Sn(Ph) ₃	BuCN	0.1
6	K2Mg	Jac-Sn(Ph) ₃	BuCN	0.153
7	K2Mg	Jac-Sn(Ph) ₃	p-ylorane	0.057
8	K2Mg	Jac-Sn(Ph) ₃	p-ylorane	0.1

► 响应设置

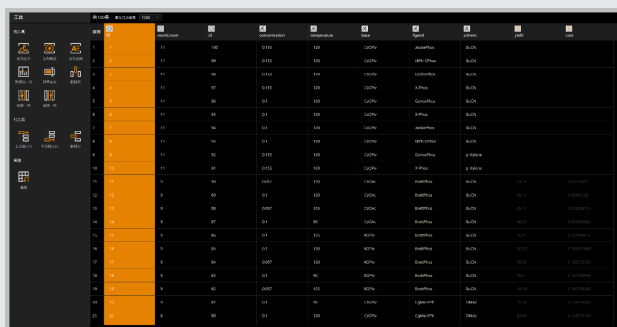
·支持响应优化目标(最大化或者最小化)以及具体的取值上下限(可选)设置。

► 提交实验设计

- 实验设计任务默认提交到远程服务器进行。
- 支持Centroidal Voronoi Tessellation采样(CVT),拉丁超立方采样(LHS),随机采样(seed)三种方式生成初始实验方案。
- 可以设定每轮推荐试验方案的数目。
- 推荐实验方案以及已完成的实验会显示在“实验数据”数据框中。

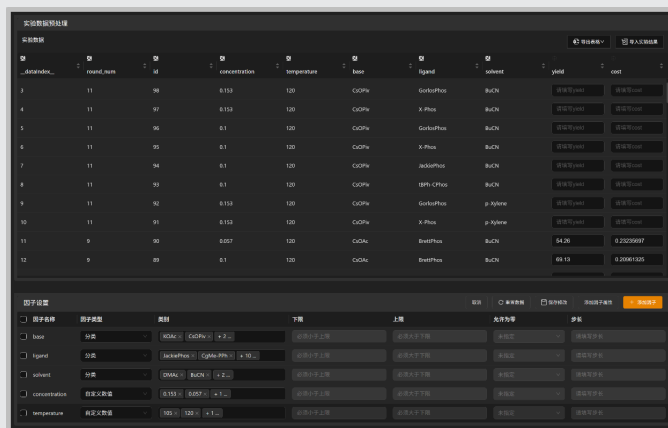
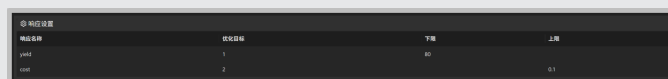
► 已有实验数据的实验设计

- 支持基于已有实验数据的实验设计。
- 可将已有的实验数据上传至平台,并以此为基础进行更优方案的搜索和推荐。
- 提供表格编辑工具,可对上传表格中的数据进行设置和调整。



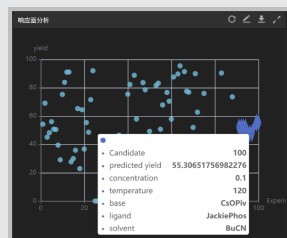
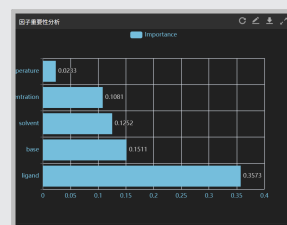
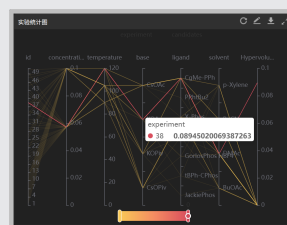
► 实验数据可视化分析

- 提供实验统计图,因子重要性图,响应面分析图以及因子相关性图辅助数据分析。
- 实验统计图展示推荐方案(预测值)以及实验数据与响应优化目标的关系。
- 因子重要性图基于已有实验数据展示各个因子与响应的关系。
- 响应面分析图显示已有的实验值以及当前推荐实验方案的预测值和置信区间。
- 因子相关性图根据已做实验以及当前推荐方案中因子的取值分析因子间的相关性。



► 自定义样本空间的实验设计

- 支持基于自定义实验空间的实验设计。
- 可将已有的搜索空间数据上传至平台,并以此为基础进行实验方案的推荐。
- 提供表格编辑工具,可对上传表格中的数据进行设置和调整。



北京市海淀区花园北路25号, epark (花园路社区) 1号楼6层O-1-603
电话: 010-82676188

江苏省苏州市工业园区东长路88号2.5产业园A2栋301室
电话: 0512-67509707

创腾官网: www.neotrident.com
创腾邮箱: market@neotrident.com

