

# 多粒度材料描述符管 理系统

V1.0

用户操作手册

文档编号：审批编号 2024-R0198

最后修订日期：2024 年 5 月 20 日

版权所有 2024-。保留所有权利。

本文档中所提到的其他所有公司和产品名，均是其所有人的商标或者注册商标。

本文档内容如有变动，恕不另行通知。

# 目录

关于本文档 .....	1
<b>第 1 章 软件概述 .....</b>	<b>2</b>
1.1 模块介绍 .....	2
1.2 用户层级、角色与相应权限 .....	3
1.3 登录界面 .....	4
1.4 主界面和导航栏 .....	4
<b>第 2 章 系统管理与导航 .....</b>	<b>5</b>
2.1 首页介绍 .....	5
2.2 描述符树构建导航 .....	5
2.3 描述符选取导航 .....	6
2.4 系统管理 .....	7
<b>第 3 章 描述符树构建 .....</b>	<b>8</b>
3.1 描述符树新建 .....	8
3.2 描述符树修改 .....	9
3.3 描述符树融合 .....	11
3.4 描述符树冗余消除 .....	11
<b>第 4 章 描述符选取 .....</b>	<b>15</b>
4.1 描述符重要度计算 .....	15
4.2 描述符重要度可视化 .....	16
4.3 描述符分类选取 .....	17
4.4 机器学习样本模板下载 .....	18

## 关于本文档

### 主题

欢迎使用多粒度材料描述符管理系统的用户操作手册，该手册包含了需要了解和使用多粒度材料描述符管理系统的相关知识。

本文档包含了如下章节：

- 第 1 章 软件概述
- 第 2 章 系统管理与导航
- 第 3 章 描述符树构建
- 第 4 章 描述符选取

序言中介绍了使用该文档的一些帮助信息。

### 读者

使用多粒度材料描述符管理系统的最终用户和系统管理员。

# 第 1 章 软件概述

## 本章概述

本章介绍了多粒度材料描述符管理系统的功能和操作界面特点。

## 内容

主题	页码
模块介绍	2
用户层级、角色与相应权限	3
登录界面	3
主界面和导航栏	4

## 1.1 模块介绍

材料描述符是用于描述复杂材料现象的简单标度，是驱动机器学习模型精准挖掘材料构效关系的关键。然而，受限于针对一种材料特性的描述符定义杂、来源异等特点，不便于直接应用于系统存储，且在构建、可视化、融合、冗余消除及描述符选取各个阶段上缺乏可用的算法程序，尚没有形成方便、快捷的工具来实现流程上的自动化。为了高效管理描述符并实现选取描述符自动化，我们研发了多粒度材料描述符管理系统，旨在以树形结构实现多源异构描述符粗粒度至细粒度分化及存储管理，其主要功能有：描述符树的构建（包含新建、修改、融合和冗余消除）和描述符的选取（包含描述符重要度计算、描述符重要度可视化、描述符分类选取以及机器学习样本模版下载），以辅助材料专家为基于机器学习的材料性能预测任务选择合适的描述符。该平台基于 B/S 架构，前端采用 Vue2 开发，使用 webpack 打包，后端基于 SpringBoot 开发，在系统管理模块使用 MySQL 作为数据库，在描述符树构建、描述符选取模块使用 MongoDB 作为数据库，在冗余消除和描述符重要度计算上基于 flask 框架实现算法；使用 antvG6 图形渲染引擎作为技术框架将抽象的描述符树可视化；

具体来说，多粒度材料描述符管理系统设计与实现了如图 1-1 所示的导航管理、描述符树构建、描述符选取这三大模块。

### 1. 系统管理与导航

此模块包括系统管理和导航功能，

- (1) 系统管理：包括平台管理、用户管理、用户信息、系统日志、菜单管理、操作管理，对系统运行维护可各类模块进行查看管理。
- (2) 首页介绍：系统的开始页面，应有系统所有模块的介绍，以供用户查阅使用。
- (3) 描述符树构建导航：涵盖描述符树构建全流程的导航及介绍
- (4) 描述符选取导航：涵盖描述符选取构建全流程的导航及介绍

包括描述符重要度计算、描述符分类选取、机器学习模板生成，为基于重要度的描述符选取方法提供自动化工具。

### 2. 描述符树构建

包括单描述符树构建、描述符树修改、描述符树融合和描述符树冗余消除，为描述符树构建方法提供自动化工具。

### 3. 描述符选取

包括描述符重要度计算、描述符分类选取、机器学习模板生成，为基于重要度的描述符选取方法提供自动化工具。

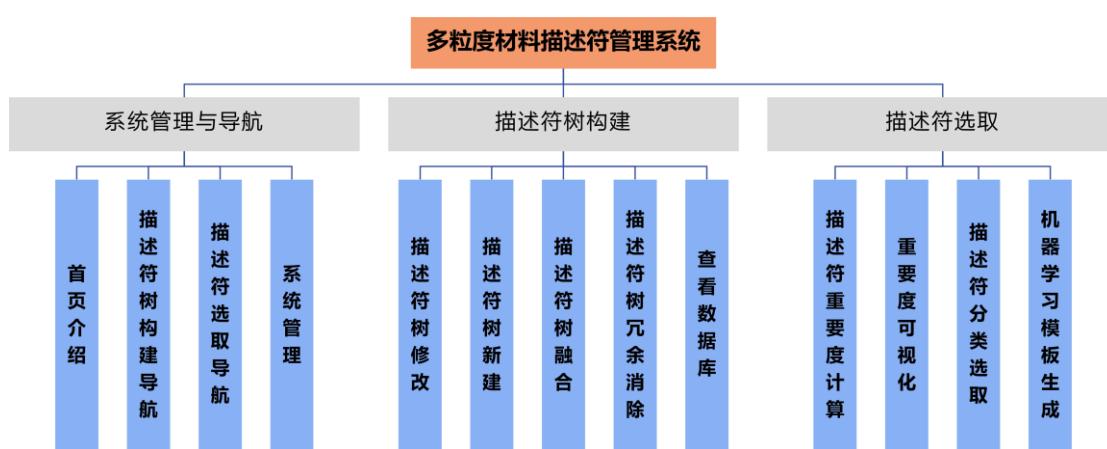


图 1-1 系统软件架构

## 1.2 用户层级、角色与相应权限

使用本系统的用户主要分为三个不同层级，即：超级管理员，管理员，普通用户，如表 1-1 所示。

表 1-1 用户层级

用户层级	用户名	密码
超级管理员（manage）	manage	shu123456
管理员（automat）	shu	123456
普通用户	user	123456

不同层级角色的用户各自享有不同权限。例如对于同一功能，超级管理员可对机构、用户信息、系统日志、菜单、操作进行管理，管理员可对其他用户信息和系统日志进行编辑，而普通用户只可修改自身用户信息和系统日志。

如在本手册阅读过程中，您发现所描述的内容与您所实际看到的内容不一致，可能是由于权限差异。

超级管理员可以为机构创建机构管理员并分配机构模块(目录)访问权限，管理员可以对

不同角色的权限进行设置和更改。

## 1.3 登录界面

如图 1-2 所示是多粒度材料描述符管理系统的初始登陆页面。

对于不同层级用户，需选择对应账号及密码输入（表 1-1），以登录进入主界面。

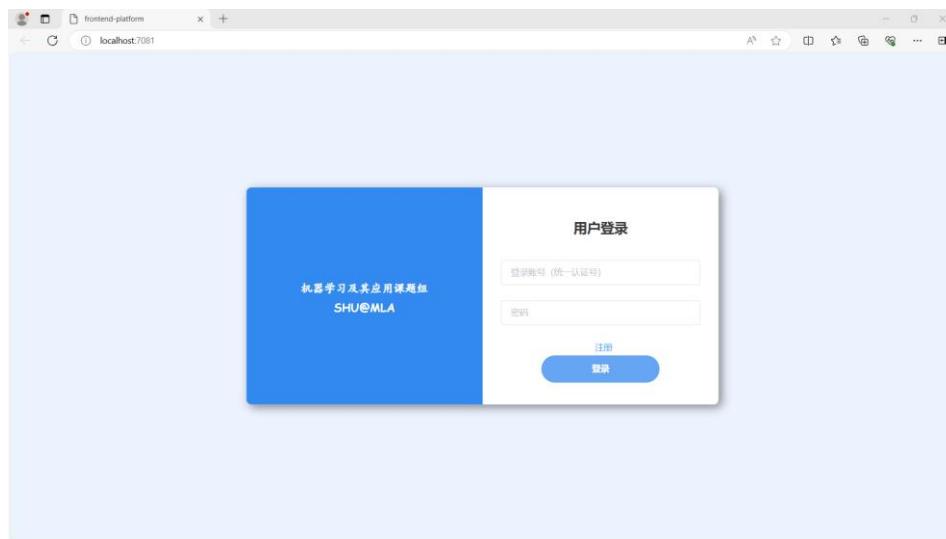


图 1-2 登陆界面

## 1.4 主界面和导航栏

不同角色权限的用户其主界面功能展示不同。如图 1-3 所示为以 root 用户身份登录后系统后的主界面，平台页面布局分为头部区域、左侧导航栏区域、主要内容区域三个重要部分。头部区域包括平台 logo 及平台名称，左侧导航栏显示平台的各个模块和主要功能，主要内容区域被用于展示各模块的操作过程及结果。



图 1-3 主界面

# 第 2 章 系统管理与导航

## 本章概述

本章主要介绍了多粒度材料描述符管理系统的系统管理与导航的内容。

## 本章内容

主题	页码
首页介绍	5
描述符树构建导航	5
描述符选取导航	6
系统管理	7

## 2.1 首页介绍

如图 2-1 所示，首页介绍使用折叠文字块的方式对本系统的各个功能模块给予介绍。



图 2-1 首页介绍

## 2.2 描述符树构建导航

如图 2-2 所示，描述符树构建导航分为“横向导航”和“纵向导航”。

**横向导航：**单击横向导航可以按次序进入描述符树构建下一步骤，并高亮显示当前已完成步骤。  
**纵向导航：**单击纵向导航指定条目可以进入指定描述符树构建页面。



图 2-2 描述符树构建导航

## 2.3 描述符选取导航

如图 2-3 所示，描述符树构建导航分为“横向导航”和“纵向导航”。

**横向导航：**单击横向导航可以按次序进入描述符选取下一步骤，并高亮显示当前已完成步骤。  
**纵向导航：**单击纵向导航指定条目可以进入指定描述符选取页面。

步骤	操作	得分
energy landscaps	基于TF_IDF得分-1	0
entropy of migration	基于公式得分-1	0
vacancy formation energy	基于公式得分-1	0
formation energies of materials	基于公式得分-1	0
formation energies	基于公式得分-1	0
overall parameter	基于公式得分-1	0
lithium charge carrier concentration	基于公式得分-1	0
charge carrier concentration ratio	基于公式得分-1	0

图 2-3 描述符选取导航

## 2.4 系统管理

如图 2-4 系统管理所示，系统管理共有 6 个功能，包括“平台管理”，“用户管理”，“用户信息”，“系统日志”，“菜单管理”，“操作管理”。首先，平台管理负责整个系统的运行状态监控与维护，确保各项功能稳定可靠。用户管理则涉及用户的注册、登录和权限分配，确保系统的安全性与用户体验。用户信息模块专注于管理用户的个人资料与操作记录，为用户提供便捷的查询和更新功能。系统日志功能则用于记录系统内所有重要操作和事件，便于后续审计和问题追踪。菜单管理则允许管理员自定义系统界面的菜单结构，提升系统的灵活性和可用性。最后，操作管理则对用户的操作行为进行监控和管理，确保符合系统的安全规范，从而提升整体系统的管理效率与安全性。

The screenshot shows a web browser window titled 'frontend-platform' with the URL 'localhost:7081/home/system/platformManage'. The page header includes the system logo and the text '多粒度材料描述符管理系统' and 'root'. On the left, there is a sidebar with a tree-like navigation menu. The 'Platform Management' node is currently selected and highlighted in blue. Other nodes include 'User Management', 'User Information', 'System Log', 'Menu Management', and 'Operation Management'. The main content area displays a table titled '平台列表' (Platform List) with two rows of data. The columns are '平台名称' (Platform Name), '平台描述' (Platform Description), '平台简称' (Platform Abbreviation), '平台URL' (Platform URL), and '操作' (Operations). The first row contains '开发机构 (管理平台)' (Development Institution (Management Platform)), '上海大学刘晓老师课题组', 'manage', 'http://localhost:7081', and buttons for '查看平台管理' (View Platform Management), '编辑平台信息' (Edit Platform Information), '可访问模块' (Accessible Modules), and '停用' (Disable). The second row contains '平台1' (Platform 1), '测试平台' (Test Platform), 'test', and similar operation buttons. A large blue button labeled '新增平台' (Add New Platform) is located at the top right of the table area.

图 2-4 系统管理

# 第3章 描述符树构建

## 本章概述

本章主要介绍了多粒度材料描述符管理系统的描述符树构建的内容。我们使用了多种方法进行材料描述符树构建，并进行了可视化、交互式增删改查，生成融合树和冗余消除树，以选取描述符。

## 本章内容

主题	页码
描述符树新建	8
描述符树修改	9
描述符树融合	11
描述符树冗余消除	11

## 3.1 描述符树新建

描述符树构建模块实现了描述符构建全流程，描述符新建页面负责建立一颗描述符树，其主要功能如图 3.1 所示，为描述符构建页面未上传数据状态。



图 3.1 描述符树构建 1

如图 3.2，上传数据后，可进行描述符树预览，确认无误后可点击右上角“导入数据库”将嵌套化描述符树数据转为结构化描述符树数据，并存储到数据库。

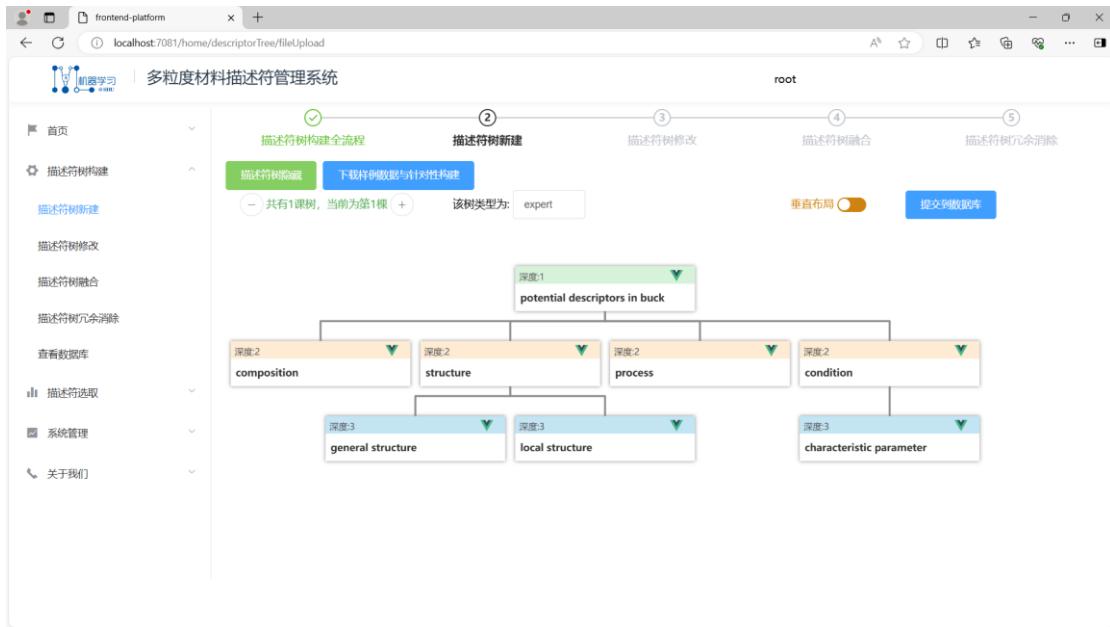


图 3.2 描述符构建 2

如图 3.3 所示，上传描述符树信息文件，可通过表格形式预览，确认无误后可导入数据库，补充描述符树可选属性。

节点	中文名	简介	概念层级	来源	公式
Potential Descriptors in buck			粗粒度层	无	无
composition			粗粒度层	无	无
structure			粗粒度层	无	无
process			粗粒度层	无	无
condition			粗粒度层	无	无
Intrinsic-atomic parameter			细粒度层	无	无
Extrinsic-atomic parameter			细粒度层	无	无
interatomic parameter			细粒度层	无	无
Overall parameter			细粒度层	无	无
General structure			细粒度层	无	无

图 3.3 描述符树信息文件上传

## 3.2 描述符树修改

如图 3.4 所示，进入描述符树修改页面，并在该页面执行下述操作：

- 1) 可根据左上方选择框，在当前数据库内选择一棵描述符树进行可视化增删改查。

- 2) 可根据上方描述符树节点查询框, 来查询输入描述符节点是否存在与当前描述符中, 若存在, 会高亮节点及其路线。若不存在, 则会弹出相关提示信息。
- 3) 右上方详细信息框显示当前点击的描述符树节点的详细属性, 包括必须属性和可选属性。
- 4) 点击节点可以对描述符树叶子节点进行伸缩和展开, 同时会自动化调整大小适配显示, 以提供最佳的视觉效果。



图 3.4 描述符树修改 1

如图 3.5, 右键点击描述符节点, 可通过交互增加孩子节点、删除孩子节点、删除孩子树、以及修改当前节点信息。



图 3.5 描述符树修改 2

### 3.3 描述符树融合

如图 3.6 所示为融合树页面，该页面主要由 5 部分组成。图中第一个红色框标注，显示当前融合树由哪些描述符树组成。中间选择框，可根据交互显示交集树、Middle 树、并集树。右侧融合树可视化辅助按钮，“垂直布局”可以调整融合树的显示模式，改变“横向显示或纵向显示”。 “全部展开”可以调整节点的折叠和展开，全部展开按钮可将所有节点展开。最右侧“构建融合树”，可根据数据库文件构建一棵融合树，来替换当前的融合树。页面主体部分的融合树展示，可通过点击折叠和显示孩子节点，与上文类似。

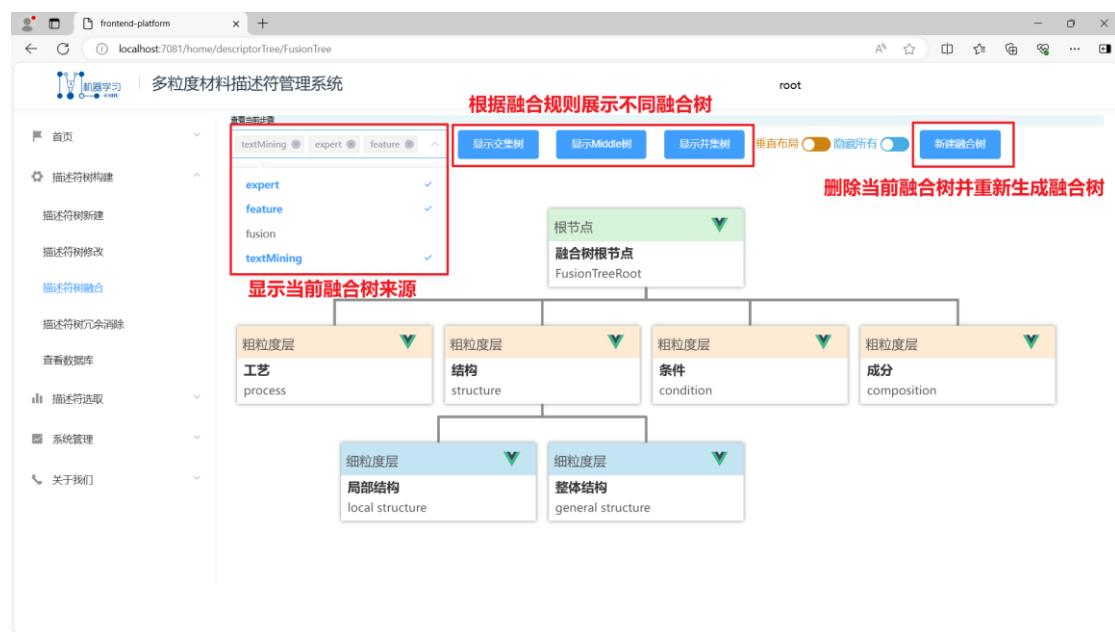


图 3.6 融合树页面

### 3.4 描述符树冗余消除

如图 3.7 所示，当用户点击“冗余检测”按钮时，系统立即启动冗余检测算法，深入分析当前描述符树中的各个描述符，旨在识别它们之间是否存在冗余信息。该算法会逐一比较描述符，评估其相似性和重叠度，确保准确性和高效性。一旦检测完成，系统会将发现的相似描述符整理并在“内容区”中以清晰的方式展示，用户可以直观地查看这些相似描述符的具体内容和关系。

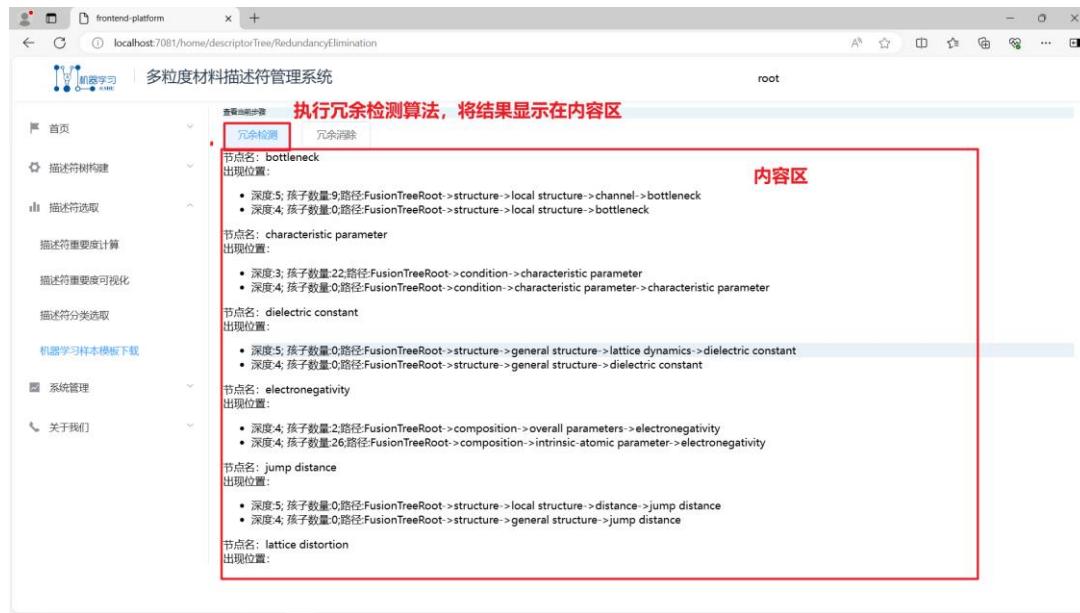


图 3.7 冗余消除页面

如图 3.8 所示，点击冗余消除按钮可选择冗余消除方式，分别为“手动消除”和“自动消除”。

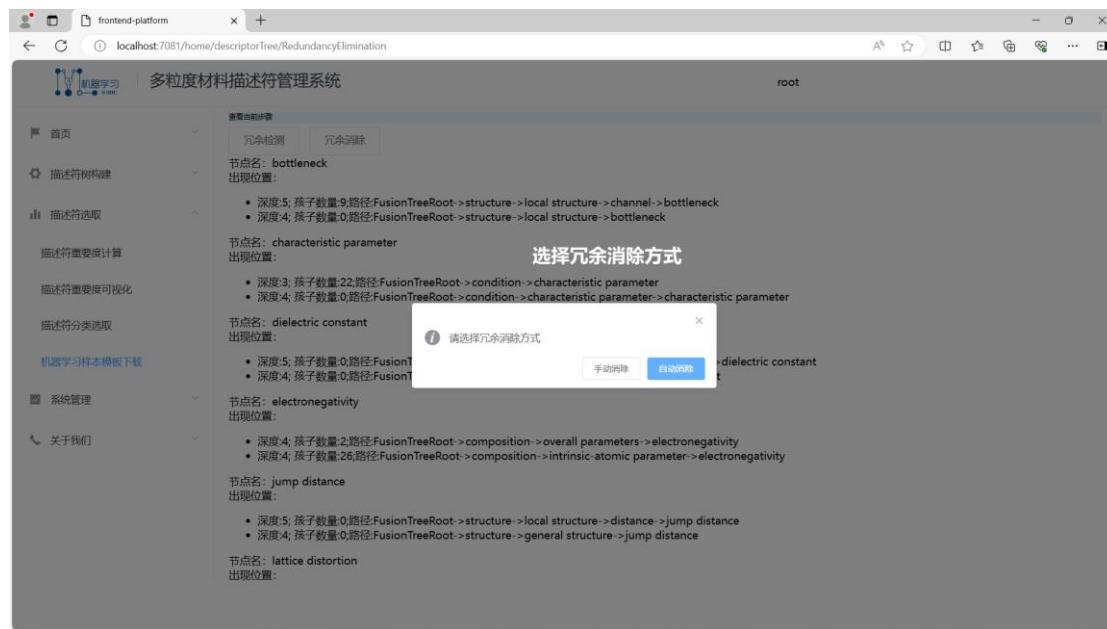


图 3.8 冗余消除

当选择手动消除时，系统自动列出所有冗余重复节点，如图 3.9 所示。用户可以通过点击的操作选择删除节点。删除节点后会重新进行冗余检测。例如，图 3.9 中的冗余重复节点“bottleneck”，其出现位置有两条信息，手动删除第一条信息后，其就从冗余重复节点变为非冗余重复节点，对该节点就完成了冗余消除的操作，依次将该融合树中的所有冗余重复节点执行同样的操作，该融合树就完成了冗余消除的操作。

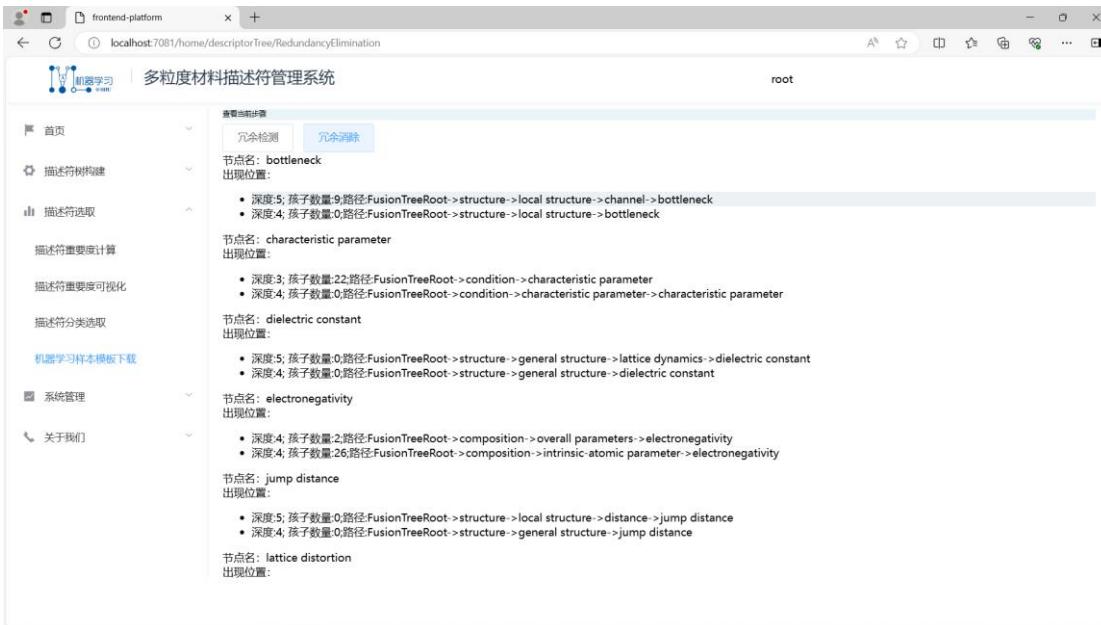


图 3.9 手动选择冗余重复节点和删除

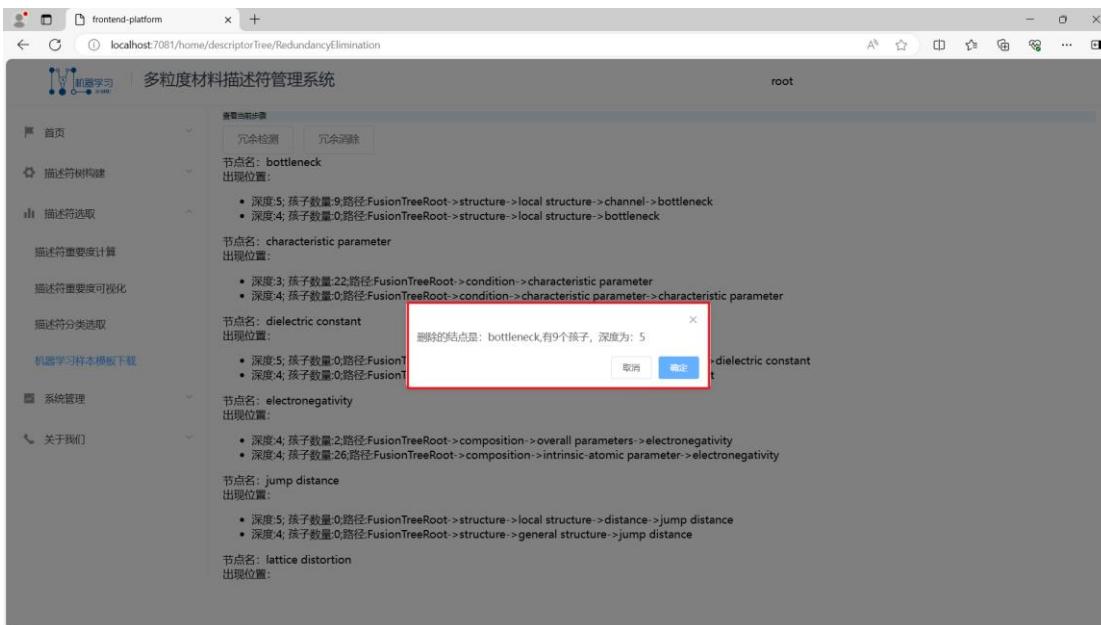


图 3.10 选择删除节点

当选择“冗余消除-自动消除”时，会将“相似描述符节点对比保留规则”予以显示，如图 3.11 所示，自动消除将保留孩子节点最多，即 childrenNum 最大的描述符节点，若孩子节点数量相同，则保留深度更大的孩子节点。

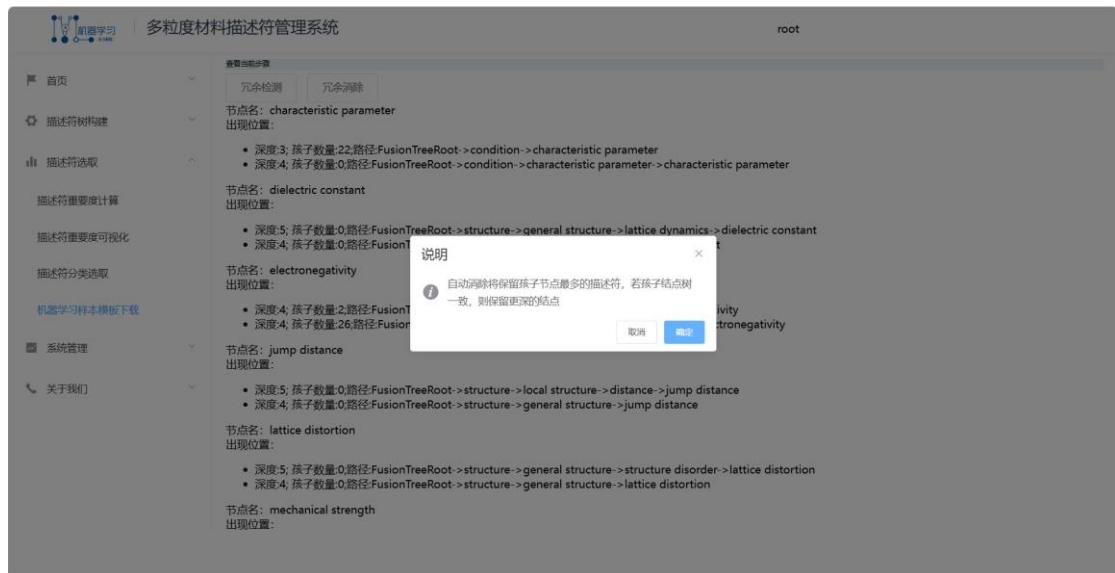


图 3.11 相似描述符节点对比保留规则

确认规则后执行自动消除, 将会按照此“相似描述符节点对比保留规则”对所有冗余重复节点执行自动消除如图 3.12 所示, 直至描述符树无冗余重复节点, 则融合树的冗余消除操作完成。

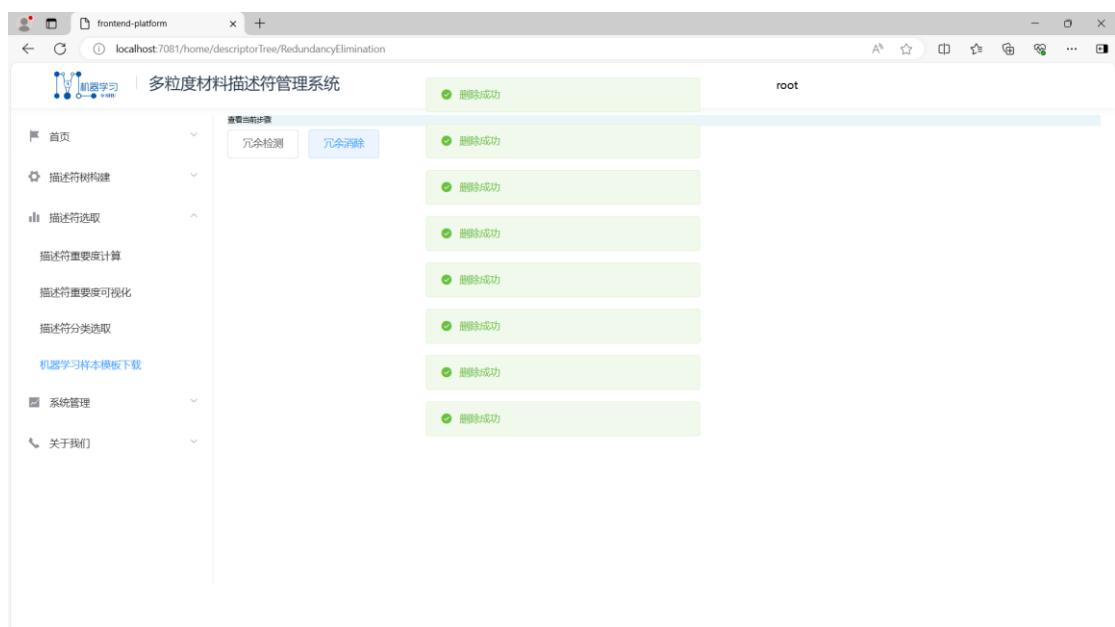


图 3.12 根据对比保留规则自动删除冗余重复节点

# 第 4 章 描述符选取

## 本章概述

本章主要介绍了多粒度材料描述符管理系统的描述符选取部分的内容。用户可通过此模块对冗余消除树中的描述符进行重要度计算，并以热力图和饼图为参考依据人工选取描述符，并可生成机器学习模板。

## 本章内容

主题	页码
描述符重要度计算	15
描述符重要度可视化	16
描述符分类选取	17
机器学习样本模板下载	18

## 4.1 描述符重要度计算

图 0-1 重要度计算页面 1

重要度计算页面如图 4-1 所示，分为操作区、内容区和功能区。操作区可以导入当前冗余消除树节点，并剔除粗粒度节点，然后基于融合树的重要度评分即自动导入，基于 TF-IDF 的重要度评分，基于公式的重要度评分，基于可获得性的重要度计算，分别点击上述三个按钮“基于 TF-IDF 的重要度评分”、“基于公式的重要度计算”、“基于可获得性的重要度计算”，即可计算并获取三种评分自动填入到如内容区中，如图 4-2 所示。

The screenshot shows the 'Importance Calculation' page of the system. At the top, there are five tabs: ① 'Descriptor Selection Full Process', ② 'Descriptor Importance Degree Calculation', ③ 'Descriptor Importance Degree Visualization', ④ 'Descriptor Classification Selection', and ⑤ 'Machine Learning Sample Template Download'. The tab ② is currently selected. Below the tabs, there is a table with columns: 'Descriptor', 'TF\_IDF Baseline Score', 'Based on TF-IDF Score', 'Based on Descriptor Tree Score', 'Based on Formula Score', 'Based on Availability Score', and 'Total Score'. The table contains data for several descriptors: temperature, concentration, v, c, a, radius, and ionic diffusion. The total scores range from 2 to 3.5.

图 4-2 计算完毕重要度得分

完成重要度计算后，可以进行“调整权重”按钮完成权重调整，如图 4-3 所示，在此处调整权重可，综合得分也可自动计算并显示。

The screenshot shows the 'Weight Adjustment' dialog box overlaid on the main interface. The dialog box has four circular input fields, each labeled with a value of 1, representing the weight for different calculation methods: 'Based on TF-IDF', 'Based on Descriptor Tree', 'Based on Formula', and 'Based on Availability'. Each field has a minus button (-) and a plus button (+) to adjust the value. Below the dialog box, there are 'Cancel' and 'Confirm' buttons. The background shows the same table of descriptor scores as in Figure 4-2.

图 4-3 权重调整

## 4.2 描述符重要度可视化

调整完毕权重后，可通过“保存数据”按钮将数据保存以供后续描述符选取。而后进入“描述符重要度可视化”页面，如图 4-4 所示默认展示热力图，点击上方按钮可以选择展示热力图还是展示饼图。饼图展示如图 4-5 所示。



图 0-4 热力图

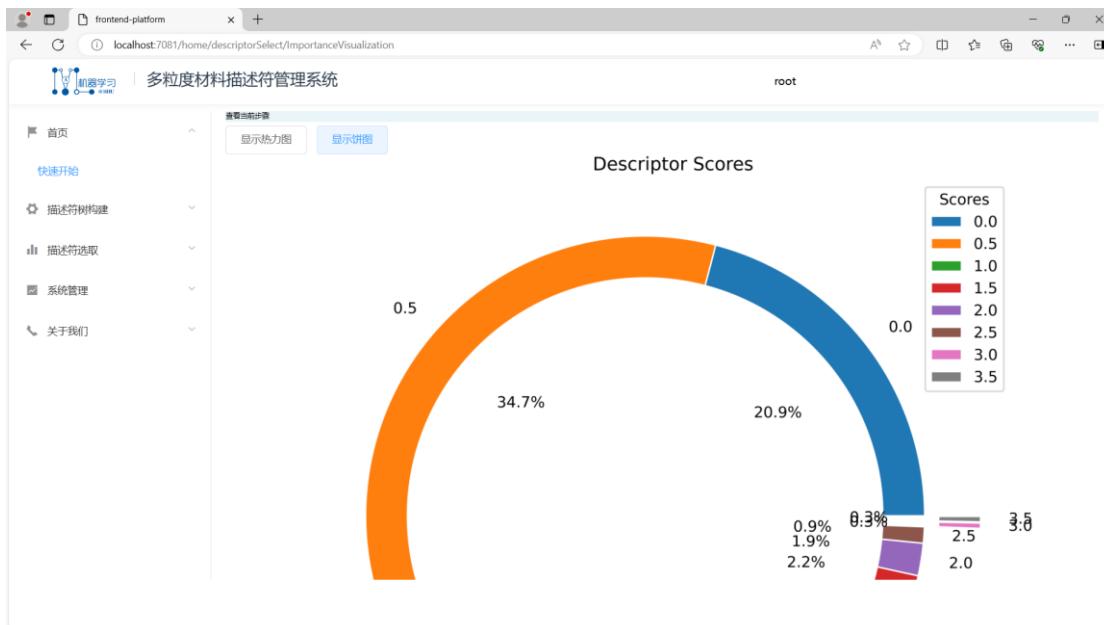


图 0-5 饼图

重要度可视化页面主要在于以两种图展示重要度。

### 4.3 描述符分类选取

点击进度条进入“描述符分类选取”页面，如图 4-6 所示。描述符分类选取页面可根据上方来选取一种粗粒度节点类型，并进入数据展示区；数据展示区可通过点击左侧选取框来选取描述符，选取后的描述符会自动集中到“查看选中&导出”模块，如图 4-7 所示。



图 0-6 描述符分类选取

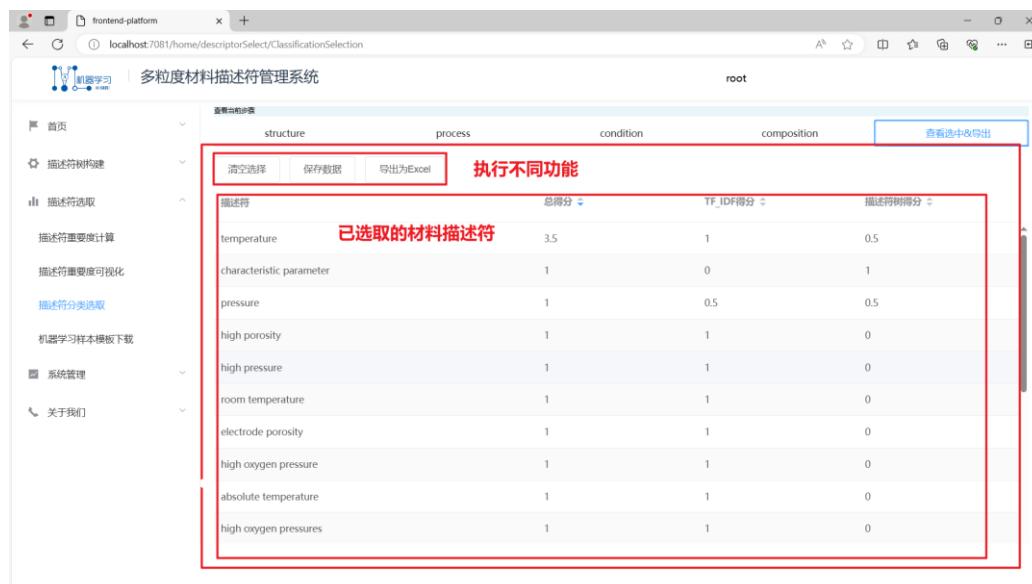


图 0-7 查看选中&amp;导出模块

在图 4-7 中，分为内容区和操作区，内容区记录了粗粒度分类选取的描述符，操作区有“清空选择”可以清空当前选择的描述符节点，“保存数据”可以保存当前选择的描述符，供后续生成机器学习模板，“导出为 Excel”可以把当前选取的描述符信息导出，即导出当前的内容区所有信息。

## 4.4 机器学习样本模板下载

保存数据后，进入如图 4-8 所示，机器学习样本模板下载页面，此处会在展示根据上述过程选取的描述符的机器学习样本模板，并可通过按钮交互导出成 Excel 文件，以提供研究

者使用。

当前生成的机器学习模板

化学式	temperature	room temperature condit ion	characteristic temperatur e	increasing te
Na12Ta3Al9P18O72	108002	待添加	待添加	待添加
Na20.94Cr9Co3P18O72	109405	待添加	待添加	待添加
Na12.006Fe6Sn6P18O72	151700	待添加	待添加	待添加
Na7.566Ti10.176Al1.824P18O72	154071	待添加	待添加	待添加
Na6.558Hf11.448Al0.552P18O72	154072	待添加	待添加	待添加
Na24Zr12Si18O72	15545	待添加	待添加	待添加
Na24Zr12Si18O72	15546	待添加	待添加	待添加
Na20.94Cr9Co3P18O72	157881	待添加	待添加	待添加
Cs0.6Na5.4Zr12P18O72	167728	待添加	待添加	待添加

图 0-8 机器学习样本模板下载页面