DDMP项目说明书

[一、 基本网页模块 3](#_Toc3707232)

[一． 用户模块 3](#_Toc3707233)

[（1） 用户注册： 3](#_Toc3707234)

[（2） 用户登录： 3](#_Toc3707235)

[（3） 用户消息板块： 3](#_Toc3707236)

[（4） 用户登出： 3](#_Toc3707237)

[（5） 用户历史记录： 3](#_Toc3707238)

[二． VASP模块 3](#_Toc3707239)

[（1） VASP任务提交模块： 3](#_Toc3707240)

[（2） VASP任务管理模块： 4](#_Toc3707241)

[（3） VASP任务反馈模块： 4](#_Toc3707242)

[三． 材料数据模块 4](#_Toc3707243)

[（1） 数据库建立： 4](#_Toc3707244)

[（2） 数据查询： 4](#_Toc3707245)

[（3） 数据扩充： 4](#_Toc3707246)

[四． 数据分析模块 4](#_Toc3707247)

[（1）基本数据和实验数据分析： 4](#_Toc3707248)

[五． 用户友好模块 5](#_Toc3707249)

[（1） 帮助文档： 5](#_Toc3707250)

[（2） 视频教程： 5](#_Toc3707251)

[六． 配置信息 5](#_Toc3707252)

[（1） 开发环境介绍 5](#_Toc3707253)

[（2） 服务器介绍 6](#_Toc3707254)

备注：红色字体表示的是还未实现的功能

# 基本网页模块

## 用户模块

### 用户注册：

提供用户注册的界面，需要用户提供：用户名，密码，邮箱地址，并进行必要的检查，若正确则存入数据库，跳转到主界面。

### 用户登录：

提供用户登录的界面，需要用户提供用户名，密码，与数据库中信息核对，若正确，跳转到主界面。

### 用户消息板块：

用户提交的VASP任务完成情况，可以收到系统的任务提醒消息。收到网站的推送消息等

### 用户登出：

提供用户退出登录的界面，点击则退回到用户登录界面

### 用户历史记录：

用户可进入自己的历史记录界面，查询VASP运行情况，分为正在运行和已完成两种情况

## VASP模块

### VASP任务提交模块：

提供用户材料搜索界面，用户通过ID搜索，查询到相应材料，跳转到VASP输入文件调整界面，有两种方案可供选择，其一是用户可将自己本地的文件提交给网页进行VASP计算；其二是通过点击选择相应的模板，可供用户直观的进行部分修改，确认后提交给VASP计算。

### VASP任务管理模块：

主要是指任务数据库数据的建立，每个任务有本身的编号，运行材料的信息，incar的信息，job作业脚本的信息等。

### VASP任务反馈模块：

VASP可实时监控每个用户提交的VASP任务的运行情况，完成时给用户反馈，也可实时的查询任务属性。

## 材料数据模块

### 数据库建立：

从网上获取相关数据项： id,slid,materialid,prettyformula,elements,structure,energy,energyperatom,volum,formationenergyperatom,nsites,ishubbard,nelements,eabovehull,iscompatible,bandgap,density,totalmagnetization,oxidetype,makerone,makertwo。

### 数据查询：

提供给用户三个查询方式：材料编号，材料化学式，材料组成。例如：sl-0,Li3Cr,CrLi。查询结果以列表的形式返回，点击材料可以进入到材料的具体展示界面。

### 数据扩充：

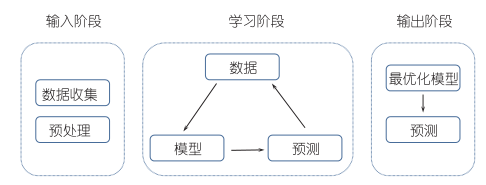
提供给用户相关接口，可以把做实验的数据进行统计，存入数据库。

## 数据分析模块

### （1）基本数据和实验数据分析：

基于数据库中的大量的基础数据和实验数据，进行数据分析。机器学习在材料的设计与研发中的应用, 主要是借助于机器学习对于材料属性的预测能力, 这里的材料属性包括材料的组成和结构, 以及材料的微观性质与宏观性能, 还有材料的合成加工方法.通过计算机利用已知数据, 在某些算法的指导下自动优化并改进模型, 使之能对全新的情境进行判断和预测，也就是在我们利用已有的数据库数据和部分实验数据，通过相应的算法进行模型训练，从而得到我们说需要的模型，并对全新的数据和未知的样本进行分析和预测。

大概分为三个阶段：



目前我们正在数据的收集和预处理阶段，当网站和实验可以交互的时候就可以进行实验数据的收集和分析。

在数据的预处理和收集工作进行的同时，也需要对物质的特征进行分类，对于同一材料的不同领域或不同情境下的应用存在不同的特征要求。对于不同的特征之间的关系也需要有清楚的认知，当数据达到非常高的维度时训练时间会随着特征的数量呈指数增长，同时特征的增加也会带来过拟合的风险所以对于特征的选择非常重要。

## 用户友好模块

### 帮助文档：

提供网站相关的说明文档，可供用户查看和下载。

### 视频教程：

提供教学视频用来说明网站的基本使用方法。

## 配置信息

### 开发环境介绍

使用Python3语言，pycharm软件进行开发，使用django网站开发框架，通过djongo连接mongodb数据库.

版本号介绍：

Python 3.7.1

Mongodb 4.0.5

Django 2.1.7

Djongo 1.2.31

Pycharm JetBrains PyCharm 2018.1.4 x64

### 服务器介绍

本网站目前搭载在阿里云的租赁服务器上面，服务器配置：

CPU:1核；

内存：2GB;操作系统：

CentOS7.3 64位；

公网IP：39.108.210.141;

当前使用带宽：1Mbps;

系统盘：40GB；

挂载的高效云盘：50GB。