



**MISSION
INNOVATION**

accelerating the clean energy revolution

POA MATERIALI AVANZATI PER L'ENERGIA

**PROGETTO IEMAP - Piattaforma Italiana Accelerata per i Materiali per
l'Energia**

Gestione dei dati all'interno del progetto IEMAP

Claudio Ronchetti, Sergio Ferlito, Simone Giusepponi, Francesco
Buonocore, Massimo Celino



D1.8, Gestione dei dati all'interno del progetto IEMAP

Claudio Ronchetti (ENEA), Simone Giusepponi (ENEA), Francesco Buonocore (ENEA), Massimo Celino (ENEA)

Maggio 2023

Report MISSION INNOVATION

Ministero dell'Ambiente e della Sicurezza Energetica - ENEA
Mission Innovation 2021-2024 - II annualità
Progetto: Piattaforma accelerata per i Materiali per l'Energia
Work package: IEMAP: Italian Energy Materials Acceleration Platform
Linea di attività 1.8: Sviluppo di metadati di progetto
Responsabile del Progetto: Massimo Celino, ENEA
Responsabile della LA: Massimo Celino, ENEA

INDICE

INDICE DELLE FIGURE	4
INDICE DELLE TABELLE	5
SOMMARIO	6
1 MATERIALS FOR ENERGY	7
2 GESTIONE DATI	9
3 UTENTI	10
4 AREA “MATERIALS FOR ENERGY”	12
4.1 PUBLISH PAGE	12
4.1.1 <i>Modalità automatica</i>	15
4.2 EXPLORE PAGE	17
4.3 ANALYZE PAGE	22
5 DATI CARICABILI DAGLI UTENTI	23
5.1 VALORIZZAZIONE	24
5.2 DOCUMENTAZIONE ONLINE	27
6 CONCLUSIONI	28
7 BIBLIOGRAFIA	28

Indice delle Figure

Figura 1: Layout della pagina principale (parte superiore)	7
Figura 2: Pagina riportante i KPI	8
Figura 3: Schema piattaforma informatica IEMAP.....	9
Figura 4: Albero di esplorazione delle pagine della sezione "Materials for Energy"	12
Figura 5: Layout della pagina iniziale di upload dei dati	13
Figura 6: Layout della pagina di dettaglio di upload dei dati	14
Figura 7: Layout della pagina relativa al primo step della modalità automatica di caricamento dati	15
Figura 8: Layout della pagina relativa al secondo step della modalità automatica di caricamento dati	16
Figura 9: Layout della pagina relativa al terzo step della modalità automatica di caricamento dati	16
Figura 10: Layout della pagina iniziale della sezione 'Explore'	17
Figura 11. Layout della pagina Encyclopedia di NOMAD	18
Figura 12. Layout della pagina Materials Explorer di Materials Project	18
Figura 13. Layout della pagina iniziale della sezione 'Explore' con risultati	21
Figura 14. Notebook gestiti dal servizio Jupyter	22
Figura 15. Sito per la documentazione a supporto degli utenti	27

Indice delle Tabelle

Tabella 1. Elenco KPI.....	7
Tabella 2. Informazioni su accessi per profilo utente	10
Tabella 3. Elenco filtri	19
Tabella 4. Struttura metadato caricabile dall'utente.....	23
Tabella 5. Lista dei parametri	24
Tabella 6. Lista delle proprietà	25

Sommario

Nel capitolato la Linea di Attività LA2.8 aveva come obiettivo principale l'analisi dei dati all'interno dei laboratori partecipanti al progetto con il fine di identificare la tipologia di dato che possa soddisfare le differenti esigenze dei singoli laboratori.

In questo rapporto tecnico quindi si riportano i risultati conseguiti nel progettare il layout, la logica e le funzionalità che sono necessari da implementare nell'interfaccia utente del database del progetto IEMAP. Inoltre si discute il formato dei dati nonché la creazione e gestione dei metadati di progetto. L'aspetto importante di quanto riportato in questo rapporto è che le indicazioni qui discusse sono il frutto di condivisione con tutti i laboratori partecipanti al progetto.

Le indicazioni di questo rapporto sono state utilizzate per impostare la realizzazione del portale iemap.enea.it, oggetto del rapporto D1.5. In questo rapporto vengono suggerite una serie di implementazioni e servizi con il fine di:

- Rendere semplice ed efficace l'accesso al portale;
- Sviluppare una gestione standardizzata dei dati scientifici.

Il portale potrebbe avere una veste grafica differente da quella indicata in questo rapporto. Questo è dovuto alla scelta degli strumenti software che sono utilizzati per realizzare concretamente il portale. Spesso accade che alcuni strumenti software potrebbero rendere più semplici delle implementazioni rispetto ad altre. Dal punto di vista del progetto è importante che siano implementate caratteristiche e funzionalità che sono state discusse con i laboratori.

Per quanto riguardano le immagini, il testo, il font del testo e i colori da utilizzare si rimanda alle decisioni definite durante lo sviluppo del sito web di Mission Innovation (www.mission-innovation.it). In questo modo la sezione web dell'area *Materials for Energy* del sito Mission Innovation e la pagina iniziale del portale iemap.enea.it che darà accesso al database saranno uniformi. Inoltre, i siti di *Novel Materials Discovery* (Draxl, 2018) e *Materials Project* (Jain, 2013) sono stati presi in considerazione come riferimenti per la definizione della piattaforma. Infine, per la definizione degli schemi in forma stilizzata è stato utilizzato *Balsamiq Wireframes* (versione 3.5.17), un programma per la definizione di layout grafici.

Inoltre in questo rapporto sono fornite indicazioni su come completare la sezione "Materials for Energy" del sito Mission Innovation (www.mission-innovation.it) che rappresenta il punto di partenza per la ricerca di informazioni sui progetti finanziati in ambito Mission Innovation in Italia: Hydrogen Valley, Materials for Energy, Smart Grid.

1 Materials for Energy

Il sito dedicato a Mission Innovation (www.mission-innovation.it) è composto da tre sezioni principali come descritto nella Figura 1: Layout della pagina principale (parte superiore). Le tre sezioni sono Hydrogen Valley, Materials for Energy e Smart Grid. La sezione Materials for Energy del sito Mission Innovation avrà in primo piano i link necessari per:

- Trovare informazioni sul progetto
- Riportare i link alle tre sezioni dedicate alla analisi dei dati: Publish, Explore e Analyze. Queste sezioni sono relative rispettivamente all’inserimento, all’esplorazione e all’analisi dei dati, come mostrato in Figura 1: Layout della pagina principale (parte superiore). Le colorazioni mostrate in figura rappresentano i requisiti di accesso minimi in base ai profili utente (riportati in Tabella 2).
- Nella parte inferiore della medesima pagina o in una pagina dedicata con accesso riservato sarà necessario riportare alcuni indicatori (Key Performance Indicators, KPI) che illustrano le informazioni chiavi relative ai dati presenti nel database della piattaforma IEMAP. Un esempio di KPI sono riportati nella Tabella 1 e le informazioni potrebbero essere riportate visivamente sulla pagina web come illustrato nella Figura 2.

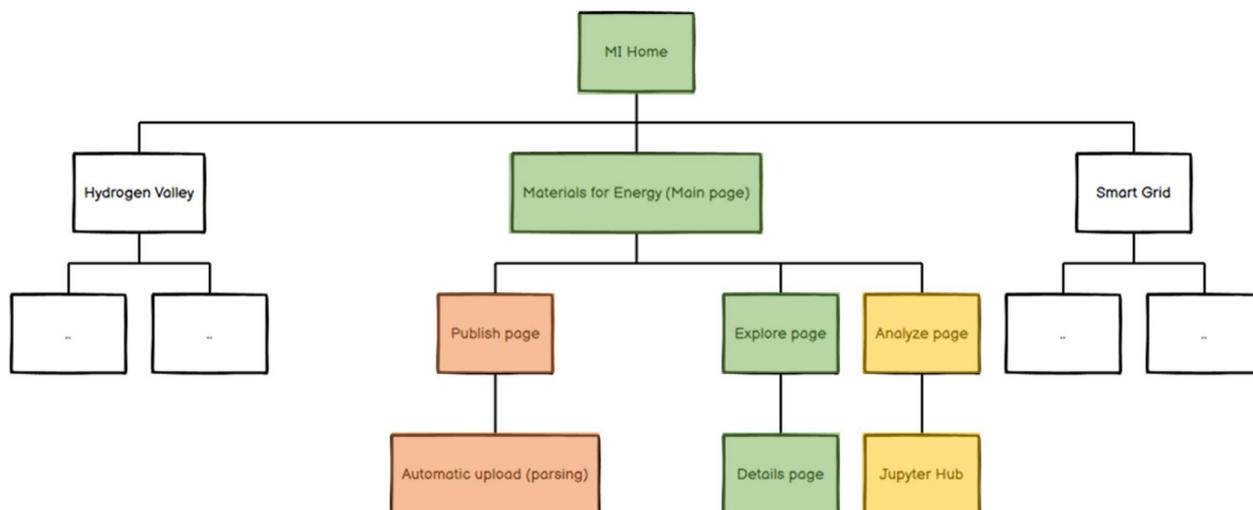


Figura 1: Layout della pagina principale (parte superiore)

Tabella 1. Elenco KPI

Indice	Nome	Descrizione	Tipo
KPI[0]	Materials count	Totale dei materiali che sono stati caricati nell’archivio (database)	Valore numerico
KPI[1]	Data count	Totale dei data file che sono stati caricati nel repository	Valore numerico
KPI[2]	Upload count per time	Indicatore che mostra gli upload effettuati temporalmente	Grafico
KPI[3]	Upload count per project	Indicatore che mostra gli upload effettuati per singolo progetto	Grafico

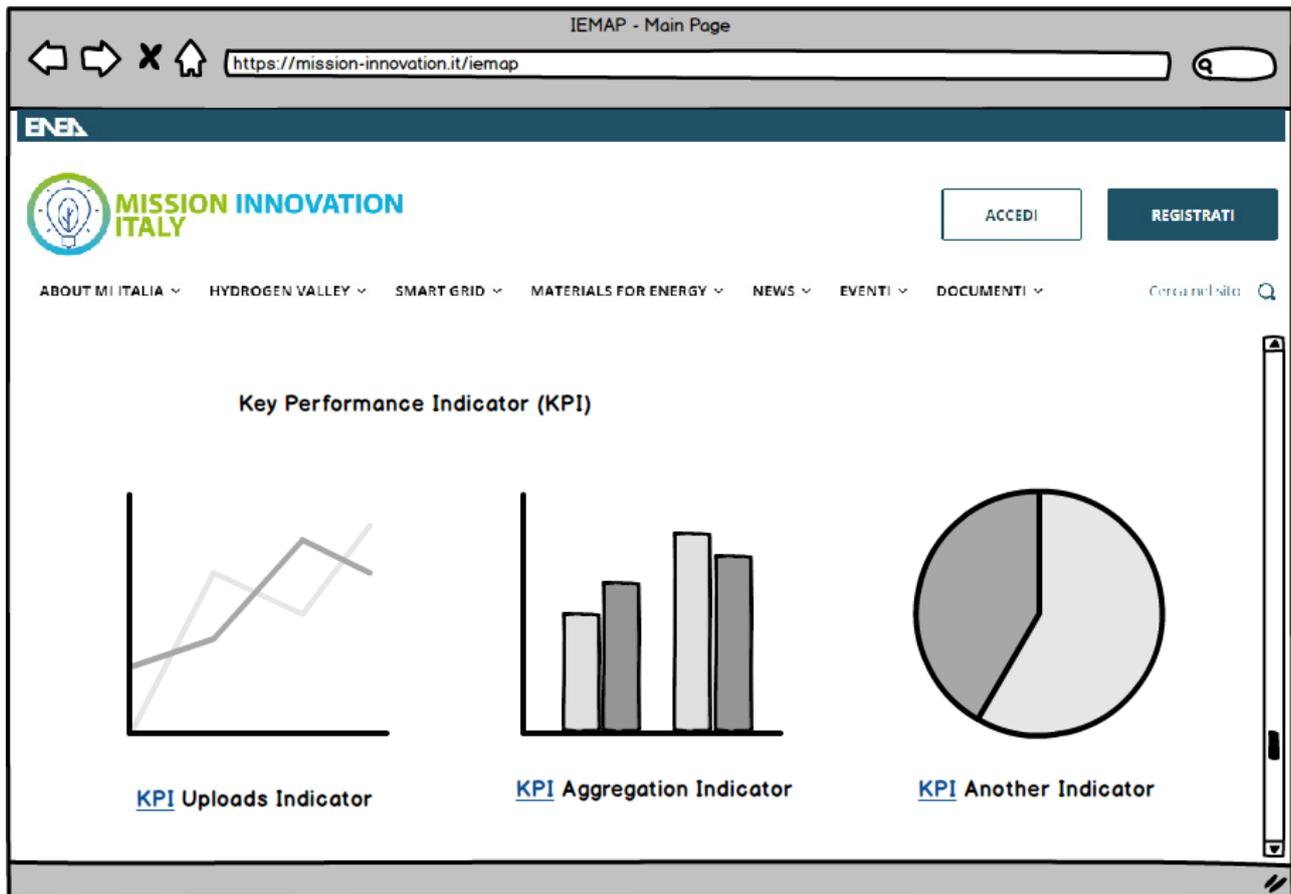


Figura 2: Pagina riportante i KPI

La sezione Materials for Energy del sito Mission Innovation, anche se non indicata nella Figura 1: Layout della pagina principale (parte superiore), potrà avere una sezione riservata dedicata agli utenti sviluppatori della piattaforma IEMAP e ai revisori del progetto. La parte riservata potrà contenere e rendere disponibili informazioni riguardanti lo stato di avanzamento della piattaforma.

2 Gestione dati

In generale la componente dedicata alla gestione dei dati della piattaforma IEMAP deve essere costituita da diverse entità software affinché possa funzionare correttamente.

Lo schema, riportato in Figura 3, mostra i quattro elementi fondamentali:

1. Il **Database** che memorizza i metadati estratti dai processi elaborati dagli utenti (dati strutturati);
2. Il **File Storage** che memorizza i file aggiuntivi (file non strutturati, ad es. immagini, file testuali, ...);
3. **API (Application Programming Interface)** è il nodo centrale all'interno del quale sono state indicate una serie di procedure atte alla gestione dei dati e all'autenticazione utenti verso l'esterno;
4. **Front-end** rappresenta l'interfaccia utente accessibile da browser che fornisce le funzionalità offerte dall'API in modo grafico.

Questo documento ha lo scopo di fornire i dettagli principali sulla definizione di quest'ultima entità. L'interfaccia utente è fondamentale per permettere agli utenti umani (human-user) l'accesso ai dati.

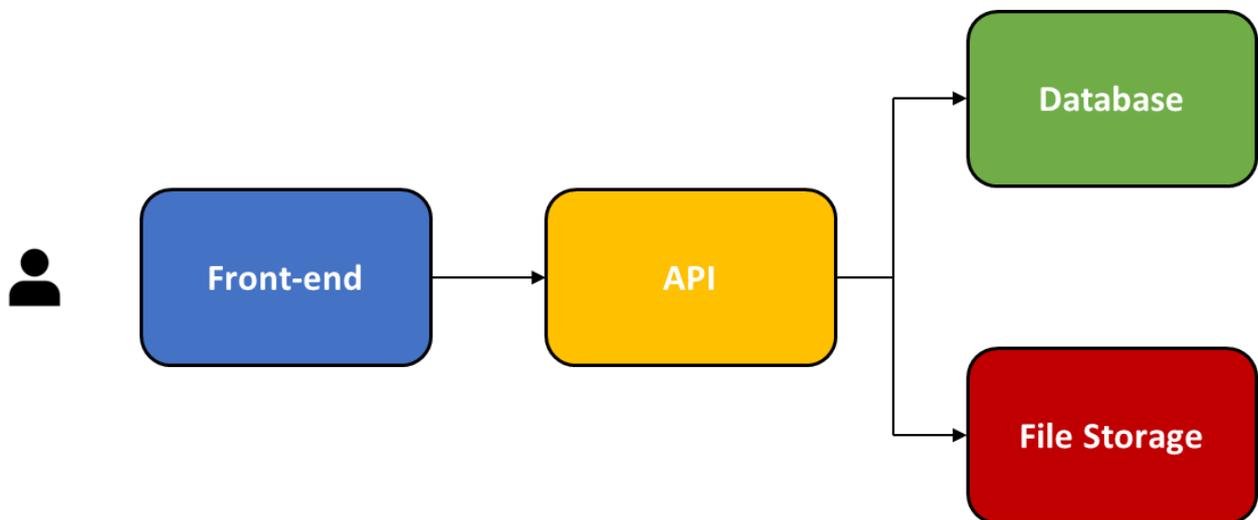


Figura 3: Schema piattaforma informatica IEMAP

3 Utenti

Il portale web dedicato ai dati di IEMAP dovrebbe permettere all'utente di registrarsi al fine di limitare gli accessi a pagine riservate.

La Tabella 2. Informazioni su accessi per profilo utente2 definisce tre possibili tipi di utenti che potrebbero essere gestiti dalla piattaforma tramite una fase di registrazione.

Qualsiasi utente può accedere liberamente alla pagina iniziale, le pagine contenenti informazioni generali (ad es. documentazione generale) e alla sezione di esplorazione dati. La sezione di analisi dei dati richiede la registrazione base, mentre la sezione di caricamento dati richiede la registrazione con autorizzazione.

Al fine di permettere la registrazione da parte di tutti gli utenti è presente sul portale una pagina adibita alla registrazione che richiede le seguenti informazioni dell'utente:

- E-mail
- Organizzazione
- Password (richiesto il doppio inserimento)

A seguito della compilazione dei campi richiesti, il sistema attiva una procedura di verifica automatica dell'e-mail (ad es. un invio e-mail di conferma all'utente) per completare la registrazione.

A questo punto, l'utente potrà effettuare il login ed accedere alla sezione di analisi dei dati.

Affinché l'utente possa accedere alla sezione riservata ai partner è necessaria un'ulteriore abilitazione da parte dell'amministratore della piattaforma.

Il responsabile dell'area di interesse selezionata, solamente a seguito della verifica con successo della mail dell'utente registrato, riceve la richiesta di autorizzazione e potrà abilitare o meno tali credenziali.

Gi endpoint protetti che richiedono una validazione dell'utente dovranno essere richiamati fornendo un JWT dove nel payload risulti anche e-mail e organizzazione dell'utente validato. Tale JWT verrà concesso solo a seguito dell'abilitazione e memorizzato nel browser (http-only cookie) per essere usato con gli endpoint protetti.

Tabella 2. Informazioni su accessi per profilo utente

Colore	Profilo utente	Ruolo	Descrizione	Richiesta autorizzazione
	Utente Sconosciuto	Nessuno	Utente che non si è mai registrato o si è registrato ma non ha effettuato l'accesso alla piattaforma Mission Innovation.	No
	Utente Base	Base	Utente che si è registrato ed ha effettuato l'accesso alla piattaforma Mission Innovation.	No

Colore	Profilo utente	Ruolo	Descrizione	Richiesta autorizzazione
	Utente Partner	Base e partner di IEMAP	Utente che si è registrato ed è stato autorizzato come partern del progetto IEMAP, e ha effettuato l'accesso alla piattaforma Mission Innovation.	Si

4 Area “MATERIALS FOR ENERGY”

L’Area “Materials for Energy” di Mission Innovation (www.mission-innovation.it) dovrà avere come servizio la possibilità di rimandare al portale iemap.enea.it dedicato alla gestione dei dati. Il portale riporterà una pagina iniziale da cui si potranno accedere a tre sottosezioni (Figura 4):

- Pubblica (Publish)
- Esplora (Explore)
- Analizza (Analyze)

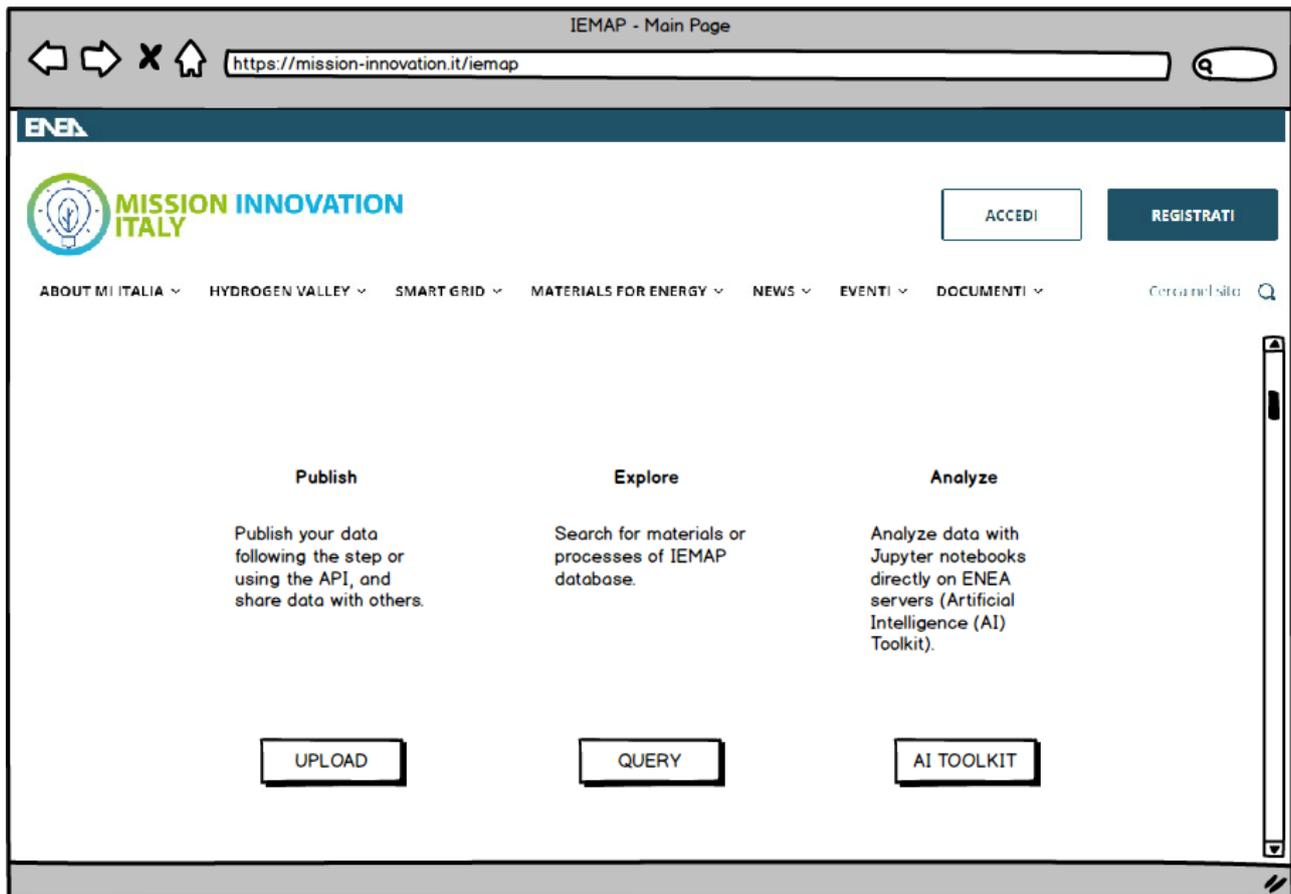


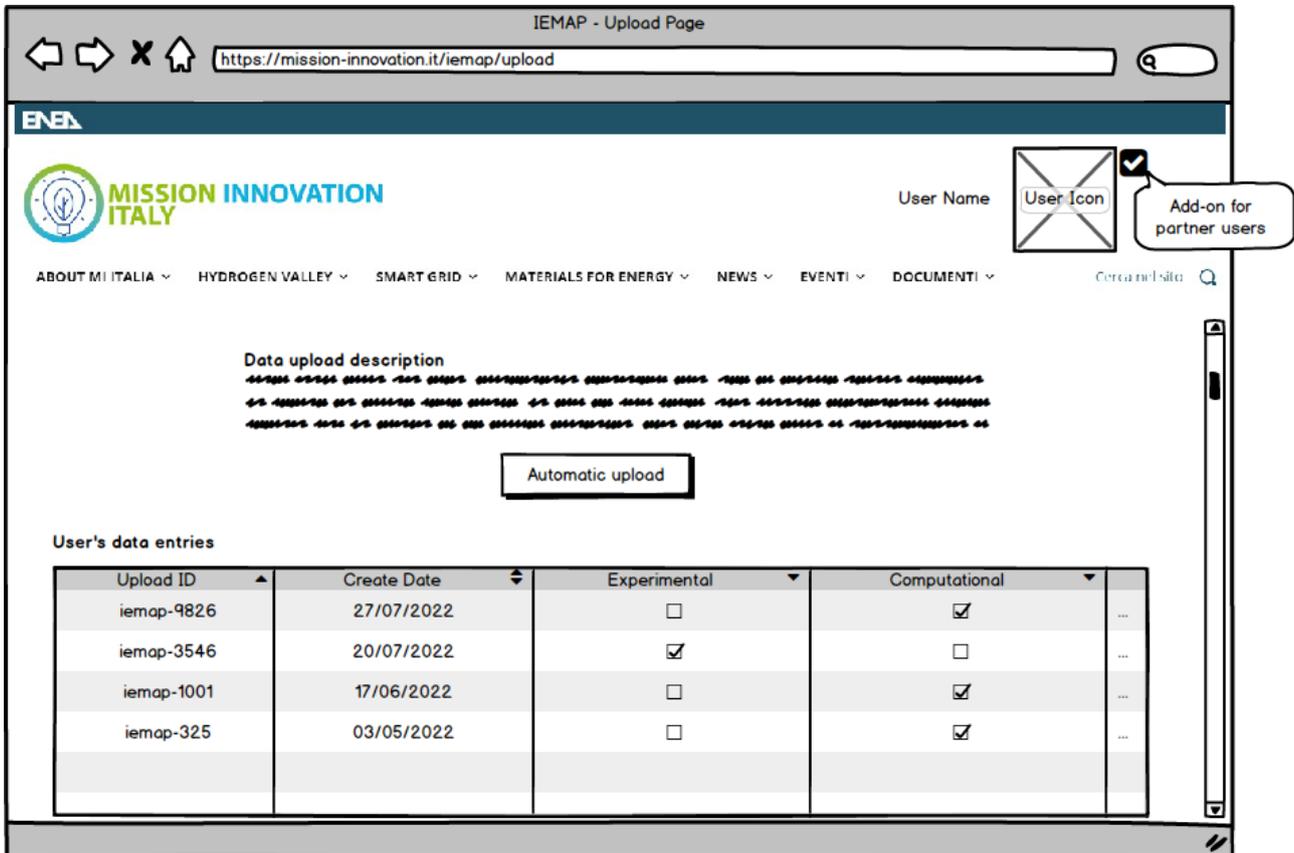
Figura 4: Albero di esplorazione delle pagine della sezione "Materials for Energy"

4.1 Publish page

Questa sezione è dedicata e resa accessibile ai soli partner del progetto Materials for Energy, ovvero gli utenti partner, dopo essersi autenticati. Nel caso in cui l’utente non si è autenticato verrà ridirezionato alla sezione di login.

Come mostrato in Figura 5, la sezione superiore permette di caricare i dati dell’utente sulla piattaforma IEMAP. L’utente carica i metadati e i file annessi, e la piattaforma procede all’analisi e all’estrazione delle informazioni chiave in modo automatico.

La sezione inferiore della pagina mostra la lista dei caricamenti effettuati dall'utente stesso. L'elenco mostra per ogni caricamento l'identificativo, la data di creazione, il tipo di processo (sperimentale o computazionale). L'utente ha la possibilità di selezionare ed aprire uno specifico elemento. La pagina di dettaglio, illustrata in Figura 6, riassumerà le informazioni caricate dall'utente permettendogli di modificare o cancellare definitivamente i dati legati a ciascun elemento caricato.



Data upload description

Automatic upload

User's data entries

Upload ID	Create Date	Experimental	Computational	
iemap-9826	27/07/2022	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	...
iemap-3546	20/07/2022	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	...
iemap-1001	17/06/2022	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	...
iemap-325	03/05/2022	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	...

Figura 5: Layout della pagina iniziale di upload dei dati

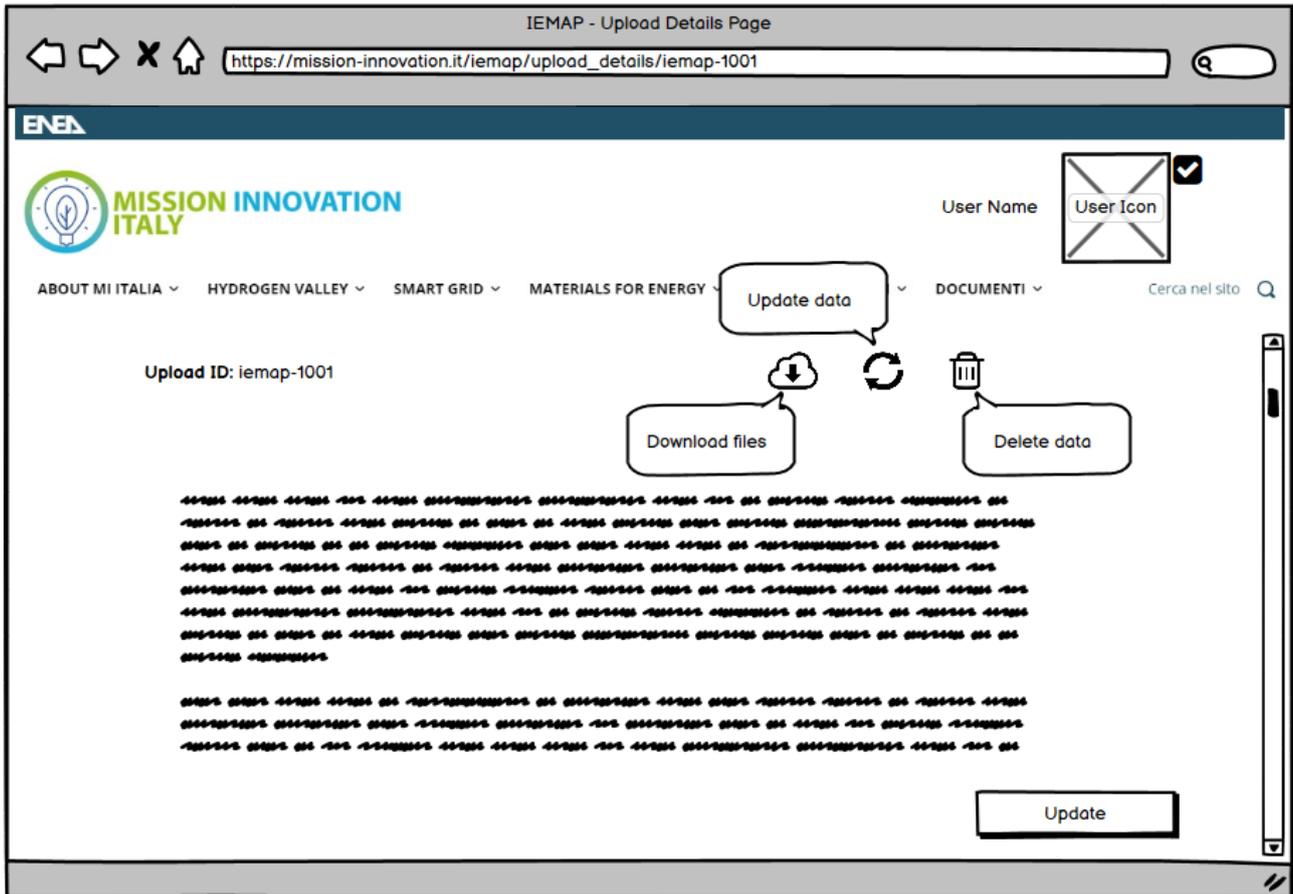


Figura 6: Layout della pagina di dettaglio di upload dei dati

4.1.1 Modalità automatica

La procedura di caricamento dati in modo automatico permette all'utente di caricare i metadati e i file annessi al processo di interesse ed il sistema estrae i metadati in modo automatico.

I metadati possono essere caricati nei formati JSON ed Excel.

La struttura logica di questa procedura segue i seguenti tre step:

1. Caricamento del metadato e file annessi da parte dell'utente (Figura 7)
2. Parsing dei file da parte del sistema al fine di validare i file caricati (Figura 8)
3. Risultati dell'elaborazione con possibili segnalazioni di errori (Figura 9)

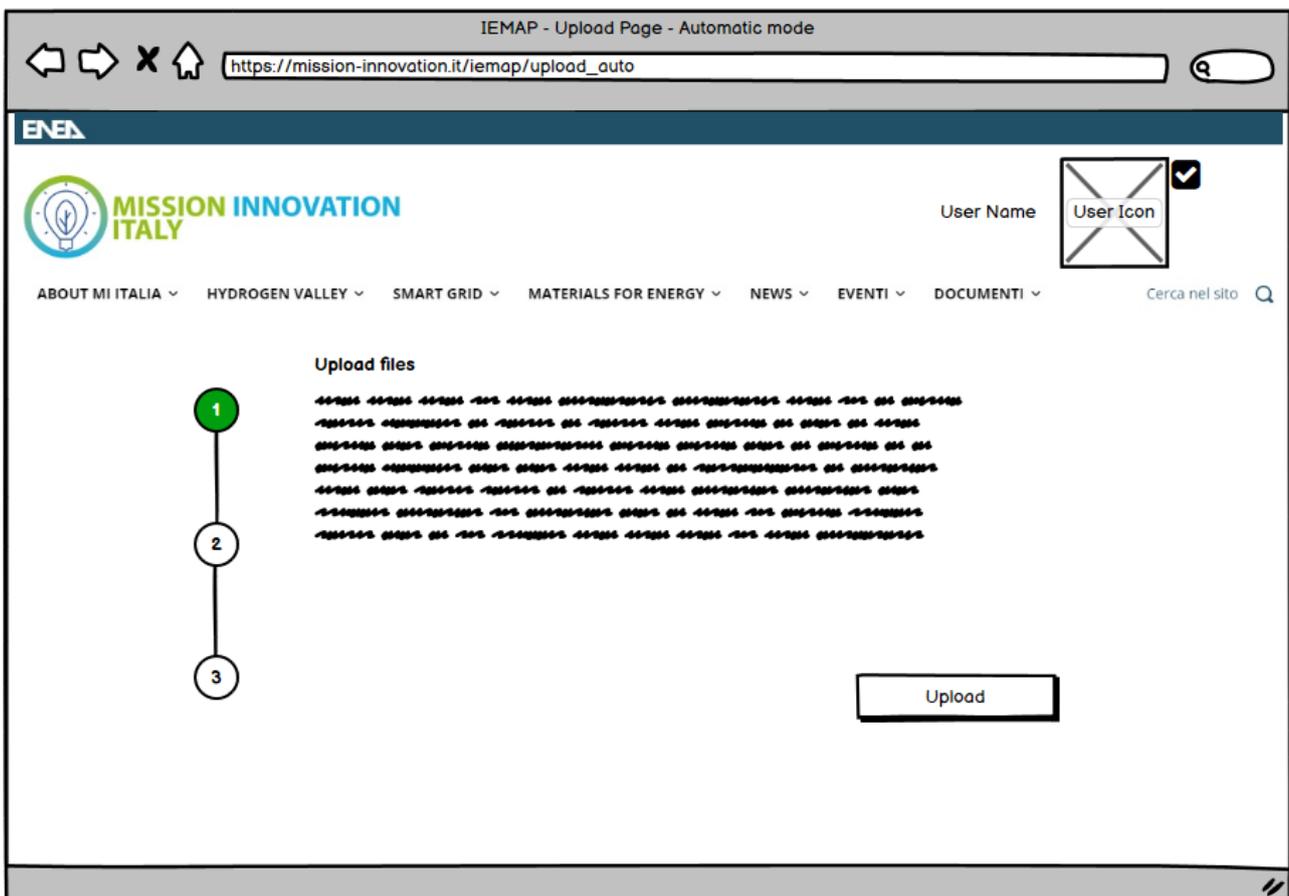


Figura 7: Layout della pagina relativa al primo step della modalità automatica di caricamento dati

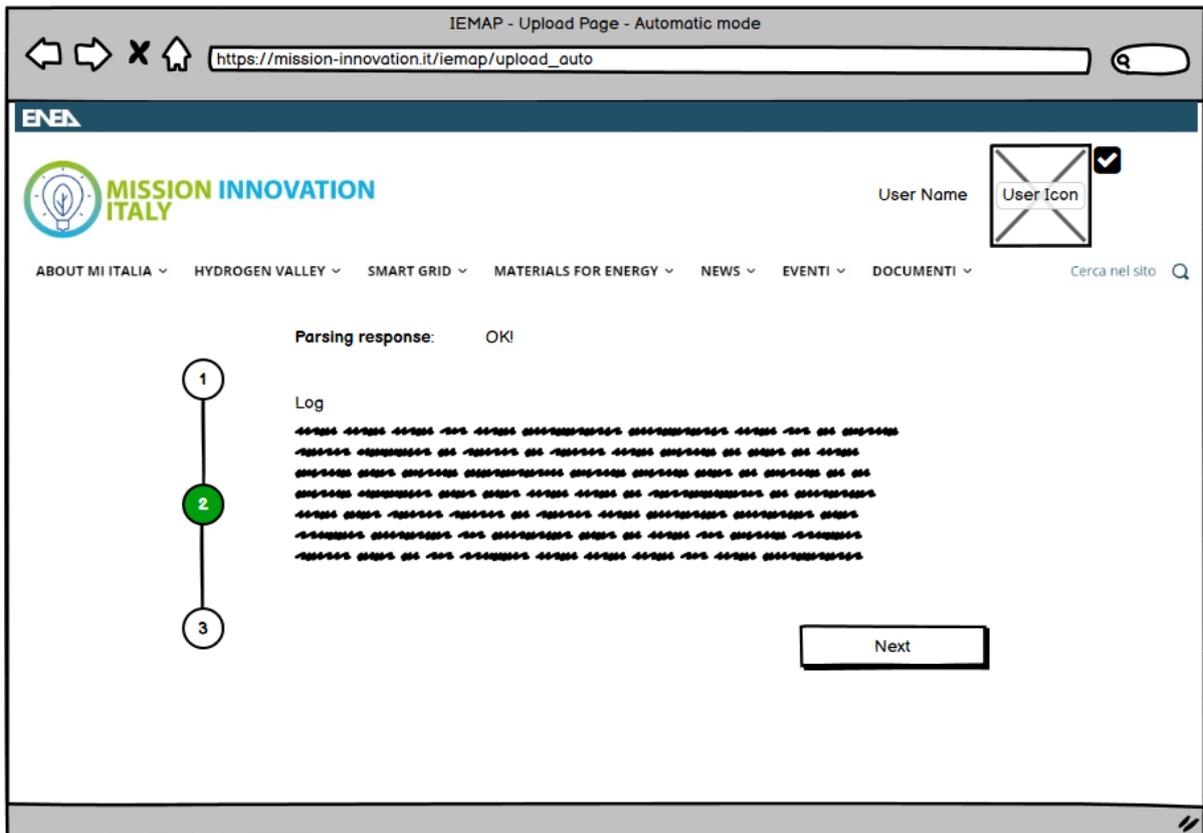


Figura 8: Layout della pagina relativa al secondo step della modalità automatica di caricamento dati

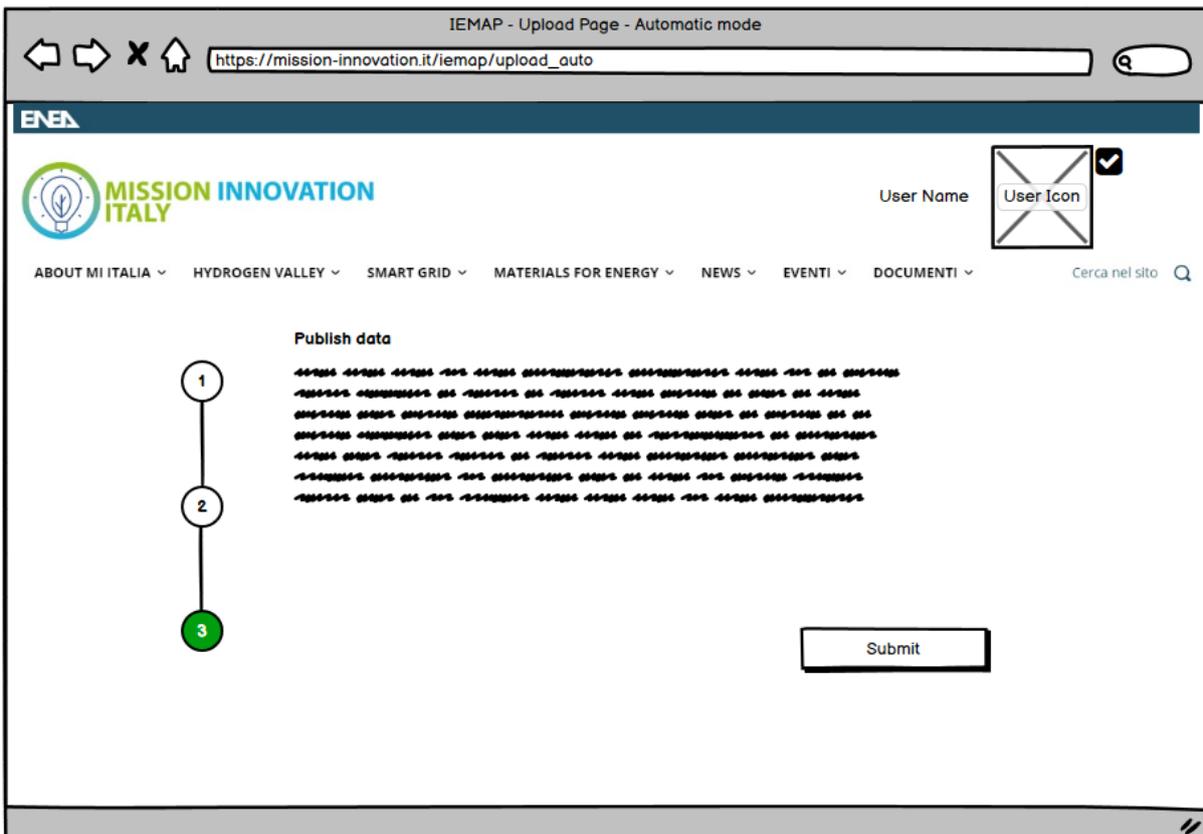


Figura 9: Layout della pagina relativa al terzo step della modalità automatica di caricamento dati

4.2 Explore page

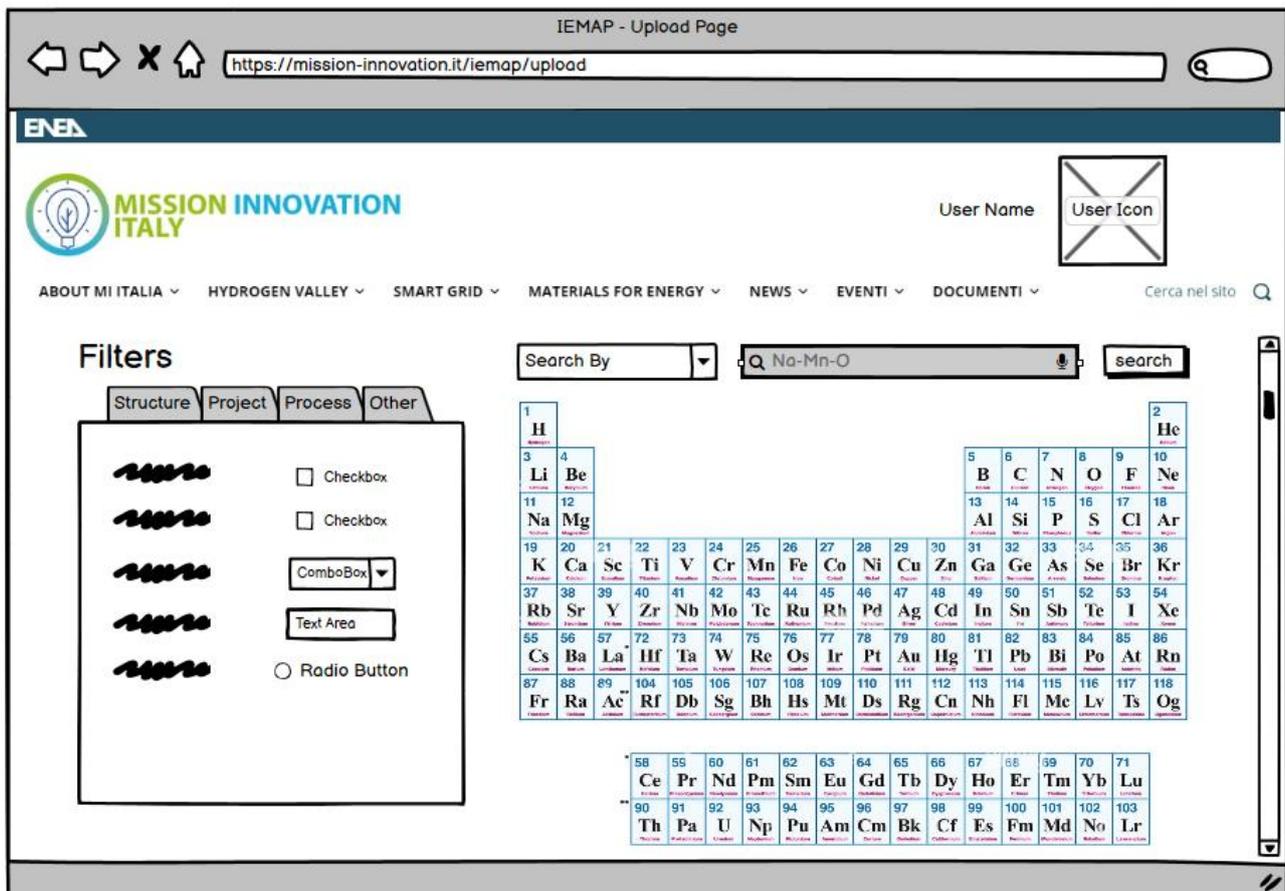
Questa sezione è dedicata e resa accessibile a tutti gli utenti. La sezione permette di ricercare i dati di interesse che sono stati caricati sulla piattaforma IEMAP.

Come illustrato in **Errore. L'origine riferimento non è stata trovata.**, l'idea è di poter mettere a disposizione verso l'utente una serie di filtri da poter scegliere.

La pagina potrebbe comprendere una serie di filtri: alcuni esempi sono stati riportati in Tabella 3 e sono legati alla struttura del materiale, al progetto, e al processo.

Un importante filtro è quello legato alla ricerca del materiale tramite la selezione di elementi. Quest'ultimo è diventato iconico nelle principali piattaforme per i materiali (come NOMAD e Materials Project, riferimenti mostrati rispettivamente in Figura 10, Figura 11 e Figura 12) dove viene mostrata una tavola periodica. Una valida alternativa all'utilizzo della tavola periodica interattiva può essere data da una barra di ricerca dove è possibile indicare i tipi di elementi da filtrare.

Una volta selezionati i filtri di interesse e premuto il pulsante di ricerca verrà mostrata la lista dei risultati nella parte inferiore della pagina (in Figura 13).



The screenshot shows the IEMAP - Upload Page interface. At the top, there is a navigation menu with categories: ABOUT MI ITALIA, HYDROGEN VALLEY, SMART GRID, MATERIALS FOR ENERGY, NEWS, EVENTI, and DOCUMENTI. A search bar is located on the right side of the menu. Below the menu, there is a 'Filters' section with tabs for Structure, Project, Process, and Other. The filters section contains several input fields: two checkboxes, a combobox, a text area, and a radio button. A search bar is also present in the filters section with the text 'Na-Mn-O'. Below the search bar, a periodic table of elements is displayed, with the search results 'Na-Mn-O' highlighted in the table.

Figura 10: Layout della pagina iniziale della sezione 'Explore'

NOMAD Encyclopedia Additional information

Structure

System type

Bulk
 2D
 1D

Crystal system

Cubic
 Hexagonal
 Trigonal
 Tetragonal
 Orthorhombic
 Monoclinic
 Triclinic

Space group number

Composition

Na × AND Mn × AND O × Clear Search

Element ^ Formula Name OR AND NOT

H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	Rf	Ha	Sg	Ns	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og	
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			

Alkali metals
Alkaline earth metals
Transition metals
Post-transition metals
Metalloids

Other nonmetals
Halogens
Noble gases
Lanthanoids
Actinoids

Allow other elements

Figura 11. Layout della pagina Encyclopedia di NOMAD

Search for materials information by chemistry, composition, or property.

Materials Search

Only Elements
 At Least Elements
 Formula

* Select elements to search for materials with **only** these elements

H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La-Ce	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac-La	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			

Filters Reset

▶ Composition

▶ Thermodynamics

All 146,323 materials
Showing 1-15

Material ID	Formula	Crystal System	Space Group Symbol	Sites
mp-862690	Ac	Hexagonal	P6 ₃ /mmc	4

Figura 12. Layout della pagina Materials Explorer di Materials Project

Tabella 3. Elenco filtri

ID	Label	Descrizione	Query
Query legate alla provenienza del dato			
Q1.1	Ricerca per affiliazione	La query restituisce le informazioni in base all'affiliazione	{ "provenance.publisher":X }
Q1.2	Ricerca per più affiliazioni	La query restituisce le informazioni in base a più di una affiliazione	{ "provenance.publisher":{\$in: [X, Y]} }
Q1.3	Ricerca per nome progetto	La query restituisce le informazioni in base al nome di progetto	{ "project.name":X }
Q1.4	Ricerca per utente	La query restituisce le informazioni in base all'email del nome utente. Questa query viene eseguita solo dall'utente stesso per mostrargli i dati e i file da lui caricati.	{ "provenance.creator":X }
Q1.5	Ricerca per anno di pubblicazione	La query restituisce le informazioni in base all'anno della data di pubblicazione	{ "provenance.createdAt":{\$gte: X, \$lte:Y} } dove X = new Date(<year>, 01, 01) e Y = new Date(<year>+1, 01, 01)
Q1.6	Ricerca per data di pubblicazione	La query restituisce le informazioni se la data di pubblicazione è successiva ad una certa data o compresa in un range	{ "provenance.createdAt":{\$gte: X, \$lte:Y} } oppure { "provenance.createdAt":{\$gte: X, \$lte:Y} }
Query legate al materiale			
Q2.1	Ricerca per elementi	La query restituisce i processi dove il materiale riporta tutti gli elementi richiesti dall'utente	{ "material.elements": {\$all: [X, Y]} }
Q2.2	Ricerca per elementi in modo separato	La query restituisce i processi unici dove il materiale riporta almeno un elemento tra quelli richiesti dall'utente	{ "material.elements": {\$in: [X, Y]} }
Q2.3	Ricerca per formula	La query restituisce il processo in base alla formula del materiale	{ "material.formula": X }
Query legate al processo			
Q3.1	Ricerca per identificativo	La query restituisce il processo in base all'identificativo	{ "iemapID": X }
Q3.2	Ricerca processi computazionali	La query restituisce i processi se legati a	{ "process.isSimulation": true }

		simulazioni	}
Q3.3	Ricerca processi sperimentali	La query restituisce i processi se legati a esperimenti	{ "process.isExperiment": true }
Q3.4	Ricerca per codice computazionale	La query restituisce i processi computazionali in base al codice con cui è stato eseguito	{ "process.isSimulation": true, "process.calculation.agent.name": X }
Q3.5	Ricerca per strumento	La query restituisce i processi sperimentali in base allo strumento con cui è stato condotto l'esperimento	{ "process.agent.name": X }
Q3.6	Ricerca per metodo computazionale	La query restituisce i processi computazionali in base al metodo utilizzato	{ "process.method": X }
Q3.7	Ricerca per tecnica sperimentale	La query restituisce i processi sperimentali in base alla tecnica utilizzata	{ "process.method": X }
Query legate ai parametri di processo			
Q4.1	Ricerca per parametro	La query seleziona i processi in base al nome del parametro	{ "parameters.X" }
Q4.2	Ricerca per il valore di un parametro	La query restituisce i processi in base al valore di un parametro	{ "parameters.X": Y }
Query legate alle proprietà di processo			
Q5.1	Ricerca per proprietà	La query seleziona i processi in base al nome della proprietà	{ "properties.X" }
Q5.2	Ricerca per valore di una proprietà (caso scalare)	La query restituisce i processi in base al valore della proprietà	{ "properties.X": Y }

IEMAP - Explore Page (Details)

https://mission-innovation.it/iemap/materials/iempa-ID

ENEA

MISSION INNOVATION ITALY

User Name 

ABOUT MI ITALIA ▾ HYDROGEN VALLEY ▾ SMART GRID ▾ MATERIALS FOR ENERGY ▾ NEWS ▾ EVENTI ▾ DOCUMENTI ▾

Filters

Structure Project Process Other

Checkbox

Checkbox

ComboBox ▾

Text Area

Radio Button

Search By

1																	2
H																	He
3	4											5	6	7	8	9	10
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
11	12											13	14	15	16	17	18
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
87	88	89	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og
58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71				
Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu				
90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103				
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr				

Material (iemap-ID) ▲	Formula ⇅	Experimental ▼	Computational ▼
iemap-1001	Cr3NiTi	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
iemap-3546	MnNaO2	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
iemap-9826	Ac2AgNi	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
iemap-325	Al2CdO4	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

Figura 13. Layout della pagina iniziale della sezione 'Explore' con risultati

4.3 Analyze page

Questa sezione è dedicata e resa accessibile agli utenti base e partner. La sezione permette di accedere allo strumento chiamato Jupyter Hub, ovvero un servizio multiutente per la definizione e l'esecuzione di notebook. Tale servizio è stato pensato e progettato per le organizzazioni, scuole e laboratori di ricerca.

La pagina 'Analyze' potrebbe reindirizzare ad un cluster interno ENEA che possa offrire tale servizio fornendo il token dell'utente (ad es. PAM, OAuth, ...). In questo modo il servizio Jupyter Hub può mantenere lo stato di ciascun utente.

In Figura 14 un esempio di interfaccia verso un servizio Jupiter Hub.

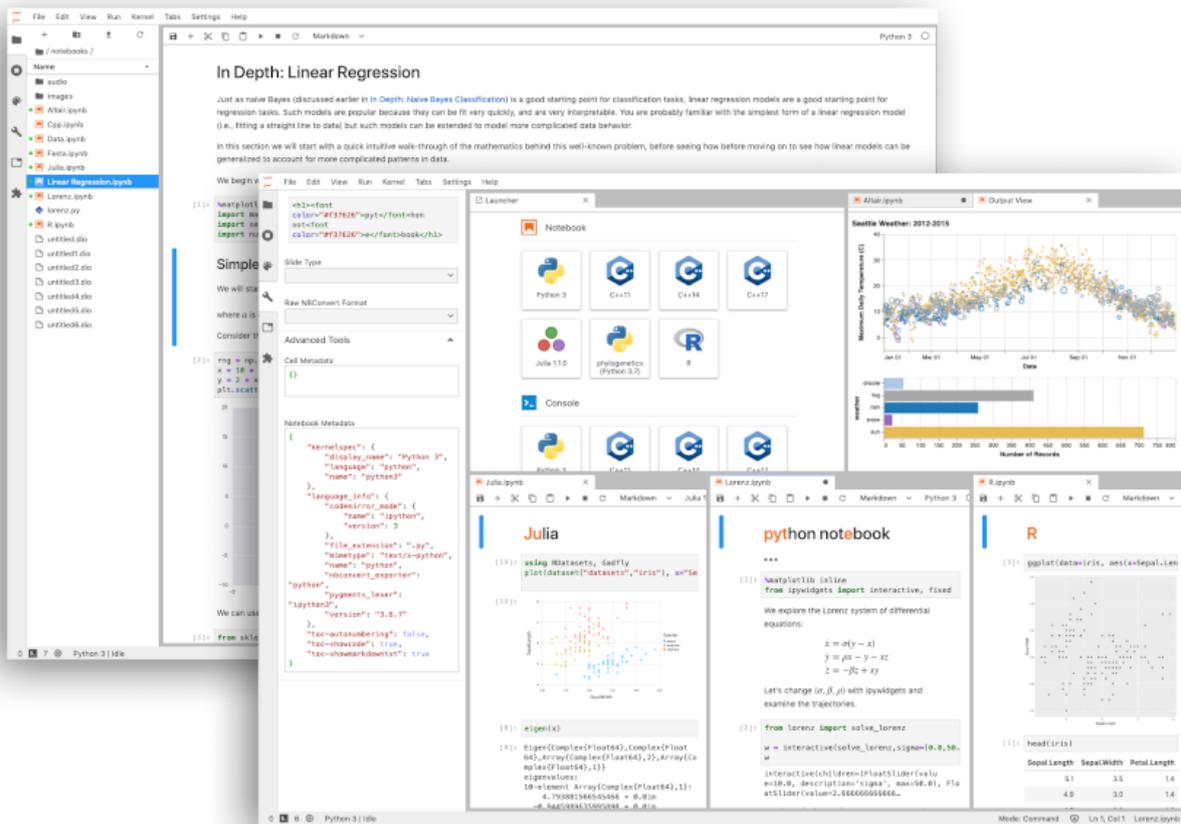


Figura 14. Notebook gestiti dal servizio Jupiter

5 Dati caricabili dagli utenti

I dati manipolati dalla piattaforma informatica consistono in due tipologie: metadato e file generici.

I file caricabili dagli utenti supportati sono i formati maggiormente utilizzati, ovvero doc, docx, pdf, txt, csv, ecc., mentre il formato del metadato riporta la struttura in Tabella 4. Il metadato può essere caricato sulla piattaforma in formato JSON, fondamentale per i processi automatizzati, e in Excel, egualmente importante per gli utenti che hanno maggiore familiarità con la suite Microsoft.

E' consigliabile avere all'interno della piattaforma IEMAP due posti distinti dove conservare i dati e i rispettivi metadati. I dati hanno bisogno di sistemi di storage importanti con software dedicato alla gestione di grandi moli di dati, invece i metadati possono essere conservati all'interno di un gestore di database. Il database di riferimento per IEMAP è MongoDB descritto nel deliverable D1.4.

Tabella 4. Struttura metadato caricabile dall'utente

Nome	Tipo	Indice	Descrizione
project	Object		Progetto a cui il processo si lega
project.name	String		Work Package di progetto
project.label	String	Yes	Etichetta di progetto
project.description	String		Descrizione del progetto
process	Object		Entità che definisce i dati inerenti al processo
process.isExperiment	Boolean	Yes	True se il processo è sperimentale; altrimenti False
process.method	String		Metodo computazionale o tecnica sperimentale
process.agent	Object		Informazioni su codice o strumento (name e version)
material	Object		Informazioni sul materiale analizzato
material.formula	String		Formula del materiale
material.InCh	String		International Chemical Identifier – testo usato per definire in modo inequivocabile una struttura composta. Formato supportato da IUPAC.
parameters	List		Lista dei parametri di processo. Ciascun elemento della lista, ovvero il parametro, è un oggetto composto da <i>name</i> e <i>value</i>
properties	List		Lista delle proprietà ricavate dal processo. Ciascun elemento della lista, ovvero la proprietà, è un oggetto composto da <i>name</i> , <i>value</i> e <i>unit</i> .

5.1 Valorizzazione

La valorizzazione dei campi e la loro messa in comune permettono di rendere omogeneo il contenuto e una ricerca efficiente ed efficace dei dati. A tal fine è stato condiviso un template file a tutti i partner che hanno la possibilità di accedervi e modificare/aggiungere i valori di interesse. In particolar modo i campi Parameters, riportati e Properties sono stati riportati rispettivamente in Tabella 5 e in Tabella 6.

Tabella 5. Lista dei parametri

Field name	Type	Description
EXPERIMENTAL PROPERTIES FIELDS		
temperature	Float	Temperature in (°C) as unit
pressure	Float	Pressure in (mbar) as unit
flow	Float	Flow in (ml) as unit
wavelength	Float	Wavelength in (nm) as unit
frequency	Float	Frequency in (Hz) as unit
current	Float	Electrical current in Ampere (A) as unit
printing force	Float	Printing force in Newton (N) as unit
printing speed	Float	Printing speed in (m/min) as unit
precursor materials	Array	List of precursor materials
precursor details	String	Details of precursor material
antisolvent	String	Antisolvent
solvents	String	Solvents
solution details	String	Details of solution
relevant fabrication parameters	String	
experimental conditions	String	
film appearance	String	
Resonance frequency	Float	Resonance frequency (in MHz) of the magnetically active nucleus
Ionization method	Float	Ionization method used in the HRMS experiment
Wavenumber range	String	Range of wavenumbers (in cm ⁻¹) scanned in the FT-IR experiment, in the micro-Raman and ATR-FTIR experiments
Sample state	String	Physical state of the sample
Wavelength range	String	Range of wavelengths (in nm) scanned in the UV-Vis or fluorescence experiment
Excitation wavelength	Float	Excitation wavelength (in nm) of the sample in the fluorescence experiment
Support	String	Material used as an inert support for the compound studied
Solvent	String	Solvent used in the experiment
Internal standard	String	Internal standard used as reference for potentials in the cyclic voltammetry experiment
Working electrode	String	Working electrode used in the cyclic voltammetry experiment and galvanostatic charge/discharge cycles
Reference electrode	String	Reference electrode used in the cyclic voltammetry experiment and galvanostatic

		charge/discharge cycles
Support electrolyte	String	Composition of the support electrolyte in the cyclic voltammetry experiment
Potential range	String	Range of potentials (in V, vs. the reference) scanned in the cyclic voltammetry experiment.
pH	Float	pH value
Concentration	Float	Concentration (M)
Temperature	Float	Temperature (°C)
Reaction time	Float	Time (min)
Pressure	Float	Pressure (Bar)
Rotation speed	String	Float
Electrolyte medium	String	Electrolyte used for the cyclic voltammetry experiment and galvanostatic charge/discharge cycles
Solar irradiance	Float	Irradiance in W m ⁻²
time	String	min
scan rate	Float	°C/min
COMPUTATIONAL PROPERTIES FIELDS		
calculation	String	
exchange_correlation	String	

Tabella 6. Lista delle proprietà

Field name	Type	Description
EXPERIMENTAL PROPERTIES FIELDS		
cte	Float	Coefficient of thermal expansion (°C ⁻¹)
young module	Float	Young's modulus (dyne/cm ²)
transmittance	Float	Transmittance in percentage (%)
reflectance	Float	Reflectance in percentage (%)
workfunction	Float	Workfunction in (eV)
resistivity	Float	Resistivity in (ohm)
plasma characteristics	Array of Float	(I,V,W)
weight	Float	Weight in (g)
density	Float	Density in (g/cm ³)
corona treatment	Float	Corona treatment in (W)
viscosity	Float	Viscosity in (mPas)
layer conductivity	Float	Layer conductivity in (S/cm ²)
purity	Float	Purity in (wt.%)
ionic conductivity	Float	Ionic conductivity in (mS cm ²)
thermal stability	Float	Thermal stability in (°C)
electrochemical stability	Float	Electrochemical stability in (V)
photoluminescence quantum yield	Float	Photoluminescence quantum yield in (%)
raman analysis	Float Bi-dimensional	Chemical bonds/Intensity of ligh as a function of Raman shift
ftir analysis	Float Bi-dimensional	Chemical bonds/intensity of ligh as a function of light frequency
x-ray diffraction	Float Bi-dimensional	Semi-quantitative recognition of crystallographic phases and crystallite size/Intensity as a function

		of the diffracted angle
afm	Float Bi-dimensional	Surface morphology/ Height profile as a function of the position
dynamic light scatytering	Float Bi-dimensional	Particle size dimension distribution/ Number of particles as a function of particle size
1H-NMR spectrum	String	List of peaks and multiplicities of the 1H-NMR spectrum
13C-NMR spectrum	String	List of peaks of the decoupled 13C-NMR spectrum
m/z	Float	Mass-to-charge ratio obtained from the MS spectrum
IR spectrum	String	List of peaks (in cm-1) of the IR spectrum
Maximum absorption wavelength	Float	Maximum absorption wavelength (in nm)
Molar attenuation coefficient	Float	Molar attenuation coefficient (in M-1 cm-1)
Zero-zero transition energy	Float	Zero-zero transition energy (in eV)
Maximum emission wavelength	Float	Maximum emission wavelength (in nm)
Ground state oxidation potential	Float	Ground state oxidation potential (in V, vs. the reference)
Excited state oxidation potential	Float	Excited state oxidation potential (in V, vs. the reference)
Sample state	String	Physical state of the sample
Size of nanoparticles	String	Size of obtained material measured by TEM analysis (nm)
Film thickness	String	Value measured by SEM or profilometer
Energy gap	String	Energy gap value measured by DRS analysis, transmittance analysis or Tauc plots (eV)
Lifetime	String	Average lifetime of emission (nsec)
Roughness	String	Average roughness of thin films (nm)
Raman spectrum	String	List of peaks of the Raman spectrum
ATR-FTIR spectrum	String	List of peaks of the FTIR-ATR spectrum
DSC thermograms	String	List of endothermic and exothermic peaks
XPS spectrum	String	List of peaks of the XPS spectrum
Electrolyte viscosity	String	Poise (Pa • s)
Electrode resistivity	String	ohm • cm
Specific capacitance	String	F/g
Areal capacitance	String	F/cm2
Photocurrent	String	mA cm-2
Electrolyte ionic conductivity	String	S cm-1
Poisson rate	Float	
Moisture content	Float	ppm
COMPUTATIONAL PROPERTIES FIELDS		
band gap	Float	Band gap in (eV)
total_energy	Float	Total energy in (eV)
formation_energy	Float	Formation energy in (eV)
redox potential	Float	Redox (intercalation) potential in (V)
volume	Float	volume in (mm3)
Poisson rate	Float	

5.2 Documentazione online

A supporto degli utenti sulla comprensione del corretto flusso di caricamento dati e della struttura dati è stato creato un sito online contenente la documentazione. Il sito è momentaneamente reperibile al link <https://iemap-api.readthedocs.io/en/latest/index.html>.

Alcune pagine di esempio sono state riportate in Figura 15.

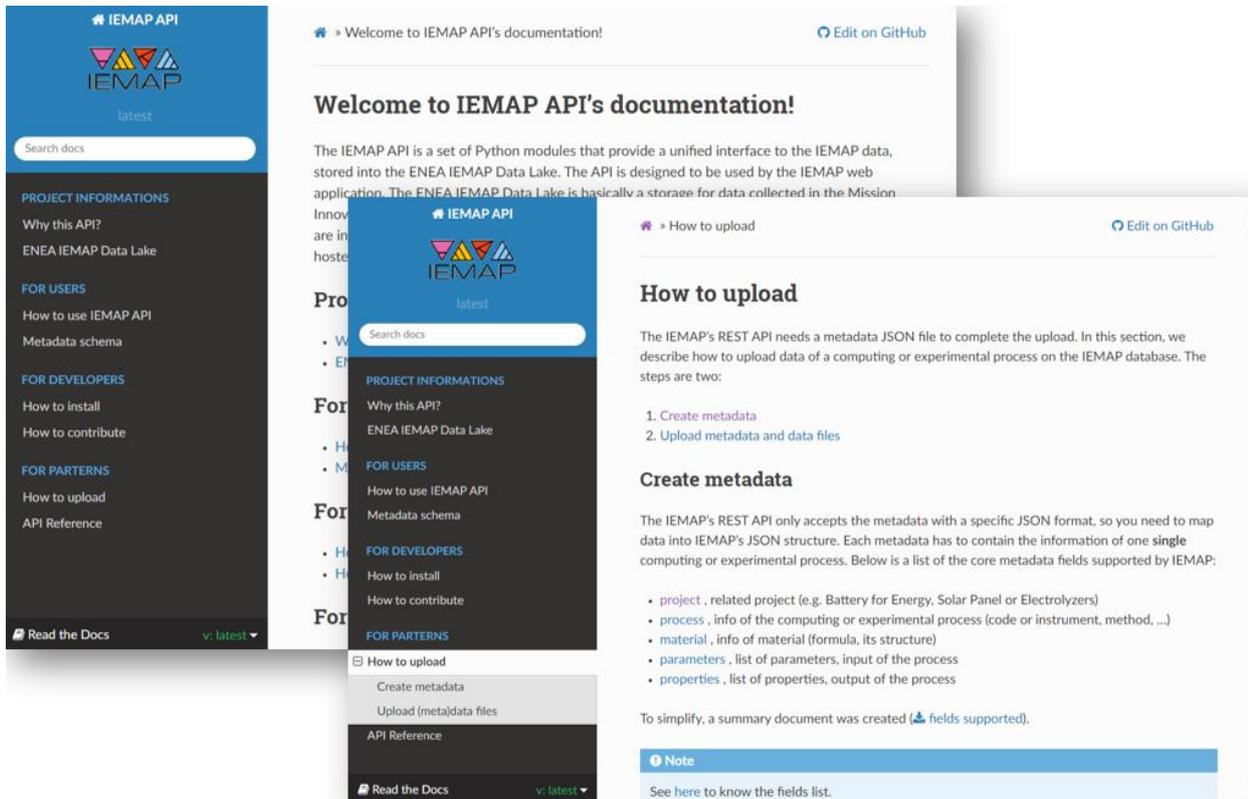


Figura 15. Sito per la documentazione a supporto degli utenti

6 Conclusioni

La piattaforma IEMAP utilizza i servizi web per rendere semplice ed intuitivo l'utilizzo degli strumenti realizzati dal progetto.

I siti di riferimento di IEMAP per la gestione dei dati sono tre:

- <https://www.mission-innovation.it> : questo sito è dedicato a fornire informazioni agli utenti
- <https://iemap.enea.it> : questo sito è il portale dati di IEAMP e rende possibile attraverso una interfaccia semplice ed intuitiva gestire i dati generati in IEMAP
- <https://iemap-api.readthedocs.io/en/latest/index.html> : questo sito condivide informazioni di base ed avanzate sull'utilizzo dei servizi e strumenti IEMAP.

Questo rapporto riporta indicazioni sui servizi e strumenti che sono necessari sul portale IEMAP per una gestione condivisa dei dati e dei loro metadati. Queste indicazioni sono il frutto di una co-progettazione realizzata insieme ai laboratori IEMAP in modo da armonizzare le esigenze dei ricercatori con quelle infrastrutturali definite dalla disponibilità dell'ambiente virtuale e dai suoi servizi.

7 Bibliografia

- Draxl, C. a. (2018). NOMAD: The FAIR concept for big data-driven materials science. *Mrs Bulletin*, 23(9), 676--682.
- Jain, A. a. (2013). Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation. *APL materials*, 1(1), 011002.