Wissenschaftliche Softwareentwicklung

28. Datenaufnahme: Metadaten

Till Biskup
Physikalische Chemie
Universität Rostock
19.01.2024

Zentrale Aspekte

- Daten ohne Metadaten sind wertlos.
  Beide zusammen bilden eine untrennbare Einheit.
- Die Information ist bei Datenaufnahme maximal.
  Eine sinnvolle Reduktion ist die eigentliche Herausforderung.
- Metadaten sollen den Auswertungsroutinen
  ein semantisches Verständnis ermöglichen.
- Metadaten sollten strukturiert und für Mensch
  und Maschine lesbar abgelegt werden.
- Ein Format für Metadaten sollte plattformunabhängig
  und möglichst einfach nutzbar sein.

Übersicht

Bedeutung: Daten ohne zusätzliche Informationen sind wertlos

Zielstellung: semantisches Verständnis durch Auswertungsroutinen

Kriterien für eine formalisierte Ablage von Metadaten

Ein reales Beispiel: die Infodatei

Daten ohne Metadaten sind wertlos

Metadaten sollten fünf Fragen beantworten

- Datenerhebung findet immer in einem Kontext statt.
  - Was zur Spezifität des Kontextes gehört,
    muss immer im Einzelfall geklärt werden.
- Metadaten sollten fünf Fragen beantworten:
  - Wer hat
  - was
  - mit wem
  - wann und
  - wie gemacht?

☛ Gilt sowohl für die eigentliche Datenaufnahme
als auch später für jeden Verarbeitungsschritt der Daten.

Datensatz

Einheit von (numerischen) Daten und
über die Daten verfügbare Informationen (Metadaten)

- Daten und Metadaten immer gemeinsam ablegen
  - nicht notwendigerweise in derselben Datei
  - konkrete Implementierung nebensächliches Detail (DIP)
- Importroutinen lesen die Metadaten mit ein.
  - Nur so wird ein semantisches Verständnis der Daten durch die Auswertungsroutinen ermöglicht.

☛ Datensatz entsprechend in Software implementieren (als Teil des „Kerns der Anwendung“, vgl. DDD)

Daten und Metadaten bilden eine Einheit

Ein alltägliches Beispiel: Blister-Verpackung von Tabletten

Auswahl der „richtigen“ Metadaten

Die eigentliche intellektuelle Herausforderung

These

Die Menge verfügbarer Informationen ist
während der Datenaufnahme maximal.

- Verantwortung des Experimentators
  - aus der Summe der verfügbaren Informationen
    die relevanten auswählen und dokumentieren
- Welche Informationen sind relevant?
  - häufig eine Frage der Erfahrung
  - auf der Erfahrung anderer aufbauen
  - Heuristiken anwenden

Auswahl der „richtigen“ Metadaten

Eine Übersicht möglicher Heuristiken

- allgemeine wichtige Informationen
  - Datum
  - Durchführende(r)
  - Probe
  - Temperatur
- verwendete Messapparatur
  - bei mehreren ähnlichen Geräten mit gleichem Datenformat
  - Information geht beim Export der Daten oft verloren.
- Aufbau aus austauschbaren Komponenten
  - Hersteller und Typenbezeichnung für jede Komponente
  - wichtige Parameter für jede Komponente
  - ggf. Metadaten nach Komponenten geordnet ablegen

☛ Erhebung der relevanten Metadaten formalisieren

Übersicht

Bedeutung: Daten ohne zusätzliche Informationen sind wertlos

Zielstellung: semantisches Verständnis durch Auswertungsroutinen

Kriterien für eine formalisierte Ablage von Metadaten

Ein reales Beispiel: die Infodatei

Semantisches Verständnis: Voraussetzungen

Die Auswertungsroutinen sollten die Daten „verstehen“ können.

Semantik

Wissenschaft von der Bedeutung der Zeichen;
Zeichen können auch Sätze, Satzteile, Wörter oder Wortteile sein.

- Computer können nicht denken.
  - „Verständnis“ ist in diesem Kontext immer relativ zu sehen.
- Formalisierung der Informationen
  - Der Mensch ist viel flexibler bei der Mustererkennung . . .
- strukturierte Ablage innerhalb der Software
  - als Schlüssel-Wert-Paare
  - assoziatives Datenfeld (zunächst) am Besten geeignet

Lösung: Das assoziative Datenfeld

Strukturierte Ablage von Informationen in einer Datenstruktur

Geordnete Listen

#	Wert
1	0.0000
2	0.0025
3	0.0050
⋮	
n-1	0.0600
n	0.0625

#	Wert
1	'Im'
2	'Anfang'
3	'war'
⋮	
n-1	'die'
n	'Tat'

Assoziative Datenfelder

Schlüssel	Wert
Name	'K. Racht'
Alter	42
Adresse	
Hobbies	{'...','...'}

Schlüssel	Wert
Straße	'Talstraße'
Nummer	21

Lösung: Das assoziative Datenfeld

Strukturierte Ablage von Informationen in einer Datenstruktur

assoziatives Datenfeld

Datenstruktur, die nichtnumerische Schlüssel verwendet,
um die enthaltenen Elemente zu adressieren.

- Bezeichnung je nach Programmiersprache unterschiedlich
  - *map*, *dictionary*, *associative array*, *hash*, *struct*
- Schlüssel in keiner bestimmten Reihenfolge abgelegt

- ☛ Schlüsselnamen sollten eine nachvollziehbare Verbindung zwischen Schlüssel und Feldinhalt liefern.
- ☛ Sorgt für ausdrucksstarken, *lesbaren* Code.

Beispiele für Anwendungsmöglichkeiten

Eine Liste von Ideen

- einfaches Beispiel: Achsenbeschriftung
  - Informationen (Größe und Einheit) entsprechend ablegen
  - Achsenbeschriftungen weitestgehend automatisierbar
- einfaches Beispiel: Abbildungsunterschrift
  - alle wichtigen Kenndaten über einen Datensatz bekannt
  - Abbildungsunterschrift automatisch generierbar
- komplexeres Beispiel: Einheitenkonvertierung
  - Voraussetzungen: Einheit, Umrechnungsvorschrift
  - Umrechnungsroutine bekommt Ausgangs- und Zieleinheit
  - generisch, wenn die Dimension von Einheiten bekannt ist
- einfache Überprüfung auf Konsistenz
  - Bsp: zwei Datensätze sollen aufeinander addiert werden.
  - Achseninformation erlaubt Überprüfung auf Kompatibilität

Beispiele für Anwendungsmöglichkeiten

Zwei konkrete Beispiele der Umsetzung in realen Code

Listing 1: Beispiel für automatisch erzeugte Achsenbeschriftungen

```
def _set_axes_labels(self):
    xlabel = self._create_axis_label_string(self.dataset.data.axes[0])
    ylabel = self._create_axis_label_string(self.dataset.data.axes[1])
    self.axes.set_xlabel(xlabel)
    self.axes.set_ylabel(ylabel)

@staticmethod
def _create_axis_label_string(axis):
    label = '$' + axis.quantity + '$' + ' / ' + axis.unit
    return label
```

- ausdrucksstarker Code durch intuitive Benennung
- Größe kursiv, Einheit aufrecht, Schrägstrich als Trenner

Listing 2: Beispiel für Überprüfung von Achsen auf Konsistenz

```
if dataset1.data.axes[0].values == dataset2.data.axes[0].values:
    # Do something with datasets, e.g., add them up
```

- Es gibt noch viel komplexere Überprüfungsmöglichkeiten . . .

Übersicht

Bedeutung: Daten ohne zusätzliche Informationen sind wertlos

Zielstellung: semantisches Verständnis durch Auswertungsroutinen

Kriterien für eine formalisierte Ablage von Metadaten

Ein reales Beispiel: die Infodatei

Kriterien für die Ablage von Metadaten

Nutzbar von Mensch und Computer, erweiterbar, nutzerfreundlich

- einfach von Nutzern zu schreiben
  - modulares, elektronisches Laborbuch
  - plattformunabhängig während der Messung ausfüllbar
- eindeutig parsbar
  - für den Computer (einfach) erkennbare Struktur
- robust gegenüber Fehlern des Nutzers
  - möglichst tolerant und flexibel
  - wenige, klar kommunizierte (und nachvollziehbare) Regeln
- einfach erweiterbar
  - modularer Aufbau mit „logischer“ Ergänzung
  - Anforderungen entwickeln sich in der Praxis weiter.

☛ Das Medium für die Ablage der Metadaten ist sekundär (DIP).

Lesbar für Mensch und Computer

Die einfache Nutzung durch den Menschen steht im Fokus.

- Kompromiss
  - Parsbarkeit durch den Computer ist nicht verhandelbar.
  - so einfach, intuitiv und nutzerfreundlich wie möglich
- Kriterien
  - möglichst wenig unnötige Schreibarbeit (*kein* XML)
  - offensichtliche, vertraute Struktur für den Nutzer
- Fehlertoleranz
  - zusätzlichen Leerraum (Leerzeichen etc.) ignorieren
  - ggf. Routinen zur Überprüfung schreiben, die den Nutzer frühzeitig und verständlich auf Probleme hinweisen

☛ Nur was sich einfach nutzen lässt, wird genutzt werden.

☛ Metadaten sind zu wichtig, um nicht notiert zu werden.

Open-Closed-Prinzip

offen für Erweiterungen, verschlossen gegenüber Änderungen

- Flexibilität bei gleichzeitiger Abwärtskompatibilität
  - Die Grundstruktur sollte sauber überlegt werden.
  - Abwärtskompatibilität beim Import ist zentral.
- Möglichkeit eines Freitext-Kommentars
  - Es gibt immer zusätzliche, wichtige Beobachtungen.
  - Das Kommentarfeld sollte beliebige Formatierung erlauben.
  - Tauchen immer wieder die gleichen Informationen auf, sollte das Format entsprechend erweitert werden.

Übersicht

Bedeutung: Daten ohne zusätzliche Informationen sind wertlos

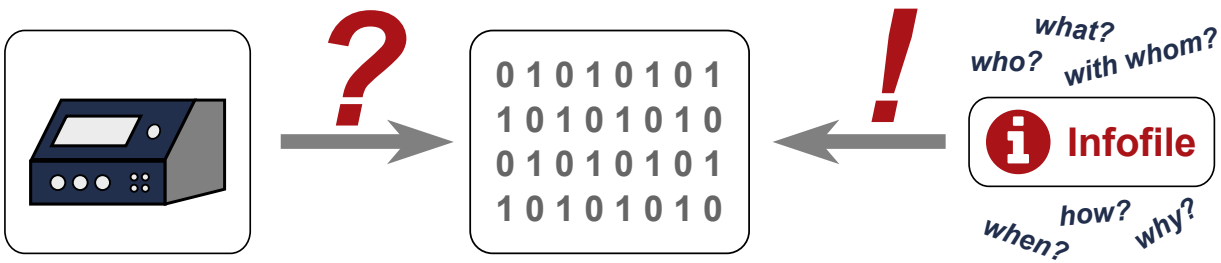
Zielstellung: semantisches Verständnis durch Auswertungsroutinen

Kriterien für eine formalisierte Ablage von Metadaten

Ein reales Beispiel: die Infodatei

Towards more reproducible and FAIRer research data: documenting provenance during data acquisition using the Infofile format

*Bernd Paulus, Till Biskup**



Digital Discovery **2**:234–244, 2023

Kriterien bei der Entwicklung

Der Mensch im Fokus – unter Erhalt der Parsbarkeit

- Ausgangspunkt: „Liesmich“-Datei eines Chemotechnikers
  - elektronisches Laborbuch direkt bei den Daten
  - Beobachtungen und Informationen zur Messung

Kriterien

- maschinenlesbar und vom Menschen les- und schreibbar
  - Fokus: Les- und *Schreibbarkeit* durch den Menschen
  - Voraussetzung: (einfache) Parsbarkeit
- Reintext (ASCII-7-Bit-Zeichensatz)
  - Grund: mangelnde Unterstützung von Unicode in MATLAB
- eindeutige Identifizierbarkeit des Dateiformats
  - durch eine Kennung in der ersten Zeile

Eine minimale Infodatei

Ein praktisches Beispiel – als Grundlage der weiteren Diskussion

Listing 3: Beispiel für eine (minimale) Infodatei

```
common Info file - v. 0.1.0 (2014-04-04)

GENERAL
Filename:               data01
Date start:             2014-04-04
Time start:             11:05:00
Date end:               2014-04-04
Time end:               15:50:00
Operator:               Max Mustermann
Label:                  My first measurement
Purpose:                Kill time

SAMPLE
Name:                   xxxCry WT, Peak 2
ID:                     42
Description:            Peak 2 aus der xxxCry WT Expression
Solvent:                50 mM Phosphat, 20% Glycerin
Preparation:            Frisch exprimierte Probe aus Uebernachtanzucht

TEMPERATURE
Temperature:            270 K

COMMENT
Und hier gibt's ein bisschen Freitextkommentar - aber bitte OHNE Sonderzeichen!
```

Grundsätzlicher Aufbau

In Anlehnung an das Format von Windows-INI-Dateien

- allgemein
  - Blöcke mit Schlüssel-Wert-Paaren
  - erste Zeile zur Identifizierung von Format und Version
- Feldnamen
  - werden mit Doppelpunkt vom Feldinhalt getrennt
  - dürfen keine Doppelpunkte im Namen selbst tragen
  - Leerzeichen sind erlaubt
  - müssen mit einem Buchstaben beginnen
- Leerraum (Leerzeichen, Tabulator, ...)
  - wird ignoriert, wenn er nach Feldnamen und vor und nach Feldinhalten auftritt
  - Feldinhalte *können* vertikal ausgerichtet werden.

Grundsätzlicher Aufbau

In Anlehnung an das Format von Windows-INI-Dateien

- Zeilenumbrüche in Feldern
  - Folgezeilen müssen mit Leerraum beginnen.
- Kommentare auf einer Zeile
  - Alles hinter dem Kommentarzeichen wird ignoriert.
  - Kommentarzeichen selbst durch Backslash verwendbar
- Der letzte Block ist für Kommentare vorbehalten.
  - Im Kommentar ist jegliche Formatierung erlaubt.
  - Alles ab der Blocküberschrift bis zum Dateiende wird als Kommentar interpretiert und nicht geparst.
  - Wiederkehrende Informationen sollten als neue Felder in die Infodatei aufgenommen werden.

☛ offenes, flexibles, modular erweiterbares Format

Anmerkungen zu einigen Feldern

Tipps aus der Praxis für die Entwicklung eigener Formate

- Datum und Uhrzeit für Beginn und Ende angeben
  - Messungen über den Tageswechsel bzw. mehr als 24 h
- Name des/der Messenden angeben
  - bei mehreren Namen durch Komma getrennt
- Zweck einer Messung angeben
  - hilfreich beim Verstehen einer Messung
    bzw. beim Wiederfinden des richtigen Datensatzes
- Proben mit eindeutigem Bezeichner (ID) versehen
  - im einfachsten Fall eine (fortlaufende) Nummer
- Werte mit Einheit
  - Größe und Einheit durch Leerzeichen getrennt
  - sinnvollerweise Beschränkung auf SI-Einheiten

Listing 4: Beispiel für eine Metadatendatei im YAML-Format

```
---
format:
  type: measurement metadata
  version: 0.1.0

general:
  start:
    date: 2017-05-27
    time: 08:00:00
  end:
    date: 2017-05-27
    time: 09:05:00
  operator: John Doe
  purpose: kill time

sample:
  name: PC71BM
  id: 42
  solvent: toluene

temperature:
  value: 270 K

comment: >
  Spektrometer hat sich mal wieder unartig verhalten.
```

Zentrale Aspekte

- Daten ohne Metadaten sind wertlos.
  Beide zusammen bilden eine untrennbare Einheit.
- Die Information ist bei Datenaufnahme maximal.
  Eine sinnvolle Reduktion ist die eigentliche Herausforderung.
- Metadaten sollen den Auswertungsroutinen
  ein semantisches Verständnis ermöglichen.
- Metadaten sollten strukturiert und für Mensch
  und Maschine lesbar abgelegt werden.
- Ein Format für Metadaten sollte plattformunabhängig
  und möglichst einfach nutzbar sein.