

# Programmierkonzepte in der Physikalischen Chemie

## 32. Datenrepräsentation: Darstellungs- und Berichterstellung

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg



**UNI  
FREIBURG**

Dr. Till Biskup

Institut für Physikalische Chemie  
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg  
Wintersemester 2017/18



- Ein Bild sagt mehr als tausend Worte: Der Wert guter Repräsentationen sollte nicht unterschätzt werden.
- Charakteristika eines Datensatzes herauszuarbeiten, ist die eigentliche intellektuelle Leistung der Auswertung.
- Erkenntnisgewinn lässt sich nicht automatisieren, viele Einzelschritte auf dem Weg dahin schon.
- Berichte präsentieren übersichtlich Informationen zu einem Datensatz und lassen sich automatisch erzeugen.
- Zentraler Aspekt der Berichterstellung ist die Trennung von verarbeitenden Routinen und Darstellung.

Zur Bedeutung der Repräsentation von Daten

Repräsentationen sollten aus den Primärdaten automatisch generierbar sein

Berichte: Übersicht über die Informationen zu einem Datensatz

Vorlagen: Trennung von Inhalten und Darstellung

# Ein Bild sagt mehr als tausend Worte

Große Wirkung bringt große Verantwortung mit sich.

- ▶ Wirkung grafischer Darstellungen nicht unterschätzen
  - Menschen sind sehr gut darin, Zusammenhänge visuell wahrzunehmen.
  - Mitunter erkennen wir mehr, als wirklich vorhanden ist...
- ▶ Verantwortung des Wissenschaftlers
  - Abbildungen dürfen nicht zu viel/das Falsche implizieren.
  - Oft implizieren Bilder ungewollt und unbeabsichtigt zu viel.
  - Kriterium: nur implizieren, was die Daten real hergeben
- ▶ „Aushängeschild“ der eigenen Forschung
  - „Ein gutes Bild sagt mehr als tausend Worte.“
  - Die Bedeutung sollte sich in der aufgewandten Sorgfalt bei der Erstellung von Darstellungen widerspiegeln.

# Repräsentationen sind nicht nur Bilder

Tabellarische Darstellungen können für Überblick sorgen.

- ▶ Repräsentationen können sowohl Abbildungen als auch Tabellen etc. sein.
  - entscheidend: Darstellung charakteristischer Parameter
- ▶ Repräsentationen können mehrere Datensätze umfassen.
  - Oft werden Zusammenhänge erst im Vergleich mehrerer Datensätze und ihrer Charakteristika deutlich.
- ▶ Beispiele für Aussagen aufgrund von Vergleichen
  - Verschiebung von Absorptionsbanden mit zunehmender Delokalisierung des aromatischen Systems
  - Linienbreiten in der EPR in Abhängigkeit der Temperatur
  - Kinetiken: Absorbanz bei einer Wellenlänge
  - Kinetiken: Vergleich der Zeitkonstanten (Tabelle)

# Auswertung ist (meist) nicht automatisierbar.

Viele Schritte auf dem Weg dorthin allerdings schon...



## These

Eine aussagekräftige Darstellung eines Datensatzes ist das Ergebnis der intensiven Beschäftigung mit den Daten und oft die eigentliche intellektuelle Leistung.

- ▶ Daten müssen meist vorverarbeitet werden.
  - Vorverarbeitung lässt sich automatisieren.
  - Historie sorgt für Nachvollziehbarkeit und Transparenz
- ▶ Sichten auf Daten lassen sich formalisiert ablegen.
  - intellektuelle Leistung: Welche Sicht ist relevant?
  - Die eigentliche Darstellung ist vollständig automatisierbar.

# Der Imperativ: „Kenne deine Daten“

Eine einheitliche Darstellung hilft bei der Übersicht.

- ▶ Verantwortung des Wissenschaftlers
  - solider und umfassender Überblick über die eigenen Daten
  - Dazu gehören auch repräsentative Darstellungen.
  
- ▶ Ausgangspunkt: die „Briefmarkensammlung“
  - gleichartig formatierte Darstellungen
  - hilft, auf die Unterschiede in den Daten zu fokussieren
  - Grundlage für Vergleiche zwischen Datensätzen
  
- ▶ Ziel: Verständnis von Zusammenhängen
  - setzt intime Kenntnis der Daten voraus
  - Hypothesen einfach anhand der Ergebnisse überprüfbar
  - Ideal: Daten verinnerlicht und vor dem inneren Auge
  
- ☞ wird im Kontext von Berichten noch bedeutsam

- ▶ Beschriftung von Abbildungen und Tabellen
  - Abbildungen haben *Unterschriften*, Tabellen *Überschriften*.
  - Abbildungen und Tabellen werden fortlaufend nummeriert.
  - Auf jede Abbildung/Tabelle wird aus dem Text verwiesen.
- ▶ Größen und Einheiten
  - Größe kursiv, Einheit aufrecht, Schrägstrich dazwischen
  - Einheiten *niemals* in eckigen Klammern
- ▶ Abbildungen
  - Achsenbeschriftungen in lesbarer Größe und konsistent
  - nie auf Farbe verlassen (Graustufen sollten funktionieren)
- ▶ Tabellen
  - nur horizontale Linien, sparsam eingesetzt
  - Linien zur Gruppierung von Inhalten verwenden

- ▶ **Zeitersparnis**
  - Die eigentliche Darstellung ist meist reine Routine.
  - Nicht nachdenken zu müssen, erspart Zeit.
  
- ▶ **Konsistenz**
  - einheitliche Formatierung
  - bessere Vergleichbarkeit untereinander
  
- ▶ **Fokussierung auf das eigentlich Wesentliche**
  - Analyse und Verständnis stehen im Mittelpunkt.
  - Charakteristika lassen sich abstrakt ablegen.
  
- ▶ **Voraussetzung für Berichterstellung**
  - Zusammenfassung der Charakteristika und Informationen
  - involviert häufig (grafische) Darstellungen

## ▶ Idee

- Formalisierung von Repräsentationen
- Fokussierung auf das „Was“ statt auf das „Wie“
- Ablage charakteristischer „Sichten“ auf Daten
- Minimierung der Notwendigkeit zur Nachbearbeitung

## ▶ Vorteile

- identische Darstellung unterschiedlicher Datensätze
- sorgt ggf. für Konsistenz und bessere Vergleichbarkeit
- Entkopplung von Datenquelle und Darstellung

## ▶ Voraussetzungen

- Routinen zur Erzeugung von Darstellungen
- weitgehende Konfigurierbarkeit
- Kontrolle über die einzelnen Darstellungsoptionen

### ▶ Daten

- Liste von Datensätzen
- wo möglich auf Rohdaten verweisen

### ▶ (Vor-)Verarbeitung

- notwendige Vorverarbeitungsschritte
- ggf. Extraktion der Charakteristika
- wird auf jeden Datensatz aus der Liste angewendet

### ▶ Darstellung

- genereller Typ (Abbildung: 1D, 2D, ...)
- allgemeine Formatierungen und Beschriftungen
- Details zur Formatierung

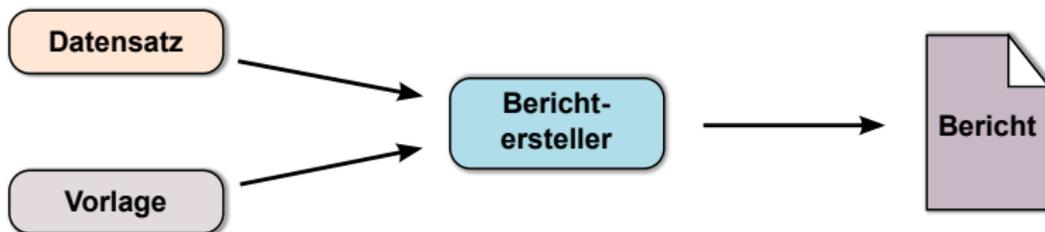
☞ auf Abbildungen und Tabellen gleichermaßen anwendbar

# Idee: Informationen zugänglich machen

Die Informationen sind vorhanden und wollen genutzt werden.

- ▶ Ein Gesamtsystem zur Datenverarbeitung erzeugt große Mengen an Informationen.
  - Informationen zur Datenaufnahme (z.B. Infodatei)
  - Informationen zur Datenverarbeitung (was, wie)
  - Informationen zu Charakteristika der Daten
  
- ▶ Ziel: Informationen zugänglich machen
  - Zusammenfassung der Charakteristika und Informationen
  - übersichtlich und lesbar aufbereitet
  - hilfreich für den Vergleich von Datensätzen untereinander
  
- ▶ Berichte sind oft hochspezifisch.
  - Übersichtliche Darstellung ist eine intellektuelle Leistung.
  - Berichte sollten strukturell unabhängig vom Datensatz sein.

- ▶ Verantwortung des Wissenschaftlers
  - solider und umfassender Überblick über die eigenen Daten
- ▶ Vergleich von Daten hilft beim Verständnis.
  - Muster oft nur durch Vergleich von Datensätzen erkennbar
  - Berichte möglichst gleichförmig und informativ
  - Fokus des Betrachters auf dem Vergleich, nicht auf dem Zusammensuchen der Informationen
  - Unterschiede treten entsprechend deutlich zutage.
- ▶ Beispiel: Ergebnisse von Kurvenanpassungen
  - meist relativ viele Parameter
  - Vergleich unterschiedlicher Anpassungen oft wichtig
- ☞ Berichte sollten automatisch erzeugt werden.



▶ vier Grundbestandteile

- Datenquelle
- Vorlage (*template*)
- Verarbeitungslogik
- Bericht

☞ Grundidee: Trennung der Präsentation von den darzustellenden Informationen und deren Erzeugung

- ▶ einfachstes Bild: Vorlage als „Lückentext“
  - Die „Lücken“ werden speziell markiert und gefüllt.
  - Das (Datei-)Format spielt (fast) keine Rolle.
  - intellektuelle Leistung: Ausarbeitung guter Vorlagen zur übersichtlichen Darstellung wichtiger Informationen
  
- ▶ Verarbeitungslogik für Vorlagen (*template engine*)
  - liest eine Vorlage und füllt die „Lücken“
  - beherrscht komplexere Ersetzungen
  - benötigt keinerlei Wissen über das Format der Vorlage
  
- ▶ Vorteile der Verwendung von Vorlagen
  - Trennung von Datenquelle, Verarbeitungslogik, Darstellung
  - Berichte mit gleicher Information in einer Vielzahl von Formaten bzw. Sprachen automatisiert generierbar

- ▶ Vorlagen parsbar und einfach veränderbar
  - Format muss Platzhalter und Steuercodes ermöglichen
  - ohne Kenntnis des Formats einlesbar und verarbeitbar
  - (beliebige) Textdateien geeignet, Binärformate i.d.R. nicht
  - Beispiele geeigneter Dateiformate:  $\text{\LaTeX}$ , ODF, HTML/XML, Markup-Formate (Markdown, DokuWiki, ...)
  
- ▶ Vorlagenverarbeitung unabhängig vom Vorlagenformat
  - keine Erzeugung formatspezifischer Ausgaben
  - Verarbeitung ausschließlich über Steuercodes
  
- ▶ Trennung von Vorlagenverarbeitung und Inhalterzeugung
  - Erzeugung von Darstellungen auslagern
  - Berichterzeugung greift auf Vorlagenverarbeitung zurück, generiert aber ggf. zusätzlich (Daten für) Darstellungen

- ▶ einfache Ersetzungen
  - Grundlage jedes Vorlagensystems
- ▶ Einbinden zusätzlicher Vorlagen
  - sorgt für Modularität und Flexibilität
- ▶ Schleifen
  - besonders wichtig für das Ausfüllen von Tabellen
- ▶ (einfache) Bedingungen
  - erhöht die Flexibilität von Berichten
- ▶ Formatierungsangaben für numerische Werte
  - insbesondere für Gleitkommazahlen
- ▶ freie Wahl der Begrenzer für Ersetzungs- und Steuercodes
  - abhängig vom Format der Vorlage

### ▶ Single Responsibility

- Die Verarbeitungslogik weiß nichts von Datenmodell oder Bericht, kann aber (komplexe) Ersetzungen vornehmen.
- Die Verarbeitungslogik ist modular einsetzbar.

### ▶ Liskov-Substitution

- Auch wenn die Datenquelle ein abgeleiteter Datentyp ist, funktioniert eine generische Berichterstellungsroutine.
- Erweiterungen sind abwärtskompatibel.

### ▶ Dependency Inversion

- Das Datenmodell weiß nichts vom Bericht, der Bericht aber vom Datenmodell.
- Berichte sind peripher, das Datenmodell zentral.
- Das Dateiformat des Berichtes spielt keine Rolle.

- ▶ **Berichterstellungsroutine**
  - nutzt Datensätze als primäre Datenquelle
  - greift auf Verarbeitungslogik für Vorlagen zurück
  - sorgt ggf. für die Erzeugung von Darstellungen etc.
  - sorgt für die Speicherung des fertigen Berichtes
  - greift ausschließlich auf separate Routinen zurück
  
- ▶ **Modularität sorgt für Flexibilität.**
  - Darstellungen als Metadaten abgelegt
  - Vorlagen für Teile von Berichten einsetzbar
  
- ☞ **Berichte sorgen für Überblick und Vergleichbarkeit.**
- ☞ **Eigentliche intellektuelle Herausforderung:**  
aussagekräftige, übersichtliche, zugängliche Struktur



- Ein Bild sagt mehr als tausend Worte: Der Wert guter Repräsentationen sollte nicht unterschätzt werden.
- Charakteristika eines Datensatzes herauszuarbeiten, ist die eigentliche intellektuelle Leistung der Auswertung.
- Erkenntnisgewinn lässt sich nicht automatisieren, viele Einzelschritte auf dem Weg dahin schon.
- Berichte präsentieren übersichtlich Informationen zu einem Datensatz und lassen sich automatisch erzeugen.
- Zentraler Aspekt der Berichterstellung ist die Trennung von verarbeitenden Routinen und Darstellung.