

# 团体标准

T/CSTM 00837—2022

## 材料基因工程数据 元数据标准化基本原则与方法

Materials genome engineering data—  
Metadata standardization principle and method

2022-08-31 发布

2022-11-30 实施

中关村材料试验技术联盟

发布

## 前 言

本文件参照 GB/T 1.1—2020 《标准化工作导则 第 1 部分：标准化文件的结构和起草规则》的规定起草。请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由中国材料与试验团体标准委员会材料基因工程领域委员会（CSTM/FC97）提出。

本文件由中国材料与试验团体标准委员会材料基因工程领域委员会通则技术委员会（CSTM/FC97/TC01）归口。

CSTM标准发布使用

## 引 言

材料基因工程通过数据驱动模式来加速材料研究，而当前材料数据离散分布、多源异构的现状特点使得数据的访问、获取、集成和再利用极为不便，严重制约了材料基因工程的高效推进。为此，中国材料与试验团体标准委员材料基因工程领域委员会（CSTM/FC97）制定了 T/CSTM 00120《材料基因工程数据通则》（以下简称《通则》），以 FAIR（Findable, Accessible, Interoperable, Reusable, 可发现、可获取、可互操作、可再利用）原则为目标来对材料数据进行标准化。《通则》将数据分为样品信息、原始数据（未经处理的数据）与衍生数据（经分析处理得到的数据）三类，以操作（样品制备/表征/计算/数据处理）为条目单位，在每条数据中需包含数据唯一标识、丰富的元数据记录及原始结果数据来保证其符合 FAIR 原则要求。这里，样品可以是实验产生的实物，也可以是经计算产生的虚拟物。同理，原始数据可以来自于表征或是直接的测量，也可以通过模拟计算产生。《通则》明确了材料基因工程数据的标准化内容和基本方向，仍需明确具体的标准化原则与方法作为标准编制的指导依据。

元数据是用于描述数据的数据，可对数据的产生背景、内容、过程及其它特征进行全面性描述，构成了数据访问和利用的实际承载基础，因此，材料数据标准化实现的关键在于其元数据的标准化。为促进材料数据标准化目标的切实落地和全面性开展，本文件基于《通则》要求，对材料基因工程数据（样品信息/原始数据/衍生数据）的元数据标准制定原则与方法进行明确，确保各元数据标准细则内容完整、形式一致，使其有效保障数据符合 FAIR 原则要求。

# 材料基因工程数据 元数据标准化基本原则与方法

## 1 范围

本文件规定了材料基因工程数据元数据（以下简称元数据）的术语和定义、标准化原则、分类和组成、标准化方法和标准化文件编写要求等。

本文件适用于材料数据采集、数据库存储模板结构、数据汇交和集成等数据规范化文件、设施的编制和开发等。

## 2 规范性引用文件

下列文件中的内容通过文中的规范性引用而构成本文件必不可少的条款。其中，注日期的引用文件，仅该日期对应的版本适用于本文件；不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

- GB/T 18391.1 信息技术 元数据注册系统（MDR） 第一部分：框架
- GB/T 19710 地理信息 元数据
- GB/T 30522 科技平台 元数据标准化基本原则与方法
- T/CSTM 00120 材料基因工程数据通则
- T/CSTM 00839 材料基因工程术语

## 3 术语和定义

GB/T 18391.1、GB/T 19710、T/CSTM 00839和T/CSTM 00120界定的以及下列术语和定义适用于本文件。

### 3.1

元数据 metadata  
定义和描述其他数据的数据。

[来源：GB/T 18391.1-2009，3.2.16]

### 3.2

元数据元素 metadata element  
元数据的基本单元。

注1：元数据元素在元数据实体中是唯一的。

注2：与 UML术语中的属性同义。

[来源：GB/T 19710-2005，4.6]

### 3.3

元数据模式 metadata schema  
从某种角度对资源整体进行描述所形成的元数据元素集合。

### 3.4

元数据实体 metadata entity  
一组说明数据相同特性的元数据元素。

注1：可以包含一个或多个元数据实体。

注2：与 UML术语中的类同义。

[来源：GB/T 19710-2005，4.7]

### 3.5

标识元数据 identification metadata

对数据进行识别、区分的元数据。

### 3.6

管理元数据 management metadata

对数据的产生背景、概况进行描述的元数据。

### 3.7

技术元数据 technical metadata

对数据产生的技术条件、结果进行描述的元数据。

### 3.8

描述单元 description unit

单个描述模式所覆盖的数据对象的特征范围。

### 3.9

元数据模式描述单元 metadata schema description unit

单个元数据模式所描述的对象。

### 3.11

样品信息 sample information

材料真实样品制备或加工过程产生的数据，或者虚拟样品以计算、仿真方式构建过程所产生的数据。

### 3.12

原始数据 source data

测量或计算产生的未经处理的表征数据。

[来源：T/CSTM 00120-2022，3.8]

### 3.13

衍生数据 derived data

对原始数据或者衍生数据进行分析后产生的结果数据。

[来源：T/CSTM 00120-2019，3.5]

## 4 标准化原则

元数据标准化的基本原则如下：

- a) 遵循科学数据管理的可发现、可获取、可互操作、可再利用原则设计元数据；
- b) 按CSTM 00120，以样品制备/表征/数据处理为条目单位描述元数据单元。元数据标准以可独立存在的条目单位（样品制备/表征/数据处理）所采用的方法为载体，以其数据产出操作为描述对象进行建设。

## 5 分类及组成

### 5.1 分类

元数据分为以下三类：

- a) 标识元数据：对数据进行唯一性标识，保证数据能够被查询解析到；

- b) 管理元数据：对数据的产生者、产生目的、产生环境、数据主题进行基本描述，为数据使用者提供数据概况和获取途径；
- c) 技术元数据：对数据产生的详细条件、结果进行完整描述，使数据使用者能够完整理解和重复利用数据。

5.2 组成

元数据模式由标识元数据、管理元数据和技术元数据三部分组成。

元数据模式应以标准化的形式来表达。明确其包含的元数据元素的详细定义，清晰表达元数据元素彼此间的相互关系，保障同主题不同来源数据在产生、采集、存储、交换和使用表达形式一致，具备互操作性。

6 标准化方法

6.1 标准化流程

元数据标准化流程见图1。

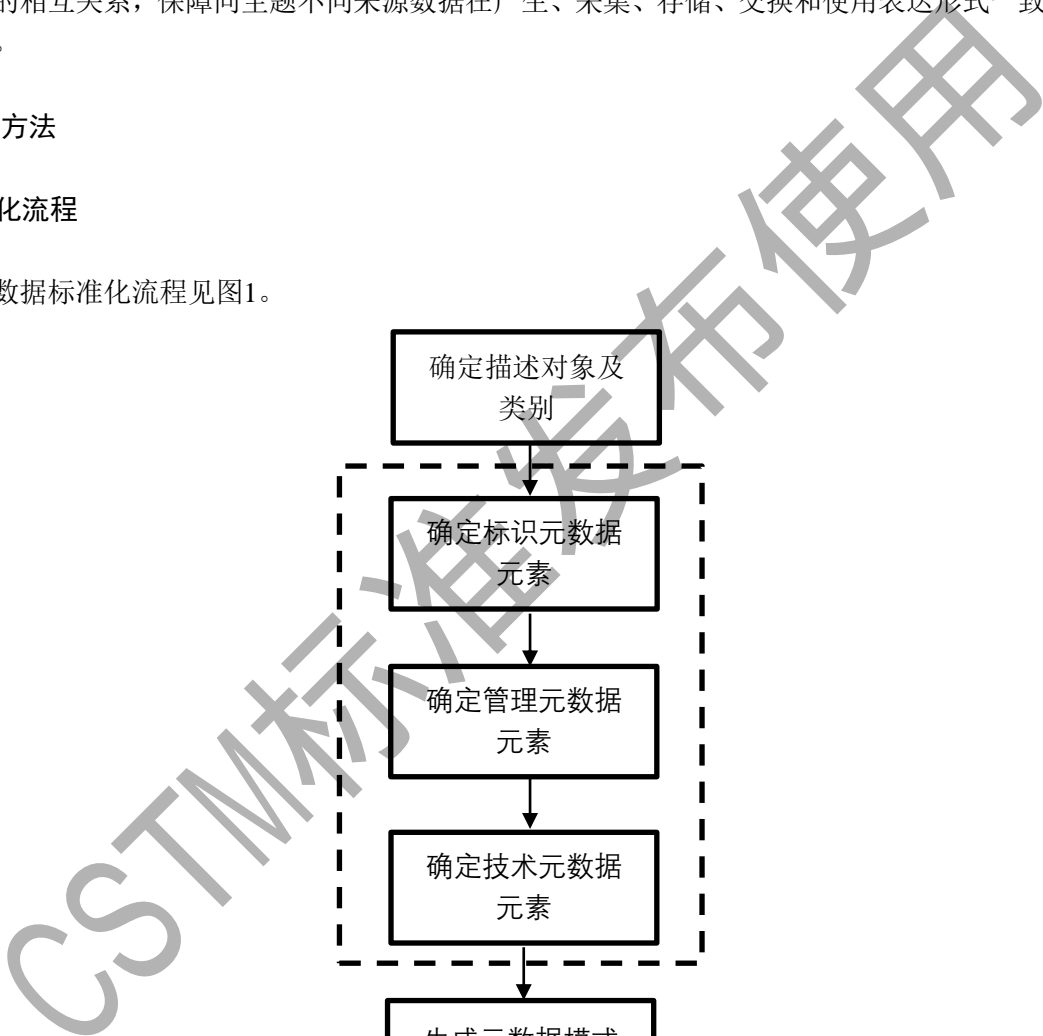


图1 元数据标准化流程

6.2 标准化步骤

### 6.2.1 确定描述对象及类型

按第4章的原则，确定拟建设元数据标准的描述对象；按CSTM 00120中数据分类，确定所描述数据的类型。

以离子束沉积（IBD）薄膜制备为例：元数据模式的描述对象为IBD样品的制备操作，所描述的IBD制备数据属于样品信息；以X射线衍射（XRD）表征为例，元数据模式描述对象为XRD的表征操作，所描述的XRD表征数据属于原始数据；以物相分析为例，元数据模式描述对象为基于XRD原始数据的物相分析操作，所描述的物相分析数据属于衍生数据。

### 6.2.2 确定元数据元素

#### 6.2.2.1 确定标识元数据元素

标识元数据元素包括如下元素：

- a) 数据唯一标识元素，在所有类型数据的元数据模式中必须存在；
- b) 关联数据标识元素，在所有类型数据的元数据模式中必须存在，用于与其他数据建立关联。

#### 6.2.2.2 确定管理元数据元素

依据数据类型来选择管理元数据元素，各类型数据的管理元数据元素应至少包括如下元素：

- a) 样品信息管理元数据元素包括：样品名称/虚拟样品名称、材料专业分类、样品用途、制备仪器名称/模拟软件名称、制备仪器型号/模拟软件型号、制备日期、制备者姓名、制备单位、制备者邮箱；
- b) 原始数据管理元数据元素包括：试验名称/计算模拟名称、试验仪器名称/计算模拟软件名称、试验仪器型号/模拟软件型号、测试日期、测试者姓名、测试单位、测试者邮箱；
- c) 衍生数据管理元数据元素包括：分析名称、分析软件名称、分析软件版本、分析日期、分析人姓名、分析单位、分析人邮箱。

#### 6.2.2.3 确定技术元数据元素

技术元数据元素依据数据产出所依托的方法来确定，确定过程如下：

- a) 调研所描述方法的基本原理，分析数据产出过程的逻辑组成；
- b) 将各组成部分所涉及的元数据元素予以记录；
- c) 绘制数据产出逻辑组成图，分步骤将各组成部分元数据元素绘制在同一张逻辑组成图上，示例见附录A.3。
- d) 对数据产出逻辑组成图上的元数据元素“应收尽收”的采集，得到技术元数据元素。

### 6.2.4 生成元数据模式

将标识元数据元素、管理元数据元素、技术元数据元素合并生成元数据模式，以表格的形式表示，示例见附录A.4。

### 6.2.5 编制元数据标准化文件

根据得到的元数据模式，编制元数据标准化文件，编写要求见第7章。

## 7 标准化文件的编写要求

元数据标准化文件除标准中通常所包含的范围、规范性引用文件、术语和定义等以外，元数据标准化文件的编写还可包括但不限于下列内容：

a) 数据产出方法介绍

按T/CSTM 00120明确该方法所产生数据的类型，示例见附录A.1；

b) 数据产出方法原理示意图

绘制所描述方法的原理示意图，辅助用户理解数据产出的过程，示例见附录A.2；

c) 元数据元素表

将元数据模式中所包含的元素以表格形式进行列举，示例见附录A.4；

d) 元数据的UML图；

按GB/T 30522，采用 UML图描述元数据模式所包含的元数据实体，及各元数据实体所包含的元数据元素，明确其相互关系，具体方法见附录B，示例见附录B.3；

e) 数据字典；

按GB/T 30522，采用数据字典描述元数据元素的特征属性，具体方法参见附录C，示例见附录C.3，其中标识元数据元素和管理元数据元素的数据字典定义可引用附录D中定义内容；

f) 元数据著录示例表

将确定的元数据模式以表格形式，结合实际数据作著录示例，元数据著录示例表见附录 A.7。



附录 A

(资料性)

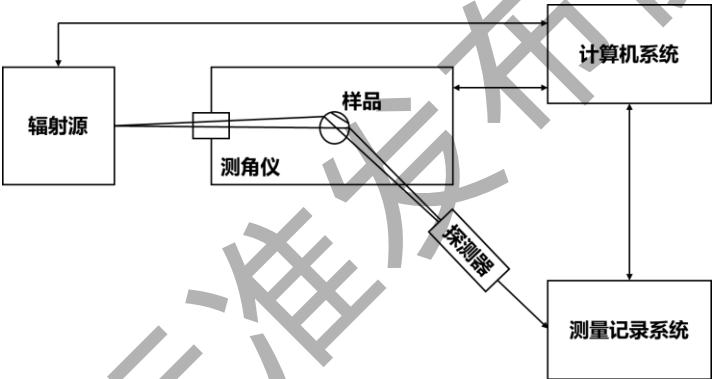
XRD表征元数据标准化文件编写示例

A.1 数据产出方法介绍

X射线衍射分析（XRD）是一种利用X射线在晶体中的衍射现象来获得衍射后信号特征，并经处理得到衍射图谱来分析材料物相、应力、结晶等结构信息的表征方法。按T/CSTM 00120分类，XRD表征数据属于原始数据。

A.2 数据产出方法原理示意图

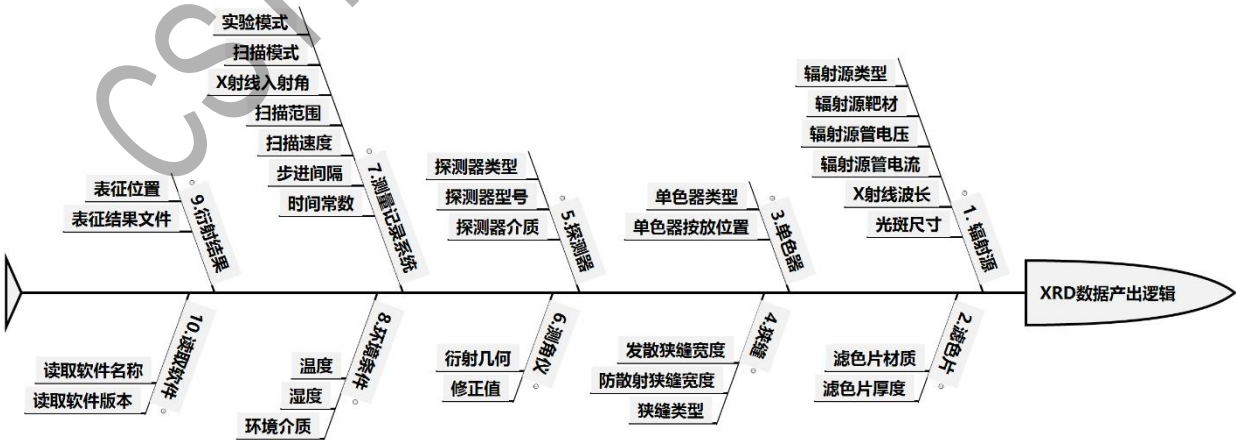
XRD表征方法原理示意图见图A.1。



图A.1 XRD表征方法原理示意

A.3 数据产出逻辑组成图

XRD表征方法的数据产出逻辑组成图见图A.2。



图A.2 XRD表征数据产出逻辑组成图

A.4 元数据元素表

XRD表征数据的元数据元素表见表A.1。

表A.1 XRD表征数据的元数据元素表

| 元数据元素类型 | 元数据元素名称 |
|---------|---------|
| 标识元数据   | 数据唯一标识  |
|         | 关联数据标识  |
| 管理元数据   | 试验名称    |
|         | 试验仪器名称  |
|         | 试验仪器型号  |
|         | 测试日期    |
|         | 测试者姓名   |
|         | 测试单位    |
|         | 测试者邮箱   |
| 技术元数据   | 辐射源类型   |
|         | 辐射源靶材   |
|         | 辐射源管电压  |
|         | 辐射源管电流  |
|         | X射线波长   |
|         | 光斑尺寸    |
|         | 滤色片材质   |
|         | 滤色片厚度   |
|         | 单色器类型   |
|         | 单色器安放位置 |
|         | 发散狭缝宽度  |
|         | 防散射狭缝宽度 |
|         | 狭缝类型    |
|         | 探测器类型   |
|         | 探测器型号   |
|         | 探测器介质   |
|         | 衍射几何    |
|         | 修正值     |
|         | 实验模式    |
|         | 扫描模式    |
|         | X射线入射角  |
|         | 扫描范围    |
|         | 扫描速度    |
|         | 步进间隔    |
|         | 时间常数    |
|         | 温度      |
|         | 湿度      |
|         | 环境介质    |
|         | 表征位置坐标  |

|  |          |
|--|----------|
|  | 表征位置结果文件 |
|  | 读取软件名称   |
|  | 读取软件版本   |

A.5 UML 图

XRD表征元数据模式的UML图表示见附录B.3。

A.6 数据字典

XRD表征元数据模式的数据字典表示见附录C.3。

A.7 元数据著录示例表

XRD表征数据的元数据著录示例表见表A.2。

表A.2 XRD表征数据的元数据著录示例

| 元数据类型 | 元数据实体 | 元数据元素   | 元数据记录                        |
|-------|-------|---------|------------------------------|
| 标识元数据 | 标识    | 数据唯一标识  | 2022.1201.xyz.001            |
|       |       | 关联数据标识  | 2022.1125.xyz.001            |
| 管理元数据 | 管理信息  | 试验名称    | IBD 薄膜的物相表征                  |
|       |       | 试验仪器名称  | Bruker-XRD                   |
|       |       | 试验仪器型号  | Bruker-T500                  |
|       |       | 测试日期    | 2022-01-01                   |
|       |       | 测试者姓名   | X X X                        |
|       |       | 测试单位    | X X X 大学                     |
|       |       | 测试者邮箱   | xxx@sjtu.edu.cn              |
| 技术元数据 | 辐射源   | 辐射源类型   | 玻璃管/液态金属/转靶等                 |
|       |       | 辐射源靶材   | Cr/Cu/Co/Mo 等                |
|       |       | 辐射源管电压  | 40kV                         |
|       |       | 辐射源管电流  | 35mA                         |
|       |       | X 射线波长  | 1.54060Å                     |
|       |       | 光斑尺寸    | 20μm                         |
|       | 滤色片   | 滤色片材质   | Ni（与单色器二选一，选滤色片时填充）          |
|       |       | 滤色片厚度   | xxμm（与单色器二选一，选滤色片时填充）        |
|       | 单色器   | 单色器类型   | 石墨/单晶等（与滤色片二选一，选单色器时填充）      |
|       |       | 单色器按放位置 | 光管侧/探测器侧等（与滤色片二选一，选单色器时填充）   |
|       | 狭缝    | 发散狭缝宽度  | 1/2mm                        |
|       |       | 防散射狭缝宽度 | 1/2mm                        |
|       |       | 狭缝类型    | 固定/可变                        |
|       | 探测器   | 探测器类型   | 点/线/面探                       |
|       |       | 探测器型号   | LH70-PA350                   |
|       |       | 探测器介质   | NaI                          |
|       | 测角仪   | 衍射几何    | 德拜/平板反射/bragg-bretano/固定入射角等 |

|  |        |          |                   |
|--|--------|----------|-------------------|
|  |        | 修正值      | 0mm               |
|  | 测量记录系统 | 实验模式     | 粉末/单晶/薄膜          |
|  |        | 扫描模式     | 连续/步进             |
|  |        | X 射线入射角  | 30°               |
|  |        | 扫描范围     | 10°~70°           |
|  |        | 扫描速度     | 1°/min（选填，连续模式时填） |
|  |        | 角度间隔     | 0.005°            |
|  |        | 时间常数     | 2min（选填，步进模式时填）   |
|  | 环境条件   | 温度       | 23℃               |
|  |        | 湿度       | 0%                |
|  |        | 环境介质     | 真空                |
|  | 衍射结果   | 表征位置坐标   | (5, 5)            |
|  |        | 表征位置结果文件 | 存储文件              |
|  | 结果读取软件 | 读取软件名称   | EVA               |
|  |        | 读取软件版本   | AL-H530           |

\*：本表中所有元数据记录取值仅为示例，不作规范参考。

#### A.8 补充说明

附录A中所提供的XRD表征元数据标准文件编写示例，仅作为标准化文件的编写方法参考；其中涉及到XRD元数据内容设计仅用于标准化XRD元数据模式参考，相关内容需依据本文件另设专门的XRD表征元数据标准。

附录 B

(资料性)

XRD表征元数据模式的UML图

B.1 概述

采用统一建模语言（UML）描述元数据实体和元数据元素之间的关系。分别使用 UML 中的类和属性表示元数据实体和元数据元素。

B.2 UML 图构建说明

B.2.1 元数据实体与元素的 UML 表示

用 UML 中类的概念表示元数据实体，用 UML 类的属性概念表示元数据元素，如图 B.1 所示。

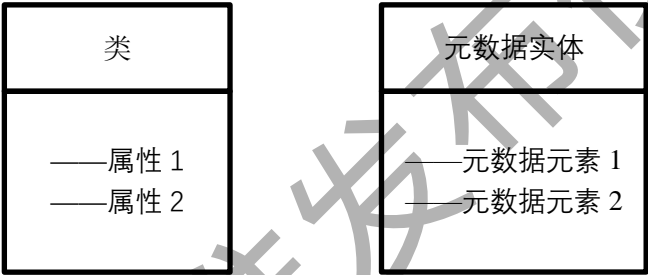


图 B.1 元数据实体与元数据元素的 UML 表示

B.2.2 UML 模型关系

B.2.2.1 关联

关联用于描述两个或更多类之间的一般关系，如图 B.2 所示。应说明关联的方向。如果不指明方向，则假定为双向关联；如果是单向关联，关联方向可以在线段终点用箭头来标记。

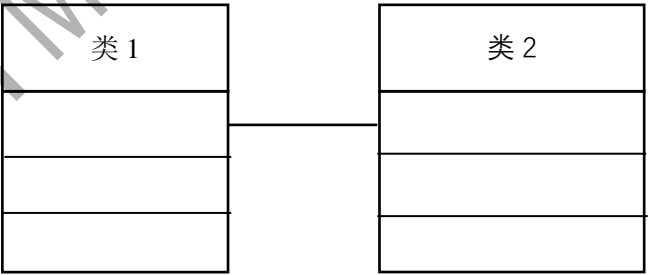


图 B.2 关联

B.2.2.2 聚合

聚合用于创建两个类之间的部分与整体关系，如图 B.3 所示。在该关系中，一个类承担容器角色，另一个类担当容器的构件角色。聚焦的表示法是从“部分”类画一条带空心菱形箭头的实线指向“整体类”。

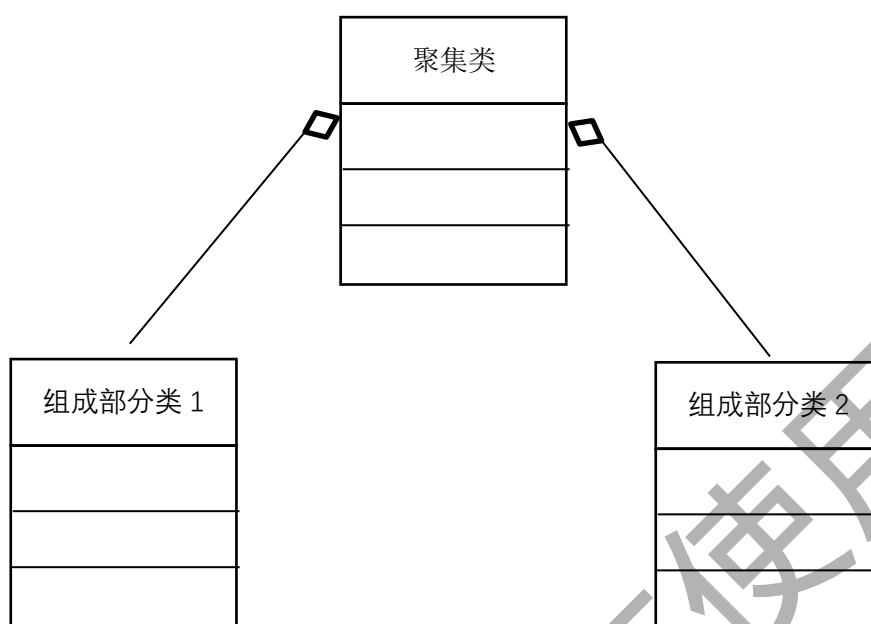


图 B.3 聚合

### B.2.2.3 泛化

泛化表示父类（或超类）和可以替代它的子类之间的关系，如图 B.4 所示。父类是泛化类，而子类则定义为特化类。泛化的表示法是从子类画一条带空心三角箭头的实线指向父类。

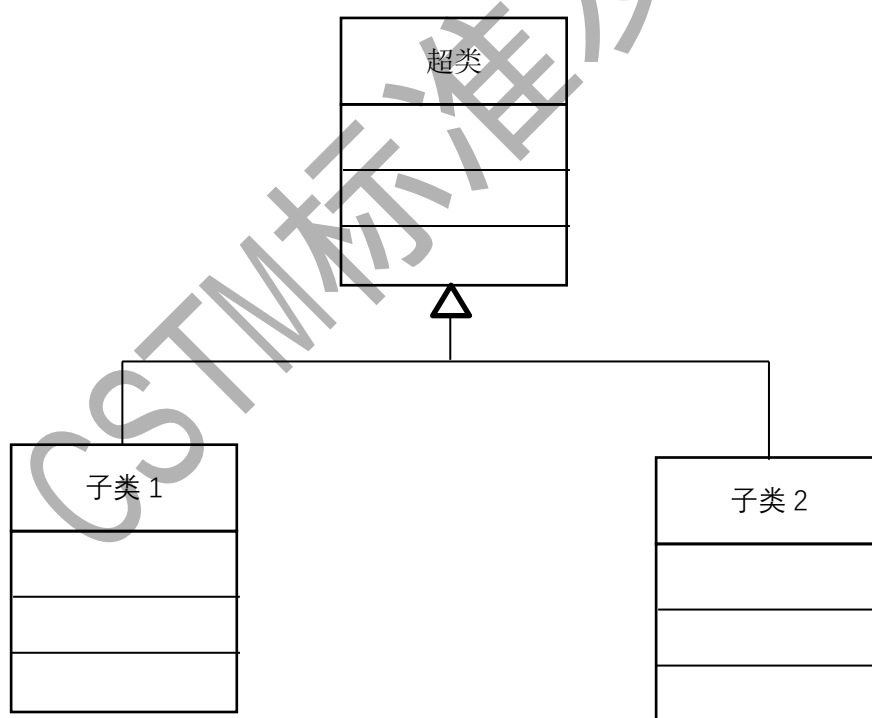


图 B.4 泛化

### B.2.2.4 依赖

依赖用于表示对某个元数据子集的理解、使用等依赖其他的元数据子集，如图 B.5 所示。依赖的表示法是从依赖类画一条带箭头的虚线指向被依赖类。

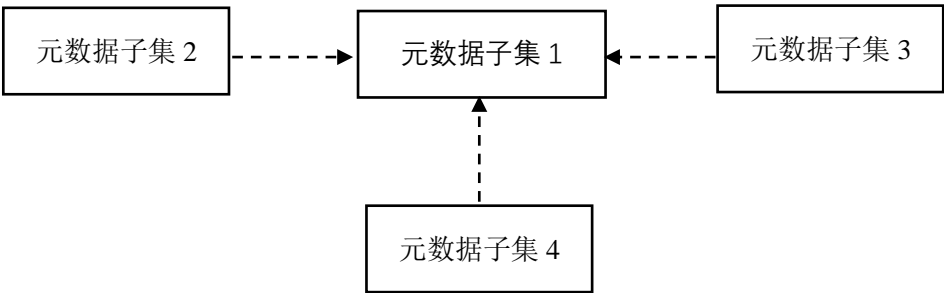


图 B.5 依赖

B.2.3 角色

两个类发生关联时，每个类通常在关联中都扮演着某种角色。UML 模型中可以使用“角色名称”标明目标对象到源对象的关系。在双向关联中，将提供两个角色名称。图 B.6 说明了在 UML 图中如何表示角色名称和基数。

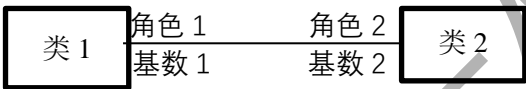


图 B.6 UML 角色名称和基数

图 B.6 中，角色名称“角色 1”是类 1 对类 2 的关系，“角色 2”是类 2 对类 1 的关系，“基数 1”表示类 1 有多少个对象和类 2 的单个对象关联，“基数 2”表示类 2 有多少个对象和类 1 的单个对象关联。基数的取值可以是一个正整数  $n$ （例如，“1”、“2”、“3”），也可以是“0.. $n$ ”、“0..\*”、“ $n$ ..\*”、“ $m$ .. $n$ ”（ $m$  小于  $n$ ），还可以是“ $m$ ,  $n$ ”（ $m$  小于  $n$ ）。其中， $m$  和  $n$  都是一确定的正整数，“\*”表示许多、多个；“..”在“0..\*”、“ $n$ ..\*”语境中表示“或”，例如基数 1 为“0..\*”表示类 1 的 0 个或多个对象与类 2 的 1 个对象关联，基数 1 为“1..\*”表示类 1 的 1 个或多个对象与类 2 的 1 个对象关联；“..”在“0.. $n$ ”、“ $m$ .. $n$ ”语境中表示“到”，例如，基数 1 为“1..3”表示类 1 的 1 个、2 个或 3 个对象与类 2 的一个对象关联；“,”表示“或”，例如，基数 1 为“2, 4”表示类 1 的 2 个或 4 个对象与类 2 的一个对象关联。在单向关联中，一般只标注箭头指向的类的多少个对象与箭头背向的类的一个对象关联。

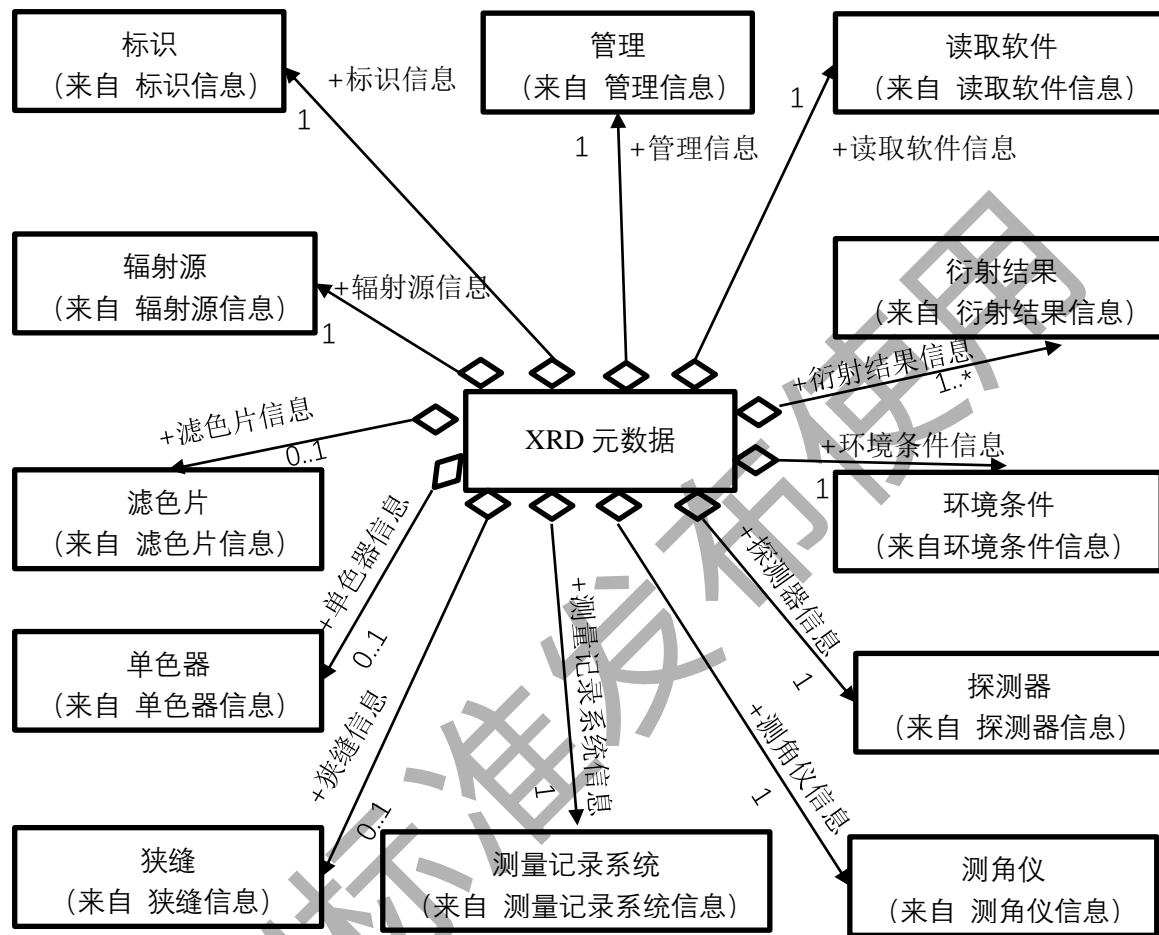
B.2.4 UML 模型构造型

UML 构造型是现有 UML 概念的扩展机制。它是一种模型元素，用来对其他 UML 元素进行分类（或标记），使得它们在某些方面行为上类似新的虚拟或伪元模型类的示例，增强了分类机制。以下是 UML 构造型的简单说明，更详细说明参见 GB/T 19710、ISO/TS 19103。

- a) << 类型>> 用于说明实例（对象）的域，以及可以对对象进行的操作，一个类型可以有属性和关联。
- b) << 数据类型>> 一组缺少同一性，其操作没有副作用的值的描述符。数据类型包括预定义的简单类型和用户可定义的类型。预定义的简单类型包括数值型、字符串和时间型等。用户可定义的类型包括枚举类型。
- c) << 枚举>> 其实例构成确切值列表的数据类型。枚举的名称与其确切值都是得到公认的。枚举是一个类中的已知可能值的简短列表。
- d) << 代码表>> 用于描述一个更加开放的枚举。<< 代码表>> 是可扩展的。代码表可以用于表示一个可能值的长表。如果该表的元素是完全已知的，应当使用枚举；如果只有元素的可能值是已知的，则应使用代码表。
- e) << 联合>> 描述对一种特化类型的选择。可用于在不需要生成一个公共的超类型 / 超类时，说明一组可供使用的可选类型 / 类。
- f) << 抽象>> 不能直接实例化的类（或其他分类符）。UML 符号用斜体表示其名称。

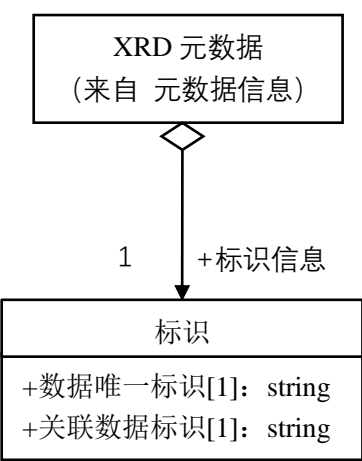
## B.3 示例

图 B.7 为对应附录 A 中 XRD 表征元数据模式的 UML 组成示例，其余部分可按 UML 图原则进行构建，更全面综合的示例见 GB/T 19710，GB/T 20533。

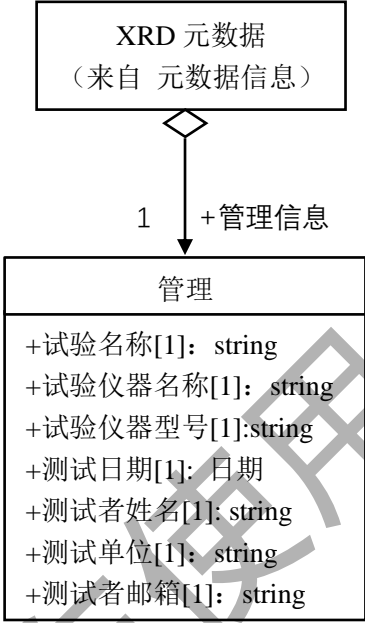


a) XRD 元数据的 UML 图





b) XRD 元数据组成部分-标识元数据实体 UML 图



c) XRD 元数据的组成部分-管理元数据实体的 UML 图

注：此为XRD表征元数据的UML图的部分组成示例，并非其完整表示，其他组成部分可按此方法表示。

图B.7 XRD表征元数据UML组成示意图

## 附录 C

## (资料性)

## XRD表征元数据模式的数据字典

## C.1 概述

使用中文名称 / 角色名称、英文名称 / 角色名称、短名和域代码、定义、约束 / 条件、最大出现次数、数据类型、域 / 值域等属性，以表格的形式描述元数据。数据字典用灰色背底的行描述元数据实体，非灰色背底的行描述元数据元素。

## C.2 属性及取值要求

## C.2.1 中文名称/角色名称

中文名称 / 角色名称是赋给元数据实体或元数据元素的一个中文标记。

角色名称用以标识元数据抽象模型关联，并由“角色名称：”开头，将其与其他元数据元素相区分。

## C.2.2 英文名称/角色名称

英文名称 / 角色名称是赋给元数据实体或元数据元素的一个英文标记。

元数据实体英文名称以一个大写字母开头。元数据实体名称中没有空格，而是多个单词连写，其中每一个新的单词开头为大写字母(如：XnnnYmmm)。元数据实体名称在本标准的数据字典中是唯一的。

元数据元素英文名称以一个小写字母开头。元数据元素名称中没有空格，而是多个单词连写，其中每一个新的单词开头为大写字母(如：xnnnYmmm)。元数据元素名称在元数据实体中是唯一的，但在本标准的数据字典中并不是唯一的。通过元数据实体和元数据元素名称的组合，可使元数据元素名称在一个应用中唯一（如：元数据.元数据字符集）。

## C.2.3 短名和域代码

元数据的英文缩写名称，具体缩写规则如下：

- 短名在本标准范围内应唯一；
- 对存在国际或行业领域惯用英文缩写的元数据实体或元数据元素，其短名直接采用该英文缩写；
- 对于根据英文名称形成的短名，在保持唯一性的前提下统一取每个单词前三个字母作为其短名，当如此取词不能保证唯一性时应延展取词位数，通常仅增加一位，如此仍不能保证唯一性时将继续延长取词，直至保证唯一性为止；
- 元数据实体短名的写法是：所有组成词汇的缩写为无缝连写，并且每个词汇缩写的首字母大写；
- 元数据元素的短名的写法是：所有组成词汇的缩写为无缝连写，首词汇全部采用小写字母，其余每个词汇缩写的首字母大写。

对于代码表和枚举构造型，元数据标准应为每一个可能的选择均提供一个代码。这些域代码由四位数字表示，并在该代码表中是唯一的。每个代码表或枚举的第一行包含一个英文短名，是该代码表或枚举的英文名称缩写。

## C.2.4 定义

描述元数据的基本内容，建议从权威或专业途径获取元数据的专业描述，如百度百科、维基百科、专业术语词典等。

## C.2.5 约束/条件

约束/条件是对元数据的含义的进一步解释，说明元数据实体或元数据元素应选取的属性，包括必选(M)、可选(O)和条件必选(C)，其中当该元数据为条件必选时，应注明其约束条件：

- a) 必选 M：表明该元数据实体或元数据元素必须选择。
- b) 可选 O：根据实际应用可以选择也可以不选的元数据实体或元数据元素。可选元数据实体可以包含必选的元数据元素；但这些元数据元素只当可选元数据实体被选用时才成为必选的。如果一个可选元数据实体未被选用，则该元数据实体所包含的元数据元素(包括必选元数据元素)也不选用。
- c) 条件必选 C：说明可以选择该元数据实体或元数据元素的条件，当该条件满足时，至少一个元数据实体或元数据元素必选。“条件必选”用于以下三种可能性之一：
- 表示在 2 个或 2 个以上元数据实体或元数据元素中进行选择。至少存在一个元数据实体或元数据元素必选；
  - 当已经选用另一个元数据实体或元数据元素时，此元数据实体或元数据元素为必选；
  - 当另一个元数据元素已经选择了一个特定值时，此元数据元素为必选。

C.2.6 最大出现次数

说明元数据实体或元数据元素可以具有的最大实例数目。只出现一次的用“1”表示，重复出现的用“N”表示。不为 1 的固定出现次数用相应的数字表示，如“2”“3”“4”等。

C.2.7 数据类型

元数据的有效值域和允许对该值域内的值进行有效操作的规定。例如，整型、实型、布尔型、字符串、日期等。也使用数据类型属性定义元数据实体、构造型和元数据关联。

注：数据类型在 ISO/TS 19103-2015 的 6.6 中定义。

C.2.8 域/值域

对元数据实体而言，域说明数据字典中其包含的行数。对元数据元素而言，值域说明其有效值或使用自由文本。

C.3 示例

元数据的数据字典示例如表 C.1~C.3 所示，分别对应图 B.7(a)~B.7(c)，更全面实际数据类型示例参见 GB/T 19710，GB/T 20533。

表 C.1 XRD 元数据的数据字典表

| 序号 | 中文名称           | 英文名称  | 缩写名             | 定义                  | 数据类型 | 值域        | 约束 / 条件 | 最大出现次数 |
|----|----------------|---|-----------------|---------------------|------|-----------|---------|--------|
| 1  | XRD 元数据        | XRDMetadata                                 | XRDMetad<br>ata | 定义 XRD 表征数据的元数据根实体。 | 类    | 第 2~5 行   | M       | 1      |
| 2  | 角色名称：<br>标识信息  | roleName:Identi<br>ficationInformation      | idInfo          | 标识、区分 XRD 数据的信息     | 关联   | 标识(表 C.2) | M       | 1      |
| 3  | 角色名称：<br>管理信息  | roleName:Manage<br>mentInformation          | manInfo         | XRD 数据的产生背景、概况。     | 关联   | 管理(表 C.3) | M       | 1      |
| 4  | 角色名称：<br>辐射源信息 | roleName:Radiati<br>onSourceInformat<br>ion | radSouInfo      | XRD 衍射仪辐射源信息        | 关联   | 辐射源*      | M       | 1      |
| 5  | 角色名称：<br>滤色片信息 | roleName:Color<br>FilterInformation         | colFilInfo      | XRD 衍射仪滤色片信息        | 关联   | 滤色片*      | O       | 1      |

|    |                   |  |               |                  |    |         |   |   |
|----|-------------------|--|---------------|------------------|----|---------|---|---|
| 6  | 角色名称:<br>单色器信息    | roleName:MonochromatorInformation              | monInfo       | XRD 衍射仪单色器信息     | 关联 | 单色器*    | O | 1 |
| 7  | 角色名称:<br>狭缝信息     | roleName:SlitInformation                       | sliInfo       | XRD 衍射仪狭缝信息      | 关联 | 狭缝*     | O | 1 |
| 8  | 角色名称:<br>探测器信息    | roleName:DetectorInformation                   | detInfo       | XRD 衍射仪探测器信息     | 关联 | 探测器*    | M | 1 |
| 9  | 角色名称:<br>测角仪信息    | roleName:GoniometerInformation                 | gonInfo       | XRD 衍射仪测角仪信息     | 关联 | 测角仪*    | M | 1 |
| 10 | 角色名称:<br>测量记录系统信息 | roleName:MeasurementRecordingSystemInformation | mesRecSysInfo | XRD 衍射仪测量记录系统信息  | 关联 | 测量记录系统* | M | 1 |
| 11 | 角色名称:<br>环境条件信息   | roleName:EnvironmentalInformation              | envInfo       | XRD 表征时环境条件信息    | 关联 | 环境条件*   | M | 1 |
| 12 | 角色名称:<br>衍射结果信息   | roleName:ResultInformation                     | resultInfo    | XRD 表征结果信息       | 关联 | 表征结果*   | M | N |
| 13 | 角色名称:<br>读取软件信息   | roleName:ReadSoftwareInformation               | sofInfo       | XRD 表征结果文件读取软件信息 | 关联 | 读取软件*   | M | 1 |

注 1: \*-可参考表 C.2, C.3 构建对应条目的数据字典表;

注 2: 为 XRD 表征元数据的数据字典的部分组成示例, 并非其完整表示, 其他组成部分可按此方法分别表示;

注 3: 对应图 B.7(a)。

表 C.2 标识元数据元素的数据字典

| 序号 | 中文名称   | 英文名称              | 缩写名   | 定义                                 | 数据类型         | 值域        | 约束/条件       | 最大出现次数        |
|----|--------|-------------------|-------|------------------------------------|--------------|-----------|-------------|---------------|
| 14 | 标识     | Identification    | Ident | 标识元数据实体                            | 聚集类<br>(元数据) | 第 15~16 行 | 使用参照对象的约束条件 | 使用参照对象的最大约束次数 |
| 15 | 数据唯一标识 | identifier        | ID    | 唯一标识数据资源的标识码, 标识方法可参考材料基因工程数据标识标准。 | 字符串          | 自由文本      | M           | 1             |
| 16 | 关联数    | associatedIdentif | AID   | 本条数据所关                             | 字符串          | 自由文       | C (本条数据与    | N             |

|   |    |     |  |              |  |   |              |  |
|---|----|-----|--|--------------|--|---|--------------|--|
|   | 标识 | ier |  | 联的另一条数据的唯一标识 |  | 本 | 其他数据存在关联时必选) |  |
| 注 1：为 XRD 表征元数据的数据字典的部分组成示例，并非其完整表示，其他组成部分可按此方法分别表示；<br>注 2：对应图 B.7(b)。 |    |     |  |              |  |   |              |  |

表 C.3 原始数据管理元数据元素的数据字典表

| 序号  | 中文名称            | 英文名称                      | 缩写名          | 定义                     | 数据类型     | 值域               | 约束/条件       | 最大出现次数        |
|---|-----------------|---------------------------|--------------|------------------------|----------|------------------|-------------|---------------|
| 17  | 原始数据管理          | SourceDataManagement      | SourceManage | 原始数据管理元数据实体            | 聚集类(元数据) | 第 18~24 行        | 使用参照对象的约束条件 | 使用参照对象的最大约束次数 |
| 18  | 试验名称/计算模拟名称     | characterizationName      | chaName      | 对样品进行试验表征或计算模拟的目的和方式简称 | 字符串      | 自由文本             | M           | 1             |
| 19  | 试验仪器名称/计算模拟软件名称 | characterizationToolName  | chaToolName  | 试验仪器名称/计算模拟软件名称        | 字符串      | 自由文本             | M           | 1             |
| 20  | 试验仪器型号/计算模拟软件型号 | characterizationToolModel | chaToolModel | 试验仪器型号/计算模拟软件型号        | 字符串      | 自由文本             | M           | 1             |
| 21  | 测试日期            | testDate                  | testDate     | 样品表征测试的时间              | 日期型      | 日期, 参照 GB/T 7408 | M           | 1             |
| 22  | 测试人员            | tester                    | tester       | 样品表征测试人姓名              | 字符串      | 自由文本             | M           | N             |
| 23  | 测试人邮箱           | testerEmail               | testerEmail  | 测试者邮箱                  | 字符串      | 自由文本             | M           | 1             |
| 24  | 测试单位            | organization              | organization | 样品测试组织、机构              | 字符串      | 自由文本             | M           | N             |
| 注 1：为 XRD 表征元数据的数据字典的部分组成示例，并非其完整表示，其他组成部分可按此方法分别表示；<br>注 2：对应图 B.7(c)。 |                 |                           |              |                        |          |                  |             |               |

(规范性)  
元数据元素的数据字典

## D.1 标识元数据元素的数据字典

标识元数据元素的数据字典表见附录 C 中表 C.2。

## D.2 样品信息管理元数据元素的数据字典

样品信息管理元数据元素的数据字典见表 D.1 和表 D.2。

表 D.1 样品信息管理元数据元素的数据字典

| 序号 | 中文名称            | 英文名称                   | 缩写名              | 定义               | 数据类型         | 值域               | 约束/条件       | 最大出现次数        |
|----|-----------------|------------------------|------------------|------------------|--------------|------------------|-------------|---------------|
| 1  | 样品管理            | SampleManagement       | SampleManagement | 样品管理元数据实体        | 聚集类<br>(元数据) | 第 2~10 行         | 使用参照对象的约束条件 | 使用参照对象的最大约束次数 |
| 2  | 样品名称 / 虚拟样品名称   | sampleName             | sampleName       | 赋予样品的名称          | 字符串          | 自由文本             | M           | 1             |
| 3  | 材料类别            | materialClassification | matClass         | 样品所属的材料的专业分类类别   | 类            | 《代码表》D.2         | M           | N             |
| 4  | 样品用途            | usage                  | usage            | 样品制备的目的或用途       | 字符串          | 自由文本             | M           | 1             |
| 5  | 制备仪器名称 / 模拟软件名称 | preparationToolName    | preToolName      | 样品制备仪器名称或者模拟软件名称 | 字符串          | 自由文本             | M           | 1             |
| 6  | 制备仪器型号 / 模拟软件型号 | preparationToolModel   | preToolModel     | 样品制备仪器型号或者模拟软件型号 | 字符串          | 自由文本             | M           | 1             |
| 7  | 制备日期            | preparationDate        | preDate          | 样品制备的时间          | 日期型          | 日期, 参照 GB/T 7408 | M           | 1             |
| 8  | 制备人姓名           | maker                  | maker            | 样品制备人姓名          | 字符串          | 自由文本             | M           | N             |
| 9  | 制备单位            | organization           | organization     | 样品制备组织、机构        | 字符串          | 自由文本             | M           | N             |

|    |              |            |            |                  |       |            |   |   |
|----|--------------|------------|------------|------------------|-------|------------|---|---|
| 10 | 制 备 人<br>邮 箱 | makerEmail | makerEmail | 样 品 制 备 者 邮<br>箱 | 字 符 串 | 自 由 文<br>本 | M | 1 |
|----|--------------|------------|------------|------------------|-------|------------|---|---|

表 D.2 材料类别代码表

| 序号 | 中文名称       | 英文名称                                      | 域代码      | 定义         | 备注（此项非必须项） |
|----|------------|---|----------|------------|------------|
| 1  | 材料类别代码     | materialCategory                          | matClass | 表示材料的专业分类  | 材料一级分类     |
| 2  | 材料的物理及化学基础 | physical and chemical basis of materials  | 0101     | 材料的物理及化学基础 | 材料基础       |
| 3  | 材料的结构基础    | structural basis of materials             | 0102     | 材料的结构基础    |            |
| 4  | 材料的性能基础    | material performance basis                | 0103     | 材料的性能基础    |            |
| 5  | 材料的分析、测试技术 | material analysis and testing technology  | 0104     | 材料的分析、测试技术 |            |
| 6  | 材料腐蚀学      | corrosion of materials                    | 0105     | 材料腐蚀学      |            |
| 7  | 环境材料学      | environmental materials science           | 0106     | 环境材料学      |            |
| 8  | 计算材料学      | computational materials science           | 0107     | 计算材料学      |            |
| 9  | 钢铁材料       | steel material                            | 0201     | 钢铁材料       | 金属材料       |
| 10 | 有色金属材料     | non-ferrous metal materials               | 0202     | 有色金属材料     |            |
| 11 | 金属功能材料     | metal functional materials                | 0203     | 金属功能材料     |            |
| 12 | 特殊用途金属材料   | special purpose metal materials           | 0204     | 特殊用途金属材料   |            |
| 13 | 粉末冶金及材料    | powder metallurgy and materials           | 0205     | 粉末冶金及材料    |            |
| 14 | 表面技术与膜材料   | surface technology and membrane materials | 0206     | 表面技术与膜材料   |            |
| 15 | 金属制备与加工    | metal preparation and processing          | 0207     | 金属制备与加工    |            |
| 16 | 无机非金属材料基础  | inorganic non-metallic materials          | 0301     | 无机非金属材料基础  | 无机非金属材料    |

|    |                   |  |      |                   |         |
|----|-------------------|--|------|-------------------|---------|
| 17 | 晶体材料              | crystal material   | 0302 | 晶体材料              |         |
| 18 | 传统陶瓷              | traditional ceramics   | 0303 | 传统陶瓷              |         |
| 19 | 近代陶瓷              | modern ceramics  | 0304 | 近代陶瓷              |         |
| 20 | 陶瓷基复合材料           | ceramic matrix composites  | 0305 | 陶瓷基复合材料           |         |
| 21 | 玻璃                | glass  | 0306 | 玻璃                |         |
| 22 | 无机涂层              | inorganic coating  | 0307 | 无机涂层              |         |
| 23 | 耐火材料              | refractory   | 0308 | 耐火材料              |         |
| 24 | 胶凝材料及混凝土          | cementitious materials and concrete                                    | 0309 | 胶凝材料及混凝土          |         |
| 25 | 碳材料               | carbon material  | 0310 | 碳材料               |         |
| 26 | 高分子科学             | polymer Science  | 0401 | 高分子科学             | 有机高分子材料 |
| 27 | 塑料                | plastic  | 0402 | 塑料                |         |
| 28 | 橡胶                | rubber   | 0403 | 橡胶                |         |
| 29 | 纤维                | fiber  | 0404 | 纤维                |         |
| 30 | 胶粘剂与涂料            | adhesives & coatings   | 0405 | 胶粘剂与涂料            |         |
| 31 | 有机硅、有机氟及其他元素有机高分子 | organic silicon, organic fluorine and other elemental organic polymers | 0406 | 有机硅、有机氟及其他元素有机高分子 |         |
| 32 | 功能高分子材料           | functional polymer materials   | 0407 | 功能高分子材料           |         |
| 33 | 高分子材料性能及测试方法      | polymer material properties and test methods                           | 0408 | 高分子材料性能及测试方法      |         |
| 34 | 高分子加工             | polymer processing   | 0409 | 高分子加工             |         |
| 35 | 高分子材料助剂           | polymer material additives   | 0410 | 高分子材料助剂           |         |
| 36 | 复合材料增强体           | composite reinforcement  | 0501 | 复合材料增强体           | 复合材料    |
| 37 | 聚合物基复合材料及工艺       | polymer matrix composites and processes                                | 0502 | 聚合物基复合材料及工艺       |         |
| 38 | 金属基复合材料及工艺        | metal matrix composite materials and processes                         | 0503 | 金属基复合材料及工艺        |         |
| 39 | 陶瓷基复合材料           | ceramic matrix composites  | 0504 | 陶瓷基复合材料           |         |
| 40 | 功能复合材料            | functional composites  | 0505 | 功能复合材料            |         |



|    |             |  |      |             |          |
|----|-------------|--|------|-------------|----------|
| 41 | 半导体材料       | semiconductor material                                 | 0601 | 半导体材料       | 信息材料     |
| 42 | 光学介质材料      | optical media materials                                | 0602 | 光学介质材料      |          |
| 43 | 光电子材料       | optoelectronic materials                               | 0603 | 光电子材料       |          |
| 44 | 发光材料        | luminescent material                                   | 0604 | 发光材料        |          |
| 45 | 感光与显示材料     | photosensitive and display materials                   | 0605 | 感光与显示材料     |          |
| 46 | 电子元器件材料     | electronic component materials                         | 0606 | 电子元器件材料     |          |
| 47 | 辅助材料        | auxiliary materials                                    | 0607 | 辅助材料        |          |
| 48 | 核能材料        | nuclear material                                       | 0701 | 核能材料        | 能源材料     |
| 49 | 含能材料        | energetic materials                                    | 0702 | 含能材料        |          |
| 50 | 电池材料        | battery material                                       | 0703 | 电池材料        |          |
| 51 | 生物医学材料基础    | fundamentals of biomedical materials                   | 0801 | 生物医学材料基础    | 生物医用材料   |
| 52 | 医用高分子材料     | medical polymer materials                              | 0802 | 医用高分子材料     |          |
| 53 | 医用金属材料      | medical metal materials                                | 0803 | 医用金属材料      |          |
| 54 | 生物陶瓷        | bioceramics  | 0804 | 生物陶瓷        |          |
| 55 | 医用复合材料      | medical composites                                     | 0805 | 医用复合材料      |          |
| 56 | 组织工程与再生医学材料 | tissue engineering and regenerative medicine materials | 0806 | 组织工程与再生医学材料 |          |
| 57 | 药物载体材料      | drug carrier material                                  | 0807 | 药物载体材料      |          |
| 58 | 介入材料        | interventional material                                | 0808 | 介入材料        |          |
| 59 | 血液净化材料      | blood purification material                            | 0809 | 血液净化材料      |          |
| 60 | 矫正外科材料      | orthopedic surgical materials                          | 0810 | 矫正外科材料      |          |
| 61 | 人工器官        | artificial organ                                       | 0811 | 人工器官        |          |
| 62 | 齿科材料        | dental materials                                       | 0812 | 齿科材料        |          |
| 63 | 生物传感器       | biological sensor                                      | 0813 | 生物传感器       |          |
| 64 | 矿物材料        | mineral material                                       | 0901 | 矿物材料        | 天然材料及其制品 |
| 65 | 木材材料        | wood material  | 0902 | 木材材料        |          |

|                       |        |                                   |      |        |        |
|-----------------------|--------|-----------------------------------|------|--------|--------|
| 66                    | 纸质材料   | paper material                    | 0903 | 纸质材料   |        |
| 67                    | 皮革     | leather                           | 0904 | 皮革     |        |
| 68                    | 环境治理材料 | environmental treatment materials | 1001 | 环境治理材料 | 特种功能材料 |
| 69                    | 超导材料   | superconducting material          | 1002 | 超导材料   |        |
| 70                    | 纳米材料基础 | fundamentals of nanomaterials     | 1101 | 纳米材料基础 | 纳米材料   |
| 71                    | 纳米效应   | nano effect                       | 1102 | 纳米效应   |        |
| 72                    | 纳米技术   | nanotechnology                    | 1103 | 纳米技术   |        |
| 73                    | 纳米结构   | nano-structure                    | 1104 | 纳米结构   |        |
| 74                    | 纳米功能材料 | nano functional materials         | 1105 | 纳米功能材料 |        |
| 75                    | 纳米器件   | nanodevices                       | 1106 | 纳米器件   |        |
| 注：对应表 D.1 中“材料类别”的值域。 |        |                                   |      |        |        |

### D.3 原始数据管理元数据元素的数据字典

原始数据管理元数据元素的数据字典表见附录 C 中表 C.3。

### D.4 衍生数据管理元数据元素的数据字典

衍生数据管理元数据元素的数据字典表见表 D.3。

表 D.3 衍生数据管理元数据元素数据字典

| 序号 | 中文名称   | 英文名称                 | 缩写名             | 定义          | 数据类型     | 值域              | 约束/条件                 | 最大出现次数        |
|----|--------|----------------------|-----------------|-------------|----------|-----------------|-----------------------|---------------|
| 1  | 衍生管理   | DerivedManagement    | DerivedManage   | 衍生数据管理元数据实体 | 聚集类（元数据） | 第 2~8 行         | 使用参照对象的约束条件           | 使用参照对象的最大约束次数 |
| 2  | 分析名称   | analyzeName          | analyzeName     | 分析的目的、方式简称  | 字符串      | 自由文本            | M                     | 1             |
| 3  | 分析软件名称 | analyzeSoftware      | analyzeSof      | 所使用的分析软件名称  | 字符串      | 自由文本            | C(借助软件等工具分析时必选，未用可不填) | 1             |
| 4  | 分析软件版本 | analyzeSoftwareModel | analyzeSofModel | 所使用的分析软件版本号 | 字符串      | 自由文本            | C(借助软件分析时必选，未采用可不填)   | 1             |
| 5  | 分析日期   | analyzeDate          | analyzeDate     | 分析日期        | 日期型      | 日期，参照 GB/T 7408 | M                     | 1             |

|   |       |              |              |       |     |      |   |   |
|---|-------|--------------|--------------|-------|-----|------|---|---|
| 6 | 分析人员  | analyst      | analyst      | 分析人姓名 | 字符串 | 自由文本 | M | N |
| 7 | 分析人邮箱 | analystEmail | analystEmail | 分析人邮箱 | 字符串 | 自由文本 | M | 1 |
| 8 | 分析单位  | organization | organization | 分析机构  | 字符串 | 自由文本 | M | N |

CSTM标准发布使用

附录 E

(资料性)

起草单位和主要起草人

本文件主要起草单位：上海交通大学、钢铁研究总院有限公司、北京科技大学、昆明贵研新材料科技有限公司、云南省科学技术院。

本文件主要起草人：路勇超、汪洪、张澜庭、余宁、唐凌天、陈永彦、孙璧瑶、黄海友、张爱敏、鞠生宏、陈力、安正源。

CSTM标准发布使用

## 参 考 文 献

- [1] GB/T 5271.1 信息技术 词汇 第1部分：基本术语[S]
  - [2] GB/T 20533 生态科学元数据[S]
  - [3] ISO/TS 19103 -2015 Geographic information-conceptual schema language[S]
  - [4] 黄伯云. 材料大辞典(第2版)[M]. 北京: 化学工业出版社, 2016
- 

CSTM标准发布使用