Sem vložte zadanie Vašej práce.

České vysoké učení technické v Praze
Fakulta informačních technologií
Katedra softwarového inženýrství

Diplomová práca

Spracovanie a vizualizácia chemických meraní v dátovom repozitári

Bc. Lukáš Koštenský

Vedúci práce: RNDr. David Antoš, Ph.D.

3. mája 2017

Poďakovanie

Rád by som poďakoval RNDr. Davidovi Antošovi, Ph.D. za cenné rady pri písaní práce. Taktiež by som rád poďakoval Mgr. Miroslavovi Šimkovi za pomoc a rady pri návrhu a programovaní aplikácie. Tiež by som chcel poďakovať Ing. Janovi Horníčkovi za pomoc pri získavaní testovacích dát, ich vysvetlenia a vytvorenie testovacích a produkčných serverov pre repozitár.

Prehlásenie

Prehlasujem, že som predloženú prácu vypracoval samostatne a že som uviedol všetky informačné zdroje v súlade s Metodickým pokynom o etickej príprave vysokoškolských záverečných prác.

Beriem na vedomie, že sa na moju prácu vzťahujú práva a povinnosti vyplývajúce zo zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona, v znení neskorších predpisov, a skutočnosť, že České vysoké učení technické v Praze má právo na uzavrenie licenčnej zmluvy o použití tejto práce ako školského diela podľa § 60 odst. 1 autorského zákona.

V Prahe 3. mája 2017 .....

Odkaz na túto prácu

Koštenský, Lukáš. *Spracovanie a vizualizácia chemických meraní v dátovom repozitári.* Diplomová práca. Praha: České vysoké učení technické v Praze, Fakulta informačních technologií, 2017.

Abstrakt

Cieľom diplomovej práce je analýza potrieb, návrh a implementácia modulov repozitára CESNET z.s.p.o.. Zameriava sa pritom na dáta Ústavu organickej chémie VŠCHT Praha. Ako jadro repozitára je použitá Fedora, ktorá sa stará o ukladanie dát. Vyhľadávanie rieši Elasticsearch. Bolo vytvorené webové užívateľské rozhranie v programovacom jazyku Python s využitím frameworku Django. Vytvorené boli tiež nástroje pre správu a kontrolu oprávnení a nástroj na import dát z aplikácie Open Enventory.

Klíčová slova Fedora, repozitár, Elasticsearch, webová aplikácia, Python, Django, Java

Abstract

The aim of the diploma thesis is to analyze needs, design and implement modules for CESNET z.s.p.o. repository. It is focused on data from The Department of Organic Chemistry, UCT Prague. Fedora is used as the core repository and takes care of data storage. Elasticsearch is used for searching the repository. The web user interface is created in Python with the usage of as well as Django as the framework. I also created tools for checking and controlling permissions and tool for importing data from Open Enventory.

Keywords Fedora, repository, Elasticsearch, web application, Python, Django, Java

Obsah

Zoznam obrázkov

Zoznam tabuliek

Úvod

Nielen výskumníci, ale aj bežní užívatelia počítačov riešia problém s ukladaním dát. Tých máme stále viac, musíme ich niekam ukladať a ideálne aj zabezpečiť, aby sa nestratili napríklad pri poškodení disku. Tiež je potrebné v dátach vedieť vyhľadávať a to najmä ak ich chceme zverejniť.

Existujú rôzne dátové repozitáre, teda software, ktorý sa stará o ukladanie a správu dát. Dáta v takýchto repozitároch môžu byť popísané metadátami a zverejnené.

Repozitár, ku ktorému mám v rámci diplomovej práce vytvoriť moduly, má byť zameraný na vedecké dáta. Aby výskumníci repozitár používali, je potrebné, aby bolo vkladanie dát jednoduché a pohodlné. Tiež je cieľom vytvoriť jednotlivé súčasti tak, aby boli čo najvšeobecnejšie a použiteľné pre rôzne skupiny vedcov.

Pokúsim sa teda vytvoriť moduly a nástroje, ktoré umožnia prácu s rôznymi typmi dát a tiež nástroje, ktoré zjednodušia proces vkladania nových dát do repozitára.

Kapitola 1

Popis problému

Repozitár slúži vo všeobecnosti ako centrálne miesto, ktoré sa stará o ukladanie a správu dát. Takúto službu môžu chcieť poskytovať rôzne inštitúcie, napríklad školy, knižnice,... Pod slovom repozitár si môžeme taktiež predstaviť konkrétny software, ktorý sa stará o ukladanie, archiváciu a sprístupnenie dát. V tejto diplomovej práci budeme pod slovom repozitár rozumieť práve software.

1.1 Zdieľanie dát v tíme

Ústav organickej chémie VŠCHT Praha potrebuje vyriešiť ukladanie a sprístupnenie dát. Potrebuje ukladať, analyzovať a prezentovať infračervené vibračné, NMR a hmotnostné spektroskopické merania, chemické vzorce a reakcie.

Nad jedným datasetom môže pracovať viacero ľudí, ktorí môžu riešiť rôzne merania a pokusy alebo spoločne pracovať na jednom meraní. V oboch prípadoch počas priebehu samotného výskumu potrebujú prístup k dátam, ktoré vytvoril iný člen tímu. Taktiež musia mať možnosť dáta upravovať (napr. opakované merania a pokusy, keď je potrebné doplniť nové výsledky). Repozitár teda musí umožniť zdieľanie dát v tíme, rôzne oprávnenia pre osoby, ktoré majú mať k dátam prístup, verziovanie dát.

1.2 Open data/Open access

Pri vývoji repozitára je potrebné myslieť na možnosť zverejnenia (časti) dát pre širokú verejnosť s možnosťou ich ďalšieho využitia alebo odkazovania na ne. Takto zverejnené dáta označujeme pojmom Open data. V prípade zverejnených výskumov hovoríme o Open access (OA). Repozitár musí umožniť zverejnenie všetkých alebo časti uložených dát. Cieľom vývoja repozitára je vytvorenie platformy, s využitím ktorej bude možné publikovať nielen články

a závery výskumu, ale aj čiastkové merania a experimenty, ktoré k výsledkom viedli.

1.3 Zálohovanie a archivácia

Zálohovaním dát rozumieme vytváranie kópie práve spracúvaných alebo v relatívne nedávnej dobe uložených dát. Archiváciou rozumieme uchovávanie dokumentačných materiálov.

Zálohované dáta môžu byť poškodené degradáciou média, fyzickým poškodením média alebo v súčasnosti rozšírenými cryptovírusmi. Zálohovať dáta na jedno médium nestačí. Je dobré sa riadiť pravidlom 3-2-1. Tri kópie všetkých dôležitých dát, na dvoch rôznych médiách, pričom jedna kópia by mala byť uložená off-site, teda niekde mimo pracovného prostredia. [1]

Pri archivácii dát je potrebné myslieť na čitateľnosť dát po dlhej dobe. Preto je potrebné myslieť nielen na zabezpečenie dát, ale aj na archiváciu programu potrebného na prečítanie archivovaných dát.

Repozitár by mal byť pre užívateľov možnosťou ako dáta zálohovať. Zároveň jeho napojenie na služby CESNETu umožní ochranu dát, akú by bolo na pracovisku VŠCHT Praha ťažké dosiahnuť.

V budúcnosti bude možné repozitár rozšíriť o nástroje, ktoré by umožnili aj dlhodobú archiváciu dát.

Kapitola 2

Súčasné riešenia

2.1 Repozitáre

Existujú rôzne repozitáre, ktoré sa od seba líšia použitou technológiou, možnosťou rozšírenia, používajú rôzne metadátové schémy. Niektoré sú voľne dostupné ako open source, iné ako proprietárny software alebo hosťované aplikácie. V tejto časti uvádzam prehľad dostupných aplikácií. Zameriavam sa najmä na vlastnosti, ktoré boli pre ďalší vývoj repozitára kľúčové, a to: open source (aby bolo možné software ďalej upravovať), použitie metadátovej schémy, modulárnosť softwaru (jednoduchá možnosť rozšírenia o ďalšie nástroje) a verziovanie (najmä kvôli zdieľaniu a zálohovaniu dát).

2.1.1 Metadáta

Na popis uložených dokumentov slúžia metadáta. Metadáta sú štrukturované dáta nesúce informáciu o primárnych dátach. Pojem metadát je používaný predovšetkým v súvislosti s elektronickými zdrojmi. [2] Za zdroje alebo dokumenty pokladáme knihy, články, časopisy, audio nahrávky, obrazové záznamy, binárne súbory obsahujúce dáta z meraní a ďalšie. Kvôli vzájomnej prepojenosti repozitárov, vyhľadávaniu dát a správnej interpretácii informácií je snaha o vyvinutie celosvetovo používaného štandardu pre popis dát.

O to sa snažia rôzne metadátove schémy, pomocou ktorých je možné zdroje popísať. Medzi najznámejšie schémy patrí Dublin Core [`http://dublincore.org/`] a MARC [`http://www.loc.gov/marc/`].

2.1.1.1 Dublin Core

Dublin Core (skrátene DC) vznikol s cieľom jednoducho a všeobecne popísať zdroje. Metadátová schéma je určená pre popis zdrojov umiestnených na web. Táto schéma obsahuje 15 prvkov. To sú: názov (title), autor (creator), predmet (subject), popis (description), vydavateľ (publisher), prispievateľ (contributor), dátum (date), typ (type), formát (format), identifikátor (identifier),

zdroj (source), jazyk (language), vzťah (relation), pokrytie (coverage) a práva (rights). [3, s. 37] Tieto prvky nie sú povinné a môžu sa opakovať. Jednotlivé vlastnosti sú teda pomenované. Ako sa World Wide Web menil, v snahe o vytvorenie sémantického webu sa vyvinul aj štandard Dublin Core. Od roku 2008 obsahuje formálne domény a rozsahy v definíciách vlastností. Tento aktualizovaný variant vlastností sa nazýva dcterms.

Jednotlivé prvky môžu byť ďalej rozšírené o kvalifikátor. Ten môže lepšie určiť, čo daná položka popisuje. Napríklad namiesto všeobecného autora tak môžeme upresniť, či išlo o ilustrátora (dc:creator.ilustrator),
editora (dc:creator.editor),... Kvalifikátory ale nesmú meniť význam vlastnosti, dokument popísaný s využitím kvantifikátorov tak ostáva kompatibilný aj pre systémy, ktoré kvantifikátory nepoužívajú.[4, s. 295]

2.1.1.2 MARC

MARC (MAchine-Readable Cataloging) využívajú najmä knihovníci. Bol navrhnutý pre popis bibliografických údajov v strojovo čitateľnej podobe. Schéma obsahuje vlastnosti, ktoré sú očíslované. Kým názov v dcterms je označený ako title, v MARCu je označený číslom 245 (title proper statement). Na rozdiel od dcterms obsahuje niekoľko pomocných polí (ako napríklad 222 kľúčový názov, 240 unifikovaný názov,...).[4, s. 288-289] Takéto označenie je ľahko čitateľné pre stroje, knihovníci si pri každodennej práci s týmito číslami ich významy zapamätajú. Človek, ktorý ich vidí prvýkrát, významu nerozumie.

MARC je od DC komplikovanejší, dokáže však presnejšie popísať zdroj. Prvé číslo v číselných kódoch určuje, o aký typ informácie ide, jednotlivé kódy sú popísané v tabuľke 2.1. V prípade kódov 1XX, 4XX, 6XX, 7XX a 8XX sa obsah upresňuje doplnením dvojice čísel. Zvyčajne sa dodržiavajú nasledujúce dvojice: X00 - Mená osôb, X40 - Bibliografické názvy, X10 - Názvy firiem, X50 - Tematické pojmy, X11 - Názvy stretnutí/konferencií, X51 - Názvy miest, X30 - Jednotné názvy.

Tabuľka 2.1: Typ informácie v kóde MARC

0XX	Kontrolná informácia, identifikačné a klasifikačné čísla,...
1XX	Hlavné údaje
2XX	Názvy a kapitoly (názov, edícia, vydanie)
3XX	Fyzický popis,...
4XX	Informácie o dieloch/sériách
5XX	Poznámky
6XX	Kontaktné informácie na subjekty
7XX	Pridané informácie (iné než o subjektoch, dieloch/sériách); linkovacie polia
8XX	Rada pridaných informácií, informácie o holdingoch
9XX	Vyhradené pre lokálnu implementáciu

Hodnoty niektorých kódov majú presne určenú dĺžku a obsah, napríklad kód 008 obsahuje číselný kód pre zdroj a kód jazyka, v akom je dokument napísaný. Iné polia nemajú obmedzenú dĺžku ani definovanú štruktúru a hodnoty v nich sú len textové polia. Tieto polia často obsahujú aj podhodnoty, ktoré sú označené písmenami a, b, c,.... Napríklad pole s kódom 100 (meno autora) môže obsahovať podpolia so štandardizovaným menom, celými krstnými menami a dátumy.[4, s. 288-291]

Použitie navrhovaného repozitára by malo byť jednoduché aj pre užívateľov, ktorí s metadátami nemajú veľké skúsenosti a nepotrebujú komplikovaný popis dát. Pre skúsenejších užívateľov by však bolo dobré zachovať možnosť použitia zložitejších, prípadne vlastných metadátových schém. Repozitár by teda mal vedieť používať aj iné metadátove schémy než len Dublin Core alebo MARC.

2.1.2 Software

V tejto časti popisujem prehľad najrozšírenejších softwarov, ktoré sa používajú ako implementácie repozitárov. Uvádzam prehľad dôležitých vlastností pre ďalší vývoj repozitáray a to či ide o proprietárny alebo open source systém, kvôli možnosti ďalších úprav; programovací jazyk a modulárnosť softwaru; aké metadátové schémy používajú a či ich je možné rozširovať; a či daný software umožňuje verziovanie uložených dát.

Keďže každý software pokrýva inú kombináciu týchto vlastností, bolo by veľmi náročné pokúšať sa o nejakú klasifikáciu. Preto uvádzam len prehľad ich vlastností:

2.1.2.1 Digital Commons

[`http://digitalcommons.bepress.com/`]

Hostovaná platforma inštitucionálneho repozitára. Zameraný na školy a školské dokumenty.

Používa Dublin Core schému, v používateľskom rozhraní podporuje aj iné vlastnosti než len DC, aj keď nepodporuje iné schémy (vrátane MARC).

Autori vedia prispôsobiť repozitár požiadavkám klienta.

Nepodporuje verziovanie.

2.1.2.2 LIBSYS

[`http://www.libsys.co.in/`]

Proprietárny software. Repozitár funguje ako webová aplikácia.

Používa MARC ako schému metadát.

2.1.2.3 SimpleDL

[`http://www.simpledl.com/`]

Proprietárny software.
Metadáta na základe Dublin Core. Môžu byť rozšírené o iné schémy.

2.1.2.4 Greenstone

[http://www.greenstone.org/]
Repozitár vyvinutý na Univerzite Waikato.
Používa MARC schému.
Modulárna architektúra, napísaný v jazyku Java. Pluginy v jazyku Perl.
Nepodporuje verziovanie.
Open source

2.1.2.5 Invenio

[http://inveniosoftware.org/]
Software bol pôvodne vyvinutý pre CERN. Umožňuje vytvoriť digitálnu knižnicu alebo repozitár dokumentov dostupný cez web.
Používa špecifikáciu MARC pre metadáta.
Má modulárnu architektúru. Napísaný v jazyku Python.
Podporuje verziovanie uložených dát.
Open Source

2.1.2.6 EPrints

[http://www.eprints.org/]
Vyvinutý na Univerzite Southampton.
Používa rôzne typy metadátových polí, ktoré je možné nastavovať (upraviť zobrazovanie, indexovanie, vyhľadávanie).
Modulárny software napísaný v jazyku Perl.
Podporuje verziovanie dát.
Open Source

2.1.2.7 DSpace

[http://www.dspace.org/]
Software pôvodne vyvinutý MIT a Hewlett-Packard. Od vzniku má viac ako 2000 inštalácií po celom svete.
Ako východziu schému pre popis dát používa Dublin Core, je však možné použiť aj iné schémy.
Ide o súbor spolupracujúcich Java webových aplikácií. K dispozícii je RESTful webové užívateľské rozhranie.
Neumožňuje verziovanie uložených dát.
Open source

2.1.2.8 Fedora

[http://www.fedora-commons.org/]

Je možné použiť rôzne schémy pre popis dát.

Flexibilný, jednoducho rozšíriteľný, modulárny repozitár. Napísaný v programovacom jazyku Java.

Umožňuje verziovanie uložených dát.

Open Source

2.2 Nástroje na zber a organizáciu chemických dát

Výskumníci v oblasti chémie si vedú laboratórne denníky so záznamami hypotéz, experimentov, analýz alebo interpretáciou experimentov. V súčasnosti sa denníky vedú v elektronickej forme s využitím elektronických laboratórnych denníkov (často sa pre tento software používa skratka ELN). Keďže Ústav organickej chémie VŠCHT Praha používa a naďalej chce používať len E-Notebook a Open Enventory, iné nástroje na zber a organizáciu chemických dát v prehľade neuvádzam.

Prehľad programov, ktoré používa Ústav organickej chémie VŠCHT Praha:

2.2.1 E-Notebook

[http://www.cambridgesoft.com/Ensemble/E-notebook/] Software od firmy Perkin Elmer. V súčasnosti je k dispozícii len ako Enterprise verzia alebo ako súčasť cloudových aplikácií Elements https://elements.perkinelmer.com/ a plánovaného ChemDraw E-notebook http://chemdrawenotebook.perkinelmer.cloud/. Perkin Elmer dodáva Enterprise aplikáciu ako hotové riešenie s úpravami a nastavením pre konkrétneho zákazníka. Software funguje na serveroch Oracle. Cloudové riešenie aj Enterprise verzia softwaru je uzatvorená a upravovať ich môže len dodávateľská firma.

2.2.2 Open Enventory

[https://www.chemie.uni-kl.de/goossen/open-enventory/] Webová open source aplikácia napísaná v jazyku PHP, ktorá má k dispozícii všetky zdrojové kódy. Neexistuje k nej ale žiadna dokumentácia. Pri prechádzaní kódu aplikácie som naviac zistil, že veľká časť komentárov a aj časť samotného kódu sú napísané v nemčine.

Využíva MySQL databázu. Databázová schéma taktiež nie je prehľadná, v jednotlivých tabuľkách nie sú označené cudzie kľúče, a teda chýbajú prepojenia na iné tabuľky. Na stĺpcoch, ktoré by mali byť cudzími kľúčmi, sú len indexy.

Kapitola 3

Analýza a návrh riešenia

3.1 Analýza požiadaviek

CESNET, z.s.p.o. bol oslovený Ústavom organickej chémie VŠCHT Praha, ktorý potrebuje vyriešiť ukladanie a sprístupnenie vlastných dát - chemické vzorce, reakcie, analýzy nameraných dát. Nad jedným datasetom môže pracovať viacero výskumníkov, niektorí dáta namerali, iní ich analyzujú alebo každý člen tímu pracujúci na jednom projekte rieši iné merania a experimenty. Výskumník teda okrem vlastných dát potrebuje mať prístup aj k dátam ostatných ľudí v tíme. Nie všetky dáta môžu byť zverejnené, na niektoré výskumy môže platiť embargo a majú byť zverejnené až neskôr, k dátam, s ktorými sa aktuálne pracuje, majú mať prístup len členovia tímu alebo dáta ich autor nechce zverejniť z iných dôvodov. Pre tieto dáta taktiež potrebujú vyriešiť zálohovanie.

Ako sa postupne zistilo, o vyriešenie ukladania a sprístupnenia dát má záujem viacero rôznych a na rôzne dáta zameraných skupín. Preto chceme vytvoriť repozitár, ktorý bude jednoduché rozšíriť pre užívateľov používajúcich iné typy dát a metadát.

CESNET v rámci služieb DataCare poskytuje dátové úložisko s celkovou hrubou kapacitou presahujúcou 21 PB. Toto úložisko poskytuje dátový priestor na zálohovanie, archiváciu, zdieľanie dát. [5] Úložisko dát umožňuje ukladať dáta tak, aby boli prístupné len pre jednu osobu alebo zdieľané pre skupinu ľudí. [6] CESNET teda má vytvorené zázemie, ktoré bude možné využiť pre potreby repozitára.

3.1.1 Funkčné požiadavky

Ústav organickej chémie VŠCHT Praha v súčasnosti využíva aplikácie pre tvorbu laboratórnych denníkov, v ktorých sú uložené informácie o chemických prvkoch, reakciách, ktoré počas pokusu nastali, taktiež o priebehu meraní a pokusov. Aby bola využiteľnosť repozitára čo najlepšia a práca s ním čo naj-

jednoduchšia, požadujú možnosť importovať dáta z aplikácie Open Enventory, v ktorej si vedú laboratórne denníky, do repozitára.

Projekty v rámci laboratórnych denníkov obsahujú:

- meno vedca alebo vedcov, ktorí na meraniach a pokusoch spolupracovali,
- priebeh meraní a pokusov,
- reaktanty,
- vzniknuté produkty,
- chemickú rovnicu, ktorá bude zobrazená aj schematicky (obrázkom),
- pozorovanie priebehu pokusu,
- NMR spektrá (spektrá nukleárnej magnetickej rezonancie) chemických prvkov,
- IR (infračervené) spektrá,
- hmotnostné spektrá,
- pri chemických prvkoch je potrebné evidovať:
  - štandardný názov prvku,
  - zápis štruktúry,
  - obrázok štruktúry,
  - chemický vzorec prvku,
  - molekulárnu hmotnosť,
  - hmotnosť prvku,
  - koncentráciu.

Repozitár musí pre tieto dáta umožniť:

- Uložiť nové dáta.
- Upraviť existujúce dáta.
- Zobraziť existujúce dáta.
- Uložiť históriu zmien dát.
- Vyhľadávanie v metadátach.
- Kontrolovať oprávnenia na prístup k dátam.
- Import dát z aplikácie Open Eventory.

Prístup k jednotlivým dokumentom a poliam ale môže byť limitovaný. Vytváranie a úprava jednotlivých dokumentov je umožnená len konkrétnym užívateľom.

Aplikácia Open Eventory musí byť upravená tak, aby umožnila export dát vo formáte vhodnom pre import do repozitára.

3.1.2 Požiadavky na vlastnosti repozitára

- Repozitár bude pre užívateľov dostupný ako webová aplikácia.
- Repozitár musí umožniť ďalšie rozšírenie pre iné typy dát.
- Repozitár bude napojený na služby CESNETu.

3.1.3 Administračné rozhranie

Aby bolo možné spravovať kolekcie, oprávnenia pre prístup, užívateľov priamo v aplikácii, je potrebné vytvoriť v repozitári administračné rozhranie. Implementácia tohto rozhrania ale nie je súčasťou tejto diplomovej práce.

Kým administračné rozhranie nie je vytvorené, je nutné HTML šablóny pre kolekcie a rôzne typy dokumentov, oprávnenia pre prístup k dokumentom vytvárať a do Fedory ukladať manuálne. Pre zjednodušenie a testovanie sme vytvorili skript, ktorý umožňuje uloženie HTML šablón a ich priradenie rôznym typom dát. A tiež skript, ktorý umožňuje priradenie oprávnení.

3.2 Výber technológií

3.2.1 Výber repozitára

Keďže ani jeden existujúci repozitár nespĺňa všetky požiadavky alebo nevie uložiť/zobraziť dáta pre Ústav organickej chémie VŠCHT Praha, bolo potrebné vytvoriť nový alebo upraviť jestvujúci software. Vytvorenie nového softwaru od základov by bolo neefektívne. Vyššie zmienené repozitáre fungujú, niektoré ich časti by teda boli programované nanovo. Zvolená bola možnosť doplniť/upraviť funkčnosť existujúceho repozitára. Keďže zadávateľ preferuje open source riešenia, vyberali sme vhodný repozitár z open source repozitárov.

Okrem toho boli pri výbere vhodného repozitára do úvahy brané ďalšie kritériá, a to možnosť použitia viacerých metadátových schém, programovací jazyk, podpora komunity. Do finálneho výberu sa dostali DSpace a Fedora. Z testov, ktoré sme pri výbere repozitára previedli, vyplynulo, že sú oba repozitáre podobne výkonné. Vyhľadávanie v metadátach bude naviac zabezpečené samostatnou aplikáciou. Oba zvládajú milióny záznamov [7] [8, s. 213].

Vďaka návrhu Fedory je pridávanie rozšírení do tohto softwaru jednoduchšie, taktiež už má vyriešené verziovanie uložených dát. DSpace má k dispozícii webové užívateľské rozhranie, ktoré je možné upravovať a ďalej rozširovať.

Fedora používa jednoduché webové rozhranie, ktoré umožňuje len základnú prácu s dátami. Vytvorenie samostatného, nového webového užívateľského rozhrania s využitím RESTapi je ale jednoduchšie než úprava jadra DSpace, aby zvládal verziovanie uložených dát.

Z existujúcich možností bola zvolená Fedora ako najvhodnejší software pre možnosť ďalších potrebných úprav pre použitie v rámci služieb CESNET, z.s.p.o. a splnenie požiadaviek Ústavu organickej chémie VŠCHT Praha.

Základné webové rozhranie, ktoré poskytuje Fedora, umožňuje zobraziť metadáta, stiahnuť binárne súbory, vytvoriť potomka typu kontajner a binárny dokument, upraviť alebo zmazať existujúci dokument. Za kontajner sú vo Fedore považované všetky dokumenty okrem binárnych, teda aj tie, ktoré už žiadneho potomka nemajú. Binárneho typu sú dokumenty obsahujúce dátové súbory nahrané do Fedory. Webové rozhranie je možné vidieť na obrázku 3.1.

Pre účely repozitára dát pre Ústav organickej chémie VŠCHT Praha je takéto zobrazenie dát nedostatočné. Bolo potrebné vytvoriť užívateľské rozhranie, ktoré vhodným spôsobom zobrazí zoznam dokumentov v rámci kolekcie ale aj samotné dáta a metadáta dokumentu.

Vytvorené webové užívateľské rozhranie tiež musí umožniť vyhľadávanie v uložených dátach.

Existujúce rozhranie umožňuje vytvoriť nový dokument a následne k nemu pridať informácie. Tie je možné zadávať len v textovej forme s využitím jazyka RDF (Resource Description Framework), teda trojíc - subjekt, predikát a objekt. RDF je jazyk používaný pre reprezentáciu informácii na webe. [9] Preto je potrebné zjednodušiť vytváranie nových kolekcií a dokumentov v užívateľsky prívetivej forme.

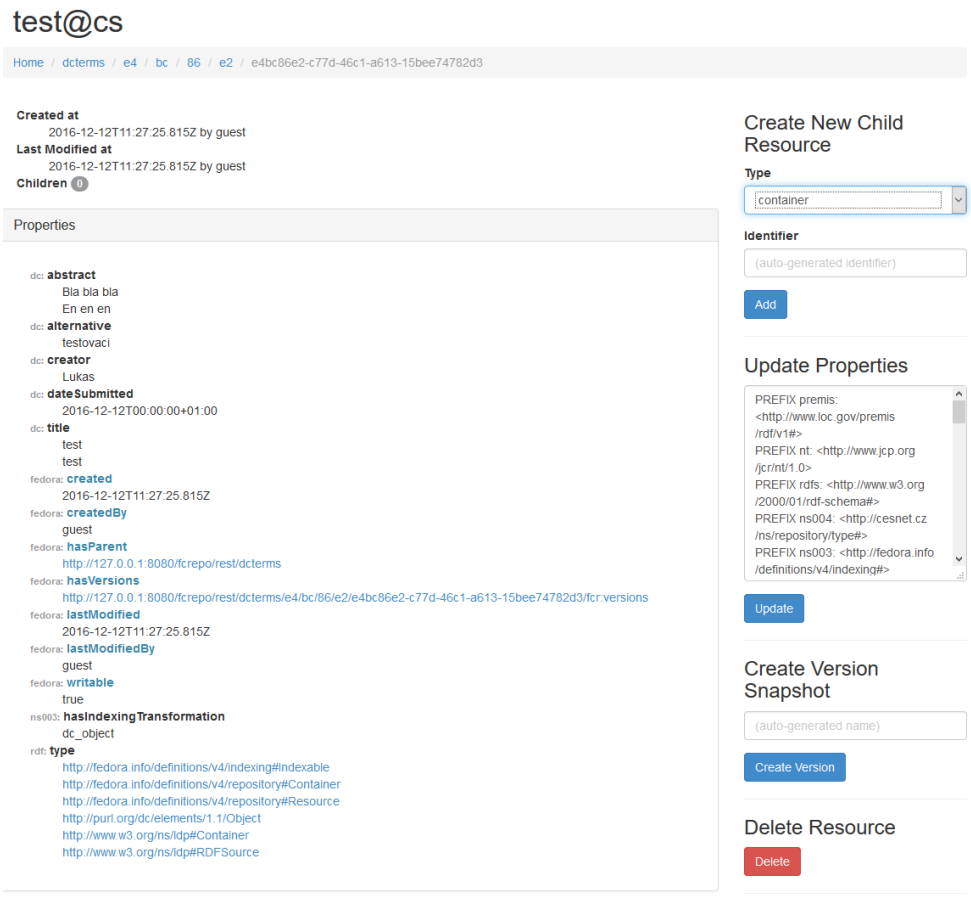
Pre vytváranie nových dokumentov, úpravu existujúcich a zobrazenie dát bude potrebné vytvárať HTML šablóny. Repozitár má byť čo najľahšie rozšíriteľný pre rôzne dáta a metadáta. Preto bolo potrebné vytvoriť nástroj, ktorý by umožnil používanie šablón pre nové typy dát s čo najmenším zásahom do kódu aplikácie. Tento nástroj vie pracovať so šablónami uloženými priamo vo Fedore.

Prístupové práva je taktiež možné nastaviť pomocou RDF priamo v existujúcom webovom rozhraní. Musím však prácu s nastavovaním a kontrolou oprávnení zjednodušiť. Na to bolo potrebné upraviť aj kód Fedory.

3.2.2 Výber aplikácie na vyhľadávanie

Na vyhľadávanie v repozitári bude použitá samostatná aplikácia. Synchronizáciu dát s Fedorou zabezpečuje medzivrstva, ktorá komunikuje s oboma aplikáciami. Potrebujeme teda aplikáciu na vyhľadávanie v textových metadátach, ktorá je čo najrýchlejšia a zvláda veľké množstvo (milióny) záznamov.

Keďže zadávateľ preferuje open source, pri výbere sme sa rozhodovali medzi týmito najrozšírenejšími vyhľadávacími aplikáciami:



Obr. 3.1: Zobrazenie dát vo webovom rozhraní Fedory

3.2.2.1 ElasticSearch `https://www.elastic.co/products/elasticsearch`

ElasticSearch je distribuovaný, RESTful vyhľadávací a analytický software. Umožňuje veľmi rýchle vyhľadávanie v indexovaných dátach. Dopyty je možné posielať s využitím RESTful api a JSONu, knižnice sú dostupné pre rôzne programovacie jazyky vrátane Pythnu a Javy. Podľa [10] ide o najrozšírenejší vyhľadávací engine.

3.2.2.2 Solr `http://lucene.apache.org/solr/`

Solr je taktiež RESTful vyhľadávací software s podporou pre dáta vo formáte JSON, XML, CSV alebo binárnych dát cez HTTP.

Obe vyhľadávacie aplikácie vychádzajú z jadra Apache Lucene, čo je vysokovýkonná, plnohodnotná, v texte vyhľadávacia knižnica napísaná v Jave.

Umožňuje full-textové vyhľadávanie v dokumentoch. `http://lucene.apache.org/core/`

3.2.2.3 Porovnanie vyhľadávacích aplikácií

V tabuľke 3.1 je porovnanie vlastností, ktoré rozhodovali pri výbere vyhľadávacieho enginu.

Tabuľka 3.1: Porovnanie vyhľadávacích enginov

Vlastnosť	Solr	ElasticSearch
Formát vstupných dát	XML, CSV, JSON	JSON
HTTP REST API	Áno	Áno
Knižnice pre Javu	Áno	Áno
Knižnice pre Python	Áno, vytvorená komunitou	Áno
Integrácia vo frameworku Django	Áno	Áno
Vnorené dokumenty	Nie	Áno
Vzťah rodič-potomok	Nie	Áno

Ak napríklad máme v repozitári uložený dokument, kde sú 2 autori, prvý s krstným menom „Ján“ a priezviskom „Svoboda“ a druhý s krstným menom „Martin“ a priezviskom „Novák“, pričom chceme vyhľadať dokument, kde je autor s krstným menom „Ján“ a priezviskom „Novák“, Solr medzi výsledkami vráti nesprávne aj tento dokument. Elasticsearch, vďaka vnoreným dokumentom správne vyhodnotí, že tento dokument nemá autora „Ján Novák“ a dokument medzi výsledkami nezobrazí.

Vnorené dokumenty a možnosť vyhľadávať rodičov, ktorých deti spĺňajú špecifikovanú podmienku a opačne vyhľadávať potomkov, ktorých rodičia spĺňajú špecifikovanú podmienku, viedli k tomu, že je v repozitári použitý ElasticSearch ako vyhľadávací software. Medzivrstva ale umožňuje pracovať aj s aplikáciou Solr.

3.2.3 Výber programovacieho jazyka a frameworku pre vytvorenie užívateľského rozhrania

Na vývoji repozitára pracuje viacero ľudí, každý ovláda a preferuje iné jazyky. Keďže sme sa rozhodli využiť Fedoru ako repozitár dát a implementovať vlastné webové rozhranie, bolo potrebné určiť programovací jazyk, v akom má byť toto rozhranie naprogramované.

Po dohode bol zvolený programovací jazyk Python `https://www.python.org/` pre vytvorenie webového rozhrania a framework Django `https://www.djangoproject.com/`, ktorý by mal prácu uľahčiť.

3.2.3.1 Python

Python je interpretovaný programovací jazyk vyššej úrovne. Obsahuje efektívne dátové štruktúry a umožňuje jednoduchý, ale efektívny prístup k objektovo-orientovanému programovaniu. [11]

3.2.3.2 Django

Django je webový framework pre Python. Na prvý pohľad na fungovanie Djanga sa zdá, že využíva návrhový vzor MVC (Model-view-controller), avšak kontrolérom nazveme v prípade Djanga „view“ a view podľa vzoru MVC „template“. V Django interpretácii vzoru MVC ale „view“ popisuje dáta, ktoré sú zobrazené užívateľovi. Pritom nie je dôležité, ako sa dáta zobrazia, podstatné je, ktoré dáta budú zobrazené.

Obsah dát je oddelený od prezentácie dát. K prezentácii sú využívané šablóny („template“), ktoré definujú, ako sú dáta zobrazené.

Kontrolér podľa definície MVC je v prípade Djanga skôr framework samotný. Obsahuje kód, ktorý obslúži dopyt a požiadavku pošle na správne view podľa konfigurácie Django URL. V konfigurácii Django URL sú regulárne výrazy. Ak sa splní niektorý z výrazov, zavolá sa funkcia, ktorá má na starosti obslúženie požiadaviek s danou URL adresou. Vyhodnotenie výrazov je v poradí, v akom sú zapísané.

V prípade ak máme nakonfigurované takéto regulárne výrazy pre URL adresy v súbore urls.py:

```
urlpatterns = [
    url(r'^articles/2003/$', views.special_case_2003),
    url(r'^articles/([0-9]{4})/$', views.year_archive),
    url(r'^articles/([0-9]{4})/([0-9]{2})/$', views.
        month_archive),
    url(r'^articles/([0-9]{4})/([0-9]{2})/([0-9]+)/$',
        views.article_detail),
]
```

A ak beží webová aplikácia na localhoste, po pokuse o zobrazenie URL adresy http://localhost/articles/2003/ sa teda zavolá funkcia (view), ktorá je v súbore views.py pomenovaná special_case_2003. Pri pokuse o zobrazenie URL adresy http://localhost/articles/2003/03/03/ ale už dôjde k splneniu posledného regulárneho výrazu a zavolaniu view article_detail.

V prípade Djanga sa namiesto MVC návrhového vzoru používa skôr označenie MTV (Model-template-view), ktoré presnejšie popisuje to, ako funguje Django. [12]

Model je klasická dátová vrstva, ktorá obsahuje logiku potrebnú pre prácu s dátami.

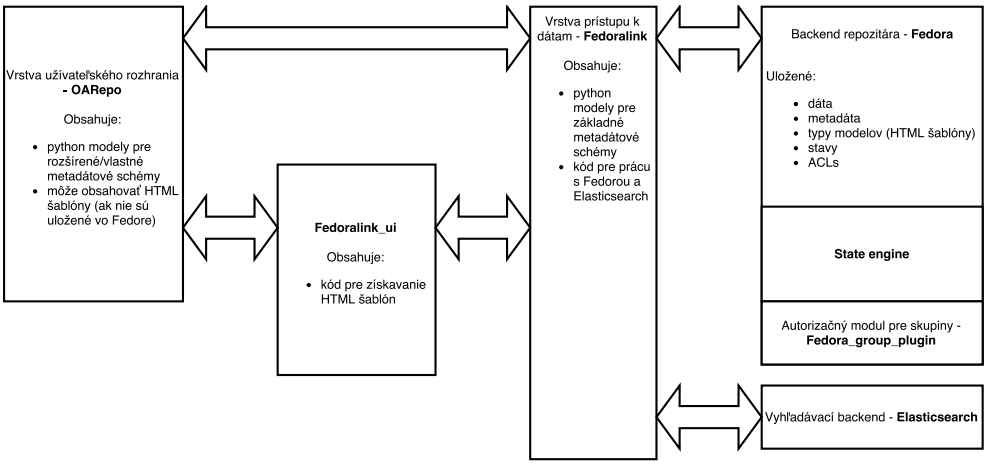
Kapitola 4

Implementácia

4.1 Návrh aplikácie

Ako backend repozitára je použitá Fedora. Pre zjednodušenie práce s oprávneniami budú použité stavy. Tento stav je dokument uložený vo Fedore, ktorý môže napríklad vyjadrovať stav publikovania dát (novovytvorený dokument, v procese schvaľovania, schválený dokument). Stav obsahuje informáciu o oprávneniach (kto má právo dokument s týmto prideleným stavom vidieť, kto ho môže upravovať,...) a povolené zmeny stavov. Takto je možné dokumentom meniť stavy, v akých sa nachádzajú a meniť tak oprávnenia. Preto nebude potrebné pre každý dokument definovať nové oprávnenia.

Fedora síce umožňuje definíciu prístupových práv (ACLs, z angličtiny Access Control Lists teda zoznamy prístupových práv), ale stavy nepoužíva. Je



Obr. 4.1: Architektúra repozitára

ju preto potrebné upraviť tak, aby s týmito stavmi vedela pracovať (kontrolovať prechody medzi stavmi). To zabezpečí modul State engine, ktorý upraví kód Fedory.

Oprávnenia chceme nastavovať nielen pre konkrétnych užívateľov, ale aj pre rôzne skupiny, do ktorých užívatelia patria. Zároveň sme pri návrhu repozitára mysleli na možnosť prihlásenia cez rôzne autorizačné služby ako je Shibboleth (`https://shibboleth.net/`) alebo Perun (`https://perun.cesnet.cz`). Využijeme štandardnú On-Behalf-Of HTML hlavičku, s ktorou vie pracovať Fedora a vlastnú On-Behalf-Of-Django-Groups hlavičku. Pre spracovanie tejto hlavičky je nutné do Fedory doplniť autorizačný modul (Fedora_group_plugin), ktorý bude súčasťou Fedory.

Užívateľské rozhranie chceme vytvoriť s využitím programovacieho jazyka Python a frameworku Django. Pre možnosť vytvorenia rôznych užívateľských rozhraní pre rôzne používateľské skupiny (ktoré potrebujú pracovať s inými dátami a metadátami) boli vytvorené medzivrstvy Fedoralink a Fedoralink_ui. Fedoralink má na starosť komunikáciu s Fedorou a Elasticsearchom s využitím REST api. Umožňuje pracovať s dokumentmi získanými z Fedory ako s Django objektmi. Django objekt je inštancia nejakej triedy, s ktorou je možné pracovať podľa definovaných štandardov frameworku Django. Fedoralink dokáže metadáta podľa ich typu získavať z Elasticsearch alebo z Fedory. S využitím Elasticsearch aplikácia taktiež môže v repozitári vyhľadávať.

V prípade webových aplikácií často používame rovnaký kód pre zobrazenie rôznych dokumentov, formuláre pre vytváranie nových dokumentov a ich úpravy. Django preto používa views (zobrazenia) založené na triedach. Ide o skupinu tried, ktoré nahradzujú funkcie pre zobrazenia, zjednodušujú prácu a zlepšujú znovupoužiteľnosť kódu pri najčastejšie používaných typoch zobrazení. Na HTTP požiadavok pošlú odpoveď, pričom doplnia dáta do správnych šablón. Vďaka takýmto triedam nie je nutné mať rovnaký kód na viacerých miestach aplikácie.[13]

Namiesto funkcie, v ktorej by bolo medzi GET a POST požiadavkom používať podmienku:

```
def myview(request):
    if request.method == "POST":
        form = MyForm(request.POST)
        if form.is_valid():
            # <process form cleaned data>
            return HttpResponseRedirect('/success/')
    else:
        form = MyForm(initial={'key': 'value'})

    return render(request, 'form_template.html', {'form'
        : form})
```

je možné použiť triedu:

```
class MyFormView(View):
    form_class = MyForm
    initial = {'key': 'value'}
    template_name = 'form_template.html'

    def get(self, request, *args, **kwargs):
        form = self.form_class(initial=self.initial)
        return render(request, self.template_name, {'
            form': form})

    def post(self, request, *args, **kwargs):
        form = self.form_class(request.POST)
        if form.is_valid():
            # <process form cleaned data>
            return HttpResponseRedirect('/success/')

        return render(request, self.template_name, {'
            form': form})
```

Aby som podobne zjednodušil prácu so zobrazeniami a minimalizoval viacnásobné používanie rovnakého kódu, vytvoril som modul Fedoralink_ui. Aplikácia je napísaná v jazyku Python s využitím frameworku Django. Obsahuje logiku pre prácu so šablónami, ktoré chceme ukladať priamo v repozitári. Bolo teda potrebné vytvoriť nástroj, ktorý dokáže z repozitára získať správne šablóny, cachovať ich a po doplnení dát z dokumentov do HTML šablóny zobraziť výslednú webovú stránku.

Pre zastrešujúcu aplikáciu, ktorá vytvára webové užívateľské rozhranie používam pracovný názov OARepo. Samotná aplikácia obsahuje modely a prípadne šablóny, ak nie sú uložené vo Fedore, pre jednotlivé typy dát. Tieto modely definujú vlastné alebo rozširujú existujúce metadátové schémy. Model je trieda v Pythone, po získaní dokumentu z Fedory aplikácia vytvorí objekt v Pythone, ktorý je inštanciou takejto triedy (modelu).

Navrhnutú architektúru repozitára je možné vidieť na obrázku 4.1. Nižšie sú detailnejšie rozpísané funkcie jednotlivých modulov.

4.1.1 Fedora

Ako už bolo zmienené v predchádzajúcej kapitole, ako backend pre repozitár bola zvolená Fedora. V nej sú uložené dáta, metadáta, typy modelov spolu s HTML šablónami, stavy a oprávnenia (ACL).

Metadáta vo Fedore sú uložené s využitím RDF (Resource Description Framework), teda ako trojice - subjekt, predikát a objekt.

4.1.2 State engine

Pre možnosť využívania stavov bude nutné rozšíriť Fedoru o tento modul. Modul rieši prechody medzi stavmi, zmenu stavov, zmenu kontroléru stavov, konkrétnu operáciu povolí len oprávneným osobám. Oprávnené osoby sú určené pomocou ACL. Keďže návrh dátového formátu pre popis stavov pracujúcich s prístupovými právami nadväzujúcimi na štandard W3C WebAccessControl a implementácia tohto modulu boli uvedené ako časť zadania, podrobnejšie sa tomuto modulu venujem v samostatnej sekcii 4.4.

4.1.3 Fedora_group_plugin

Doplňujúci modul do Fedory, ktorý umožňuje overenie oprávnení aj na základe členstva v django skupinách. Framework Django má vyriešenú prácu s užívateľmi, obsahuje kód, ktorý umožňuje ich registráciu, prihlásenie, v administračnom rozhraní správu užívateľov a tiež užívateľských skupín. Pre skupiny je možné nastaviť rôzne oprávnenia. Priamo v kóde aplikácie, využívajúcej framework Django, je tak možné získať objekt, ktorý obsahuje informácie o prihlásenom užívateľovi. Takto sa vieme dostať k jeho používateľskému menu, ale aj ku skupinám, ktorých je členom.

Samotná Fedora s webac umožňuje overenie autorizácie na základe štandardnej On-Behalf-Of hlavičky, o ktoré sa stará DelegateHeaderPrincipalProvider. On-Behalf-Of HTTP hlavička umožňuje impersonifikáciu na iného užívateľa. Často sa používa, aby administrátor mohol testovať systém ako niektorý z užívateľov alebo simulovať chybu, ktorá niektorému užívateľovi nastala.

Fedora musí bežať pod Java Servlet kontajnerom (Tomcat, GlassFish, Jetty...), autentizáciu rieši s využitím týchto kontajnerov. Užívateľské údaje sú definované v nastavení kontajneru. Pri pridávaní nového užívateľa by teda bolo potrebné zmeniť nastavenie Java Servlet kontajnera. Zmena týchto nastavení sa väčšinou prejaví až po reštarte kontajnera. Užívateľov by sme museli mať definovaných v aplikácii, ktorá sa stará o webové rozhranie, aby sa užívateľ mohol prihlásiť a pridávať nové dáta, v nastavení Java Servlet kontajnera a taktiež v definicii prístupových práv priamo vo Fedore, aby bolo možné riešiť autorizáciu.

S využitím On-Behalf-Of hlavičky je možné požiadavky na Java Servlet kontajner prevádzať stále pod jedným užívateľom (FedoraAdmin) ale Fedora už užívateľa autorizuje na základe užívateľského mena uvedeného v On-Behalf-Of hlavičke.

Podobne ako užívatelia sú aj skupiny v Java Servlet kontajneroch definované v ich nastaveniach. Fedora však nemá implementáciu pre využitie žiadnej HTTP hlavičky, ktorá by umožňovala impersonifikáciu na nejakú skupinu. Rozšírenie Fedora_group_plugin umožňuje autorizáciu na základe On-Behalf-Of-Django-Groups hlavičky, o ktoré sa stará DjangoGroupPrincipalProvider.

Skupinu teda stačí mať uloženú v databáze webovej aplikácie, kde ich ukladá Django.

Hodnota posielaná v týchto hlavičkách je vo forme urn. Ak teda máme na vstupe užívateľské meno vo forme emailu (napr. „user@vscht.cz“), výsledná hodnota bude „urn:vscht.cz:user“, inak je v tvare „urn:user“.

Vďaka tomuto rozšíreniu bude možné aj jednoduché rozšírenie repozitára o autentizáciu cez iného poskytovateľa identity (napr. Shibboleth), keď sa zároveň vynechá nutnosť registrácie užívateľa do webovej aplikácie.

Plugin je súčasťou git repozitára fedoralinku. Autorom tohto pluginu je Mgr. Miroslav Šimek.

4.1.4 Elasticsearch

Aplikácia, ktorá umožňuje rýchle vyhľadavánie v metadátach.

4.1.5 Fedoralink

Ako je spomenuté vyššie, framework Django obsahuje logiku pre prístup k dátam. K tomu sa využívajú modely - teda triedy, ktoré využívajú techniku ORM (object-relational mapping) a umožňujú tak pracovať s dátami získanými z relačných databáz. Relačné databázy sú navrhnuté tak, aby umožňovali efektívne ukladanie dát ale taktiež selekciu a získavanie dát (teda vyhľadávanie v dátach).

Repozitáre sú však navrhnuté pre ukladanie dát. Prístup k jednotlivým dokumentom vo Fedore je možný priamo, ak vieme jeho id (nazývaný „slug“). Tento slug môžeme pri vytváraní nového dokumentu navrhnúť, avšak Fedora môže uložiť dokument s iným slugom a ten vrátiť. Ak id dokumentu nepoznáme, musíme prechádzať dokumenty od koreňa repozitára. Preto využívame pre indexovanie dát a vyhľadávanie samostatnú aplikáciu Elasticsearch.

Programátori, ktorí používajú Django, sú zvyknutí na využívanie modelov pre prístup k dátam. Django neumožňuje napojenie na Fedoru a Elasticsearch rovnako ako na relačnú databázu. Chceli sme ale zachovať pre programátorov rovnaký prístup k dátam. Preto vznikla medzivrstva Fedoralink. Aplikácia je rozhranie, ktoré umožňuje prácu s Fedorov a Elasticsearchom. Modely umožňujú ukladanie dát do Fedory, získanie dokumentov priamo cez id, ale aj vyhľadávanie s využitím Elasticsearch. Navonok tieto modely vyzerajú ako klasické Django modely.

Aplikácia pôvodne vznikla pre potreby repozitára záverečných prác VŠCHT Praha, v programovacom jazyku Python s využitím frameworku Django. Autorom fedoralinku je Mgr. Miroslav Šimek. Fedoralink bol počas vývoja repozitára ďalej upravovaný v rámci diplomovej práce. Riešil som úpravy, ktoré boli nutné pri prechode na Elasticsearch vo verzii 5.0, opravu drobných chýb, časť úprav potrebných pre umožnenie autentifikácie cez On-Behalf-Of HTTP

hlavičky. Aktuálnu verziu je možné nájsť na `https://github.com/CESNET/fedoralink`

4.1.5.1 FedoraObject

Aby bolo možné s dokumentmi získanými z Fedory pracovať ako s objektmi v Djangu, boli Mgr. Miroslavom Šimkom vytvorené triedy, ktoré s týmito dokumentmi pracujú. Trieda FedoraObject je základnou triedou pre tieto objekty. Umožňuje pracovať s dátami získanými vo formáte RDF z Fedory, aj keď vopred nepoznáme štruktúru týchto dát.

Ak potrebujeme získať alebo upraviť niektorú metadátovú položku, pracujeme s objektom nasledovne (v tomto prípade chceme získať alebo upraviť názov - title zo schémy Dublin Core):

```
# [RDF:Name]
obj[DC.title]
```

Z objektu môžeme získať jeho ID, URL identifikátor (slug), jeho potomkov, objekt uložiť späť do Fedory alebo ho zmazať.

Dokument vo Fedore môže byť typu container alebo bitstream. V druhom prípade môže mať k sebe priradený súbor. Preto aj táto trieda FedoraObject umožňuje prácu so získaným bitstreamom, a to pomocou funkcie get_bitstream.

4.1.5.2 IndexableFedoraObject

Rozširuje triedu FedoraObject. Ak využívame túto triedu, o schéme metadát musíme vedieť ďalšie informácie. Vieme, akého typu sú jednotlivé metadátové polia (napr. či ide o reťazec, pole, ktoré môže byť vo viacerých jazykoch alebo o dátum...).

Príklad využitia IndexableFedoraObject:

```
#
# DCObject is indexable and provides .title and .creator
    property, that get mapped to
# DC.* predicates in RDF by simple_namespace_mapper
#
class DCObject(IndexableFedoraObject):
    title = IndexedLanguageField(DC.title, required=True
        , verbose_name=_('Title'))
    alternative = IndexedTextField(DC.alternative,
        verbose_name=_('Alternative title'))
    abstract = IndexedLanguageField(DC.abstract,
        verbose_name=_('Abstract'), attrs={'presentation'
        : 'textarea'})
```

```
    creator = IndexedTextField(DC.creator, verbose_name=
        _('Creator'))
    contributor = IndexedTextField(DC.contributor,
        verbose_name=_('Contributor'))
    dateSubmitted = IndexedDateTimeField(DC.
        dateSubmitted, verbose_name=_('Date submitted'))
    dateAvailable = IndexedDateTimeField(DC.
        dateAvailable, verbose_name=_('Date available'))

    class Meta:
        rdf_types = (DC.Object,)
```

Trieda DCObject bude využitá pri dátach získaných z Fedory, ktoré obsahujú metadáta podľa schémy DublinCore. Samotná trieda dedí z triedy IndexableFedoraObject.

IndexedLanguageField - metadátové pole, ktoré môže byť vo viacerých jazykoch. Za samotnou hodnotou je vložený parameter „@lang“, ktorý podľa skratky jazyka („en“, „cs“) určuje, v akom jazyku je daná hodnota. IndexedTextField - metadátové pole, ktoré obsahuje textový reťazec. IndexedDateTimeField - metadátové pole obsahujúce dátum a čas.

RDF typ je taktiež uložený vo Fedore a umožňuje mapovať získaný dokument na správnu triedu.

4.1.5.3 FedoraTypeManager

Trieda (singleton) zodpovedná za vytvorenie inštancie FedoraObject (alebo jej podtriedy) podľa RDF metadát získaných z Fedory počas behu aplikácie. Dokument získaný z Fedory môže mať viacero RDF typov, a teda môže spadať do viacero tried. Z nich sa vyberie najvhodnejšia alebo sa pomocou viacnásobnej dedičnosti vytvorí nová trieda kombinujúca vlastnosti viacerých existujúcich tried, ktorá sa následne použije pre prácu s takto získaným dokumentom z Fedory.

Získanie správnej triedy pre dokument má na starosti funkcia get_object_class:

```
@staticmethod
def get_object_class(metadata, model_class=None):
    """
    Returns the best python class for the given metadata

    :param metadata:     the metadata
    :return:             python class which fits the
        metadata
    """

    from .models import FedoraObject
```

```
types = metadata[RDF.type]

possible_classes = {FedoraObject: 0}
if model_class:
    possible_classes[model_class] = 1

# look at classes registered on rdf types and if the
    class match, add it to the dict of possible
    classes
for clz, rdf_and_priority in FedoraTypeManager.
    on_rdf_types.items():
    if _type_matches(types, rdf_and_priority[0]):
        possible_classes[clz] = max(possible_classes
            .get(clz, 0), rdf_and_priority[1])

# look at classes registered on rdf predicates and
    if the class match, add it to the dict of
    possible classes
for clz, rdf_and_priority in FedoraTypeManager.
    on_rdf_predicates.items():
    if _has_predicates(metadata, rdf_and_priority
        [0]):
        possible_classes[clz] = max(
            possible_classes.get(clz, 0),
            rdf_and_priority[1])

# call class method handles_metadata and if it
    returns a priority, add the class as well
for clz in FedoraTypeManager.models:
    priority = getattr(clz, 'handles_metadata')(
        metadata)
    if priority is not None and priority >= 0:
        possible_classes[clz] = max(
            possible_classes.get(clz, 0), priority)

# convert to a list, add priorities from
    superclasses as well
# (i.e. 2 * current_priority + sum of priorities of
    superclasses)
propagated_possible_classes = []

for clazz, priority in possible_classes.items():
```

```
        for clz in inspect.getmro(clazz):
            if clz in possible_classes:
                priority += possible_classes[clz]

        propagated_possible_classes.append((clazz,
            priority))

    # sort by priority
    propagated_possible_classes.sort(key=lambda x: -x
        [1])

    # remove classes that are in mro of other classes
    classes = []
    seen_classes = set()
    for clazz, priority in propagated_possible_classes:
        if clazz in seen_classes:
            continue

        classes.append(clazz)

        for clz in inspect.getmro(clazz):
            seen_classes.add(clz)

    # got a list of classes, create a new type (or use a
        cached one ...)
    return FedoraTypeManager.generate_class(classes)
```

4.1.6 Fedoralink_ui

Modul Fedoralink_ui, ktorý som vytvoril, zjednodušuje prácu so šablónami. Využíva views (zobrazenia) založené na triedach, ktorých použitie umožňuje Django. Naviac ale umožňuje získanie šablón, ktoré sú uložené mimo kódu aplikácie, vo Fedore.

Pre rôzne typy dát môžu byť v repozitári uložené rôzne šablóny, pre zobrazenie, vytvorenie alebo editáciu dokumentu. Tiež šablóny, ktoré určujú ako sa má dokument zobraziť vo výpise dokumentov v rámci kolekcie alebo pri vyhľadávaní. Pre jednotlivé typy polí môžu byť taktiež vytvorené a do Fedory uložené rôzne šablóny. Ak nie je šablóna pre daný typ dokumentu uložená ani vo Fedore ani priamo v kóde aplikácie, Fedoralink_ui sa pokúsi zobraziť aspoň základné informácie s využitím predvolených šablón.

Modul využíva fedoralink pre komunikáciu s Fedorou a Elasticsearchom a je súčasťou git repozitára fedoralinku.

4.1.6.1 Mapovanie generických URL adries

Aby nebolo nutné do aplikácie pridávať nové pravidlá pre URL adresy pri každom vytvorení novej kolekcie, mám vytvorené pravidlá pre všeobecné URL adresy a kód, ktorý zabezpečí zobrazenie dokumentov v správnej šablóne. Funkcie v rámci súboru *generic_urls.py* mapujú URL adresy v aplikácii na správne časti kódu pre zobrazenie, editáciu alebo vyhľadávanie. Z URL adresy zistíme ID dokumentu alebo kolekcie vo Fedore.

Vzory využívajúce regulárne výrazy pre URL adresy:

- '^$' - index
- r'^(?P<collection_id>[a-fA-F0-9_/-]*)?search(?P<parameters>.*)$' - vyhľadávanie v rámci kolekcie
- '^(?P<id>.*)/addSubcollection$' - pridanie novej subkolekcie
- '^(?P<id>.*)/add$' - vytvorenie nového dokumentu ako potomka dokumentu s daným ID
- '^(?P<id>.*)/edit$' - upravenie dokumentu s daným ID
- '^(?P<id>.*)$' - zobrazenie dokumentu s daným ID

Tieto generické URL adresy môžu byť v prípade potreby ďalej rozšírené v niektorej časti aplikácie.

4.1.6.2 Získanie šablóny pre zobrazenie, editáciu dokumentu alebo zoznam dokumentov v kolekcii

Potom, ako je splnený niektorý z regulárnych výrazov pre URL adresy, sa zavolá obslužný kód pre zobrazenie. O zobrazenie správnych údajov v správnej šablóne, prípadne o vytvorenie nového dokumentu/kolekcie so správnymi údajmi, sa stará kód v súbore views.py.

Každý dokument uložený v repozitári má priradený RDF typ. V samotnej aplikácii (vo fedoralinku alebo v koncovej aplikácii) musí byť model - trieda v Pythone pre tento typ dokumentu alebo je použitý všeobecný model FedoraObject.

Vo Fedore sú uložené jednotlivé typy dokumentov, pri kolekciách je uložený typ subkolekcií a potomkov. Tieto dokumenty môžu mať uložené šablóny pre zobrazenie, úpravu a vytvorenie potomkov. Taktiež je možné do Fedory uložiť typy jednotlivých polí a k nim šablóny pre ich zobrazenie/editáciu.

Z HTTP požiadavku viem id dokumentu, ktorý chce užívateľ zobraziť, upraviť alebo id kolekcie, pod ktorou chce vytvoriť nový dokument. Ostatné dáta získam pomocou tohto id.

Ak mám zobraziť dokument, ktorý je nejakého RDF typu (napríklad typu DC.Object (`http://purl.org/dc/elements/1.1/Object`)), získam z repozitára dokument obsahujúci model a šablóny pre typ DC.Object. Model je názov a cesta k triede v kóde aplikácie. Šablóny sú uložené priamo ako binárne dáta a tak po získaní tohto typu ich už môžem používať priamo v kóde. Do šablóny pre zobrazenie potom môžem doplniť dáta z dokumentu, ktorý má byť zobrazený.

Ak mám upraviť nejaký dokument, postup je podobný. Akurát namiesto šablóny pre zobrazenie použijem šablónu pre editáciu, v ktorej je formulár pre editáciu dokumentov.

Ak mám vytvoriť nový dokument v repozitári, postup sa trochu líši. Najprv musím získať typ aktuálnej kolekcie, v ktorom chcem dokument vytvoriť. V ňom je uložený primárny typ potomkov. Získam teda typ potomkov, ich model a šablónu pre editáciu. Pomocou formulára v tejto šablóne je možné vytvoriť nový dokument.

K tomu, aby bolo možné typy dokumentov ukladať do Fedory existuje trieda ResourceType, ktorá dedí z IndexableFedoraObject. Trieda ResourceType umožňuje vytvoriť dokument, v ktorom sú uložené šablóny, cesta a názov modelu pre RDF typ. Tiež je tu uložené mapovanie na RDF typy. Vďaka tomu je možné získanie správneho typu dokumentu z Fedory (teda dokumentu, ktorý bol vytvorený pomocou triedy ResourceType).

```
class ResourceType(IndexableFedoraObject):
    label = IndexedTextField(CESNET_TYPE.label,
        verbose_name=_('Label'), level=IndexedField.
        MANDATORY)
    template_view = IndexedLinkedField(CESNET_TYPE.
        template_view, Template, verbose_name=_('Template
        for view'))
    template_edit = IndexedLinkedField(CESNET_TYPE.
        template_edit, Template, verbose_name=_('Template
        for edit'))
    template_list_item = IndexedLinkedField(CESNET_TYPE.
        template_list_item, Template, verbose_name=_('
        Template for item list view'))
    controller = IndexedTextField(CESNET_TYPE.controller
        , verbose_name=_('Controller class'), level=
        IndexedField.MANDATORY)
    rdf_types = IndexedTextField(CESNET_TYPE.rdf_types,
        verbose_name=_('RDF types'), level=IndexedField.
        MANDATORY, multi_valued=True)
    fedoralink_model = IndexedTextField(CESNET_TYPE.
        fedoralink_model, verbose_name=_('Fedoralink
        model class name'), level=IndexedField.MANDATORY)
```

```
    class Meta:
        rdf_types = (CESNET_TYPE.ResourceType,)
```

Ak sa správna šablóna pre dokument alebo pole nenachádza vo Fedore, skúsi ju nájsť v aplikácii alebo použije všeobecné šablóny uložené vo fedoralink_ui, ktoré umožňujú aspoň základné zobrazenie informácií.

4.1.6.3 Cachovanie šablón

Fedoralink_ui taktiež obsahuje kód potrebný pre cachovanie výsledných šablón zložených zo šablón typu dokumentu a jednotlivých polí, keďže získanie týchto údajov z Fedory je časovo náročné. Pre získanie výslednej šablóny je potrebné množstvo dopytov na Elasticsearch a následne na Fedoru, počet dopytov záleží hlavne na komplikovanosti modelu dokumentu.

O cachovanie sa stará trieda *FedoraTemplateCache*.

Prehľad vybraných metód v triede:

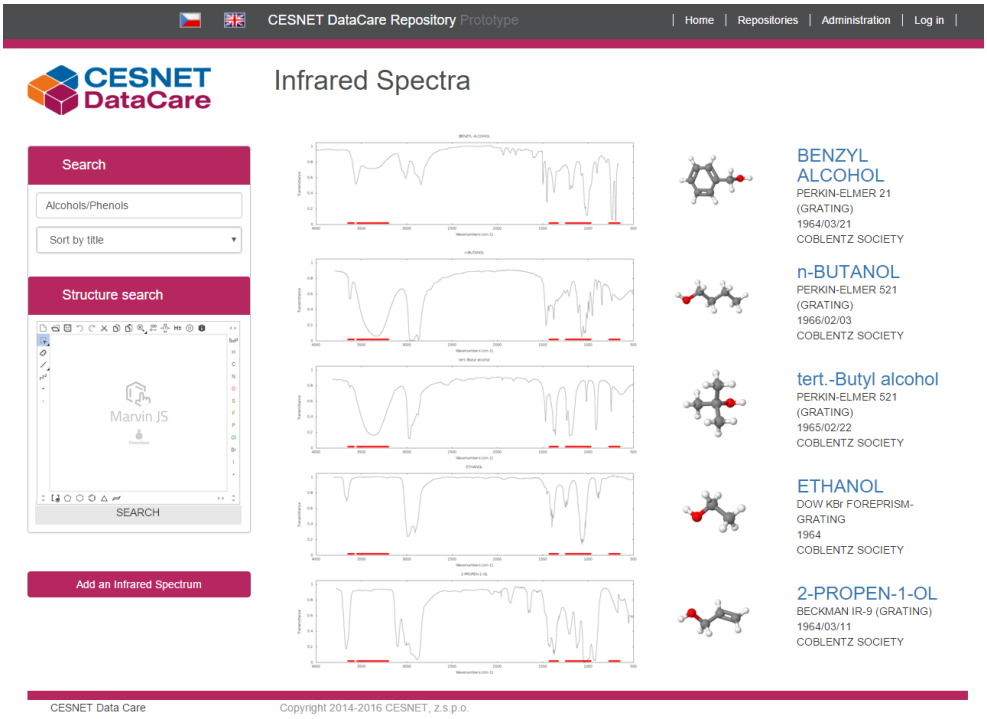
```
@staticmethod
    def get_resource_type(rdf_meta):
        for rdf_type in rdf_meta:
            retrieved_type = list(ResourceType.objects.
                filter(rdf_types__exact=rdf_type))
            if retrieved_type:
                return retrieved_type[0]
        return None
```

Metóda *get_resource_type* umožňuje získať správny RDF typ dokumentu.

```
@staticmethod
@simple_cache
def _get_template_string_internal(rdf_types, view_type):
    return FedoraTemplateCache._load_template(
        FedoraTemplateCache.get_template_object(rdf_types
        , view_type))

@staticmethod
def _load_template(template_object):
    if template_object is not None and template_object.
        get_bitstream() is not None:
            return template_object.get_bitstream().stream.
                read().decode("utf-8")
    return None
```

Metóda *_load_template* získa bitstream šablóny z dokumentu, ktorý máme z Fedory. Bitstream následne dekóduje a uloží ako reťazec, dáta do Fedory ukladáme v kódovaní utf-8. O cachovanie tejto šablóny sa stará metóda *_get_template_string_internal*.



Obr. 4.2: Výpis dát v kolekcii Infrared Spectra

Repozitár záverečných prác VŠCHT Praha pôvodne využíval šablóny uložené priamo v kóde aplikácie. Po vzniku fedoralink_ui ale aj tento repozitár začal využívať fedoralink_ui.

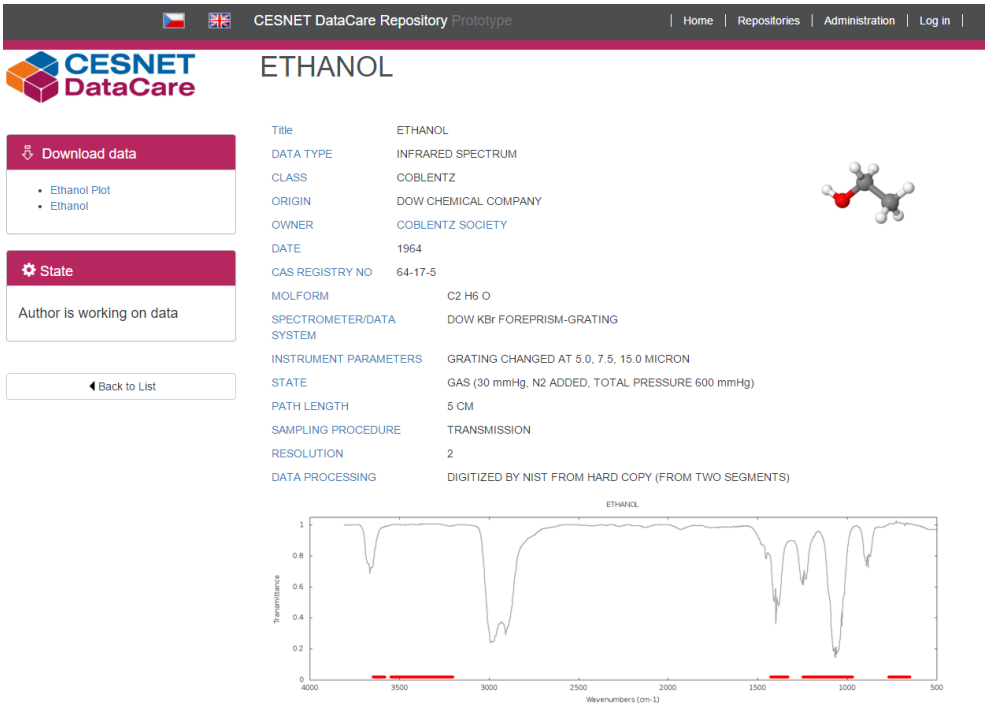
4.1.7 Návrh grafického rozhrania

Repozitár bude nasadený ako jedna zo služieb diskového úložiska CESNET, z.s.p.o. `https://du.cesnet.cz/`, preto navrhnuté grafické rozhranie vychádza z už existujúcich služieb.

Návrh zobrazenia pre dáta organickej chémie je na obrázkoch 4.2 a 4.3

4.2 Zobrazovanie chemických dát

Technológie, ktoré máme vybrané, Fedora a Elasticsearch, umožňujú ukladanie dát a vyhľadávanie v dátach. Fedora tiež poskytuje základné webové užívateľské rozhranie, ktoré umožňuje vytváranie nových dokumentov, zobrazenie a úpravu existujúcich. Toto webové rozhranie ale nie je užívateľsky prívetivé, taktiež je potrebné zobrazovať aj dáta v inej než textovej podobe (napríklad



Obr. 4.3: Zobrazenie detailu konkrétnej položky (Ethanolu)

grafy, obrázky, štruktúru chemických látok,...), je preto potrebné vytvoriť nové webové rozhranie, ktoré umožní prácu s dokumentmi v repozitári.

Webové užívateľské rozhranie by malo byť schopné zobraziť kolekcie, ktoré sú v repozitári, ich obsah (každá kolekcia môže mať podkolekcie alebo obsahovať dokumenty). Pri jednotlivých dokumentoch zobraziť ich detaily. Cez webové rozhranie tiež musí byť možné vytváranie nových kolekcií, podkolekcií a dokumentov. Vytvárať a upravovať dokumenty môže len prihlásený užívateľ, ktorý na to má pridelené oprávnenia. Modul teda musí umožniť aj prihlásenie užívateľa.

Prácu s dokumentmi zjednoduší Fedoralink, ktorý tvorí medzivrstvu medzi Fedorou, Elasticsearchom a samotným webovým rozhraním napísaným v programovacom jazyku Python s využitím frameworku Django. Prácu so šablónami zase zjednodušuje fedoralink_ui, ktorý umožňuje získavať šablóny pre jednotlivé typy dokumentov priamo z Fedora alebo z kódu aplikácie. Prečo využívam tieto technológie a ako fungujú je popísané v predchádzajúcich častiach diplomovej práce.

Pre prácu s jednotlivými dokumentmi je potrebné mať v aplikácii vytvorený model. Modely pre základné typy dokumentov sú už vytvorené vo Fedoralinku. Napríklad trieda DCObject - model pre dokumenty, ktoré ob-

sahujú len metadáta zo schémy Dublin Core a majú priradený RDF typ DC.Object (`http://purl.org/dc/elements/1.1/Object`). V aplikácii fedoralink_ui sú zase vytvorené modely potrebné pre prácu so šablónami. Napríklad trieda ResourceType, ktorá je určená pre dokumenty s RDF typom CESNET_TYPE.ResourceType. Dokumenty s týmto RDF typom obsahujú šablóny pre zobrazenie v zozname potomkov kolekcie, zobrazenie dokumentu, editáciu dokumentu, názov a cestu k modelu v aplikácii.

Jednotlivé časti repozitára sú navrhnuté tak, aby bolo pridanie nových modelov a šablón do systému čo najjednoduchšie. Aby bolo v repozitári možné pracovať s novými typmi dokumentov (napr. s dátami z Ústavu organickej chémie VŠCHT Praha) je potrebné vytvoriť modely pre tieto dokumenty a šablóny.

4.2.1 Kolekcie vo Fedore

Dokumenty vo Fedore sú uložené buď ako kolekcie alebo binárne dáta. Dokument, ktorý je typu kolekcia môže mať pod sebou uložené ďalšie dokumenty. Vzniká teda hierarchická štruktúra, ktorá začína koreňom repozitára.

Ako prvú vec pri ukladaní nových dokumentov je potrebné vyriešiť ich hierarchické usporiadanie do rôznych kolekcií. V tejto časti diplomovej práce popisujem hierarchickú štruktúru rôznych typov dát Ústavu organickej chémie VŠCHT Praha, ktoré je potrebné ukladať, v repozitári.

Hierarchickú štruktúru kolekcií je možné vidieť na obrázku 4.4

4.2.1.1 Inštitúcie

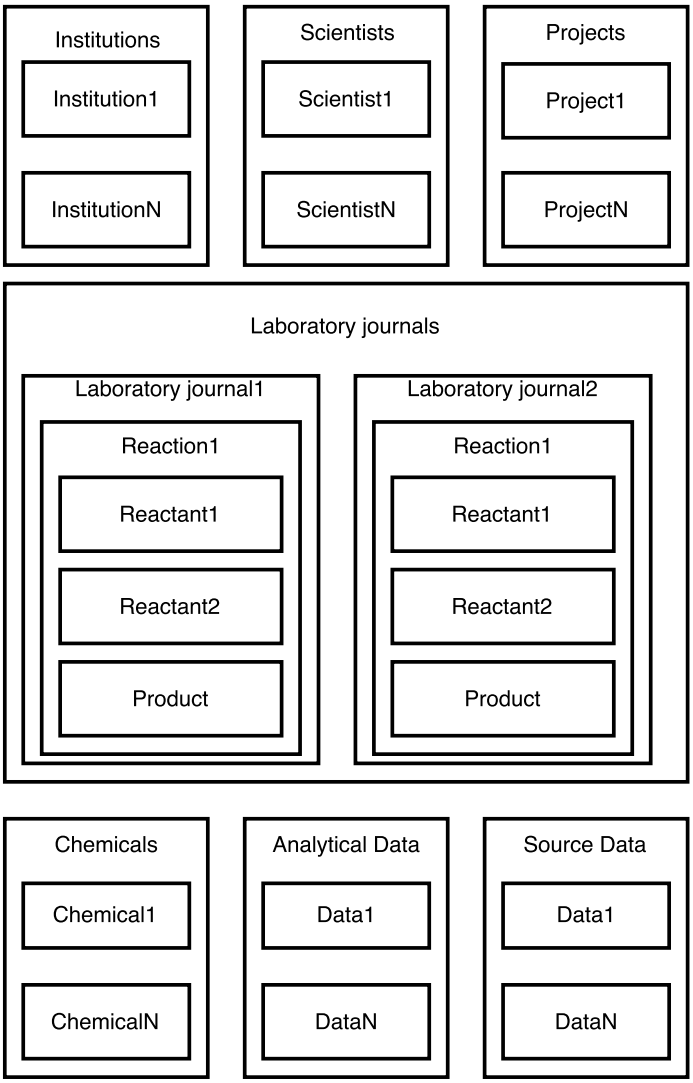
Do repozitára budú môcť dáta ukladať rôzne inštitúcie. Jednotlivé dokumenty je potrebné priradiť k inštitúcii, ktorej patria. Niektoré dáta ale môžu byť zdieľané medzi viacerými inštitúciami. Preto bude vytvorená kolekcia „Institutions“, v ktorej sú uložené jednotlivé inštitúcie. Ak pri jednej inštitúcii potrebujeme evidovať aj jej súčasti, tie môžu byť uložené ako potomci inštitúcie.

4.2.1.2 Projekty

Dáta, s ktorými Ústav organickej chémie VŠCHT Praha a iné inštitúcie pracujú, sú priradené k jednotlivým projektom. Na projekte môže spolupracovať niekoľko inštitúcii a vedcov. Preto je pre projekty vytvorená kolekcia „Projects“, pod ňou sú uložené jednotlivé projekty.

4.2.1.3 Vedci

Vedec je osoba, ktorá sa podieľa na niektorom z projektov. Môže ale pracovať na viacerých a taktiež pracovať pre viacero inštitúcii. Preto je vytvorená samostatná kolekcia „Scientists“, pod ktorou sú uložené jednotlivé osoby.



Obr. 4.4: Hierarchická štruktúra kolekcií vo Fedore

4.2.1.4 Laboratórne denníky

Laboratórne denníky Ústavu organickej chémie VŠCHT Praha, prípadne aj iných inštitúcií sú uložené pod kolekciou „Laboratory journals“.

4.2.1.5 Reakcie

Reakcie, ktoré boli pozorované v rámci niektorého laboratórneho denníka sú uložené pod daným denníkom. Detaily (ako použité množstvo, koncentrácia,...) o reaktantoch a produktoch, teda chemických látkach, ktoré boli pri reakcii použité alebo pri nej vznikli, sú uložené pod touto reakciou.

4.2.1.6 Chemické látky

Samotné dáta (názov chemikálie, jej štruktúra, vlastnosti,...) o chemikáliach, ktoré môžu byť používané v rôzných reakciách, sú uložené v kolekcii „Chemicals“.

4.2.1.7 Analytické dáta

NMR, IR, hmotnostné spektrá jednotlivých chemických látok a iné analytické dáta sú uložené v samostatnej kolekcii „Analytical data“. Všetky zdrojové binárne dáta (výstupy zo zariadení, serializované dáta z Open Enventory,...) sú uložené v kolekcii „Source data“.

4.2.2 Modely

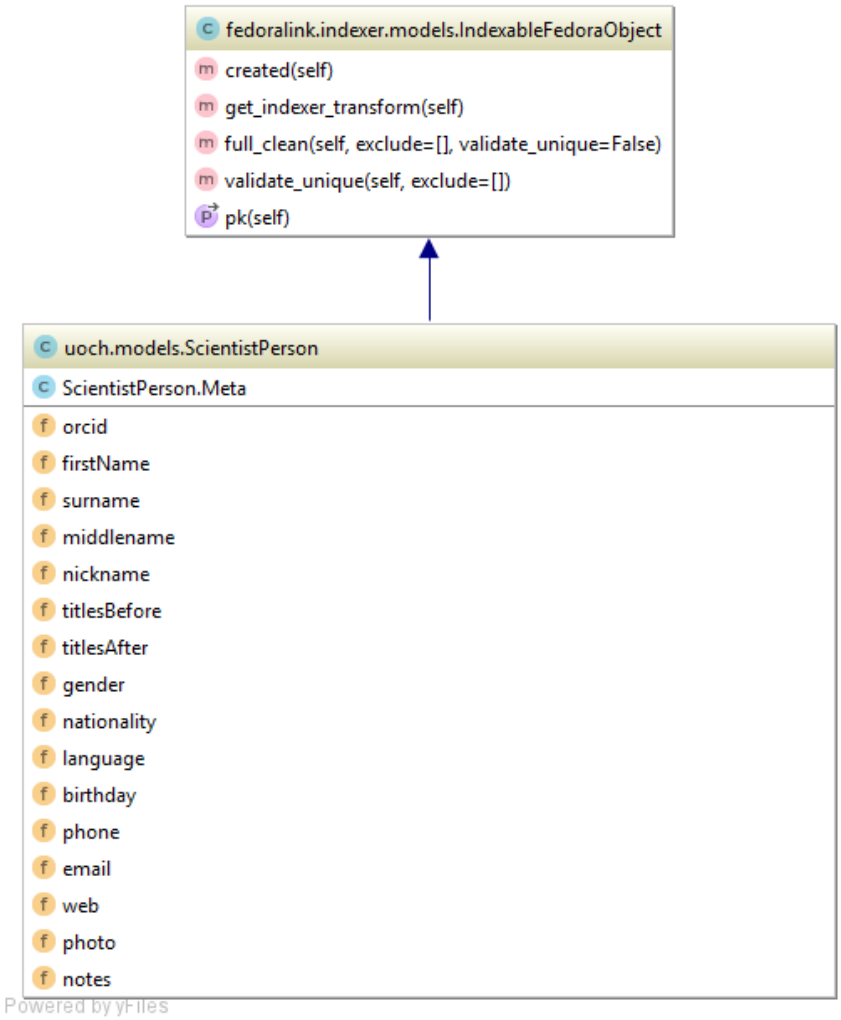
Modely, teda triedy pre jednotlivé dokumenty sú navrhnuté tak, aby boli čo najvšeobecnejšie, ale zároveň pokrývali všetky potrebné dáta, ktoré chcú výskumníci z Ústavu organickej chémie VŠCHT Praha v repozitári ukladať. Zároveň bolo pri ich návrhu myslené na potrebu importu dát z aplikácie Open Enventory.

V repozitári potrebujeme ukladať informácie o vedcoch, ktorí na jednotlivých projektoch pracujú. Preto bola vytvorená trieda ScientistPerson (diagram triedy je možné vidieť na obrázku 4.5).

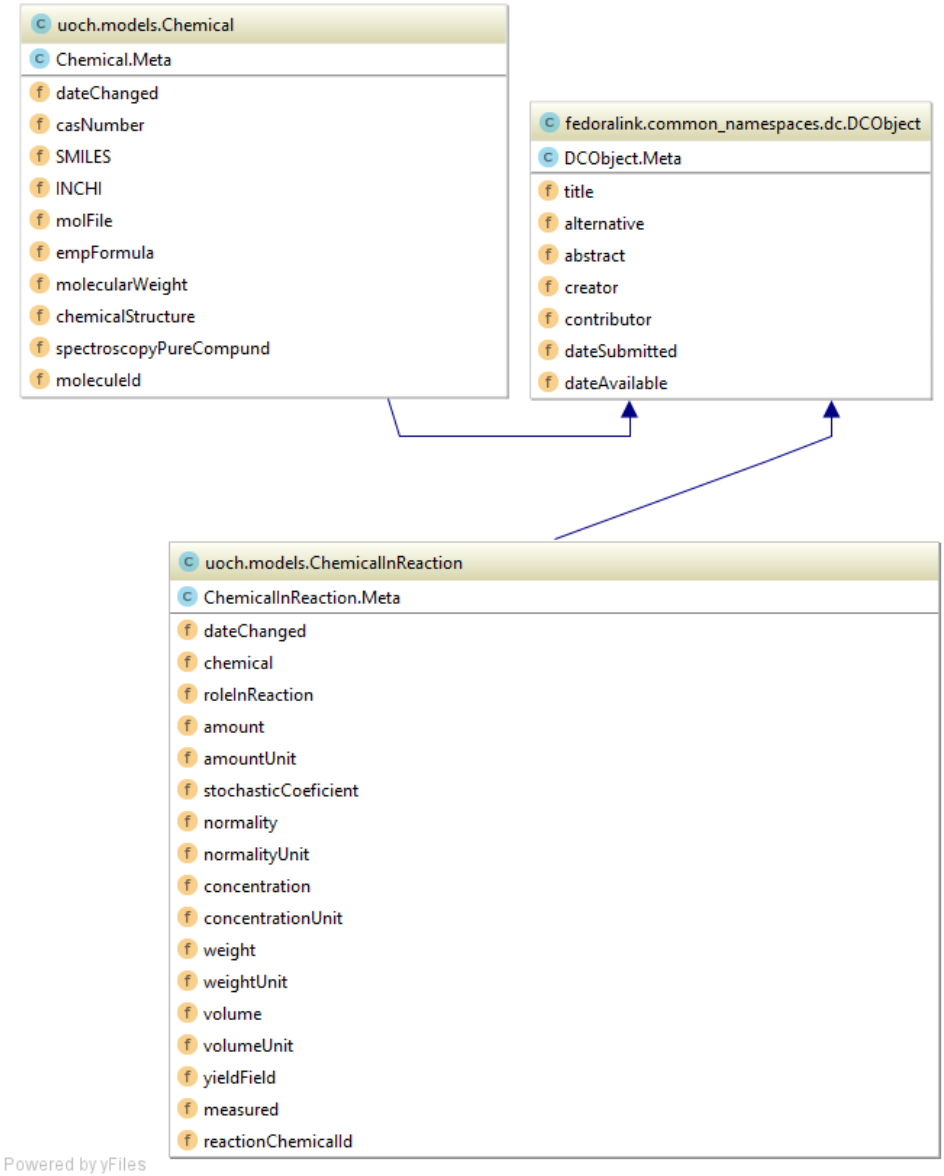
Pre projekty je vytvorená trieda Project, ktorá okrem názvu projektu má aj odkaz na členov projektu (z modelu ScientistPerson) a tiež na inštitúcie, ktoré sa na projekte podieľajú. Trieda Institution umožňuje prácu so základnými informáciami o inštitúcii.

V laboratórnych denníkoch popisované reakcie má na starosť trieda Reaction (diagram triedy je možné nájsť na obrázku 4.7). Medzi uložené údaje patrí popsi reakcie, pozorovanie, čas začiatku a trvanie reakcie. Reaktanty a produkty zapísané vo formáte SMILES (zjednodušený jednoriadkový zápis štruktúry). Samotné chemické látky v reakcii ale obsluhuje model ChemicalInReaction (diagram je možné vidieť na obrázku 4.6), kde sú uvedené hodnoty ako váha, objem koncentrácia použitej látky v reakcii, či je v reakcii reaktant alebo produkt. Samotné chemické látky má na starosť trieda Chemical (4.6)). Pri chemických látkach ukladáme hodnoty ako je štandardný názov prvku, CAS number, štruktúru chemického prvku.

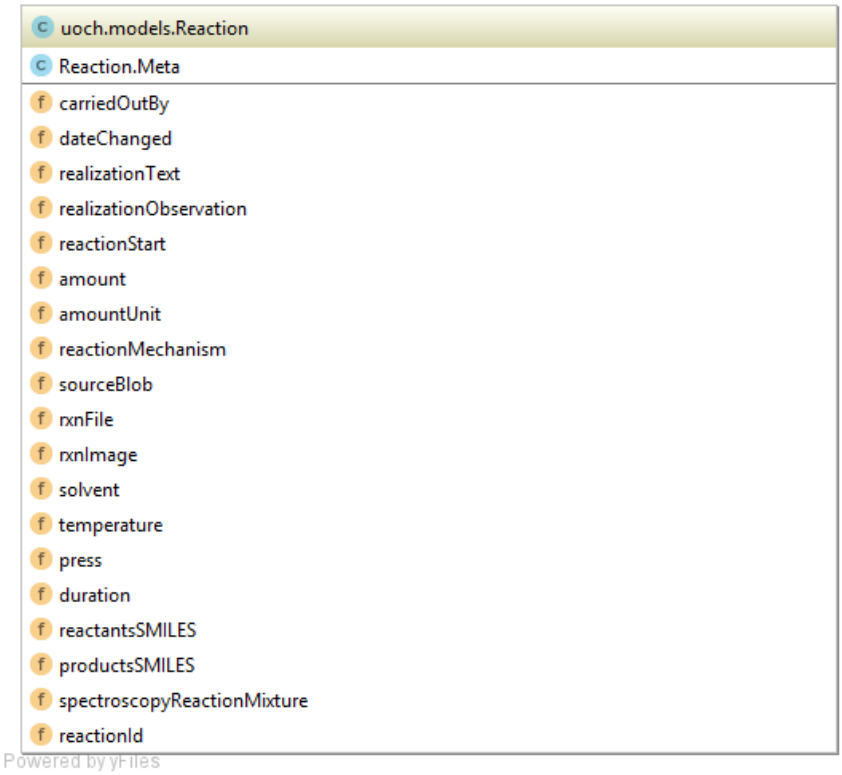
Analytické dáta k reakciám a chemickým látkam obsluhujú modely AnalyticalMethod, SpectroscopyMethod (napríklad NMR spektrá, IR spektrá, hmotnostné spektrá) a binárne dáta obsluhuje model SourceData a OpenEnventorySourceData (diagramy sú zobrazené na obrázku 4.8). Za zdrojové dáta, ktoré ma na starosť trieda SourceData, považujeme napríklad dátové súbory s výsledkami analýz. OpenEnventorySourceData obsluhuje všetky serializované dáta k reakcii, získané importom z OpenEnventory.



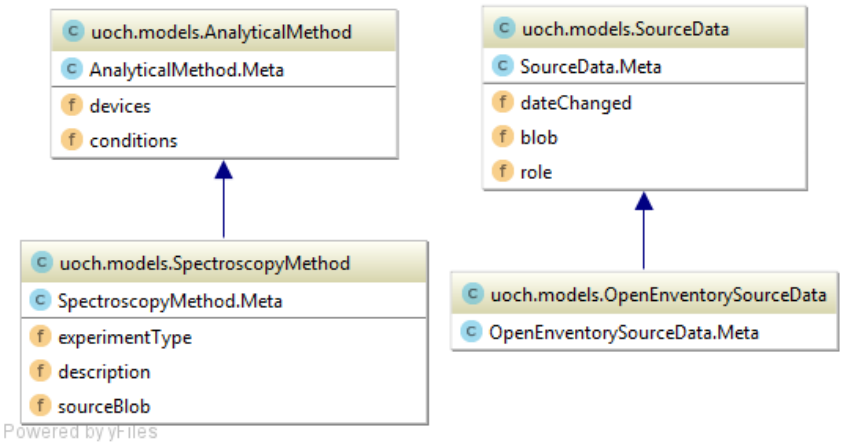
Obr. 4.5: Model osoby - vedca



Obr. 4.6: Modely chemických prvkov a chemických prvkov v reakcii



Obr. 4.7: Model reakcie



Obr. 4.8: Modely analytických dát a zdrojových dát

4.3 Automatický import dát

Aby sme čo najviac zjednodušili vkladanie nových dát do repozitára, je potrebné upraviť niektorý z nástrojov na zber a organizáciu chemických dát, ktorý používajú výskumníci z Ústavu organickej chémie VŠCHT Praha. Pre účely diplomovej práce bol po dohode s výskumníkmi ako zdroj dát pre import vybraný nástroj Open Enventory.

Výskumníci na Ústave organickej chémie VŠCHT Praha chcú mať možnosť importovať do repozitára vybrané reakcie. K importu nemá dochádzať plne automaticky, ale až po potvrdení užívateľom. Pre tento účel je najlepšie implementovať tlačidlo umiestnené priamo vo webovej aplikácii Open Enventory. Aby bolo možné aplikáciu upraviť, je potrebné vedieť ako funguje, aké sú vzťahy medzi tabuľkami v databáze a nájsť vhodné umiestnenie pre tlačidlo.

4.3.1 Schéma databázy Open Enventory

Celá schéma databázy je na priloženom CD vo formáte UML aj SVG. V tejto časti sú popísané a okomentované databázové tabuľky, v ktorých sú uložené dáta z aplikácie Open Enventory, ktoré chceme importovať do repozitára alebo ich k tomuto importu potrebujeme.

V databázovej tabuľke lab_journal, sú uložené základné údaje o laboratórnom denníku. Pre naše účely budú ďalej dôležité stĺpce person_id a primárny kľúč lab_journal_id.

V rámci laboratórnych denníkov sú vytvorené jednotlivé projekty užívateľov.

Samotné dáta meraní, popis a priebeh reakcií sú uložené v databázovej tabuľke reaction. Tá je cez stĺpec project_id prepojená s tabuľkou project a cez stĺpec lab_journal_id s tabuľkou lab_journal. Zároveň má každá reakcia jedinečné poradové číslo v denníku uložené v stĺpci nr_in_lab_journal.

Popis reakcie je uložený v stĺpci realization_text_fulltext, pozorovanie v stĺpci realization_observation_fulltext, množstvo výslednej látky v stĺpci ref_amount a jednotka, v akej je toto množstvo uvedené, v stĺpci ref_amount_unit. Ďalšie namerané hodnoty sú ako binárne hodnoty uložené v stĺpcoch rxnfile_blob, rxn_gif_file - chemická rovnica reakcie vo formáte GIF, rxn_svg_file - obrázok vo formáte SVG. RXN je formát pre popis reakcie, ktorý pozostáva z bloku reaktantov, produktov a prípadne (nie veľmi zvyčajne) aj bloku agentov.

Ďalšie dáta ako doba trvania reakcie, použité rozpúšťadlo a jeho koncentrácia alebo teplota, pri ktorej reakcia prebiehala, sú uložené v tabuľke reaction_property. V stĺpci reaction_property_name je uložený názov vlastnosti (napríklad „solvent“ teda rozpúšťadlo, „temperature“ teda teplota, ...) a v stĺpci reaction_property_value je uložená samotná hodnota.

V tabuľke analytical_data sú uložené rôzne analýzy reakcie a chemických prvkov. Analytické dáta môžu byť H NMR spektrá, C NMR spektrá, teda spektroskopia nukleárnej magnetickej rezonancie s využitím vodíka alebo

uhlíka; infračervené spektrá, hmotnostné spektrá. Do Open Enventory mohli byť tieto analýzy uložené v binárnom formáte (väčšinou ako dokument vo formáte PDF alebo obrázok vo formáte TIF, RAW), v databázovej tabuľke sa okrem binárnych hodnôt nachádzajú grafy (obrázky) k jednotlivým analytickým dátam. Tieto grafy/obrázky sú uložené v stĺpci analytical_data_graphics_blob, textová interpretácia dát (ak je možná) v stĺpci analytical_data_interpretation, komentár k dátam v stĺpci analytical_data_comment. Pôvodné dáta su uložené v stĺpci analytical_data_raw_blob, kde sú súbory uložené do archívu TAR a komprimované metódou gzip. Prepojenie na tabuľku reaction_chemical je cez stĺpec reaction_chemical_id.

V tabuľke reaction_chemical (schéma je na obrázku 4.9) sú uložené informácie o reaktantoch a produktoch. Môže tu byť uvedený štandardný názov prvku v stĺpci standard_name, tzv. SMILES teda zjednodušený jednoriadkový zápis štruktúry (uložené v stĺpci smiles). Binárne hodnoty popisujúce prvok v stĺpcoch molfile_blob (MDL Molfile je súborový formát, ktorý umožňuje ukladať informácie o atómoch, spojeniach, prepojeniach a polohe molekúl), molecule_serialized, gif_file - obsahuje obrázok štruktúry prvku vo formáte GIF, svg_file - štruktúra prvku na obrázku vo formáte SVG.

Chemický vzorec prvku je uložený v stĺpci emp_formula, molekulárna hmotnosť v stĺpci mw, poradie reaktantov a produktov je v stĺpci nr_in_reaction. Či ide o reaktant alebo produkt, sa dozvieme zo stĺpca role. Stochastický koeficient v stĺpci stoch_coeff, hmotnosť v stĺpci m_brutto, jednotka, v akej je hmotnosť uvedená, je v stĺpci mass_unit, objem v stĺpci volume a jednotka objemu v stĺpci volume_unit. Koncentrácia v stĺpci rc_amount a jednotka, v akej je koncentrácia uvedená, je v stĺpci rc_amount_unit. V prípade produktov je v stĺpci yield uložené reálne získané množstvo v % a z rc_amount sa dá zistiť teoreticky získateľná koncentrácia.

4.3.2 Implementácia automatického importu

Štruktúru databázových tabuliek a prepojenia medzi nimi už poznáme, ďalej sa bolo potrebné rozhodnúť na spôsobe implementácie automatického importu dát z Open Enventory do repozitára.

Do úvahy prichádzajú dve možnosti:

1. Implementácia v programovacom jazyku PHP, ktorá by bola priamo súčasťou Open Enventory. Autor Open Enventory ale na získavanie dát využíva volania z javascriptu, kde jednotlivé hodnoty získava postupne. Nemá tu teda v PHP pripravené objekty ani funkcie, ktoré by získanie laboratórnych denníkov uľahčili. Kód aplikácie je naviac neprehľadný s komentármi a aj časťou kódu v nemeckom jazyku.

2. Implementácia samostatného skriptu s napojením priamo na databázu, ktorý by sa staral o automatický import dát do repozitára. V samotnom Open Enventory je v tomto prípade potrebné umiestniť tlačidlo, ktoré

Obr. 4.9: Štruktúra databázovej tabuľky reaction_chemical

spustí tento skript a odovzdá mu parametre potrebné pre import (teda id reakcie alebo laboratórneho denníka, ktorý chce užívateľ importovať do repozitára).

Rozhodol som sa pre druhú možnosť, pričom využívam programovací jazyk Python a framework Django. Django, po nastavení pripojenia k databáze, umožňuje automatické vytvorenie modelov pre tabuľky v databáze. Vzhľadom na nezadefinované cudzie kľúče a ďalšie zistené chyby, bolo pre ľahšiu prácu s modelmi potrebné upraviť vygenerované triedy.

4.4 Kontrola stavov a prístupové práva

Fedora umožňuje nastaviť práva pre jednotlivé dokumenty pomocou ACL. Takýmto spôsobom vieme nastaviť, kto môže daný dokument zobraziť, kto ho môže upraviť... Keďže má byť repozitár pre užívateľov čo najjednoduchší, nie je takéto nastavovanie prístupových práv ideálne. Tieto práva by bolo potrebné nastavovať a hlavne meniť pre každý dokument individuálne. Tak by mohlo dochádzať k častým chybám s nesprávne nastavenými oprávneniami. Preto som vytvoril nástroje, ktoré umožňujú kontrolu prístupových práv cez stavy. Tieto určujú, v akom stave alebo stavoch sa konkrétny dokument nachádza.

Napríklad môže ísť o schvaľovací proces. Vložené dáta nesmú byť zverejnené hneď. Je potrebné, aby prešli procesom schvaľovania cez viacero ľudí. Prístup k tomuto dokumentu má na začiatku osoba, ktorá dokument vytvorila, tá môže požiadať o jeho zverejnenie. Zmení sa stav a nové nastavenie prístupových práv umožní, aby dáta videli aj osoby, ktoré majú právo schváliť zverejnenie. Po schválení všetkými potrebnými osobami dôjde opäť ku zmene stavu a prístupu k týmto dátam. Keď sa dokument nachádza v stave „zverejnený“, môžu si ho prezerať všetci. Právo na editáciu ale ostane len pôvodnému autorovi prípadne editorovi. Po úprave bude ale opäť potrebné požiadať o schválenie.

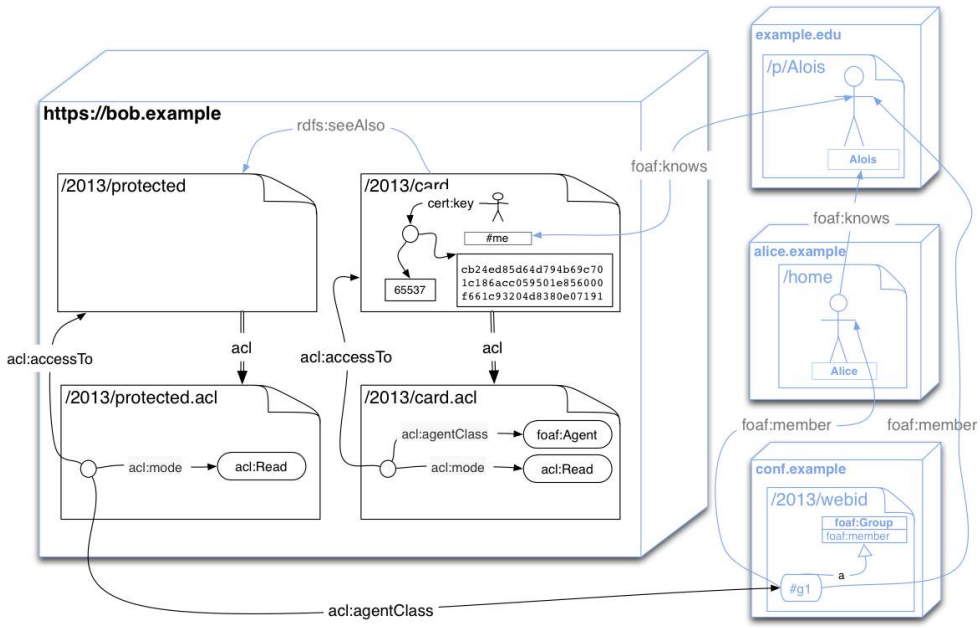
Možnosti Fedory, nutné úpravy a detailnejšie informácie o stavoch sú popísané nižšie.

4.4.1 Prístupové práva vo Fedore

Fedora 4 obsahuje modul WebAC Authorization Delegate, ktorý je implementáciou W3C návrhu decentralizovaného autorizačného mechanizmu na základe RDF. Tento mechanizmus sa nazýva WebAccessControl `https://www.w3.org/wiki/WebAccessControl`.

4.4.1.1 WebAccessControl

Je decentralizovaný systém umožňujúci rôznym užívateľom a skupinám rozdielne prístupy k dokumentom na základe identifikácie užívateľov a skupín cez HTTP URI.



Obr. 4.10: Diagram prístupových práv, prepojenia dokumentov a ACL dokumentov, zdroj: [14]

Takýmto spôsobom je možné nastaviť prístup k dokumentu uloženom na jednom mieste užívateľom a skupinám hostovaným na inom mieste. Užívateľ tak nemusí mať vytvorený profil na mieste, kde je dokument uložený.

Každý dopyt na webový zdroj vráti HTTP dokument obsahujúci hlavičku s odkazom na ACL dokument, ktorý popisuje prístupové práva pre daný dokument (prípadne pre iné dokumenty). [14]

Nastavenie prístupových práv, prepojenie dokumentov a ACL dokumentov je možné vidieť na diagrame znázornenom na obrázku 4.10. Podľa diagramu je umožnený prístup na čítanie všetkým, kto pristupujú k dokumentu /2013/card, ale k dokumentu /2013/protected majú prístup len užívatelia, ktorí patria do skupiny conf.example (teda účastníci konferencie).

ACL je zoznam oprávnení priradených k nejakému dokumentu. Pomocou ACL môžeme určiť, ktoré osoby (parameter *agent*) alebo skupiny (parameter *agentClass*) majú mať prístup k danému dokumentu. Tento dokument, prípadne dokumenty sú určené parametrom *accessTo* alebo *accessToClass*. Ako trieda pre všetkých užívateľov sa štandardne používa foaf:Agent a znamená, že dokument je verejne dostupný. Typ prístupu je určený parametrom *mode*. Typy prístupu sú popísané v tabuľke 4.1.

Tabuľka 4.1: Typy prístupu v ACL

Read	Oprávnenie na čítanie obsahu
Write	Oprávnenie na prepísanie obsahu
Append	Oprávnenie na pridanie informácie (na koniec už existujúcej, nedáva právo na zmazanie)
Control	Oprávnenie na nastavenie prístupu na seba (prístup k danému ACL)

Príklad nastavenia prístupu (vo formáte turtle[1]):

```
@prefix acl: <http://www.w3.org/ns/auth/acl#> .

<> a acl:Authorization;
    acl:accessTo <$FCREPOREL/administration/states>;
    acl:agentClass <$FCREPOREL/groups/groupAll>;
    acl:mode acl:Read.
```

Toto ACL umožní prístup na čítanie k dokumentu s URI /administration/states v repozitári pre všetkých členov skupiny groupAll (zoznam členov tejto skupiny máme uložený na adrese /groups/groupAll). $FCREPOREL je relatívna cesta ku koreňu repozitára.

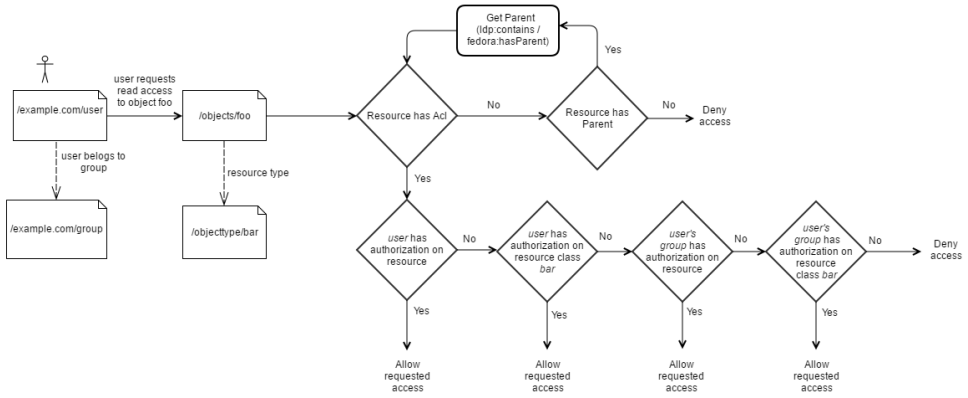
4.4.1.2 Proces získania oprávnení pre dokument vo Fedore

Proces získania oprávnení je znázornený na diagrame 4.11. Užívateľ, ktorý môže patriť do nejakej skupiny, požiada o prístup k dokumentu uloženému vo Fedore. Dokument môže mať priradený typ. Fedora zistí, či k danému dokumentu existuje ACL (dokument má nastavený parameter acl:AccessControl). Ak nie, prejde všetkých rodičov až po koreň. Pokiaľ ACL nenájde, prístup k danému dokumentu zakáže. V opačnom prípade zistí, či má užívateľ prístup na daný dokument, na daný typ dokumentov alebo či má oprávnenie užívateľova skupina. Ak nenájde žiadne oprávnenie, prístup zakáže, inak vráti dopytovaný dokument.

4.4.2 Stavy

Aby bola práca užívateľov s repozitárom čo najviac zjednodušená, každý dokument v repozitári môže mať definovaný stav. Ten následne určuje oprávnenia pre prístup k danému dokumentu.

[1] Turtle je definicia textovej syntaxe, ktorá umožňuje zápis celého RDF grafu v textovej podobe. [9]



Obr. 4.11: Proces získania oprávnení vo Fedore, zdroj: [15]

4.4.2.1 Stav uloženého dokumentu v repozitári

Stav je k dokumentu priradený pomocou parametru state:State. V jednom okamžiku môže mať dokument priradených aj viacero stavov (parameter state:State je v takom prípade použitý viackrát).

Takýto stav môže napríklad vyjadrovať stav schvaľovania publikovania dát. Nový dokument, ktorý chce autor zverejniť, je potrebné schváliť vedúcim pracovníkom. Dokument sa nachádza v stave, kedy čaká na zverejnenie. Prístup k nemu v danej chvíli má jeho autor a osoba, ktorá má zverejnenie potvrdiť.

Stavy, v ktorých sa môže nejaký dokument nachádzať, sú uložené v kolekcii stavov. Tá je k danému dokumentu priradená parametrom state:stateControl.

Príklad dokumentu s priradenými stavmi:

```
@prefix acl: <http://www.w3.org/ns/auth/acl#>.
@prefix state: <http://cesnet.cz/ns/repository/state#>.
@prefix dc: <http://purl.org/dc/elements/1.1/>.

<> acl:accessControl </fcrepo/rest/acl>;
   state:stateControl </fcrepo/rest/states>;
   state:State </fcrepo/rest/states/wg1_approving>,
               </fcrepo/rest/states/wg2_approving>;
   dc:title "Hello, World!".
```

4.4.2.2 Stav

Stav je dokument typu state:State, ktorý je uložený v kolekcii stavov v repozitári. Pre stav sú definované prístupové práva (ACL). Aby bolo možné zmeniť

stav, v akom sa nejaký dokument nachádza, je potrebné taktiež definovať povolené zmeny stavov.

- state:defaultAccessControl definuje ACL pre dokumenty s týmto stavom.
- state:allowedStateTransitions definuje povolené zmeny stavov. Ako hodnota tohto parametra je dokument typu state:Transition.

4.4.2.3 Prechod medzi stavmi

Dokument typu state:Transition definuje prechod medzi dvoma stavmi a práva, kto môže danú zmenu realizovať.

State:targetState určuje cieľový stav prechodu. ACL priradené na dokument typu state:Transition určuje, kto môže zmenu realizovať.

4.4.3 Stavy vo Fedore

Vo Fedore žiadne stavy ani nástroje na kontrolu stavov a prechodov medzi nimi neexistujú. Aplikáciu je teda potrebné upraviť tak, aby takúto kontrolu umožňovala.

Pri každom dopyte do Fedory potrebujeme skontrolovať, či dochádza k zmene stavu dokumentu. V prípade, ak áno, je potrebné skontrolovať oprávnenia a zmenu povoliť alebo zamietnuť. K ukladaniu upravených dokumentov dochádza vo funkcii patchResourcewithSparql v triede ContentExposingResource. K volaniu tejto funkcie ale dochádza z objektu, ktorý je typu FedoraLdp. Trieda FedoraLdp dedí z triedy ContentExposingResource. Obe sa nachádzajú v module fcrepo-http-api.

Fedora sa stále rýchlo vyvíja. Aktuálne vývojári pracujú aj na API-X, ktoré umožní rozširovanie kódu Fedory. Momentálny stav vývoja API-X však neumožňuje jeho využitie pre úpravu potrebného kódu. Upravovať priamo kód modulu fcrepo-http-api by spôsobilo komplikácie pri aktualizácii Fedory, ale taktiež pri šírení takto upravenej verzie. Vytvoril by som v podstate novú vetvu vývoja Fedory, pričom by bolo pri vydaní novej verzie Fedory robiť zlúčenie medzi vetvami. Čo by mohlo byť vzhľadom na možné zmeny kódu aj v časti, ktorú potrebujem upraviť, komplikované.

Menej často sa menia rozhrania metód a ich parametre, to je možné využiť, ak existuje nástroj, ktorý umožňí rozšírenie existujúceho kódu mimo kódu Fedory. Riešením je vytvorenie Java aplikácie využívajúcej rozšírenie AspectJ. Pri správnom nastavení Mavenu vytvorí nový modul fcrepo-http-api obsahujúci upravený kód. V skompilovanej Fedore následne stačí vymeniť súbor fcrepo-http-api.jar za novovytvorený fcrepo-http-api-with-states.jar.

4.4.3.1 AspectJ

V programovaní sa často využíva proces oddelenia zodpovedností (v angličtine Separation of concerns - SoC), ide o snahu rozdeliť program do samostatných

častí, z ktorých každá má inú funkciu. Funkcie a kódy jednotlivých častí by sa mali čo najmenej prekrývať. O takéto oddelenie zodpovedností sa snaží aj aspektovo orientované programovanie (AOP).

Vysvetlenie používaných termínov:

- Extension methods - umožňujú pridať metódy, premenné a rozhrania do existujúcej triedy v rámci aspektu.
- Pointcut - umožňuje definovať tzv. join points, teda presne definované miesta v bežiacom programe (ako sú volania metód, inicializácia objektov alebo prístup k premenným).
- Advices - kód, ktorý sa spustí po splnení podmienky špecifikovanej v pointcute. Tento kód môže byť spustený pred, po alebo okolo definovaného miesta v bežiacom programe.
- Weaving - proces vkladania aspektov do aplikácie.
- Aspekt - je kombináciou advice a pointcutu, umožňuje teda spustiť kód na presnom mieste v bežiacej aplikácii.

Vďaka aspektom môžeme upraviť chovanie programu na presne definovanom mieste. Takéto aspekty sa často využívajú k logovaniu, umožňujú spúšťať jeden kód na viacerých miestach programu, pričom nie je potrebné meniť samotný kód programu. V prípade potrebných zmien stačí kód pre logovanie upraviť na jednom mieste. [16]

Ak máme v existujúcom programe nejakú funkciu, pri ktorej zavolaní chceme logovať informáciu o tom, ktorý užívateľ funkciu zavolal, môžeme využiť aspekty. Vytvoríme samostatnú aplikáciu - kód, ktorý počas behu pôvodnej aplikácie, pri zavolaní funkcie, najprv uloží do logu informáciu o tom, kto danú funkciu zavolal a až potom umožní beh kódu tejto funkcie v pôvodnom programe. Ak máme takýchto funkcií, pri ktorých volaní chceme logovať informáciu o užívateľoch, viac, stačí nám tento jeden nezávislý kus kódu. To, pri volaní ktorých funkcií sa má spustiť, stačí nakonfigurovať opäť mimo pôvodnej aplikácie.

V mojom prípade bude vďaka aspektom možné upraviť kód pre ukladanie upravených objektov do Fedory tak, aby kontroloval zmenu stavov a oprávnenia pre ich zmenu.

AspectJ `http://www.eclipse.org/aspectj/` je rozšírenie využívajúce aspektovo orientované programovanie pre jazyk Java. Toto rozšírenie umožňuje využívať aspekty.

Konfigurácia AspectJ je uložená v súbore aop.xml

```
<!DOCTYPE aspectj PUBLIC "-//AspectJ//DTD//EN" "http://
    www.eclipse.org/aspectj/dtd/aspectj.dtd">
```

```
<aspectj>

    <weaver options="-verbose -showWeaveInfo">
        <include within="org.fcrepo.http.api.FedoraLdp"/
            >
        <include within="org.fcrepo.http.api.
            ContentExposingResource"/>
        <include within="org.fcrepo.http.api.
            FedoraBaseResource"/>
    </weaver>

    <aspects>
        <aspect name="cz.cesnet.fcrepo.interceptor.
            PatchWrapAspect"/>
    </aspects>

</aspectj>
```

V časti weaver je nastavený spôsob weavingu. Potrebujeme mať prístup k triedam FedoraLdp, ContentExposingResource a FedoraBaseResource, ktoré od seba dedia.

Kód aspektu, ktorý sa spustí pri každom volaní metódy patchResourcewithSparql:

```
@SuppressWarnings("PackageAccessibility")
public privileged aspect PatchWrapAspect {
    @Inject
    protected Session session;

    public pointcut wrapPatch(FedoraResource resource,
        String requestBody, RdfStream resourceTriples) :
    execution(* patchResourcewithSparql(FedoraResource,
        java.lang.String, RdfStream)) && this(org.fcrepo.
        http.api.FedoraLdp) && args(resource, requestBody
        , resourceTriples);

    Object around(FedoraResource resource, String
        requestBody, RdfStream resourceTriples) :
        wrapPatch(resource, requestBody, resourceTriples)
         {
         try {
             ContentExposingResource currentResource = (
                 ContentExposingResource) thisJoinPoint.
                 getThis();
```

```
            HttpSession session = currentResource.
                session;
            ContainerRequestContext request = (
                ContainerRequestContext) currentResource.
                request;
            IdentifierConverter<Resource, FedoraResource
                > translator = currentResource.translator
                ();

            final UpdateRequest update_request =
                UpdateFactory.create(requestBody,
                        translator.reverse().convert(
                            resource).toString());

            StateAuthorizationDelegate sad = new
                StateAuthorizationDelegate(this.session,
                translator,
                        session.getFedoraSession().getUserId
                            ());

            requestBody+= sad.checkState(resource,
                update_request);

            return proceed(resource, requestBody,
                resourceTriples);
        }
        catch (RuntimeException e){
            e.printStackTrace();
            System.out.println(e.getMessage());
            throw e;
        }
    }
}
```

4.4.4 Kontrola stavov

S využitím aspektu po nahradení pôvodného kódu potrebujeme zistiť, či sa niekto pokúša zmeniť StateControl upravovaného dokumentu. V prípade ak to robí užívateľ, ktorý nemá oprávnenie na zmenu, aplikácia vráti chybový HTTP kód. Ak StateControl nie je k dokumentu priradený, ale užívateľ sa pokúša priradiť k dokumentu stavy, aplikácia taktiež vráti chybový HTTP kód.

Ak je StateControl upraveného dokumentu a pôvodného rovnaký, porov-

náme stavy. Ak došlo k zmene v stavoch, je potrebné získať všetky povolené prechody z pôvodných stavov. Keďže operáciu, pri ktorej získavame dokumenty typu StateTransition, robí aplikácia pod užívateľom, ktorý poslal dopyt, získa len prechody, ktoré má daný užívateľ povolené.

Po získaní možných cieľových stavov z týchto prechodov aplikácia zistí, či sa medzi nimi nachádza každý nový cieľový stav. Ak niektorý z nových stavov nie je medzi povolenými cieľovými stavmi pre daného užívateľa, aplikácia vráti chybový kód.

Ak sú povolené všetky nové stavy, aplikácia upraví pôvodný dopyt tak, aby sa všetky pôvodné stavy zmazali.

Záver

Literatúra

[1] Strnad, M.: Svěřte svá data vhodnému médiu – díl 1. *V: LinuxEXPRES [online]*, november 2013, [cit. 2016-11-07]. Dostupné z: `https://www.linuxexpres.cz/praxe/sverte-sva-data-vhodnemu-mediu-dil-1`

[2] Český normalizační institut: *ČSN ISO 8459-5 (01 0175) Informace a dokumentace - sborník bibliografických datových prvků. Část 5, Datové prvky pro výměnu katalogizačních dat a metadata*. 2004.

[3] Zhang, A.; Gourley, D.: *Creating Digital Collections: A Practical Guide*. Chandos Information Professional Series, Elsevier Science, 2014, ISBN 9781780631387. Dostupné z: `https://books.google.cz/books?id=qlmpAgAAQBAJ`

[4] Witten, I.; Bainbridge, D.; Nichols, D.: *How to Build a Digital Library*. Morgan Kaufmann series in multimedia information and systems, Elsevier Science, 2009, ISBN 9780080890395. Dostupné z: `https://books.google.cz/books?id=HiJNbEy5f70C`

[5] CESNET, z.s.p.o.: *Oddělení datových úložišť CESNET*. 2016, [cit. 2017-04-22]. Dostupné z: `https://du.cesnet.cz/cs/start`

[6] CESNET, z.s.p.o.: *Jak začít využívat služby datových úložišť*. 2016, [cit. 2017-04-22]. Dostupné z: `https://du.cesnet.cz/cs/navody/jsme_tady_poprve`

[7] Duraspace: *Fedora Features*. [cit. 2017-04-27]. Dostupné z: `http://fedorarepository.org/features`

[8] Borbinha, J. L.; Kapidakis, S.; Papatheodorou, C.; aj.: *Research and Advanced Technology for Digital Libraries: 13th European Conference. ECDL 2009, Corfu, Greece, September 27 - October 2, 2009, Proceedings*. Springer Science & Business Media, 2009, ISBN 978-3-642-04345-1.

[9] Beckett, D.; Berners-Lee, T.; Prud'hommeaux, E.; aj.: *RDF 1.1 Turtle*. W3C, 2014, [cit. 2017-04-27]. Dostupné z: https://www.w3.org/TR/turtle/

[10] DB-Engines: *DB-Engines Ranking of Search Engines*. 2017, [cit. 2017-04-23]. Dostupné z: https://db-engines.com/en/ranking/search+engine

[11] Python Software Foundation: *The Python Tutorial*. 2017, [cit. 2017-04-28]. Dostupné z: https://docs.python.org/3/tutorial/index.html

[12] Django Software Foundation: *FAQ: General*. 2017, [cit. 2017-04-28]. Dostupné z: https://docs.djangoproject.com/en/1.11/faq/general/

[13] Django Software Foundation: *Class-based views*. 2017, [cit. 2017-05-02]. Dostupné z: https://docs.djangoproject.com/en/1.11/topics/class-based-views/

[14] W3C: *WebAccessControl - W3C Wiki*. 2016, [cit. 2017-04-17]. Dostupné z: https://www.w3.org/wiki/WebAccessControl

[15] Eichman, P.; Coburn, A.: *Determining the Effective Authorization Using WebAC*. Fedora Commons, 2016, [cit. 2017-04-17]. Dostupné z: https://wiki.duraspace.org/display/FEDORA4x/Determining+the+Effective+Authorization+Using+WebAC

[16] Churý, L.: Aspektově orientované programování v Javě. *V: programujte.com [online]*, december 2006, [cit. 2017-04-17]. Dostupné z: http://programujte.com/clanek/2006120416-aspektove-orientovane-programovani-v-jave/

Dodatok **A**

Zoznam použitých skratiek

VŠCHT Vysoká škola chemicko-technologická

CIS Centrum informačných služieb

ELN Electronic lab notebook

GUI Graphical user interface

XML Extensible markup language

RDF Resource Description Framework

ACL Access control list

UML Unified Modeling Language

SVG Scalable Vector Graphics

GIF Graphics Interchange Format

SMILES simplified molecular-input line-entry system

HTTP Hypertext Transfer Protocol

URI Uniform Resource Identifier

URL Uniform Resource Location

AOP Aspect-oriented programming

TAR Tape archiver

GZIP GNU zip

Dodatok **B**

Obsah priloženého CD

- `readme.txt` ..... stručný popis obsahu CD
- `exe` ..... adresár so spustiteľnou formou implementácie
- `src`
  - `impl` ..... zdrojové kódy implementácie
  - `thesis` ..... zdrojová forma práce vo formáte LaTeX
- `text` ..... text práce
  - `thesis.pdf` ..... text práce vo formáte PDF
  - `thesis.ps` ..... text práce vo formáte PS