

Bausteine Forschungsdatenmanagement
Empfehlungen und Erfahrungsberichte für die Praxis von
Forschungsdatenmanagerinnen und -managern

Das INF-Projekt im SFB 985

Funktionelle Mikrogele und Mikrogelsysteme

Florian Clausⁱ Sebastian Kirchmeyerⁱⁱ
Matthias S. Müllerⁱⁱⁱ Walter Richtering^{iv}

2019

Zitiervorschlag

Florian Claus, Sebastian Kirchmeyer, Matthias S. Müller, Walter Richtering. 2019. Das INF-Projekt im SFB 985. Funktionelle Mikrogele und Mikrogelsysteme. *Bausteine Forschungsdatenmanagement. Empfehlungen und Erfahrungsberichte für die Praxis von Forschungsdatenmanagerinnen und -managern* Nr. 2/2019: S. 104-111. DOI: [10.17192/bfdm.2019.2.8097](https://doi.org/10.17192/bfdm.2019.2.8097).

Dieser Beitrag steht unter einer
[Creative Commons Namensnennung 4.0 International Lizenz \(CC BY 4.0\)](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

ⁱRWTH Aachen. ORCID: [0000-0003-4480-8952](https://orcid.org/0000-0003-4480-8952)

ⁱⁱRWTH Aachen. ORCID: [0000-0001-9104-8904](https://orcid.org/0000-0001-9104-8904)

ⁱⁱⁱRWTH Aachen. ORCID: [0000-0003-2545-5258](https://orcid.org/0000-0003-2545-5258)

^{iv}RWTH Aachen. ORCID: [0000-0003-4592-8171](https://orcid.org/0000-0003-4592-8171)

1 Abstract

Das INF-Projekt unterstützt das Datenmanagement und die Kollaboration im SFB 985 über bisher zwei Förderperioden. Dabei konnte die technische Infrastruktur stark weiterentwickelt und an die Bedürfnisse der Forschenden angepasst werden. Der Fokus lag dabei auf der Unterstützung der Zusammenarbeit durch eine zentrale Web-Plattform, dem Management von physischen Proben und der Speicherung und Archivierung der erhobenen Daten. Ebenso konnten die Prozesse rund um den Umgang mit Forschungsdaten verbessert werden. Die Einführung eines Data Steward als kommunikativem Bindeglied zwischen INF-Projekt und den inhaltlich Forschenden hat sich als wichtige Ergänzung in der zweiten Förderphase erwiesen.

2 Der SFB

Im SFB 985¹ kooperieren Forschende aus Chemie, Physik, Ingenieurwissenschaften und Medizin der RWTH Aachen, der Uniklinik Aachen, des Forschungszentrums Jülich und des Leibniz-Instituts für Interaktive Materialien (DWI) bei der Erforschung von Grundlagen und Anwendungsmöglichkeiten von funktionellen Mikrogelen und Mikrogelsystemen. Funktionelle Mikrogele zeichnen sich dadurch aus, dass sie durch Änderung von Temperatur, Druck, pH-Wert etc. gezielt dazu gebracht werden können, anzuschwellen oder zu kollabieren. Gegenstand des umfassenden Ansatzes im SFB sind sowohl das Verständnis des einzelnen Partikels als auch der technische Produktionsprozess von Mikrogelen. Dieser Ansatz erlaubt die Entwicklung von realistischen neuen Anwendungen von Mikrogelen und ist bereits auf der Projektebene institutionalisiert, indem jedes Projekt von mindestens zwei Principle Investigators (PI) mit komplementärer Expertise geleitet wird.

3 Das INF-Projekt

Seit Beginn des SFB wurden das Datenmanagement und die Zusammenarbeit von einem INF-Projekt unterstützt, das sich im Laufe der Zeit jedoch stark entwickelt hat.

3.1 Erste Förderperiode (2/2012 - 1/2016)

Die Einrichtung des INF-Projektes in der ersten Förderphase war von zwei Herausforderungen motiviert: Die Organisation der Zusammenarbeit in einem interdisziplinären SFB, dessen Mitglieder über verschiedene Standorte in Aachen und Jülich verteilt sind,

¹<http://www.microgels.de>, zuletzt geprüft am 10.07.2019.

und der Umgang mit physischen Proben, die zwischen den verschiedenen Standorten ausgetauscht werden.

Die Zusammenarbeit von Forschenden aus unterschiedlichen Disziplinen, die ihre Labore und Büros an unterschiedlichen Standorten haben, ist heute beinahe der Normalfall. Dennoch sollte nicht unterschätzt werden, dass diese Zusammenarbeit von allen zusätzliche Anstrengungen erfordert. Disziplinäre und räumliche Distanzen können durchaus dazu führen, dass Chancen der Zusammenarbeit nicht genutzt werden. Im SFB 985 war man sich dieser Herausforderung von Anfang an bewusst. Um ihr zu begegnen wurde zum einen darauf gesetzt, das Bewusstsein aller Beteiligten zu schärfen und Anreize, wie etwa die Forderung nach Publikationen, an denen mindestens zwei PI beteiligt sind, zu schaffen. Zum anderen wurde mit dem durch das INF-Projekt betreuten Microsoft SharePoint (im Folgenden nur als SharePoint bezeichnet) eine zentrale Plattform geschaffen, die Informationen bereitstellt und den Austausch von Informationen sowie das gemeinsame Arbeiten an Dokumenten unterstützt.

Im Umgang mit physischen Proben hatte sich vor Beantragung des SFB gezeigt, dass diese zwar häufig zwischen Laboren ausgetauscht wurden, dieser Austausch aber zu Problemen führte. So hat jedes Labor andere Konventionen bei der Benennung von Proben. Das führte teilweise dazu, dass Proben, die von einem anderen Labor kamen, mit einem zusätzlichen Namen, der der eigenen Konvention entspricht, versehen wurden. Unter anderem deswegen war es im Nachhinein dann sehr zeitaufwändig, Messergebnisse oder andere wissenschaftliche Erkenntnisse auf die betrachtete Probe zurückzuführen.

Um diesen Herausforderungen zu begegnen wurde von Anfang an eine zentrale Plattform auf der Basis von SharePoint eingerichtet und ein Probenmanagement-System entwickelt. SharePoint als zentrale Kollaborationsplattform ermöglicht, gemeinsam an Dokumenten zu arbeiten, Informationen auszutauschen und zentral verfügbar zu machen, bietet aber auch Arbeitsbereiche für die einzelnen Projekte, die nach den individuellen Bedürfnissen gestaltet werden.

Das Probenmanagement wurde auf der Grundlage der SharePoint-Funktionalitäten von einer externen Firma entwickelt und folgt einem einfachen Grundprinzip: Jede Probe erhält einen Eintrag mit einem eindeutigen Identifier in einer Liste und einen eigenen Arbeitsbereich (siehe Abbildung 1). Der Eintrag kann durch einen QR-Code repräsentiert werden; Ausgedruckt dient dieser zur Beschriftung der Probe und führt direkt zurück zum Eintrag. Darüber hinaus wird die Probe durch eine Reihe von Metadaten beschrieben, die die wesentlichen Eigenschaften der Probe erfassen (siehe Abbildung 2). Dazu gehören sowohl administrative Informationen wie Zeitpunkt, Projekt und Person, die die Probe erzeugt hat, als auch die inhaltliche Beschreibung, wie und unter Verwendung welcher Chemikalien diese hergestellt wurde. Auf der Ebene der Liste lässt sich durch diese Informationen ein Überblick über die vorhandenen Proben gewinnen, wobei die Metadaten genutzt werden können, um die Liste zu sortieren oder zu filtern. Das Metadatenschema wurde pragmatisch und bottom-up gemeinsam mit

einigen Forschenden definiert. Es wurde nicht formal beschrieben und orientierte sich auch an keinem formal definierten Schema.

SFB985_G2_LFB_M000489	G2	Mikrogel	09.05.2019	SFB985_G2_LFB_M000489	LFB	CTAB	Continuous	~500s	Nipam	20190509_conti_6	09.05.2019 12:44
SFB985_G2_LFB_M000488	G2	Mikrogel	09.05.2019	SFB985_G2_LFB_M000488	LFB	CTAB	Continuous	~400s	Nipam	20190509_conti_7.5	09.05.2019 12:42
SFB985_G2_LFB_M000487	G2	Mikrogel	09.05.2019	SFB985_G2_LFB_M000487	LFB	CTAB	Continuous	~300s	Nipam	20190509_conti_10.1	09.05.2019 12:37
SFB985_G2_LFB_M000486	G2	Mikrogel	09.05.2019	SFB985_G2_LFB_M000486	LFB	CTAB	Continuous	~200s	Nipam	20190509_conti_15.1	09.05.2019 12:35
SFB985_G2_LFB_M000485	G2	Mikrogel	09.05.2019	SFB985_G2_LFB_M000485	LFB	CTAB	Continuous	~100s	Nipam	20190509_conti_30.2	09.05.2019 12:26
SFB985_A3_MB_M000484	A3	Mikrogel	17.07.2018	SFB985_A3_MB_M000484	MB	SDS	70°C	4h	NIPAM; DAAM	MB-U-LC-p(NIPAM-co-DAAM)	09.05.2019 10:31
SFB985_A6_RH_M000483	A6	Mikrogel	30.07.2018	SFB985_A6_RH_M000483	RH	CTAB			Nipam	NL4	07.05.2019 09:44
SFB985_G2_LFB_M000482	G2	Mikrogel	06.05.2019	SFB985_G2_LFB_M000482	LFB	CTAB	Continuous	900s	Nipam	20190506_conti	03.05.2019 12:27
SFB985_G2_LFB_M000455	G2	Mikrogel	29.04.2019	SFB985_G2_LFB_M000455	LFB	CTAB	Continuous	900s	Nipam	20190429_conti	03.05.2019 12:25
SFB985_G2_LFB_M000481	G2	Mikrogel	02.05.2019	SFB985_G2_LFB_M000481	LFB	CTAB	Continuous	900s	Nipam	20190502_conti	03.05.2019 12:25
SFB985_B4_AK_M000480	B4	Mikrogel	04.12.2018	SFB985_B4_AK_M000480	AK					CG159	02.05.2019 12:59

Abbildung 1: Ausschnitt aus der Liste der Proben im SharePoint

Die Arbeitsbereiche dagegen bieten die Möglichkeit, Daten, die anhand der jeweiligen Probe gewonnen wurden, abzuspeichern. Somit können Charakterisierungsergebnisse aber auch Ergebnisse von Experimenten, in denen die jeweilige Probe eingesetzt wurde, zentral abgelegt werden.

SFB985_A3_AS_M000012

project A3

type of sample Mikrogel

person (SFB member)

person initials AS

date of sample preparation 02.02.2011

chemicals used N-isopropylacrylamide; [3-(Methacrylamino)propyl]dimethyl[3-sulfopropyl]ammonium hydroxide innder salt (sulfobetaine) N,N'methylenebisacrylamide; sodium dodecylsulfate; potassium persulfate; Methacryloxyethyl thiocarbonyl rhodamine B

SFB components / microgels used precipitation polymerization at 75°C for 6h at 250 rpm under nitrogen. 99% NIPAM, 1% sulfobetaine crosslinking ratio 1:20 purification by 4 cycles of centrifugation

access permission öffentlich

group IPC, RWTH Aachen

performing person

used in components

sample name in lab book

PID <http://hdl.handle.net/21.11102/ade5bb73-838e-4b22-b0ff-075213c3ba11>

[View All Properties](#)
[Edit Properties](#)

+ new document or drag files here

Find a file

Name	Modified	Modified By	Created By
AS-015	17. September, 2014	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
AS15 in D2O SLS 30.06.2011 mit Wasser abgezogen	24. März, 2015	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
AS-15 in DMF-d7 S(q) fit Decoupling	29. Januar, 2015	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
AS-15 in DMF-d7 SANS KWS1 Februar 2014	29. Januar, 2015	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

Abbildung 2: Arbeitsbereich einer Probe

Das INF-Projekt beschränkte sich in der ersten Förderphase auf die Entwicklung, Bereitstellung und Administration der zentralen Plattform. Dies hatte zur Folge, dass das INF-Projekt innerhalb des SFB wenig in Erscheinung trat und seine Angebote und Leistungen wenig bekannt waren. Auch das Probenmanagement war nicht bei allen Forschenden bekannt und wurde entsprechend nicht von allen konsequent genutzt.

3.2 Zweite Förderperiode (2/2016 - 1/2020)

Die Antragsphase für die zweite Förderperiode des SFB 985 fiel mit den Aktivitäten zur Entwicklung einer strukturierten Unterstützung des Forschungsdatenmanagements (FDM) an der RWTH Aachen zusammen.² Auch das INF-Projekt wurde nun im größeren Kontext FDM betrachtet und seine Zielsetzungen deutlich erweitert.

Zum einen wurde der Fokus von probenbezogenen Daten auf die Gesamtheit der erzeugten Forschungsdaten erweitert. Zum anderen wurde verstärkt der Bedeutung der Kommunikation mit den Forschenden und der Integration von (IT-)Lösungen in die Arbeitsabläufe der Forschenden Rechnung getragen.

Das Personal des INF-Projektes wurde durch eine Person in der Rolle eines Data Steward mit wissenschaftlichem Hintergrund erweitert, die als Bindeglied zwischen Infrastrukturanbieter, dem FDM-Team der Hochschule³ und den Forschenden fungiert. Sie macht die Angebote des INF-Projektes und die zentralen Unterstützungsangebote bei den Forschenden des SFB bekannt und erhebt gleichzeitig die spezifischen Bedarfe der Forschenden, die dann wiederum in die Anpassung und Entwicklung von Angeboten einfließen. So konnten Bekanntheit und Nutzung des Probenmanagements und anderer Dienste erheblich gesteigert werden.

Gleichzeitig konnten so viele kleine und größere Verbesserungsmöglichkeiten an der SFB-Infrastruktur identifiziert und realisiert werden. So wurde das Metadatenschema für Proben mehrmals erweitert und an die Bedürfnisse der Forschenden angepasst. Zudem wurde die Möglichkeit implementiert, Verknüpfungen zwischen Proben abzubilden, da einige Proben als Vorläufer-Produkte für andere dienen. Für das gemeinsame Arbeiten an Publikationen werden auf Anfrage Arbeitsbereiche mit individuellen Berechtigungen erstellt, die es Gruppen von Forschenden ermöglichen, kollaborativ aber „privat“ an Texten zu arbeiten. Neben den Anpassungen im SharePoint wurde auch das open source Kommunikationstool Mattermost⁴ eingeführt. Diese instant messaging Plattform ermöglicht eine unkomplizierte, niedrighschwellige aber dauerhaft nachvollziehbare Kommunikation zwischen allen SFB-Angehörigen.

Dabei hat sich gezeigt, dass die Forschenden meist nicht von selbst Verbesserungswünsche an der vorhandenen IT-Infrastruktur formulieren, sondern diese Ideen im Dialog zwischen Forschenden und den Mitarbeitenden des INF-Projektes entstehen. Dies liegt sicherlich auch daran, dass die meisten Forschenden wenig Zeit haben, sich Gedanken über die Infrastruktur zu machen und ihr Fokus auf ihrer inhaltlichen Arbeit liegt. Häufig werden die Eigenschaften von IT-Infrastrukturen aber auch als unveränderlich wahrgenommen. Nutzende haben oft keine Vorstellung von den vorhandenen Möglichkeiten zur Anpassung oder Weiterentwicklung. Dem IT-Personal, insbesondere den Software-Entwicklern, fehlen wiederum Zeit und Hintergrundwissen, um sich in

²Daniela A. Hausen et al., "Introducing Coordinated Research Data Management at RWTH Aachen University. A Brief Project Report" (2018), <http://doi.org/10.18154/RWTH-2018-224588>.

³<http://www.rwth-aachen.de/go/id/suzq/>, zuletzt geprüft am 10.07.2019.

⁴<https://mattermost.com/>, zuletzt geprüft am 10.07.2019.

die Arbeitsabläufe der Forschenden einzudenken. Vor diesem Hintergrund hat sich die Verfügbarkeit eines Data Steward, der diese Lücke füllt, als extrem wertvoll erwiesen. Diese positiven Erfahrungen wurden auch auf die gesamte Hochschule übertragen: So spielt das Konzept Data Steward in der RWTH-Strategie zum FDM eine wichtige Rolle.

Neben den durch die Forschenden getriebenen Veränderungen wurden auch einige Erweiterungen am Probenmanagement umgesetzt, die aus der Perspektive des Forschungsdatenmanagements motiviert waren:

Die Identifier der Proben wurden durch weltweit eindeutige und auflösbare persistent identifier (PID) ergänzt. Dazu wird an der RWTH Aachen das Angebot des European Persistent Identifier Consortium (EPIC)⁵ genutzt. Die PIDs können verwendet werden, um Proben bspw. in einer wissenschaftlichen Publikation zu referenzieren. Interessierte externe Nutzende gelangen über die ID dann auf eine landing page⁶, die es ermöglicht, den Ansprechpartner für die Probe zu kontaktieren. Die nötigen Berechtigungen vorausgesetzt ermöglicht die Seite natürlich auch den direkten Zugriff auf die Probeninformationen. Bereitgestellt werden die landing pages von der Server-Infrastruktur, über die PIDs an der RWTH verwaltet werden. Sie ist unabhängig vom SharePoint des SFB und wird auch nach Projektende weiter funktionieren.

Als zweites wurde eine Funktion implementiert, die, ausgelöst durch einen Klick, die Metainformationen einer Probe sowie alle in deren Arbeitsbereich abgelegten Dateien archiviert. Dieser Schritt kann, sofern im Laufe der Zeit weitere Daten hinzukommen, jederzeit wiederholt werden. Im Arbeitsbereich der Probe können dann alle archivierten Versionen über ein drop-down-Menü überblickt und heruntergeladen werden. Zur Identifikation der archivierten Daten dient wiederum die PID der Probe, so dass diese PID auch weiterhin zu den Probeninformationen führt, sollte das Probenmanagement im SharePoint nach dem Ende des SFB abgeschaltet werden.

Neben der Erweiterung des Probenmanagements und des SharePoint wurden auch die Forschungsdaten adressiert, die nicht dort verwaltet werden. Dies sind zum einen Daten, die sehr groß sind, bspw. Daten, die aus Simulationen und aus sehr hochauflösenden bildgebenden Verfahren stammen. Da SharePoint alle Daten in einer Datenbank speichert, wäre die Ablage sehr großer Daten extrem teuer und würde die Anwendung sehr langsam machen. Zum anderen entstehen im SFB aber auch Daten, die keinen direkten Bezug zu einer physischen Probe haben, etwa im Fall von Simulationen.

Für den SFB wurde deswegen in einer internen Policy festgelegt, dass alle Daten, die in eine Publikation eingeflossen sind, archiviert und mit der Publikation verlinkt werden. Dies geschieht ebenfalls mittels PIDs. Publikationen können also z. B. verwendete Proben und die zu diesen abgelegten Daten referenzieren. Die PID wird bei den

⁵<https://www.pidconsortium.eu/>, zuletzt geprüft am 10.07.2019.

⁶Die folgende PID zu einer Probe soll hier als Beispiel dienen: <http://hdl.handle.net/21.11102/ade5bb73-838e-4b22-b0ff-075213c3ba11>.

SFB 985 > Sample Manageme...

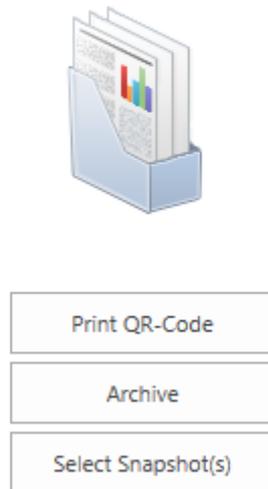


Abbildung 3: Schaltflächen zur Archivierung der Proben

wissenschaftlichen Publikationen im Artikel angegeben und ermöglicht daher den Lesenden einen einfachen Weg zu den Forschungsdaten. Die bereits erwähnten EPIC-IDs können aber auch verwendet werden, um andere Speicherorte, wie das Archiv der RWTH, zu referenzieren. Um publizierte Forschungsdaten zu verlinken werden DOIs genutzt. Zur Publikation von Daten kann entweder ein fachspezifisches Repository eines Forschungsdatenzentrums oder das institutionelle Repository RWTH Publications⁷ genutzt werden. Damit für Forschende so wenig zusätzlicher Aufwand wie möglich entsteht werden diese Arbeitsschritte weitgehend vom Personal des INF-Projekts übernommen. Forschende melden sich beim INF-Projekt, übertragen ihre Daten, und bekommen dann den Identifier für die archivierten Daten zurück.

Damit Daten wirklich nachnutzbar sind, braucht es aber mehr als lediglich die technische Lesbarkeit der Daten langfristig sicherzustellen. Durch die Verknüpfung mit einer Publikation können viele Kontextinformationen zur Entstehung der Daten bereits aus dieser entnommen werden. Damit ist die Nachnutzung von Forschungsergebnissen, d. h. von ausgewerteten Daten, durch die o. g. Publikationswege bereits sehr gut möglich. Zusätzlich beschreibt die Policy für verschiedene Datenarten, wie diese dokumentiert sein und welche zusätzlichen Kontextinformationen mit abgespeichert werden sollen. Die Regelungen bleiben jedoch notwendigerweise generisch. In der Policy des SFB 985 wurde als weitere Präzisierung zwischen Daten im Kontext von Simulationen und Experimenten unterschieden, bei den Experimenten wiederum zwischen Analyse und Synthese. Jeweils werden die Anforderungen an die Dokumentation der Daten

⁷<https://publications.rwth-aachen.de/>, zuletzt geprüft am 10.07.2019.

aufgeführt. Für spezifische Methoden gibt es getrennte Dokumente, die das Vorgehen und die Anforderungen beschreiben. Die präzise Ausgestaltung dieser Dokumentation hängt aber stark von der Zielgruppe ab, die die Daten nachnutzen möchte. Generell werden Forschungsdaten bisher nur sehr selten nachgenutzt. Am ehesten geschieht dies durch Mitglieder der eigenen Arbeitsgruppe. Die sind naturgemäß mit der generellen Thematik sehr gut vertraut und können die Daten mit der üblichen Dokumentation in den Laborjournalen nutzen. Wenn Forschende anderer Arbeitsgruppen die Daten nutzen möchten, können die dafür notwendigen Informationen am besten im Dialog der Gruppen bereitgestellt werden, da dies vom Wissensstand der an der Nachnutzung Interessierten abhängt. Eine ausführliche Dokumentation für eine nicht näher definierte Zielgruppe wäre mit erheblichem Aufwand verbunden: Hier findet entsprechend immer eine Abwägung von Kosten und Nutzen statt.

4 Fazit

Mit SharePoint, Probenmanagement, Mattermost und der Verknüpfung von Daten und Publikationen wurden im SFB 985 technische Lösungen und Prozesse etabliert, die die Zusammenarbeit in einem interdisziplinären, auf verschiedene Standorte verteilten SFB sowie das Management der anfallenden Forschungsdaten optimal unterstützen. Für Forschende ist das gemeinsame Arbeiten an Publikationen sowie das Austauschen und Archivieren von Daten einfacher und schneller möglich. Als entscheidend für die erfolgreiche Entwicklung und Etablierung dieser Lösungen hat sich der intensive Austausch und die enge Zusammenarbeit zwischen INF-Projekt und Forschenden erwiesen. Das Konzept Data Steward hat sich dabei als ein Erfolgsmodell erwiesen und wurde zum Vorbild für alle Verbundforschungsprojekte an der RWTH Aachen.

Veränderungen brauchen jedoch Zeit und Kommunikation. Diese Binsenweisheit hat sich im Kontext des SFB 985 bewährt: bei der interdisziplinären Zusammenarbeit der Forschenden und bei der Einführung von Prozessen zum bewussten und nachhaltigen Umgang mit Forschungsdaten. Die Einführung von einheitlichen Prozessen und IT-Infrastrukturen für das Datenmanagement war und ist in erster Linie eine kommunikative Herausforderung. Dies bezieht sich auf Quantität und Qualität der Kommunikation: Es ist sehr viel mehr Sprechen, Erklären, Austauschen und Zuhören nötig als in der Planung des INF-Projekts angenommen. Die Verständigung erwies sich aber auch als anspruchsvoller, da alle Beteiligten sehr unterschiedliche Hintergründe mitbringen und die angestrebten Veränderungen komplex und tiefgreifend sind.

In einer Zeit, in der interdisziplinäres Arbeiten und die ständige Modernisierung von Arbeitsweisen fast schon als normal gelten, darf deswegen nicht unterschätzt werden, wie herausfordernd diese Entwicklungen in der Praxis sind. Für den entstehenden Kommunikationsbedarf müssen deswegen unbedingt Personal und Zeit eingeplant werden.