



Kollaborative Forschungsunterstützung: Ein Integriertes Probenmanagement

E-Science-Tage 2019: Data to Knowledge

27. - 29.05.2019

Marius Politze, Annett Schwarz, Sebastian Kirchmeyer, Florian Claus, Matthias S. Müller
RWTH Aachen University

Zentrale Aktivitäten im Forschungsdatenmanagement

seit 2015:

Projekt zur Einführung eines Forschungsdatenmanagements (FDM),
enge Zusammenarbeit UB, IT Center, Dez. 4.0 Forschungsförderung

2016: umfangreiches Weiterbildungsprogramm zum FDM

2016: abgestuftes Beratungskonzept

2017: simpleArchive & Metadatentool:

Archivierung und Beschreibung von Forschungsdaten

2018: Git & ObjectStore:

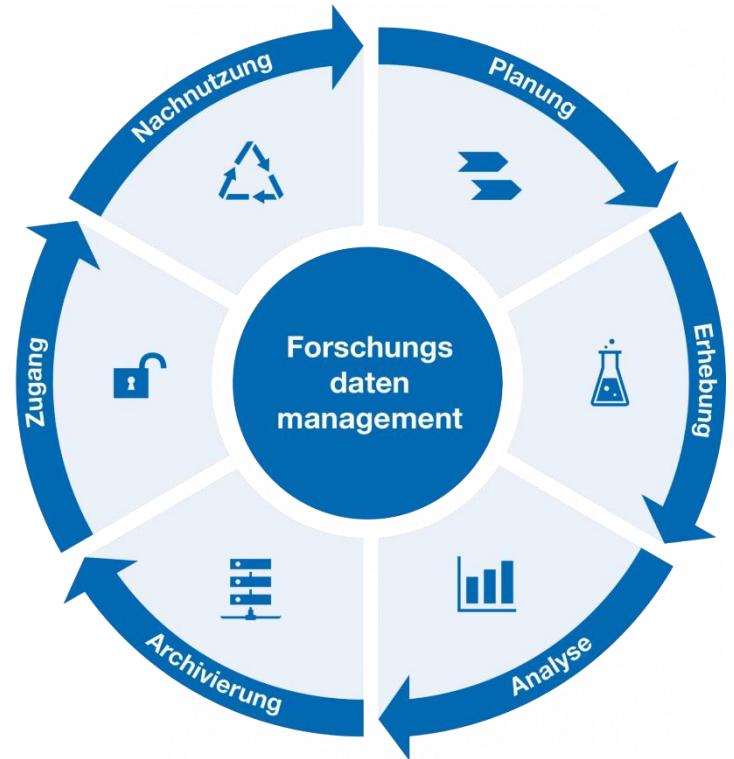
Speicherstrukturen für das Management von Forschungsdaten

2016: Nutzung externer Dienste, z.B. GWDG

2017: Intensive Kooperation mit dem FZ Jülich

2017: Intensive Kooperation mit der TU Darmstadt

2018: Dienstleistungen im Rahmen von NFDI4Ing



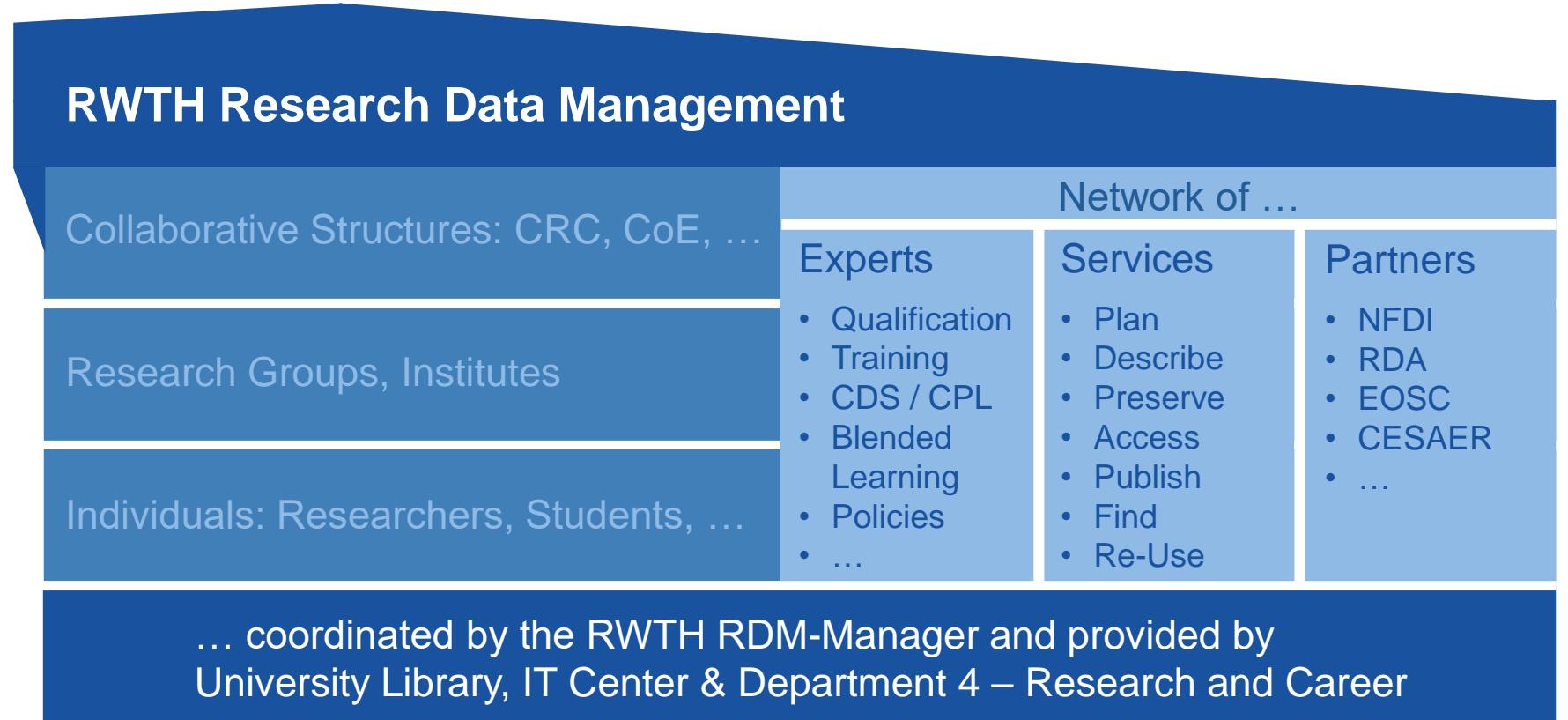
RWTH Aachen is dedicated to **Open Science** and the **FAIR** principles in managing research data. Researchers are advised and assisted in following **standards and well-defined processes**. The university provides **professional training, personal support and technical infrastructure** for managing, storing, sharing and publishing research data.

Contact:

servicedesk@rwth-aachen.de

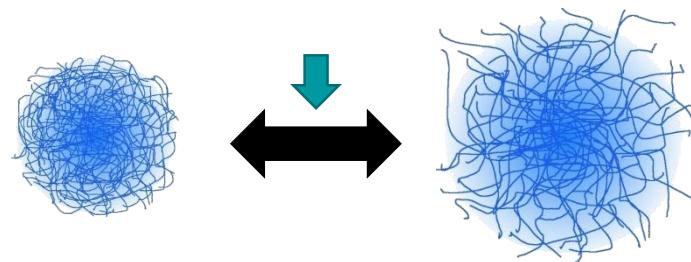
0241 80 24680

www.rwth-aachen.de/fdm



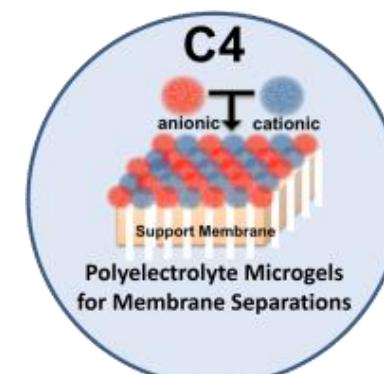
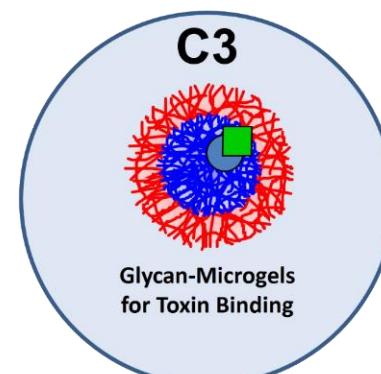
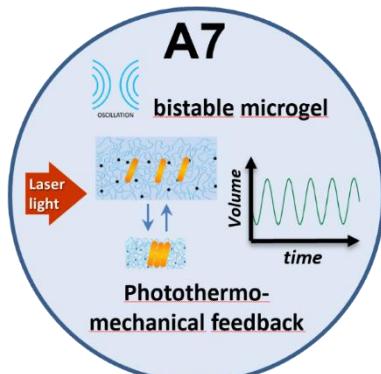
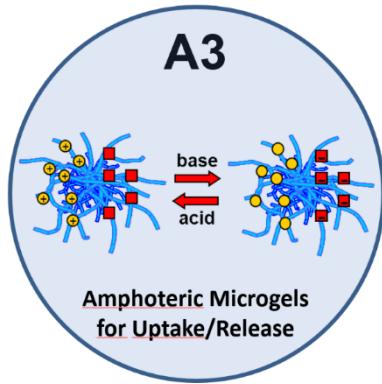
Auftraggeber / Anwendungsfall

Seit 2012 kooperieren im SFB 985 Chemiker, Physiker, Ingenieure und Mediziner der RWTH Aachen, der Uniklinik Aachen, des Forschungszentrums Jülich und des DWI.



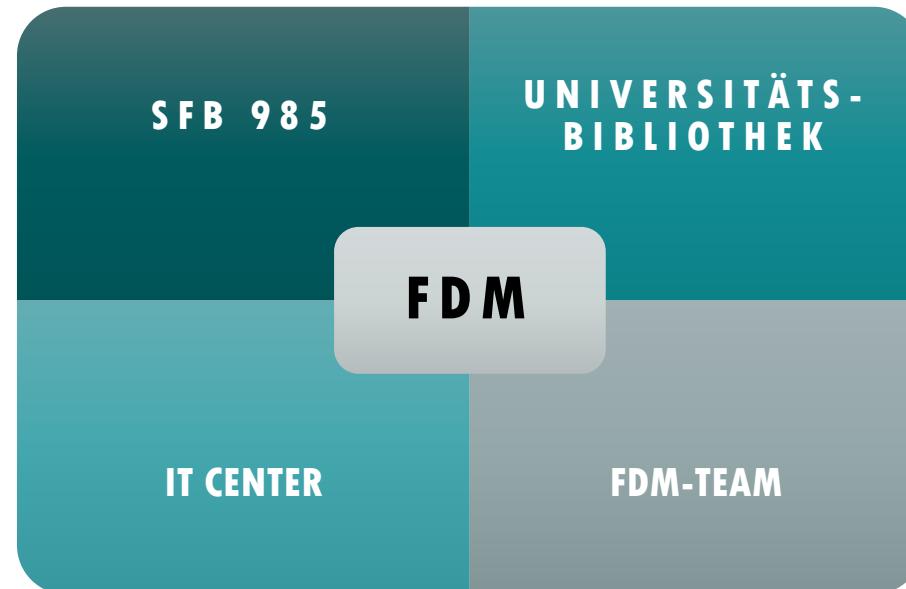
Durch Stimuli wie Temperaturänderungen, Druck, Änderungen des pH-Wertes etc. können funktionelle Mikrogele gezielt dazu gebracht werden, anzuschwellen oder zu kollabieren.

Beispiele für Anwendungsmöglichkeiten

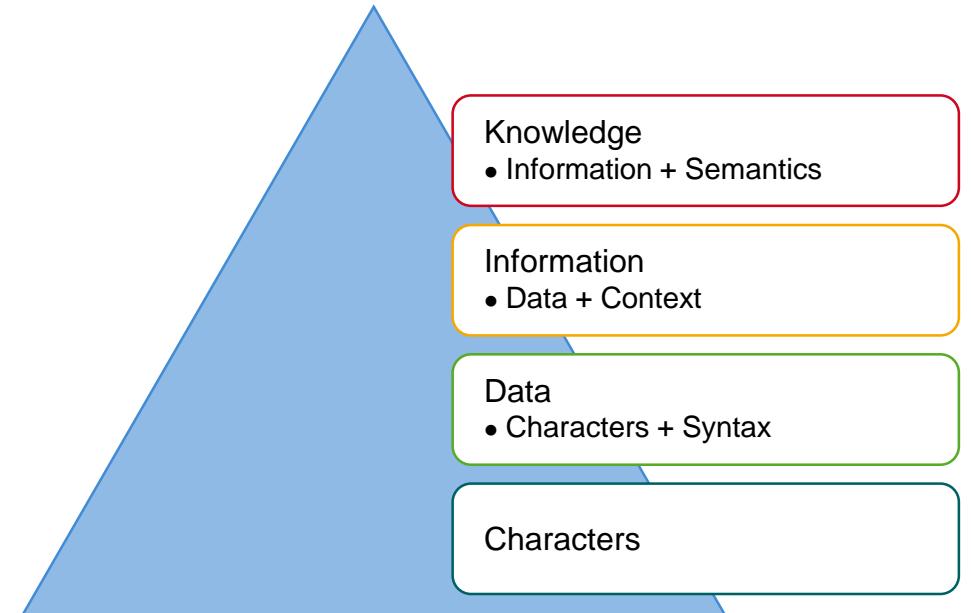


SFB 985 INF-Projekt

Das INF-Projekt unterstützt alle Projekte des SFB bei Datenmanagement und Zusammenarbeit. Personell setzt es sich aus Mitarbeitenden des Infrastrukturdienstleisters und eines fachwissenschaftlichen Instituts zusammen.



- Daten- und Wissensmanagement:
 - Gemeinsamer Zugang für Projektbeteiligte
 - Erfassung und Dokumentation von Ideen, Projekten, Erkenntnissen
 - Wissensobjekte, die über einheitliche Metadaten erschließbar sind
- Herausforderungen:
 - Erarbeitung der sinnvollen Metadaten
 - Kontinuierliches Befüllen der Datenbank
- Ziel:
 - Integration des Probenmanagement in bestehende Infrastruktur



W3L AG (2013): Werkzeuge des Wissensmanagements.

https://www.w3l.de/de/fileadmin/user_upload/Werkzeuge_des_Wissensmanagements_Ueberblick_und_ausgewaehlte_Ansaetze_2013.pdf



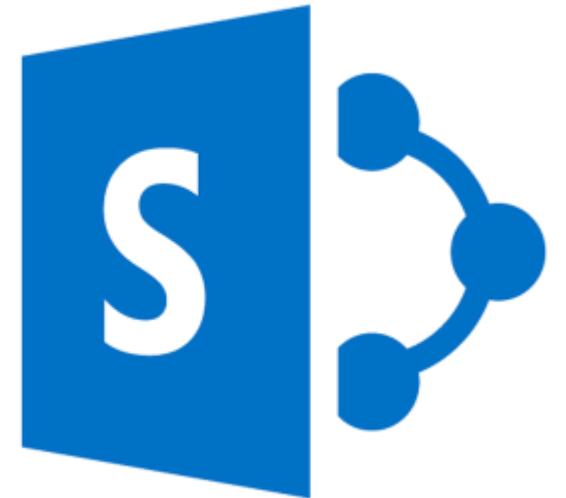
- Dokumentation der erzeugten Proben
- Verfolgen der Proben zwischen Instituten
- Verfolgen der Nutzung in Experimenten, Artikeln, ...
- Gemeinsame Sammlung von Daten zu Proben
- Daten dauerhaft und nachhaltig speichern
- Einbettung in bestehende Infrastruktur

Probenmanagement: Timeline

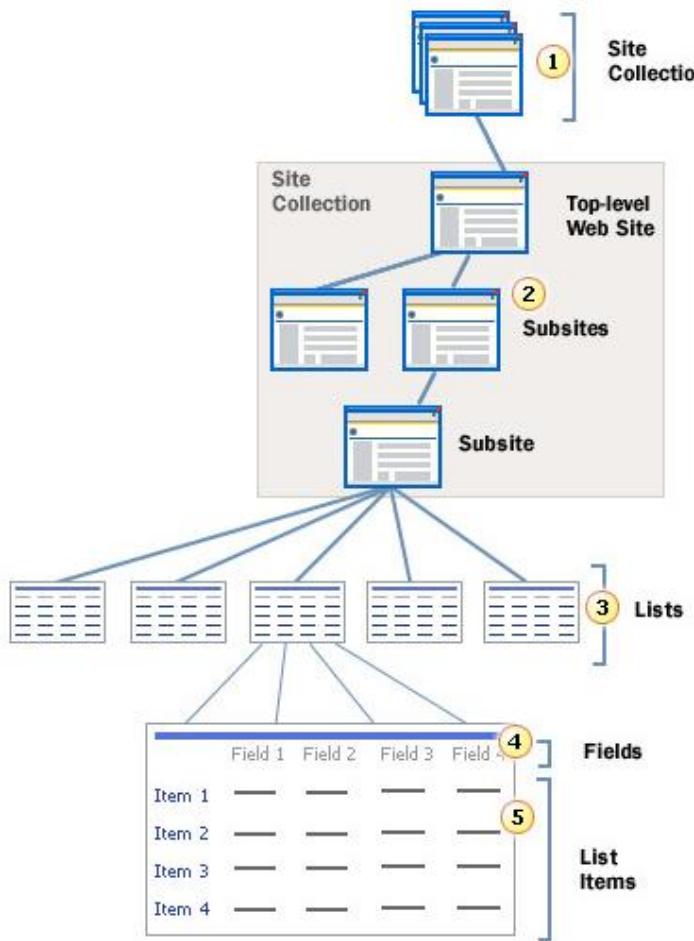
- 2012
 - Start des SFB 985
 - Start des INF-Projekts
- 2013:
 - Lastenheft “Probenmanagement”
 - Entwicklung durch ext. Unternehmen
- 2014:
 - Abnahme durch INF-Projekt
- Seit 2015:
 - Weiterentwicklung im Rahmen des INF-Projekts
- Seit 2018:
 - Einsatz des Probenmanagement in anderen Forschergruppen

Basisinfrastruktur: SharePoint

- Webbasierte Kollaborationslösung
- Erweiterbar / Anpassbar über APIs
 - C# (Serverseitig)
 - HTML5 (Clientseitig)
- Integration von Microsoft Office (Word, PowerPoint, Excel)
 - Office Web Apps oder Fat Client
 - WebDav für die Integration anderer Anwendungen
- Genutzt an der RWTH Aachen
 - 2005 - 2019 als e-Learning Plattform
 - Seit 2006 als Plattform für Dokumentenmanagement
 - Seit 2010 als Plattform für Forschungsprojekte



SharePoint: Architektur



- Hierarchische Architektur
- Granulare Rechtevergabe
- Struktur durch Nutzer anpassbar
- Über Unterseiten Anpassung an Projektstruktur möglich
- Listen: “Datenbanktabellen” + UI
- Dokumentenbibliotheken: Dokumente + Metadaten

Microsoft: Site Architecture and Model Overview
[https://docs.microsoft.com/en-us/previous-versions/office/developer/sharepoint-2010/ms473633\(v=office.14\)](https://docs.microsoft.com/en-us/previous-versions/office/developer/sharepoint-2010/ms473633(v=office.14))

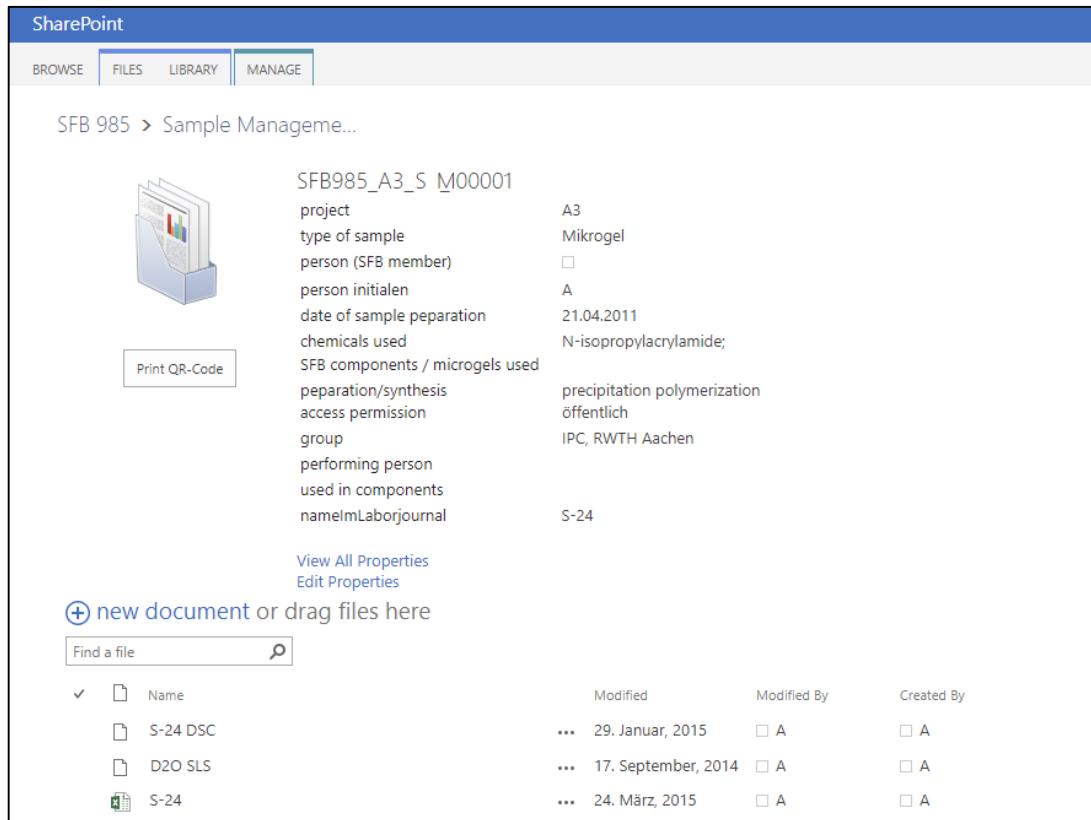
Metadaten zu Proben

SFB 985 > Sample Manageme...

sample name in lab-journal	Example																																			
page in lab-journal	12																																			
project	INF																																			
type of sample	Probe																																			
person (SFB member)	Claus, Florian																																			
person initialen	FC																																			
date of sample preparation	19.03.2019																																			
chemicals used	lots of stuff with complicated names																																			
SFB components / microgels used																																				
preparation/synthesis	pure alchemy																																			
access permission	<table><thead><tr><th>project</th><th>type of sample</th><th>date of sample preparation</th><th>workspace</th><th>person initialen</th><th>Surfactant</th><th>Reactor</th></tr></thead><tbody><tr><td>A3</td><td>Mikrogel</td><td>20.03.2017</td><td>SFB985_A3_MB_M000186</td><td>MB</td><td>SDS</td><td>70°C</td></tr><tr><td>A3</td><td>Mikrogel</td><td>11.03.2017</td><td>SFB985_A3_MB_M000187</td><td>MB</td><td>SDS</td><td>70°C</td></tr><tr><td>A3</td><td>Vorstufe</td><td>19.09.2016</td><td>SFB985_A3_MB_V000188</td><td>MB</td><td>-</td><td>60°C</td></tr><tr><td>A3</td><td>Vorstufe</td><td>14.06.2016</td><td>SFB985_A3_MB_V000189</td><td>MB</td><td>-</td><td>60°C</td></tr></tbody></table>	project	type of sample	date of sample preparation	workspace	person initialen	Surfactant	Reactor	A3	Mikrogel	20.03.2017	SFB985_A3_MB_M000186	MB	SDS	70°C	A3	Mikrogel	11.03.2017	SFB985_A3_MB_M000187	MB	SDS	70°C	A3	Vorstufe	19.09.2016	SFB985_A3_MB_V000188	MB	-	60°C	A3	Vorstufe	14.06.2016	SFB985_A3_MB_V000189	MB	-	60°C
project	type of sample	date of sample preparation	workspace	person initialen	Surfactant	Reactor																														
A3	Mikrogel	20.03.2017	SFB985_A3_MB_M000186	MB	SDS	70°C																														
A3	Mikrogel	11.03.2017	SFB985_A3_MB_M000187	MB	SDS	70°C																														
A3	Vorstufe	19.09.2016	SFB985_A3_MB_V000188	MB	-	60°C																														
A3	Vorstufe	14.06.2016	SFB985_A3_MB_V000189	MB	-	60°C																														
group																																				
performing person																																				
Surfactant																																				

- Verwaltung von Proben als Listen-Item
- Abgestimmter, erweiterbarer Metadatensatz
- Berechnete Eigenschaften
 - Einheitliche Proben-ID
 - Datum & Kürzel
- Beziehungen von Proben untereinander „used by“
- Zugriff auf Probendaten anhand der Metadaten
 - Einteilung nach Projektgruppen
 - „öffentliche“ Ansicht

Messdatenverwaltung



The screenshot shows a SharePoint 'Sample Management' library. At the top, there are tabs for 'BROWSE', 'FILES' (which is selected), 'LIBRARY', and 'MANAGE'. The page title is 'SFB 985 > Sample Manageme...'. A sample item is selected, showing its properties:

SFB985_A3_S_M00001	project type of sample person (SFB member) person initialen date of sample preparation chemicals used SFB components / microgels used preparation/synthesis access permission group performing person used in components name in Laborjournal	A3 Mikrogel <input type="checkbox"/> A 21.04.2011 N-isopropylacrylamide; precipitation polymerization öffentlich IPC, RWTH Aachen
	S-24	

Below the properties, there are links for 'View All Properties' and 'Edit Properties'. A 'Print QR-Code' button is also present. At the bottom, there is a section for 'new document' and a file list:

Name	Modified	Modified By	Created By
S-24 DSC	... 29. Januar, 2015	<input type="checkbox"/> A	<input type="checkbox"/> A
D2O SLS	... 17. September, 2014	<input type="checkbox"/> A	<input type="checkbox"/> A
S-24	... 24. März, 2015	<input type="checkbox"/> A	<input type="checkbox"/> A

- Für jede Probe wird ein Workspace erzeugt
 - Dokumentenablage und -Austausch
 - Metadaten der Probe werden übernommen
- Bearbeiten von Dateien
 - Direktes Editieren von Office Dokumenten
 - Versionierung aller abgelegten Dateien

QR-Codes



- Verknüpfung von Proben und Daten in der Kollaborationsplattform
- Etikettenvordruck aus Probenmetadaten
- Scanner an Arbeitsplätzen erlaubt Abrufen der Daten
- Kurz-URLs für “besser lesbare QR-Codes”

- Anbindung an bestehende FDM-Standards
 - PIDs
 - für Proben und / oder einzelne Dateien
 - für Probenversionen
 - (Institutionelles) Daten Repositorium für Veröffentlichung
- Skalierung des Datenspeichers
 - Object Store
 - Versionierung / Snapshots
- Verknüpfung von Proben und Publikationen
- Weitere Forschergruppen haben Interesse
 - Generalisierung
 - Betriebliche Skalierbarkeit

Thank you for your attention

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit