



# 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



# Research Data Management

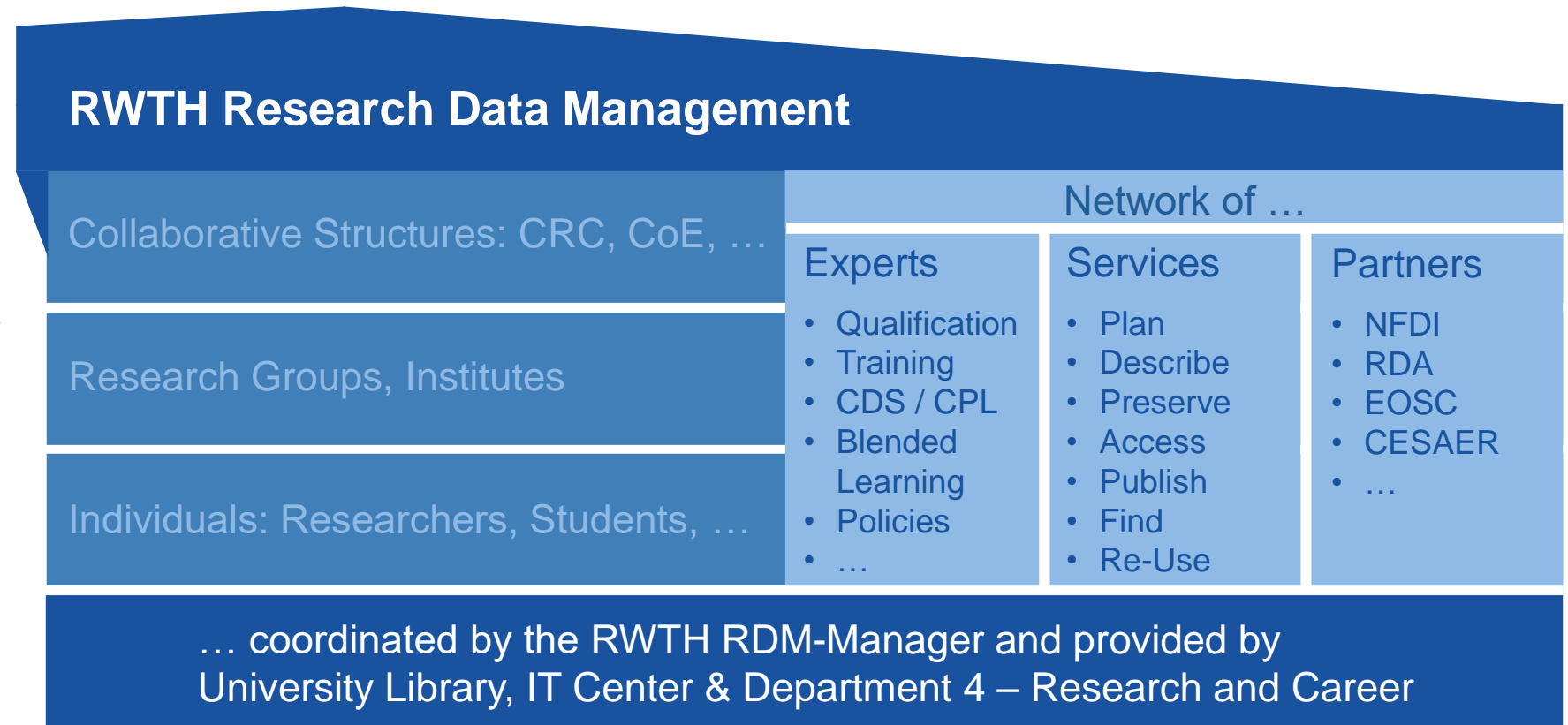
RWTH Aachen is dedicated to **Open Science** and the **FAIR** principles in managing research data. Researchers are advised and assisted in following **standards and well-defined processes**. The university provides **professional training, personal support and technical infrastructure** for managing,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

Contact:

[servicedesk@rwth-aachen.de](mailto:servicedesk@rwth-aachen.de)

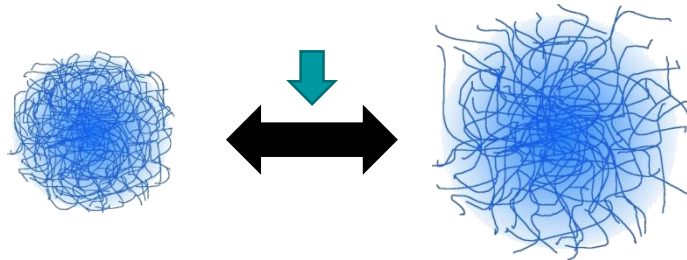
0241 80 24680

[www.rwth-aachen.de/fdm](http://www.rwth-aachen.de/fdm)



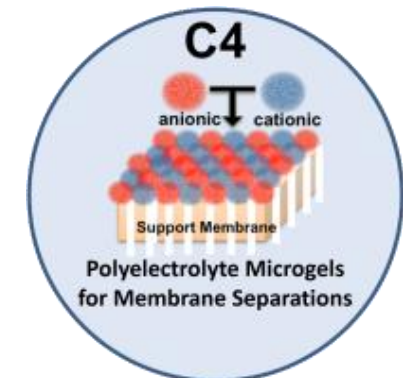
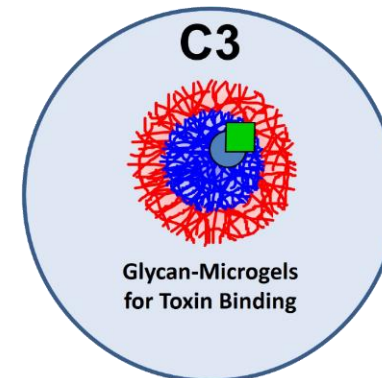
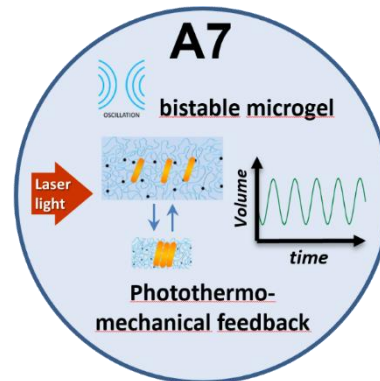
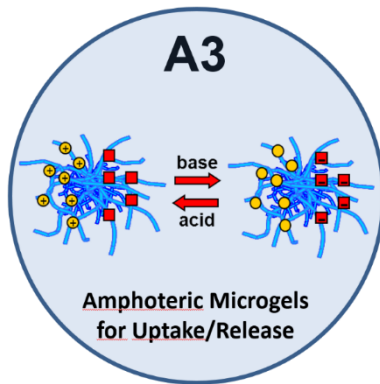
# Auftraggeber / Anwendungsfall

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.

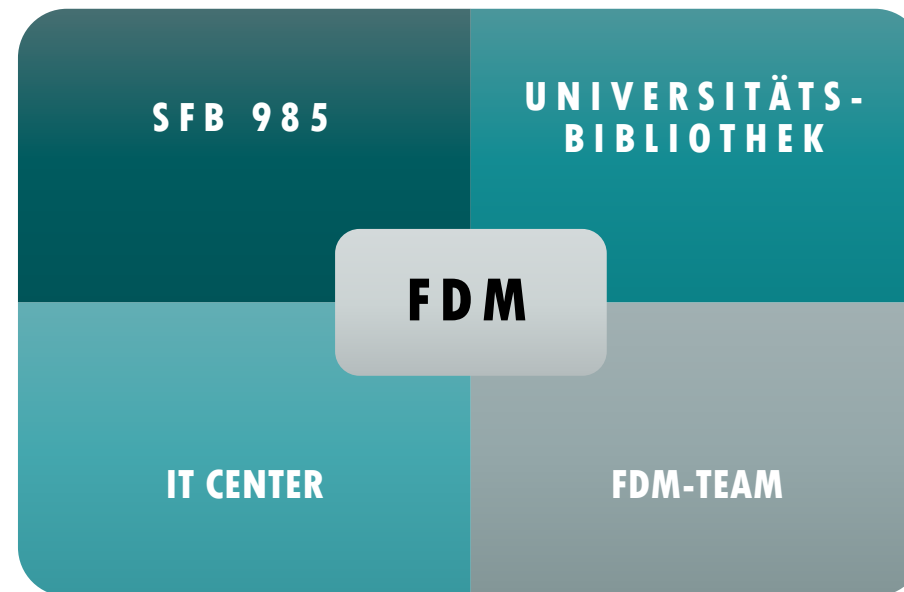
## Beispiele für Anwendungsmöglichkeiten



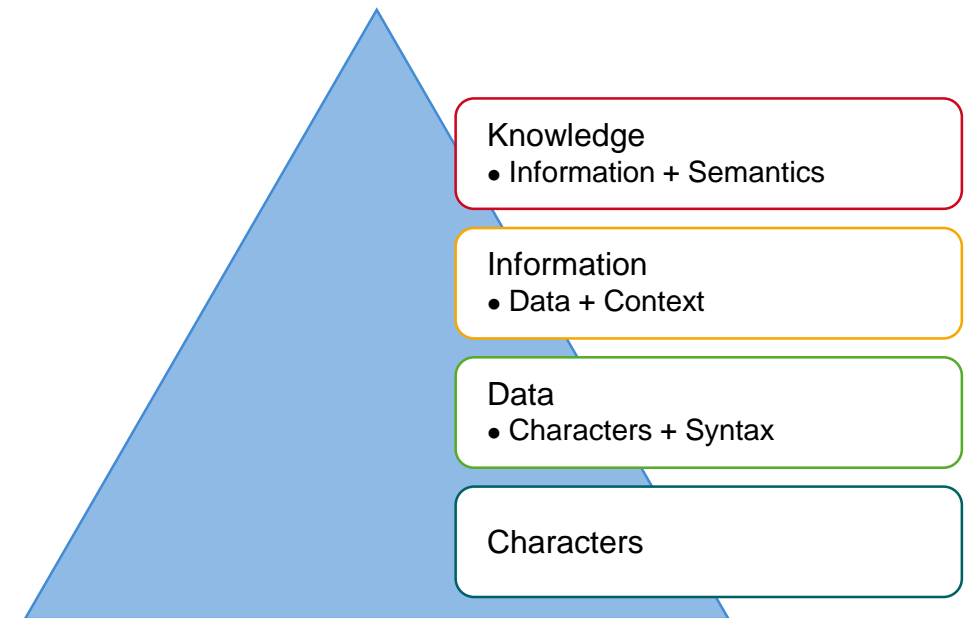
## SFB 985 INF-Projekt

---

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](https://www.w3l.de/de/fileadmin/user_upload/Werkzeuge_des_Wissensmanagements_Ueberblick_und_ausgewaehlte_Ansaetze_2013.pdf)

# Anforderungen

---



- 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

---

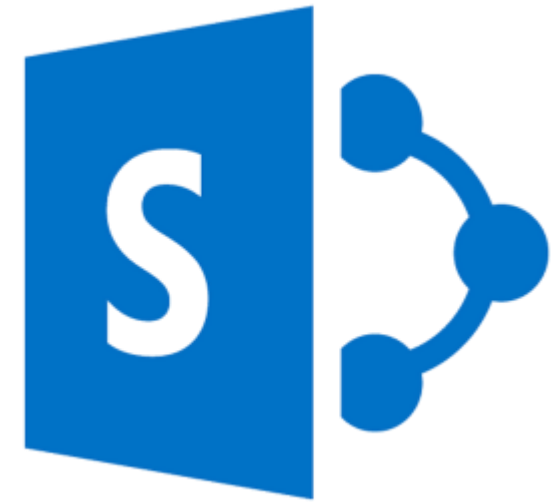
- 2012
  - Start des SFB 985
  - Start des INF-Projekts
- 2013:
  - Lastenheft “Probenmanagement”
  - Entwicklung durch ext. Unternehmen
- 2014:
  - Abnahme durch INF-Projekt
- Seit 2015:
  - Weiterentwicklung im Rahmen des INF-Projekts
- Seit 2018:
  - Einsatz des Probenmanagement in anderen Forschergruppen



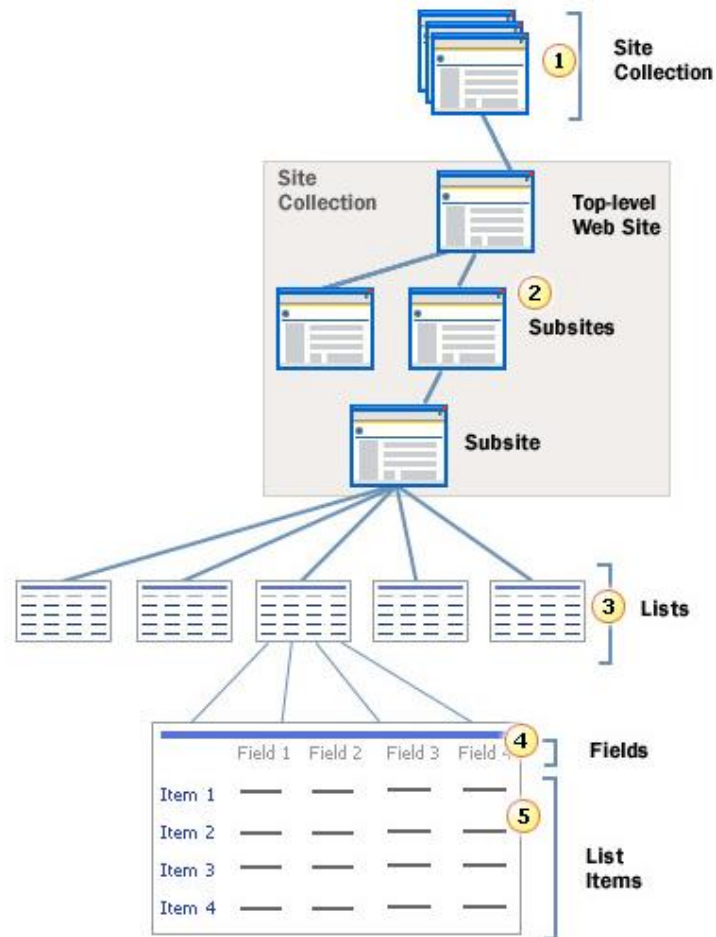
# Basisinfrastruktur: SharePoint

---

- 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 Dokumentenmanement
  - 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

page in lab-journal

project

type of sample

person (SFB member)

person initialen

date of sample preparation

chemicals used

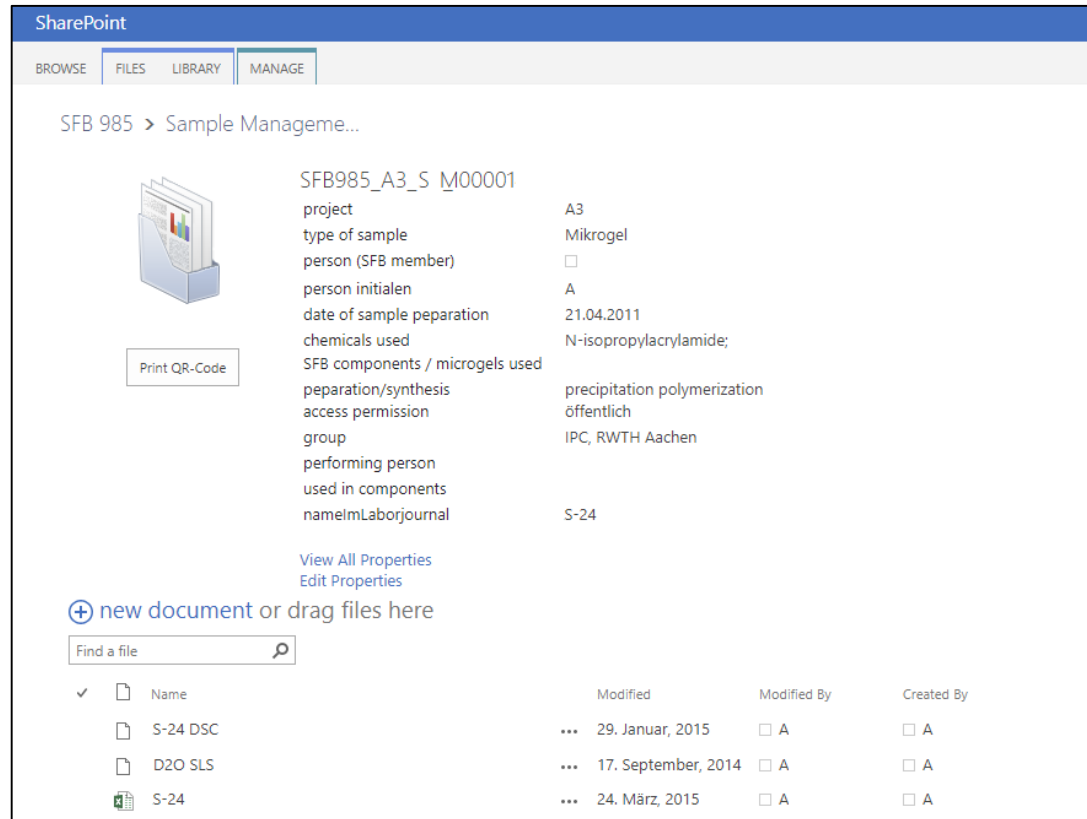
SFB components / microgels used

preparation/synthesis

| 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    |

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

# Messdatenverwaltung



The screenshot shows a SharePoint interface for a document titled "SFB985\_A3\_S M00001". The document's metadata is displayed in a table format:

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

Below the metadata, there are links for "View All Properties" and "Edit Properties". A "Print QR-Code" button is also visible. At the bottom, there is a search bar and a table listing files:

| Name     | Modified            | Modified By | Created By |
|----------|---------------------|-------------|------------|
| S-24 DSC | 29. Januar, 2015    | A           | A          |
| D2O SLS  | 17. September, 2014 | A           | A          |
| S-24     | 24. März, 2015      | A           | 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



- 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”

# Weiterentwicklung und Ausblick

---

- Anbindung an bestehende FDM-Standards
  - PIDs
    - für Proben und / oder einzelne Dateien
    - für Probenversionen
  - (Institutionelles) Daten Repository 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**