

Hinweise für Antragsteller zur Zusammenarbeit mit der Plattform Material Digital im Rahmen der Material-Hub-Initiative „Ressourcensouveränität durch Materialinnovationen“ (MaterialNeutral) – Modul 3: Ressourcenschonung durch lebenszyklusoptimierte Materialgestaltung

Die [Plattform MaterialDigital \(PMD\)](#) sowie die bereits [angebundenen Projekte](#) innerhalb der Initiative MaterialDigital unterstützen Interessierte aus der materialwissenschaftlichen Community bei der Digitalisierung und [FAIRen](#) Handhabung materialwissenschaftlicher und werkstofftechnischer Daten. Anwendungsspezifische sowie domänenübergreifende PMD Konzepte wurden entwickelt und entsprechende Werkzeuge für die Community geschaffen. Sie stehen der Community dokumentiert und frei zugänglich über verschiedene Kanäle der PMD zur Verfügung. Durch eine [Registrierung auf der PMD-Webseite](#) erhalten Interessierte vollen Zugriff auf interne Bereiche der Webseite wie den [Downloadbereich](#) für vielfältige Unterlagen und Materialien aus der Community, der Projekte aus der Initiative und der PMD.

Interessierte Projekte können in vier Stufen die erarbeiteten Ansätze der Initiative MaterialDigital kennenlernen, verwenden sowie ggf. weiterentwickeln.

Stufe I Information: Die [Webseite MaterialDigital](#) ist die erste Anlaufstelle für Interessierte. Über sie können Projekte wichtige Informationen, Erklärungen zur Initiative sowie Dokumente erhalten. Zudem gibt es Verknüpfungen zu allen Arbeits- und Austauschkanälen der PMD. Die Projekte finden dort Beschreibungen der grundlegenden Bausteine der Initiative, die eine Digitalisierung, Ablage, Suche, Bearbeitung und Freigabe von Materialdaten ermöglichen. Sie können dort Einblicke in die vier Handlungsfelder der Plattform [Community Interaktion](#), [Workflows](#), [Semantische Interoperabilität](#) und [Architektur und IT-Infrastruktur](#) sowie deren Angebote bekommen. Ein [Glossar](#) erklärt (Fach-)Begriffe, die in der Initiative verwendet werden. Die Webseite verweist auch auf relevante Digitalisierungsansätze und Informationskanäle anderer Initiativen, die die Vision eines FAIRen Umgangs mit Daten teilen. Außerdem bekommt man über die Webseite Hinweise auf wichtige [Veranstaltungen](#) und [Neuigkeiten](#) innerhalb der materialwissenschaftlichen Community.

Stufe II Adaption: Die PMD stellt den Projekten verschiedene Möglichkeiten zur Verfügung, um die PMD Konzepte und Werkzeuge für sich nutzbar zu machen. Das Teilen von Metadaten (z.B. Herkunft, URL, Autorenschaft oder Version) über Datensammlungen (z.B. Projektergebnisse, Datenverarbeitungsmethoden, oder Rohdaten) wird über einen Katalogservice ermöglicht. Entweder erfolgt die Registrierung der Metadaten in einem zentralen Katalog, dem „PMD-Datenportal“, oder die Einrichtung eines eigenen Katalogs als Teil eines eigenen Servers ist erforderlich.

Die Daten bleiben dabei auf den Servern oder anderen Datenrepositorien im Verantwortungsbereich der Projekte, die dadurch die volle Kontrolle über die Zugriffsrechte zu allen erarbeiteten Daten behalten. So gewährleisten beide oben aufgelisteten Varianten die Datensouveränität der Projektergebnisse. Der Zugriff zu dem zentralen Katalogservice wird mit dem PMD-SSO gesteuert.

Der zentrale Katalogservice, die Installationsanleitung für einen eigenen Katalog, Tutorials, Workshopangebot für Schulung der Benutzer und Schnittstellen zum technischen Support werden zum Anfang der Projektförderung von den Konsortialpartnern der Plattform MaterialDigital zur Verfügung gestellt.

Auf den Unterseiten der o.g. Handlungsfelder werden außerdem Skripte, Templates und Repositorien bereitgestellt, die die Installation und Nutzung der PMD-Softwarelösungen erklären. Zusätzlich kann das Angebot auf [GitHub](#) zur Information sowie für eine technische Adaption herangezogen werden. Informationsvideos, Step-by-step-Tutorials sowie Mitschnitte von Veranstaltungen und Onboardings auf dem [YouTube-Kanal](#) ergänzen das Angebot. Durch diese Angebote können sich Interessierte eingehend mit den entwickelten Werkzeugen – wie der ontologischen Datenbeschreibung, den Workflow-Umgebungen [Simstack](#) und [Pyiron](#) sowie der [IT-Infrastruktur-Lösung](#) – für eine Datenablage und -weiterverwendung auseinandersetzen. Sie erleichtern es, die in den Katalogen abgelegten Datensammlungen sowie deren Verarbeitung interoperabel und wiederverwendbar (reusable) zu gestalten.

Stufe III. Partizipation: Nachdem sich interessierte Projekte mit den Grundlagen der Werkzeuge vertraut gemacht haben und ggf. schon mit der eigenen Anwendung gestartet sind, können sie über verschiedene Tools wie [GitLab](#) konkrete Entwicklungen verfolgen, diskutieren und zu diesen beitragen. Arbeitsschritte können in den fachspezifischen [GitHub-Repositorien](#) mit den Fachgruppen für Semantische Interoperabilität, Workflows und IT-Infrastruktur geteilt werden. [GitHub](#) dient als Plattform für die Ablage vom Code der PMD-Werkzeuge und der entsprechenden Dokumentation, aber auch für den Erfahrungsaustausch mit anderen Projekten und Expert*innen innerhalb der Initiative. Wenn beispielsweise Anpassungen einer [Anwendungsontologie](#) oder eines [Workflows](#) aus einer Materialdomäne an die Anforderungen einer anderen Materialdomäne erforderlich sind, können sich weniger erfahrene Personen mit erfahreneren Personen bzw. Expert*innen austauschen und so Rat und Unterstützung erhalten. Der Gedanke der Gemeinschaft, gegenseitige Hilfestellung und Wissenstransfer stehen im Mittelpunkt der PMD-Community.

Stufe IV. Implementierung: Nachdem die Schritte der Information, Adaption und Partizipation erfolgreich absolviert wurden, haben die Interessierten, die nun in die Initiative MaterialDigital voll integriert sind, die Möglichkeit, ihre adaptierten Lösungen mit der Community zu bearbeiten. Es ist möglich, die eigenen Erfahrungen und Arbeitsergebnisse in die Gestaltung und Weiterentwicklung der Plattform einzubringen und gleichzeitig vom Wissen der Expert*innen zu profitieren. Ab dieser Stufe kann aktiv an den virtuellen Arbeitstreffen der Fachgruppen der PMD teilgenommen werden. Interessierte können nun z. B. im „Ontology Playground“ mitarbeiten. Hier wird an Ontologien gearbeitet, sei es an [Anwendungsontologien](#) oder der entwickelten [PMD Core Ontology](#), sowie der Kuratierung. Eine weitere Möglichkeit besteht darin, eigene erstellte Workflows in den [Workflow Store](#) des zentralen PMD-Servers hochzuladen und sie somit dauerhaft der Öffentlichkeit zur Verfügung zu stellen. Dadurch können im letzten Schritt die Werkzeuge für die Digitalisierung der MSE (*Material Science Experts*) mitgestaltet und der Weg der Digitalisierung weiter geebnet werden.

Die Angebote der PMD werden kontinuierlich weiterentwickelt und durch zusätzliche Angebote ergänzt. Aktuelle und neue Entwicklungen werden über Newsmitteilungen und Updates (wie Tutorials, Dokumentationen und Aufzeichnungen) auf den PMD-Kanälen geteilt. Folgen Sie den sozialen Medien und abonnieren Sie den Newsletter, um auf dem Laufenden zu bleiben.

Geförderte Projekte im Rahmen des Modul 3 von MaterialNeutral werden verpflichtet, im Sinne der Stufen I (Information) und II (Adaption) mit der PMD zusammenzuarbeiten. Die Stufen III (Partizipation) und IV (Implementierung) werden erst in einer potenziellen Transferphase fördertechnisch relevant, können aber in eigener Initiative gerne aufgegriffen werden. Für die Projektarbeiten in den Stufen I und II werden folgende Personal- und Sachaufwände geschätzt, die in der Skizze und bei der Antragstellung zu berücksichtigen sind:

- I. **Information:** Informationskanäle als erste Anlaufstelle zur Information über die Initiative
 - a. Im Antrag zu berücksichtigender Personalaufwand: 2 PM für den Verbund + 0,5 PM für jeden Partner (zu verteilen im eigenen Ermessen, jeweils über die gesamte Projektlaufzeit)
- II. **Adaption:** Katalogdienst und prototypische Software-Module für FAIRes Datenmanagement
 - a. Im Antrag zu berücksichtigender Personalaufwand: 4 PM für den Verbund + 1 PM pro jeden Partner (s.o.)
 - b. Einrichtung eines Servers im geplanten Vorhaben (weitere Informationen siehe <https://materialdigital.de/architektur/>): Die PMD Konzepte und Werkzeuge sind besonders einfach umsetzbar, wenn ein solcher Server nach dem PMD-Deployment-Guide (<https://materialdigital.github.io/pmd-server/>) eingerichtet wird. Er muss nicht zwingend aktiv ins PMD-Netz eingebunden werden, soll aber potenziell die Möglichkeit dazu haben.

Alle geförderten FuEul-Projekte sind verpflichtet, jegliche Daten, die im Rahmen der öffentlichen Förderung entstehen, nach den FAIR-Prinzipien für wissenschaftliches Datenmanagement zu speichern.

Anforderungen an das zu erstellende Digitalisierungskonzept im Rahmen der Material-Hub-Initiative MaterialNeutral“ – Modul 3: Ressourcenschonung durch lebenszyklusoptimierte Materialgestaltung

Im Rahmen der Material-Hub-Initiative MaterialNeutral wird eine vollständige Digitalisierung der betrachteten Materialien und Prozesse angestrebt. Die Digitalisierung soll hierbei als eine semantische Beschreibung dieser Materialien und Prozesse mittels Ontologien gefasst und in der Transferphase des Material-Hubs MaterialNeutral erreicht werden. Dafür sollen in der Modulphase (hier Modul 3) die Voraussetzungen geschaffen werden. Folgende Punkte sind daher bereits im Vorhaben der Modulphase zu berücksichtigen und in einem Digitalisierungskonzept zum Ende des Vorhabens darzustellen:

Vollständige Erfassung und Listung aller im Projekt behandelten relevanten Materialien und den damit verbundenen Prozessen

Eine vollständige Erfassung und Listung aller im Projekt behandelten relevanten Materialien und den damit verbundenen Prozessen ist erforderlich. Dabei sind sowohl Ver- und Bearbeitung der Materialien als auch Charakterisierungs- und Messprozesse sowie allgemeine Handhabung, Bewegung/Transport, Zusammenbau usw. eingeschlossen. Es ist zu klären und darzustellen, an welcher Stelle welche Daten erhoben werden müssen, damit die Prozesse jeweils vollständig digital erfasst und abgebildet werden können, und welche Schritte und Prozessanpassungen dafür notwendig sind.

Speicherung der Daten nach den FAIR-Prinzipien

Alle (Material- und Prozess-)Daten, die bereits ohne explizite Digitalisierung im Projekt anfallen, müssen nach den FAIR-Prinzipien gespeichert und abgelegt werden. Darüber hinaus ist darauf zu achten, dass die Ablage kompatibel mit den Konzepten der Plattform MaterialDigital (PMD) erfolgt und die Daten Teil des dezentralen Datenbankkonzeptes der PMD werden. Die Rechte gemäß NKBF 2017 Nummer 3.1 und 3.2 bzw. NABF Nummer 3.1 und 3.2 bleiben dabei unberührt. Das bedeutet insbesondere, dass die Daten auffindbar sind, eine Einsicht in Daten(sammlungen) jedoch nur nach Einwilligung des Rechteinhabers erfolgen kann und wird. Hinweise und Hilfestellung erhalten Sie hier: <https://www.materialdigital.de>

Darstellung des Mehrwerts der späteren vollständigen Digitalisierung

Im Digitalisierungskonzept ist der erwartete Mehrwert der (späteren) vollständigen Digitalisierung mindestens anhand der folgenden Leitfragen darzustellen:

- An welcher Stelle verbessert sich was um welches Maß (bspw. Beschleunigung von Entwicklungs- oder Optimierungsprozessen?)
- Welche zusätzlichen Erkenntnisse lassen sich aus einer vollständigen Digitalisierung mit allen dafür notwendigen Daten ziehen?
- Welche Vorteile für Materialdesign und -produktion, aber auch für Nachhaltigkeit und Produktsicherheit ergeben sich?

Meilensteine zum Digitalisierungskonzept

- Meilenstein nach 9 Monaten:

Nach 9 Monaten der Vorhabenlaufzeit ist eine Konkretisierung des Digitalisierungskonzepts anhand der Angebote der Plattform MaterialDigital (PMD) vorzunehmen und eine erste Kontaktaufnahme zur PMD nachzuweisen. Die Darstellung der aktuellen sowie der im Vorhaben noch geplanten Digitalisierungsaktivitäten erfolgt im Rahmen eines gemeinsamen Projekttreffens.

- **Zentraler Meilenstein mit Abbruchkriterium nach der Hälfte der Projektlaufzeit:**

Etwa nach der Hälfte der Vorhabenlaufzeit ist nachzuweisen, dass eine Einarbeitung in die PMD erfolgt ist, erste Daten nach den FAIR-Prinzipien gespeichert und erste Prozesse im Hinblick auf die spätere Digitalisierung analysiert wurden. Auf Basis des Erreichens dieses Meilensteins wird über die Fortführung des Vorhabens entschieden.