

## NFDI Consortium for Physics NFDI4Phys

*Sprecher: Dr. Jörn Stenger, Physikalisch-Technische Bundesanstalt, joern.stenger@ptb.de*

Forschungsgebiet: Unser Konsortium wendet sich, unabhängig von der fachlichen Ausrichtung, an alle Forschungsgruppen der Physik, die sich nicht von einem der anderen Konsortien vertreten wissen. Innerhalb der Physik stellt sich der *status quo* des Forschungsdatenmanagements als sehr heterogen dar. Eine von unserem Konsortium von März bis Mai 2020 durchgeführte Umfrage war an alle Physikfachbereiche und Institute an Universitäten, Fachhochschulen und den deutschen außeruniversitären Forschungseinrichtungen (ca. 1200 Adressen) gerichtet. An der Umfrage beteiligten sich 488 Forschende, die einen repräsentativen Querschnitt der ganzen Physik und angrenzender Fächer abbilden. Die Umfrage offenbart besonders ungedeckten Bedarf an Unterstützung beim Forschungsdatenmanagement (FDM) für Forschende aus der Optik inkl. der Quantenoptik und Spektroskopie, der Festkörper-, Plasma-, sowie der Biophysik. Darüber hinaus ist in der Physik ein hochdynamischer Wandel hinsichtlich neuer Forschungsfelder und Technologien festzustellen. Damit einher geht eine Verschiebung klassischer Disziplingrenzen. Diesen Wandel möchte NFDI4Phys ebenfalls adressieren.

Daten: Die Forschungsgruppen geben an, Forschungsdaten aus Laborexperimenten, Beobachtungsmessungen, Simulationen von Modellsystemen und aus algebraischen Berechnungen und Theorie zu erzeugen. Daten liegen in vielfältigen, heterogenen Formaten vor, neben verschiedendimensionalen numerischen Faktendatensätzen nehmen auch Bild-, Video- und Audiodateien, Software, CAD-Modelle und topologische Darstellungen nennenswerte Anteile ein. Viele Forschende beklagen die Abhängigkeit von proprietären Ausgabeformaten der verwendeten Messgeräte. Die durchgängig digitale Metadatenerhebung ist eher die Ausnahme: Knapp 60% der durch unsere Umfrage erfassten Arbeitsgruppen dokumentieren Metadaten noch händisch nach ad-hoc-Schemata und in Papierlaborbüchern. Diese Zahl weist auf ein unmittelbares Potential und auf Gestaltungsspielraum für FDM in der Digitalisierung hin. Zu jedem Aspekt des derzeitigen FDM in der Physik lässt sich aus der Umfrage ein großer Modernisierungsbedarf ablesen, vor allem der Wunsch nach Interoperabilität von Forschungsdaten und ihren Formaten. Die derzeit nicht standardisierte Darstellbarkeit und der dadurch verursachte Mangel an automatisierter Beschreibung erschweren das Finden und machen die Nachnutzbarkeit umständlich.

Spezielle Anforderungen: Vor dieser Ausgangssituation ähnlicher Bedarfe in der Physik schlagen wir einen generalistischen Lösungsansatz vor. Ein Vorbild ist das internationale Einheitensystem (SI). Hier ist die Darstellung von Messgrößen, Messwerten und Unsicherheiten bereits seit Jahrzehnten harmonisiert. Für barrierefreien Datenaustausch (Umsetzung der FAIR-Prinzipien) fehlen hingegen oft maschineninterpretierbare Metadaten. Dazu braucht es Ontologien und Standards für die Beschreibung und Qualitätsbewertung von Daten. Diese sollten in der Lage sein, die Komplexität eines physikalischen Experiments, eines Prozesses oder Workflows abbilden zu können. Das Gesamtsystem (z.B. Quelle/ Anregungen – Probe/ Substrat/ Messobjekte – Detektoren/ Sensoren) soll verbunden mit einer Diagnostik oder Analyse maschineninterpretierbar charakterisiert werden.

Geplante Maßnahmen: Eine wesentliche Maßnahme der NFDI4Phys zur Umsetzung der FAIR-Prinzipien soll daher die modulare Harmonisierung vorhandener Metadatensysteme (inkl. Ontologien) für numerische Faktendaten sein. Diverse bisherige Metadatenmodelle werden in einem moderierten Prozess zusammengeführt, so dass eine hoffentlich geringe Anzahl sich stetig verbessernder Standards daraus hervorgeht, die die bisherigen Insellösungen langfristig verbinden. Damit potentielle Nachnutzer den Grad der Verlässlichkeit einschätzen können, wollen wir als weitere Maßnahme übertragbare Qualitätsmetriken einführen und so wenn möglich auch Qualität standardisieren (vgl. Messunsicherheitsangabe in der Metrologie). Aus FAIR-Daten könnten so „FAqIR“ (*quality-indicated*) -Daten werden. Wichtige Aufgabenfelder sind dafür die Abbildung von Workflows, Repositorien, Lehre und Steigerung von *Awareness and Acknowledgment* für gutes FDM.

Den „bottom-up“-Ansatz sehen wir als Auftrag, Repositorien, Software-Werkzeuge und Dienstleistungen zu entwickeln und anzubieten, die - mit möglichst geringer Einstiegsschwelle - einen FDM-Mehrwert für die Workflows möglichst breiter Nutzerkreise erzeugen. Dabei stehen die Forschungsgruppen im Konsortium als Pilotanwender prototypisch für die Bedürfnisse der Communities (Use Cases) und übertragen in Zusammenarbeit mit den als Infrastrukturanbietern etablierten Teilnehmern im Konsortium die entwickelten Metadatenysteme und Qualitätsstandards in konkrete Anwendungen. Entsprechende Systeme sollen sich in konkreten Anwendungsfällen unterschiedlicher Fachgebiete, wie z.B. der Plasma-, Laser-, Atom- oder Festkörperphysik bewähren. Ein modulares Design erlaubt dabei lauffähige Lösungen, die sich dank des generalistischen Ansatzes als Bauplan auf sich wandelnde Bedürfnisse individueller Arbeitsgruppen anpassen, sich inkrementell verbessern und in angrenzende Communities transferieren lassen (ein System der „kleinen“ Fortschritte).

NFDI4Phys sieht sich als komplementärer Dienstleister zu den weiteren Konsortien aus Physik, Ingenieurwissenschaften und Materialwissenschaften, mit denen wir eine enge und kontinuierliche Abstimmung unserer Entwicklungen und Dienste anstreben. Unser generalistischer Ansatz inkl. der Qualitätsmetriken eröffnet Anwendungen auch über die Physik und die Naturwissenschaften hinaus; so planen wir als Pilotanwendung z.B. die Entwicklung von FDM-Angeboten (Terminologien, Werkzeuge, Repositorien, *best practices*) für transdisziplinäre quantitative Forschung.

Erfahrungen im Datenmanagement: Das NFDI4Phys-Konsortium vereint Partner aus Forschung, Lehre und Infrastruktur mit langjähriger Expertise und Vertreter der Fachgesellschaft (DPG). So sind z.B. TIB, FIZ, FZ Jülich, GSI und *fdm.nrw* etablierte FDM-Anbieter (u.a. mit DOI- und PID-Diensten, FDM-Schnittstellen, Datenbank-Diensten, Computing und *big data*, Software-Bibliotheken sowie Austauschforen, Fortbildungs- und Beratungsangeboten zu Forschungsdaten) mit eigenen Forschungsaktivitäten zu Themen wie Ontologien und Wissensgraphen. Wir sind mit DataCite, ORCID, DINI sowie durch die GSI mit einem Journal für kollaborative Methoden der Forschungsdatenprozessierung und -analyse eng verbunden.

Beiträge zu Querschnittsthemen: NFDI4Phys hat die „Leipzig-Berlin-Erklärung zu NFDI-Querschnittsthemen der Infrastrukturentwicklung“ unterzeichnet. Bei der Terminologie-Entwicklung und zu den die Physik betreffenden Querschnittsthemen wollen wir mit den Konsortien aus der gesamten NFDI zusammenarbeiten.

Wir sehen es als wichtig an, Studierende möglichst früh mit guten FDM-Praktiken vertraut zu machen. Die Physikfachbereiche haben durch die physikalischen Praktika dazu die bestmögliche Gelegenheit, denn diese führen sie für Studierende der Physik und auch der Fächer Biologie, Chemie, Elektrotechnik, Maschinenbau und Verfahrenstechnik durch. NFDI4Phys plant mit den für Praktika Verantwortlichen und Studierendenvertretungen (Zusammenkunft aller Physik-Fachschaften, ZaPf e.V; junge DPG) ein Konzept zur Einführung von FDM in physikalischen Praktika zu erstellen und die Einführung zu begleiten.

Internationale Partner und vorhandene Infrastrukturen: Metadaten- und Datenqualitätsstandards müssen international nutzbar sein, z.B. durch die EOSC. Wir werden unsere internationalen Partnerschaften zum Nutzen der NFDI einbeziehen, z.B. durch die Kooperation der Physikalisch-Technischen Bundesanstalt mit nationalen Metrologie-Instituten weltweit.

Wir sehen es auch als unsere Aufgabe, die Industrie einzubinden, also die Hersteller von Messgeräten und der bei Messprozessen und Analysen eingesetzte Software. Deren Produkte sind wesentlich für die FDM-Workflows. So soll im Forschungsablauf eine teilautomatisierte, harmonisierte Metadatenerfassung ermöglicht werden.

Erwartungen: Im Rahmen der 2. NFDI-Konferenz erhoffen wir uns einen produktiven Austausch im Sinne der Definition klarer Schnittstellen zwischen Konsortien, zu Querschnittsthemen sowie fachliche Anregungen von Experten.

## Vorgesehene Mitglieder des Konsortiums (Co-Sprecherinnen/Co-Sprecher und die weiteren, beteiligten Institutionen):

Co-Sprecher/in	Zugehörige Institution
Dr. Jörn Stenger (Sprecher) Mitglied des Präsidiums <a href="mailto:joern.stenger@ptb.de">joern.stenger@ptb.de</a>	Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB) Bundesallee 100 38116 Braunschweig
Dr. Holger Israel (Kontaktperson; Koordinator NFDI4Phys) Referat Q.11: Wissenschaftliche Bibliotheken <a href="mailto:holger.israel@ptb.de">holger.israel@ptb.de</a>	Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB) Bundesallee 100 38116 Braunschweig
Dr. Esther Tobschall (Co-Sprecherin) Fachreferentin für Physik <a href="mailto:esther.tobschall@tib.eu">esther.tobschall@tib.eu</a>	Technische Informationsbibliothek (TIB) Welfengarten 1 B 30167 Hannover
Prof. Dr. Harald Sack (Co-Sprecher) Bereichsleiter Information Service Engineering <a href="mailto:harald.sack@fiz-karlsruhe.de">harald.sack@fiz-karlsruhe.de</a>	FIZ Karlsruhe – Leibniz-Institut für Informationsinfrastruktur Hermann-von-Helmholtz-Platz 1 76344 Eggenstein-Leopoldshafen
Prof. Dr. Dirk Uhrlandt (Co-Sprecher) Leiter FB Materialien und Energie, Wiss. Vorstandsmitglied <a href="mailto:uhrlandt@inp-greifswald.de">uhrlandt@inp-greifswald.de</a>	Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie e.V. (INP) Felix-Hausdorff-Straße 2 17489 Greifswald
Frank Tristram (Co-Sprecher) Research Data Handling Officer <a href="mailto:frank.tristram@kit.edu">frank.tristram@kit.edu</a>	Karlsruher Institut für Technologie (KIT) Schlossplatz 19 76131 Karlsruhe
Dr. Uwe Kahlert Sprecher Arbeitsgruppe Information der DPG <a href="mailto:uwe@physik.rwth-aachen.de">uwe@physik.rwth-aachen.de</a>	Deutsche Physikalische Gesellschaft (DPG) Hauptstraße 5, 53604 Bad Honnef Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen (RWTH) Sommerfeldstraße / Otto-Blumenthal-Straße, 52074 Aachen
Dr. Matthias Fingerhuth NFDI und FDM-Prozesse <a href="mailto:matthias.fingerhuth@uni-due.de">matthias.fingerhuth@uni-due.de</a>	Landesinitiative fdm.nrw c/o Universitätsbibliothek Duisburg-Essen Universitätsstraße 9 45141 Essen
Dr. Kilian Schwarz Abteilung Informationstechnologie <a href="mailto:k.schwarz@gsi.de">k.schwarz@gsi.de</a>	GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung GmbH Planckstraße 1 64291 Darmstadt
Prof. Dr. Hans-Günther Döbereiner Institut für Biophysik <a href="mailto:hgd@biophysik.uni-bremen.de">hgd@biophysik.uni-bremen.de</a>	Universität Bremen Otto-Hahn Allee 28359 Bremen
Prof. Dr. Karin Jacobs Experimentalphysik und Zentrum für Biophysik <a href="mailto:k.jacobs@physik.uni-saarland.de">k.jacobs@physik.uni-saarland.de</a>	Universität des Saarlandes Campus E2 9 66041 Saarbrücken
Prof. Dr. Holger Frahm Chief Information Officer <a href="mailto:cio@uni-hannover.de">cio@uni-hannover.de</a>	Leibniz Universität Hannover (LUH) Appelstr. 2 30167 Hannover
Prof. Dr. Mario Agio Laboratory of Nano-Optics <a href="mailto:mario.agio@uni-siegen.de">mario.agio@uni-siegen.de</a>	Universität Siegen Walter-Flex-Str. 3 57072 Siegen
Dr. Britta Leven Leiterin der Physikalischen Anfängerpraktika <a href="mailto:leven@physik.uni-kl.de">leven@physik.uni-kl.de</a>	Technische Universität Kaiserslautern Erwin-Schrödinger-Str. 46 67663 Kaiserslautern
Dr. Marina Prenzel Science Manager <a href="mailto:marina.prenzel@rub.de">marina.prenzel@rub.de</a>	Ruhr-Universität Bochum (RUB) Universitätsstr. 150 44801 Bochum
Prof. Dr. Johann Kroha Professor für theoretische Physik <a href="mailto:kroha@physik.uni-bonn.de">kroha@physik.uni-bonn.de</a>	Universität Bonn Nussallee 12 53115 Bonn
Prof. Dr. Jörn Wilms Remeis-Sternwarte <a href="mailto:joern.wilms@sternwarte.uni-erlangen.de">joern.wilms@sternwarte.uni-erlangen.de</a>	Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg Sternwartstr. 7 96049 Bamberg
Dr. Stefan Krieg Jülich Supercomputing Centre (JSC) <a href="mailto:s.krieg@fz-juelich.de">s.krieg@fz-juelich.de</a>	Forschungszentrum Jülich GmbH (FZJ) Wilhelm-Johnen-Str. 52428 Jülich
Dr. Karsten Bothe Abteilungsleiter Photovoltaik <a href="mailto:bothe@isfh.de">bothe@isfh.de</a>	Institut für Solarenergieforschung GmbH (ISFH) Am Ohrberg 1 31860 Emmerthal