

## Rolle und Leistungen der Plattform MaterialDigital und ihre Wechselwirkung mit der aktuellen BMBF Ausschreibung MaterialDigital vom 24.05.2023 und Stichtag 31.08.2023

**Stand 15.06.2023;** Diese Handreichung fasst die Sicht und den Planungsstand der Plattformverantwortlichen zusammen. Im Falle von Widersprüchen gegenüber den Formulierungen im Ausschreibungstext gilt der Ausschreibungstext. Es gilt zu beachten, dass die Plattform MaterialDigital (PMD) bedingt durch die verschiedenen Projektphasen einer stetigen Weiterentwicklung unterliegt. Aktuelle Informationen finden Sie stets unter [www.materialdigital.de](http://www.materialdigital.de)

### **Inhalt**

- Zur Plattform MaterialDigital
  - Überblick Plattform MaterialDigital
  - Vision der Plattform
  - Ziel der Ausschreibung
- Zu den Wechselwirkungen zwischen Plattform & Projekten
  - Rechtliche Aspekte der Plattforminteraktion
  - Arbeitsbereich Community Interaktion
  - Arbeitsbereich Workflows
  - Arbeitsbereich Semantische Interoperabilität
  - Arbeitsbereich Architektur und IT-Infrastruktur

## Zur Plattform MaterialDigital

Der Zweck der Plattform MaterialDigital (PMD) ist, den Umgang mit Daten im Bereich der Materialwissenschaft und Werkstofftechnik zu vereinheitlichen. In Zukunft sollen Entwickler und Forschende im Stande sein, Datensätze, Fachwissen und Auswertungsmethoden Anderer nachzuvollziehen und wiederzuverwenden. Dazu entwickelt die PMD semantische Datenstrukturen, Laufzeit- und Entwicklungsumgebungen, sowie eine Infrastruktur, die geltende Prinzipien dezentraler Datenhaltung und -souveränität erfüllen.

Die PMD ist ein Verbundprojekt der Plattformträger, bestehend aus der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), des Fraunhofer-Instituts für Werkstoffmechanik (IWM), des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT), des Max-Planck-Instituts für Eisenforschung (MPIE), des Leibniz-Instituts für werkstofforientierte Technologien (IWT), sowie des Leibniz-

Institut für Informationsinfrastruktur (FIZ) Karlsruhe. Sie wird im Rahmen mehrerer angebundener Forschungsprojekte (“Use Cases”) anwendungsnah weiterentwickelt, auf neue Bereiche ausgeweitet und mit wissenschaftlichen Inhalten angereichert. Im Rahmen des aktuellen Förderauftrags sollen mit Hilfe der bisher erarbeiteten Konzepte gesamte Lebenszyklen von Materialien in gewählten Anwendungsfeldern industrienah abgebildet werden.

## Klärung Begrifflichkeiten:

<p>Plattform Material-Digital:</p>	<p>Die Plattform MaterialDigital (PMD) ist die Infrastruktur, die für einen einheitlichen Austausch und die Verknüpfung von Daten, Softwarelösungen und Ontologien zum Umgang mit Materialien notwendig ist. Sie stellt damit die vereinheitlichende technologische Basis dar, mit der Daten und Software aus verschiedenen Anwendungsfeldern miteinander verknüpft werden können. Die Plattform wird erstellt und repräsentiert durch die Plattformverantwortlichen und die geförderten Projekte.</p>
<p>Plattformverantwortliche/Plattform-träger:</p>	<p>Das Konsortium, das die Plattform MaterialDigital (PMD) seit ihrem Beginn im Juli 2019 betreut, bestehend aus der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), dem Karlsruher Institut für Technologie (KIT), dem Max-Planck-Institut für Eisenforschung (MPIE), dem Fraunhofer Institut für Werkstoffmechanik (IWM), dem Leibniz-Institut für Werkstofforientierte Technologien (IWT) und dem Leibniz-Institut für Informationsinfrastruktur Karlsruhe (FIZ).</p>
<p>Use Cases:</p>	<p>Anwendungsfälle, die auf Basis der Plattform implementiert, im Rahmen geförderter Projekte erzeugt und kompatibel mit der Plattform strukturiert werden.</p>
<p>Domänenexperten/Community:</p>	<p>Wissenschaftliche Expertinnen und Experten, die im Rahmen von Use Cases ihr Fachgebiet innerhalb der PMD (weiter-)entwickeln. Die Community als Ganzes prägt dabei die PMD sowohl durch ihren Beitrag als auch durch Partizipationsmethoden. Die Auswahl der in der PMD repräsentierten wissenschaftlichen Teilbereiche basiert auf den Beiträgen der Domänenexperten.</p>

Übergeordnetes Ziel der Anstrengung ist die Entwicklung einer nachhaltigen Dateninfrastruktur für die Materialwissenschaft und Werkstofftechnik. Diese Infrastruktur basiert auf dezentral kommunizierenden Serverinstanzen auf Basis sicheren (VPN) Netzes. Durch eine geteilte Vertrauensbasis können beteiligte Server sich dabei gegenseitig nach NutzerInnen individualisierte Lese-, Editier- sowie Ressourcennutzungsrechte erteilen. Dadurch garantiert die PMD Datensouveränität und Relevanz für industrielle Anwendungen. Forschungsdaten sowie Fachwissen legt die PMD auf Basis geteilter Ontologien strukturiert und gemäß der FAIR-Prinzipien

ab. Reproduzierbare Auswertungsroutinen bauen innerhalb gemeinsamer Laufzeitumgebungen auf den so strukturierten Informationen auf. Die PMD wird somit zentrales Vehikel zukünftigen wissenschaftlichen Erkenntnisgewinns. Für Projekte, die nachhaltige Daten- und Wissensstrukturierung zum Ziel haben, wird die PMD zum festen Bezugs- und Anlaufpunkt.

Die vom BMBF im Kontext der PMD am 24.05.2023 veröffentlichte [Bekanntmachung](#) zielt zunächst grundsätzlich darauf ab, "die Effizienz der Material- und Produktentwicklung in Deutschland zu steigern." Dadurch sollen gemäß Bekanntmachung Entwicklungszeiten verkürzt und die Qualität der Ergebnisse verbessert werden. Die Inhalte der Projekte sollten dabei im Rahmen der Ausschreibung stets auch als Use Cases für die PMD verstanden werden. Nur anhand der Projektbeiträge kann die Funktionalität der Plattform wachsen und neue Anwendungsgebiete entsprechend den individuellen Projektzielen abdecken. Die Projekte im Rahmen der Ausschreibung haben daher neben der eigenen Forschung auch stets die Weiterentwicklung der Plattform zum Ziel. Den Plattformträgern wird es nicht möglich sein, sämtliche Datenrepräsentationsansprüche der Projekte zu erfüllen. Die praktikabelste Herangehensweise, Use Cases im Rahmen der PMD zu repräsentieren, muss daher vor allem von den materialwissenschaftlichen Domänenexperten im Rahmen ihrer Förderung beantwortet werden.

## Zu den Wechselwirkungen zwischen Plattform & Projekten

Die Plattformträger stellen den Projekten das technologische Fundament der Plattform MaterialDigital in Form einer ersten prototypischen Version bereit. Diese berücksichtigt bereits zahlreiche Ansprüche der PMD-Vision.

Die Einbettung der Use Cases in die existierende PMD-Infrastruktur basiert auf der harmonisierten Bearbeitung mehrerer Teilgebiete, die mittlerweile identifiziert wurden. Hierzu zählen (1) die rechtlichen Aspekte der Plattforminteraktion, (2) der Arbeitsbereich Community Interaktion, (3) der Arbeitsbereich Semantische Interoperabilität, (4) der Arbeitsbereich Workflows sowie (5) Architektur und IT-Infrastruktur.

Für jedes Teilgebiet gilt es, effiziente Methoden und Ansätze zu entwickeln, die ein gemeinsames Vorankommen vieler Stakeholder ermöglichen. Heterogene Fachdisziplinen und Ansprüche über geografische und kommunikative Hürden hinweg sollen ebenfalls ermöglicht werden. Das plattformverantwortliche Konsortium empfiehlt der MaterialDigital-Community hierfür methodische Ansatzpunkte und lädt zu derer gemeinsamen Ausdifferenzierung im Rahmen der geförderten Projekte ein.

### **(1) Rechtlichen Aspekte der Plattforminteraktion**

Eine zentrale rechtliche Fragestellung wirft dabei schon zum aktuellen Zeitpunkt der Umgang mit Lizenzen auf, die für die heterogenen und zu verschiedenen Ausmaßen zugänglichen Plattformressourcen gelten. Laut Ausschreibungstext wird von den Zuwendungsempfängern im Rahmen der Projekte unter anderem erwartet „ihre Erkenntnisse aus den Projekten der

Innovationsplattform in geeigneter Weise zur Verfügung zu stellen“ (S.3). Die für die Plattform geeignete Aufbereitung der eigenen Ergebnisse impliziert dabei jedoch nicht etwa, dass sämtliche Ergebnisse auch im Rahmen der Plattform öffentlich zugänglich sein müssen. So hat sich die PMD insgesamt zum Ziel gesetzt auch unter Berücksichtigung industrieller Interessen eine flexible Infrastruktur zu entwickeln, die Zugangsbeschränkungen auf sämtliche Ressourcen organisations- und usergranular ermöglicht. Das plattformverantwortliche Konsortium weist darauf hin, dass die Implementierung von Zugangsbeschränkungen auf Ressourcen aus informationstechnologischer Perspektive komplexer ist als Open Access und insofern bei den entsprechenden Projekten ein erhöhtes Maß an Expertise notwendig sein kann.

Die Auswahl passender Lizenzmodelle zur Verwendung sowohl durch die PMD als auch im Kontext weiterer Beiträge (z.B. Code, Ontologien, Spezifikationen) wird durch die Plattformverantwortlichen nach Möglichkeit unterstützt. Während die PMD grundsätzlich zum Ziel hat gemeinsame Lizenzstandards für Ressourcen unter Open Access besser zu verstehen, zu entwickeln und zu empfehlen wird dies für individuell eingeschränkte Lizenzierungsbedingungen einzelner Projekte kaum möglich sein. Die Plattform kann in diesem Rahmen den Zugang nur technologisch ermöglichen. Die Lizenzierung unter Ausgestaltung rechtlicher Gesichtspunkte muss bilateral zwischen Ressourcenbereitstellenden und -nutzenden Teilnehmern erfolgen.

Allgemeine Fragen zur Lizenzierung werden in Zukunft auf den technologischen Funktionalitäten der Plattform basieren. Hierzu zählen unter anderem:

- Unter welchen Bedingungen dürfen verschiedene Stakeholder Daten- sowie Rechenressourcen voneinander nutzen?
- Wer ist Besitzer von Informationen, die mit Hilfe von Daten Anderer erzeugt wurden?
- Wo und wie werden Daten verarbeitet und vorgehalten, die nach der DSGVO unter besonderem Schutz stehen und dennoch für föderierte Abfragen zugänglich sein müssen?

Es gilt diese und weitere Unklarheiten nach Anlaufen der Förderung gemeinsam mit den Projekten und der Community zu klären.

## **(2) Arbeitsbereich Community Interaktion**

Unser Ziel ist den Austausch mit der relevanten Material-Community aus Forschenden und Entwickelnden zu pflegen und zu erweitern. Die Plattform strebt eine offene Community mit Austausch auf Augenhöhe an, ermöglicht einen Wissenstransfer zwischen allen Parteien und bietet damit einen Mehrwert für alle Beteiligten. Der Arbeitsbereich ist in die Bereiche Vernetzung, Public Relations und Community Engagement & Support aufgeteilt.

## Klärung Begrifflichkeiten:

---

Community Engagement & Support:	Der Bereich umfasst den Wissenstransfer für die Community, durch bspw. Tutorials, Guidelines und Seminarreihen. Ebenfalls gehört die Skalierung der Einbindung von Stakeholdern dazu und das Forum für den Austausch der Community.
Public Relations:	Die Information und der Austausch mit der Community über verschiedene Kanäle (Website, LinkedIn, Twitter) gehört zum Bereich Public Relations (PR). Ebenfalls wird Verbreitungs- und Informationsmaterial professionell vor- und aufbereitet (Bsp. Marketingmaterial, Imagefilm, Flyer).
Vernetzung:	Zur Vernetzung gehört die Sammlung relevanter Veranstaltungen für die Community und Darstellung auf der Webseite sowie anderer Kommunikation. Die PMD organisiert auch eigene Veranstaltungen wie Vollversammlungen, Arbeitstreffen und Austauschrunden und beteiligt sich an externen Veranstaltungen wie Messen. Es wird zur Vernetzung ein gemeinsames Netzwerk zur Digitalisierung erarbeitet.

---

## Erläuterung zu den Angaben in der Ausschreibung

Eine genauere Aufschlüsselung der resultierenden Arbeitsteilung zwischen dem Projekt MaterialDigital und weiteren Zuwendungsempfängern entsprechend der Vorstellung der Plattformverantwortlichen ist im Folgenden dargestellt.

**Ausschreibung:** „Die Fördermaßnahme fußt daher auf einer Plattform zur Strukturierung und Begleitung der Aktivitäten“ (2.2)

### ***Konsequenz für Plattform:***

- Das Team der PMD moderiert und koordiniert, um die Weiterentwicklung der Plattform im Multi-Stakeholder-Gefüge auf Basis des Konsensprinzips zu ermöglichen. Die PMD stellt geeignete Arbeits- und Strukturierungsmethoden, sowie technologische Ansatzpunkte für die Initiative bereit.

## ***Konsequenz für Zuwendungsempfänger:***

- Die Mitwirkung der Zuwendungsempfänger bei der Plattformentwicklung ist genauso Teil der Projektarbeit wie die Erarbeitung des eigenen Use Cases. Zuwendungsempfänger arbeiten mit der PMD zusammen, um ihre Bedürfnisse zu nennen und spezifische Anforderungen abzubilden.

**Ausschreibung:** „Es sind auch Aktivitäten der Innovationsplattform im europäischen/weltweiten Kontext vorgesehen, ebenso Diskussionen und Workshops zu spezifischen Themen“. (2.2)

## ***Konsequenz für Plattform:***

- Die Plattform baut die strategische Planung der Vernetzung innerhalb der Initiative MaterialDigital weiter aus.
- Die Plattform plant und organisiert Veranstaltungen zur Vernetzung, Diskussion und Austausch innerhalb der Initiative MaterialDigital.

## ***Konsequenz für Zuwendungsempfänger:***

- Die Zuwendungsempfänger arbeiten aktiv bei Aktivitäten zur Vernetzung innerhalb der Initiative MaterialDigital mit und tauschen sich aus (Teilnahme an Arbeitstreffen oder Austauschrunden der PMD).

**Ausschreibung:** „Die Zuwendungsempfänger sind daher verpflichtet [...] mit dem Träger der Innovationsplattform MaterialDigital zusammenzuarbeiten“ (6)

## ***Konsequenz für Plattform:***

- Die Plattform stellt eine zugängliche und zuverlässige Kommunikations- und Beratungsumgebung bereit.
- Die Plattform organisiert regelmäßig stattfindende Treffen zum Austausch innerhalb der Initiative MaterialDigital.

## ***Konsequenz für Zuwendungsempfänger:***

- Die Verantwortung für die Informationsbeschaffung unterliegt proaktiv nach dem „Pull“-Prinzip den Zuwendungsempfängern.
- Die Zuwendungsempfänger nehmen aktiv an Treffen der verschiedenen HAPs teil und sicher so einen Austausch und unterstützen den Wissenstransfer.

**Ausschreibung:** „sind die Zuwendungsempfänger verpflichtet, an Veranstaltungen der Innovationsplattform (Workshops, Weiterbildungen etc.) teilzunehmen sowie sich inhaltlich zu beteiligen. Jeweilige Zwischenstände der Vorhaben sollen dort im Rahmen von Statusberichten präsentiert werden.“ (6)

**Konsequenz für Plattform:**

- Die Plattform organisiert Veranstaltungen mit Beteiligung aller Projekte und kommunizierter Ansprechpersonen der Projektteams.
- Die Plattform kommuniziert frühzeitig die Aufgaben und Beteiligungen der Projekte und gibt gegebenenfalls Vorgaben zur einheitlichen Darstellung oder inhaltlichen Aufbereitung.
- Die Plattform stellt die Infrastruktur zur Ablage bereit und stellt sicher, dass die Unterlagen und Materialien auffindbar sind. Ebenfalls übernimmt die Community die Kommunikation in die Community hinein.

**Konsequenz für Zuwendungsempfänger:**

- Die Zuwendungsempfänger kommunizieren der Plattform eigenverantwortlich die Verantwortlichen bzw. Ansprechpersonen innerhalb der Projektteams für jeden Arbeitsbereich.
- Die Zuwendungsempfänger nehmen an der Planung und dem Austausch innerhalb der Initiative MaterialDigital (monatliche Communitytreffen), sowie an Arbeitstreffen teil, sofern es die Projektteams thematisch betrifft (Workflows, Ontology Playground, Architektur).
- Eine aktive Teilnahme bei Veranstaltungen und ein anschließendes Teilen der präsentierten Materialien innerhalb der Community werden vorausgesetzt.

### Zur Zusammenarbeit zwischen Zuwendungsempfänger und Plattformträger

Die Plattformträger sind bemüht, abseits der vielseitigen technologischen Herausforderungen auch eine Arbeitsmethodik und -unterstützung zu etablieren, die eine enge Zusammenarbeit aller Projekte an der PMD ermöglicht.

Es haben sich Wege zur Zusammenarbeit mit den ersten Projektrunden ergeben, die sich bewährt haben. Mittel zur Sicherstellung der effektiven Zusammenarbeit der Projekte untereinander und mit der Plattform sind einzuplanen. Ein monatlich stattfindendes Communitytreffen beispielsweise zum Austausch und gemeinsam Arbeit hat sich bewährt.

Weitere Einzelheiten und genauere Möglichkeiten werden gern nach Bewilligung näher erläutert.

## (3) Arbeitsbereich Workflows

Ziel ist laut Ausschreibung die Etablierung von digitalen Workflows im Sinne des dezentralen Daten- oder Simulationskonzepts durch aktive Agenten innerhalb der Software-Umgebung der Innovationsplattform. Dabei ist die Nachhaltigkeit der Software-Lösungen und der einheitliche Zugriff auf Daten und Tools entscheidend. Die Plattform stellt zu diesem Zweck zwei initiale Workflowumgebungen mit den Namen „pyiron“ und „Simstack“ zur Verfügung. Von den Zuwendungsempfängern wird erwartet ihre Lösungen so zu gestalten, dass sie innerhalb einer dieser Workflowumgebungen lauffähig werden.

### Klärung Begrifflichkeiten:

Workflow-Umgebung	Auf einer PMD Server Instanz installierte Software, innerhalb derer weitere Softwaretools ausgeführt und in Simulationsprotokollen kombiniert werden können. Durch Workflowumgebungen werden einheitliche Schnittstellen geregelt.
Software-Tool	Einzelnes Programm für die Bearbeitung einer bestimmten materialwissenschaftlichen Aufgabe. Es wandelt einen wohldefinierten Input in einen wohldefinierten Output um. Beispiele sind DFT- oder FEM Codes.
Simulationsprotokoll	Realisierung eines materialwissenschaftlichen Workflows in einem Computerprogramm.
Zentrale PMD-Instanz (PMD-C)	Am KIT eingerichtete PMD-Instanz, auf der die Workflowumgebungen dauerhaft laufen und auf dem alle Tools installiert und getestet werden können.

### Erläuterung zu den Angaben in der Ausschreibung

Eine genauere Aufschlüsselung der resultierenden Arbeitsteilung zwischen dem Projekt MaterialDigital und weiteren Zuwendungsempfängern entsprechend der Vorstellung der Plattformverantwortlichen ist im Folgenden dargestellt.



**Ausschreibung:** Es sind im Rahmen des Vorhabens vorrangig die Werkzeuge, Methoden und Standards, die die Innovationsplattform bereitstellt, zu nutzen (6)

**Konsequenz aus Sicht der Workflows:**

- Diese Aussage betrifft insbesondere die Software-Umgebungen die nachfolgend erläutert sind.

**Ausschreibung:** Etablierung von digitalen Workflows im Sinne des dezentralen Daten- oder Simulationskonzepts durch aktive Agenten innerhalb der Software-Umgebung der Innovationsplattform

**Konsequenz für Plattform:**

- Es werden die Software-Umgebungen „pyiron“ und „SimStack“ zur Verfügung gestellt. Diese dienen der Programmierung und Ausführung von Simulationsprotokollen. Für „pyiron“ ist diese Umgebung durch ein Web-Interface und Jupyter Notebooks benutzerfreundlich sichergestellt. Für „SimStack“ ist ein Client frei verfügbar, der Workflows sowohl auf einem zentralen als auch auf einem vom Zuwendungsempfänger betriebenen SimStack Server steuern kann.

**Konsequenz für Zuwendungsempfänger:**

- Für jede Software-Lösung müssen die Voraussetzungen geschaffen werden, damit sie auf einer der Workflowumgebungen „pyiron“ oder „SimStack“ lauffähig ist. Es wird empfohlen, dass dies über ein Python-Interface (idealerweise Jupyter) erfolgt. Es wird nicht ausgeschlossen, dass die hier geschaffenen aktiven Agenten von weiteren Serverumgebungen außerhalb der Plattform zusätzlich unterstützt werden. Auch experimentelle Prozessketten sollten in ähnlicher Form in diese Workflowumgebungen integriert werden können, was auch über die Verbindung zu einem ELN (Electronic Lab Notebooks) umgesetzt werden kann.

**Ausschreibung:** „Aktuelle Fragestellungen der Materialforschung sollen durch „simulations-“ oder „datenbasierte“ Modelle exemplarisch auf Basis der Architektur für verteilten Ressourcenzugriff, die die Innovationsplattform zur Verfügung stellt abgebildet und an konkreten Beispielen validiert werden.“ (2.1)

**Konsequenz für Plattform:**

- Es wird auf der Plattform MaterialDigital-Central (PMD-C) Instanz ausreichend Speicherplatz für Daten geben. Die PMD-C Instanz stellt die Workflowumgebungen zur Verfügung, die innerhalb von Containern genutzt werden können. Die Verwendung der Umgebung stellt automatisch (ohne, dass der Anwender Details kennen muss) sicher, dass die Daten konsistent gespeichert werden und die dazugehörigen Berechnungen auf einem Cluster ausgeführt werden.

**Konsequenz für Zuwendungsempfänger:**

- Der Zuwendungsempfänger sollte einen eigenen PMD-S Server zur Erzeugung und Ausführung der Modelle einrichten oder dafür die PMD-C Instanz nutzen (Ausnahme). In einem Deployment Guide wird erläutert, wie lokale PMD-S Instanzen als Softwaresack aufgesetzt werden können und wie der verteilte Ressourcenzugriff technisch realisiert wird.

**Ausschreibung:** „Es sollen im „App-Store“ der Innovationsplattform Modelle entstehen, die in der Lage sind, komplexe Workflows über die zugrundeliegende Architektur auf industrie-relevante „echte“ Daten anzuwenden.“ (2.1)

**Konsequenz für Plattform:**

- Zum Teilen und Verwalten von Tools steht ein Repository mit Docker-Konfigurationen zur Verfügung. Die Workflowumgebungen werden im Conda Community Channel zum Download bereitgestellt, um eine reibungslose Installation auf verschiedenen Computersystemen zu ermöglichen. Die Tools werden entsprechend ihrer Abhängigkeiten integriert. In einem „Workflow-Store“ können Simulationsprotokolle oder auch deren Einzelschritte entsprechend der dort angegebenen Regel geteilt werden.

**Konsequenz für Zuwendungsempfänger:**

- Software-Lösungen (Tools) sollten als Conda-Paket zur Verfügung gestellt werden. Für jedes Tool muss es ein einziges Shell-Script geben, das aus dem Input den Output generiert. Die Tools sollten mit Metadaten/semantischen Informationen insb. zu Input und Output versehen werden, die entsprechend noch zu schaffender PMD Standards in den Workflow-Store integriert werden.

Erläuterung Pyiron Workflowumgebung

Um die Methodenentwicklung in der rechnergestützten Materialwissenschaft zu koordinieren und die bestehenden Methoden in eine gemeinsame Plattform zu integrieren, wird ein Python basiertes Framework namens pyiron entwickelt. Es bietet alle notwendigen Werkzeuge, um

komplexe Simulationsprotokolle, die verschiedene Computercodes kombinieren und Millionen von separaten Rechnungen auf leistungsstarken Computerclustern durchführen können, interaktiv auszuführen. Gleichzeitig ermöglicht pyiron ähnlich einer integrierten Entwicklungsumgebung (IDE), diese Simulationsprotokolle interaktiv zu entwickeln, zu implementieren und zu testen. Durch die Integration von strukturierten und unstrukturierten Daten, Metadaten und Workflows liegen diese innerhalb derselben Plattform vor und werden daher automatisch in einer effizienten hierarchischen Datenbank abgelegt. Dadurch wird die komplette materialwissenschaftliche Expertise sowohl der Entwickler als auch der Anwender in einer standardisierten Ontologie konserviert und zugänglich gemacht.

Die Grundidee hinter diesem Framework ist es, ein einziges Werkzeug mit einer einheitlichen Schnittstelle für die verschiedensten Simulationscodes sowie Analyse- und Visualisierungstools bereitzustellen. Die Verfügbarkeit dieser IDE ermöglicht es dem Benutzer, sich auf die Wissenschaft zu konzentrieren, anstatt sich mit technischen Details wie Ein-/Ausgabeformaten der Codes und Tools befassen zu müssen.

#### Weiterführende Links:

- [MPIE Informationsseite zu pyiron](#)
- [Dokumentation](#)
- [Github project - Open source Version](#)

#### Erläuterung SimStack Workflowumgebung

Eine zentrale Schwierigkeit in der Einbindung von Materialsimulationen in den Produktdesign-Zyklus besteht in der Notwendigkeit, auf jeden Anwendungsfall maßgeschneiderte Simulationsworkflows, die üblicherweise aus mehreren Modulen bestehen, einzubinden. Darüber hinaus erfordert die Ausführung verfügbarer Patchwork-Lösungen spezialisiertes Know-How sowohl in der Methodik, als auch in der Bedienung von Großrechnern.

Die Workflow-Umgebung SimStack ermöglicht die effiziente Gestaltung und Anpassung komplexer Workflows („rapid prototyping“) mit Softwaremodulen verschiedener Anbieter per Drag-and-Drop, wobei nur für den jeweiligen Use-Case relevante Parameter exponiert werden. Zusammen mit der automatisierten Ausführung der Workflows auf Großrechnern wird hierdurch die Komplexität für den Endnutzer und die benötigte Expertise minimiert. Dies ermöglicht beispielsweise den Transfer komplexer, wissenschaftlicher Multiskalenmethoden in die Industrie.

#### Weiterführende Links:

- [Simstack](#)
- [Nanomatch](#)
- [Use Cases](#)

#### **(4) Arbeitsbereich Semantische Interoperabilität**

Ontologien dienen innerhalb der PMD der Repräsentation inhaltlicher Bezüge aus Materialwissenschaft und Werkstofftechnik. Sie dienen zur einheitlichen, standardisierten und anpassbaren Datenorganisation. Ontologisch vorgehaltenes Wissen in Form eines Wissensgraphen ermöglicht so FAIRe Datennachnutzung, neue Analysemethoden, sowie die Erkenntnisgewinnung selbst, wie mit Hilfe von Reasoning. Dabei werden, bspw. aufgrund von Transitivität logische Inferenzen zwischen semantischen Tripeln abgeleitet. Aufgrund ihrer Komplexität findet die Ontologie-Entwicklung nicht isoliert statt, sondern wird als gemeinsame Anstrengung der materialwissenschaftlichen Community in Angriff genommen.

##### Klärung Begrifflichkeiten:

---

Ontologie:	Explizite, formelle Strukturierung geteilter Konzepte, die eine Domäne ausmachen. Eine Ontologie enthält dabei inhaltliche Verknüpfungen, entweder deskriptiv oder formell. Sie geht über eine reine taxonomische Kategorisierung hinaus und kann dadurch mehr leisten als eine Standardisierung. Eine Ontologie für die Materialwissenschaft und Werkstofftechnik muss wann immer möglich den skalenübergreifenden Charakter der Disziplin berücksichtigen. Sie muss in sich über eine relationale Beschreibung hinaus einen logischen Mehrwert bieten.
Anwendungs- ontologie	Eine (Teil-)Ontologie, die spezielle Konzepte für einen definierten Anwendungsfall beinhaltet und strukturiert. Es ist davon auszugehen, dass pro Use Case der PMD und somit je gefördertem Projekt mindestens eine Anwendungsontologie erstellt werden muss, um die erzeugten Informationen wiederauffindbar zu integrieren.
Wissensgraph	Der Wissensgraph repräsentiert die gesammelten Informationen, die anhand von Ontologien strukturiert und instanziiert wurden. Mittels Wissensgraphen können große Datenmengen aggregiert und gesammelt Erkenntnisse abgeleitet werden.
FAIR	Nach Wilkinson et al. (2016) sollten Daten <b>F</b> indable, <b>A</b> ccessible, <b>I</b> nteroperable, sowie <b>R</b> eusable sein. Das Akronym ist in der jüngeren Vergangenheit populär geworden, um die übergeordneten vereinheitlichten Datenorganisationsziele der Wissenschaft zusammenzufassen.

---

Folgende grundlegende Prinzipien zur Entwicklung der Ontologie sind nach Ansicht der Plattformträger zentral:

- Ontologien für die Materialwissenschaft und Werkstofftechnik müssen von Domänenexperten und somit der jeweiligen Community, den Beitragenden und letztlich Nutzern und Nutzerinnen definiert werden. Typischerweise findet diese Definition in einem „Bottom-Up“ Prozess statt. Dabei tragen Informationswissenschaften nur die grundlegende Struktur als Fundament des benötigten Datenraums bei.
- Ontologien für die Materialwissenschaft und Werkstofftechnik müssen gemäß geltender Forschungsgrundsätze auf eine Weise entwickelt werden, die niemals Vollständigkeit impliziert, sondern stets Adaptivität und weiteres Wachstum ermöglicht.
- Ontologien für die Materialwissenschaft und Werkstofftechnik müssen anwendungsorientiert im Rahmen von Teildomänen beginnen, organisch wachsen und sich so langfristig zu einer stärker gesamtheitlichen Abbildung der kompletten wissenschaftlichen Disziplin fügen.
- Der Nutzen einer entwickelten Ontologie muss sich in erster Linie an deren praktischem Anwendungsnutzen für die Ziele Daten- und Wissensstrukturierung, -zugänglichkeit, -wiederverwendbarkeit und -auswertung bemessen. Eine Ontologie ohne Anwendungsnutzen ist irrelevant. Datenstandardisierung ist dabei nur eine der erwarteten Nutzendimensionen der Ontologie.

### Vorhandene Ressourcen und Herangehensweise an die Ontologie Entwicklung

Die Plattform MaterialDigital und die verbundenen Projekte haben bereits erste Expertise zur Entwicklung geeigneter Ontologien sammeln können. So zeigt sich immer wieder, dass diese vom speziellen Konzept ausgehen und darauf basierend in allgemeinere Konzepte abstrahiert werden müssen, um die Relevanz des Entwickelten sicherzustellen. Basierend auf den Erfahrungen der 1. Förderungsphase und der stetigen Community Interaktion (Ontology Playground) hat die PMD die sogenannte PMD Core Ontology (PMDco) entwickelt und bereitgestellt. Die PMDco dient für sämtliche externe Anwendungsfälle als übergeordnete Struktur und stellt allgemeine MSE-Konzepte bereit. Dies wird ermöglicht, indem spezielle Konzepte der Anwendungsfälle übergeordneten Klassen zugeordnet werden. So ist beispielsweise das Konzept „Prozess“ anwendungsagnostisch und daher ein Konzept der PMDco. Die PMDco hilft in Zukunft dabei, heterogene Anwendungsfälle gleichsam zu strukturieren. Sie ist unter <https://github.com/materialdigital/core-ontology> in Version 2.0 verfügbar. Es ist angestrebt, dass die PMD Core Ontologie gemeinsam mit allen Projektbeteiligten iterativ weiterentwickelt wird, um Unzulänglichkeiten bei der Repräsentation spezieller, doch für bestimmte Anwendungsfälle notwendiger, Konzepte gerecht zu werden. Dafür führt die PMD geeignete Kollaborationsforen (Ontology Playground) durch und entwickelt zusätzliche Kurationsmethoden.

Aus allgemeiner Sicht auf die Arbeit mit Ontologien stellt die PMDco keine Top-Level-Ontologie (TLO) dar. Diese sind in der Regel domänenunabhängig bzw. -neutral. Beispiele für TLOs

sind die „[Basic Formal Ontology](#) (BFO)“ und die „[European Materials Modelling Ontology](#) (EMMO)“. Mittelfristig ist geplant, ein Mapping zwischen diesen und der PMDco zu gewährleisten, um die PMDco so auch in den größeren Kontext der forschungsübergreifenden, rasch wachsenden Ontologie-Aktivitäten einzusortieren. Es ist aus diesem Grund aus Sicht der PMD durchaus möglich, andere Ontologien als die PMDco zur abstrakteren Einordnung der eigenen Anwendungsontologie zu verwenden. Allerdings zeigt die Erfahrung, dass eine zu abstrakte Ansiedelung die Arbeit erschwert.

Die Entwicklung der eigenen Anwendungsontologie, sowie deren Instanziierung und Verwendung im Rahmen des entwickelten Systems wirft mehrere Fragen auf, sowohl bzgl. der Entwicklungsmethodik als auch der verwendbaren Werkzeuge. Die PMD hat sich zum Ziel gesetzt, hierbei mit Hilfe ihrer bereits gesammelten Erfahrung die Projekte zu unterstützen. Die PMD wird jedoch keine fertig verwendbare Einheitslösung bereitstellen können. Die Mitarbeit der geförderten Projekte an der (Weiter-)Entwicklung der Prozesse und des vorhandenen Toolstacks ist daher unumgänglich. Grundsätzlich ist zu beachten, dass der hohe Koordinierungsaufwand der PMD nur durch eine proaktive Herangehensweise durch die Projekte geleistet werden kann.

#### Erläuterung zu den Angaben in der Ausschreibung

Eine genauere Aufschlüsselung der resultierenden Arbeitsteilung zwischen dem Projekt MaterialDigital und weiteren Zuwendungsempfängern entsprechend der Vorstellung der Plattformverantwortlichen ist im Folgenden dargestellt.

#### **Ausschreibung:**

„Entwicklung einer konkreten Ontologie („gemeinsame Sprache“) für eine Materialklasse: Über den Spezialfall eines Materials hinaus abstrahierend sollen in der Ontologie alle relevanten Eigenschaften und Prozesse in Bezug auf eine Materialklasse (z. B. definierte Polymerklassen, Metalllegierungen, Gläser etc.) erfasst und abgebildet werden“ (2.1)

„...müssen die Zuwendungsempfänger ihre Erkenntnisse und Ergebnisse aus den Projekten der Innovationsplattform in geeigneter Weise zur Verfügung stellen.“ (2.2)

#### **Konsequenz für Plattform:**

- Die PMD stellt die PMD Core Ontologie (PMDco) als semantische Zwischenebene mit abstrakteren, essentiellen Klassen und Beziehungen bereit, um die entwickelten Applikationsontologien und deren domänenspezifische Klassen und relevante Beziehungen zu Materialien, Prozessen und Eigenschaften interoperabel anzubinden.
- Sie bietet eine Infrastruktur zur Publikation der entwickelten und angebotenen Applikationsontologien im öffentlichen GitHub der PMD mit verständlicher Dokumentation für die Nachnutzung an.

**Konsequenz für Zuwendungsempfänger:**

- Applikationsontologien bzw. eines PMDco-Moduls auf der Basis der PMDco sollen entwickelt werden. Eine aktive Zusammenarbeit und Beiträge in der Weiterentwicklung und Konsolidierung der PMDco werden erwartet. Veröffentlichung(en) sind nach Best-Practices (z.B. nur versionierte, dokumentierte, dereferenzierbare, validierte OWL-Publikationen) und dadurch nachhaltig der PMD zur Verfügung zu stellen.

**Ausschreibung:** „sollen in enger Abstimmung mit der Innovationsplattform MaterialDigital (siehe Nummer 2.2) und den anderen geförderten Vorhaben aus allen Förderaufrufen Software-Tools erstellt werden, um mit der Ontologie arbeiten zu können.“ (2.1)

**Konsequenz für Plattform:**

- Bereitstellen und Dokumentieren der bereits entwickelten Werkzeuge für die Verwendung durch die Zuwendungsempfänger.

**Konsequenz für Zuwendungsempfänger:**

- Entwicklung von Software und Werkzeugen, um Forschungsergebnisse ontologiekonform abzuspeichern und nachnutzbar zu publizieren. Ggf. Verwendung der durch die PMD bereits zur Verfügung gestellten Mittel. Die Software und Werkzeuge sollen als open source bereitgestellt werden.

**Ausschreibung:** „Schließlich soll ein Kuratierungskonzept erarbeitet und demonstriert werden, um die Ontologie langfristig anzupassen sowie in einen größeren Kontext einzubetten und gleichzeitig kompatibel zu anderen Materialklassen halten zu können.“ (2.1)

**Konsequenz für Plattform:**

- Die PMD stellt vielseitige Foren für den interaktiven Austausch bereit: Ontology Playground, Forum, GitHub Funktionalitäten, und weitere Community Formate.

**Konsequenz für Zuwendungsempfänger:**

- Community aufbauen und am interaktiven Austausch über die von der Plattform bereitgestellten Möglichkeiten beteiligen. Treiben der Weiterentwicklung (domänenspezifische Konzepte und Beziehungen) der im Use-Case entwickelten Ontologien.

**Ausschreibung:** „Es wird erwartet, dass die Ontologie im Rahmen des Vorhabens am praktischen Beispiel angewendet, d. h. mit realen Daten der zugrunde liegenden Materialklasse verknüpft wird. Die semantische Abfrage von Materialinformationen auf Basis der Ontologie soll demonstriert werden.“ (2.1)

**Konsequenz für Plattform:**

- Integration valider Outputs der Zuwendungsempfänger in zentrale PMD-Demonstratoren um die Sichtbarkeit zu amplifizieren.

**Konsequenz für Zuwendungsempfänger:**

- Bereitstellung von ontologie-konformen Referenzdaten für die im Projekt beschriebenen Inhalte. Hierfür sollten von der PMD bereitgestellte Werkzeuge (z.B. OntoDocker) genutzt werden. Die Daten sollen sowohl als RDF/OWL Serialisierung abrufbar und per SPARQL abfragbar sein. Die Datensätze sollen durch einen globalen Identifier (z.B. DOI, Zenodo Id, w3id, o.ä.) identifizierbar sein. Es sollen Beispiel-SPARQL-Abfragen angegeben werden, die die Kompetenzfragen beantworten.

**Weiterführende Links:**

- [PMDco v2.0.0](#)
- [PMD Github](#)



## (5) Arbeitsbereich Architektur und IT-Infrastruktur

Der Träger der Innovationsplattform wird die notwendige Infrastruktur (generelle Konzepte zur Materialdatenverarbeitung und zu Datenstrukturen, Basistools, eine Architektur für verteilten Ressourcenzugriff inklusive Sicherheitskonzepten, siehe auch Nummer 2.1) sowie erste Daten und Ontologieentwürfe aus den ersten beiden Förderaufrufen (MaterialDigital 1 und 2) bereitstellen, um ein standardisiertes, gemeinsames und systematisches Vorgehen aller relevanten Akteure aus dem Materialforschungsbereich in Deutschland sicherzustellen. Dies wird durch PMD Infrastruktur-Komponenten ermöglicht. Die zur Verfügung gestellten Software-Komponenten werden inkl. Dokumentation bereitgestellt, können von den Projekten selbst betrieben werden und so ein Teil der Plattform werden. Die Zuwendungsempfänger erhalten Unterstützung und Hilfestellung bei allen Fragen der Datenerstellung, Datenanalyse und bei dem Austausch von Daten sowie bei der Nutzung der bereitgestellten Infrastruktur.

### Weiterführende Links:

- <https://github.com/materialdigital/pmd-server>
- <https://materialdigital.github.io/pmd-server/>

**Ausschreibung:** „Es sind im Rahmen des Vorhabens vorrangig die Werkzeuge, Methoden und Standards, die die Innovationsplattform bereitstellt, zu nutzen“ (S.5)

#### **Konsequenz für Plattform:**

- Die Plattform stellt einen “App-Store” bereit, der zentrale Komponente und Werkzeuge eines PMD-S zur Verfügung stellt. In einem Deployment Guide ist das initiale Aufsetzen und die Konfiguration eines PMD-S inklusive aller Basiskomponenten beschrieben.

#### **Konsequenz für Zuwendungsempfänger:**

- Die Informationsbeschaffung wird proaktiv nach dem „Pull“-Prinzip (“Holschuld”) erfolgen; d.h. die Verantwortung liegt bei den Zuwendungsempfängern.

**Ausschreibung:** „Dafür sollte ein dezentraler Datenserver in Betrieb genommen werden.“ (2.1)

#### **Konsequenz für Plattform:**

- Datenserver-Komponenten und Dokumentation werden von der Plattform bereitgestellt und die Anwendung wird unterstützt.

**Konsequenz für Zuwendungsempfänger:**

- Der Zuwendungsempfänger sollte einen eigenen PMD-S Server zur Erzeugung und Speicherung eigener Simulationsdaten einrichten oder dafür eine andere PMD-S Instanz nutzen (Ausnahme). In einem Deployment Guide wird erläutert, wie lokale PMD-S Instanzen als Softwarestack aufgesetzt werden können.

**Ausschreibung:** Um die Basis für Material-Ontologien und standardisierte Schnittstellen zu schaffen, die einen effizienten Austausch von Daten und Begrifflichkeiten, aber auch von digitalen Methoden untereinander ermöglichen, müssen die Zuwendungsempfänger ihre Erkenntnisse und Ergebnisse aus den Projekten der Innovationsplattform in geeigneter Weise zur Verfügung stellen (siehe auch Nummer 6).

**Konsequenz für Plattform:**

- Die Plattform stellt Schnittstellen zum kollaborativen Arbeiten für Projekte bereit.

**Konsequenz für Zuwendungsempfänger:**

- Die Zuwendungsempfänger müssen ihre Erkenntnisse und Ergebnisse nach den FAIRen Prinzipien zur Verfügung stellen. Die Erkenntnisse und Ergebnisse müssen nachhaltig auffindbar, zugänglich und benutzbar in der Plattform bleiben.

**Ausschreibung:**

Die Zuwendungsempfänger sind außerdem verpflichtet, alle Daten(sammlungen) sowie dazugehörige Metadaten, die im Rahmen der öffentlichen Förderung entstehen (beispielsweise durch experimentelle Messungen oder Simulationen), in die aufgebaute Infrastruktur der Innovationsplattform für verteilte Materialdaten einzupflegen und damit auch für die Allgemeinheit auffindbar zu machen. Dabei sind die FAIR-Prinzipien für wissenschaftliches Datenmanagement zu berücksichtigen.

Das bedeutet insbesondere, dass die Daten zwar auffindbar sind, eine Einsicht in Daten(sammlungen) jedoch nur nach Einwilligung des Eigners erfolgen kann und wird.

**Konsequenz für Plattform:**

- Die Plattform ermöglicht ein Rechtemanagement.
- Um heterogene Ergebnisse grundsätzlich in die Plattform einpflegen zu können, muss diese eine auf vielfältige Weise nutzbar und flexibel anpassbare Infrastruktur ermöglichen.

**Konsequenz für Zuwendungsempfänger:**

- Die Zuwendungsempfänger pflegen ihre Daten (in Form von Metadaten) ein.

- Die Zuwendungsempfänger verwalten Zugriffsrechte auf die von ihnen bereitgestellten Daten.
- Das Forschungsprojekt ist dann abgeschlossen, wenn es im Rahmen der Plattform verfügbar und integriert ist. Die unstrukturierte Bereitstellung der Forschungsergebnisse ist nicht ausreichend. Die Identifizierung des besten Weges, um diesen Zugang zu ermöglichen (bspw. als instanziierte Ontologie) ist vorrangig Aufgabe der Zuwendungsempfänger im Austausch mit der Plattform.