

nanoDaten

Inhalt

Nanodaten an der BAM	1
Referenzdaten	2
Nano-Referenzdatenbank.....	3
Nano-SOP-Datenbank	3
Nano-Referenzalgorithmen	3
Kontakt	3

Nanodaten an der BAM

Um die Sicherheit von Produkten zu erhöhen, untersucht die BAM, wie Nanomaterialien entworfen, hergestellt, charakterisiert und eingesetzt werden können. Dazu werden Tests zur Freisetzung dieser Materialien und deren Verhalten in der Umwelt durchgeführt. Die strukturierte Bereitstellung der dabei erhobenen Daten und eingesetzten Verfahren bilden eine wichtige Grundlage für den sicheren Einsatz von Nanomaterialien.

Bei diesen Untersuchungen werden sehr viele verschiedene Arten von Daten erhoben. Dazu gehören qualitativ hochwertige Referenzdatensätze, als Messfehler gekennzeichnete Referenzdatensätze zur gegenseitigen Überprüfung und Methodenentwicklung, Messdaten aus Ringversuchen aber auch umfangreiche Metadaten wie Abschätzungen der Genauigkeit und Präzision sowie praktische Grenzwerte.

Weiterhin wird das methodische Vorgehen in Form von Standardarbeitsanweisungen (SOPs, englisch *Standard Operation Procedure*) und Auswerteroutinen transparent dargestellt. Die strukturierte Bereitstellung dieser Daten, die durch erprobte und zumeist standardisierte Verfahren erhoben wurden, ist für viele Akteure einer digitalisierten Wirtschaft von hohem Wert. Auch für die immer wichtiger werdenden Bereiche des *Data Mining* und *Machine Learning* sind (Referenz-) Datensätze, unter anderem als Trainings- oder Validierungsdatensätze von Algorithmen oder Neuronalen Netzen sehr hilfreich.

Ein weiterer wichtiger Aspekt ist die Information und Beteiligung der Öffentlichkeit an den Arbeiten der BAM im Nano-Bereich, die durch die bereitgestellten Daten unterstützt werden.

Referenzdaten

Was sind Referenzdaten?

Referenzdatensätze sind dokumentierte und kuratierte Datensätze, die entweder

1. quantitative Informationen in Bezug auf eine messbare physikalische, chemische oder biologische Eigenschaft eines Stoffes oder Systems von Stoffen bekannter Zusammensetzung und Struktur,
2. messbare Merkmale eines oder mehrerer physischer Artefakte,
3. technische Eigenschaften oder Leistungsmerkmale eines Systems,
4. der Interpolation, bzw. Extrapolation der beschriebenen Daten dienen,
5. ein oder mehrere digitale Datenobjekte (zu denen auch Modelle, Algorithmen oder Software zählen), die der Charakterisierung, Kalibrierung, Validierung oder Bewertung von Systemen oder anderen Verfahren dienen (zu denen auch Detektions- oder Messsysteme zählen),



repräsentieren. Diese Datensätze werden nach einem besonders hohen Standard gemessen oder simuliert und kritisch bezüglich ihrer Zuverlässigkeit bewertet. Dies wird sichergestellt durch:

1. Die Benennung von Validierungsmethoden, die für das Messverfahren genutzt wurden und mindestens einem der folgenden Standards genügen oder diesen übertreffen:
 - a) CMC-Konformität (Validierte und publizierte Messprozeduren)
 - b) Peer-Verfahren, publizierte Daten
 - c) ISO Guide 34 ISO 17034
(Referenzmaterialherstellung, validierter und publizierter Ringversuch)
 - d) ISO 17025 (Akkreditiertes Qualitätsmanagement nach ISO)
 - e) BAM-Zertifizierung (BAM QM-Management)
 - f) GLP anerkannte Gute Laborpraxis
2. Die Bereitstellung von Messunsicherheiten soweit möglich (als Teil der Akkreditierung der gewählten Methode).
3. Die Dokumentation aller Metadaten, so dass Messungen und Umrechnungen jederzeit nachvollzogen werden können. Hierzu gehören die Einzelmessungen und die Historie bei zusammengesetzten Daten, die verwendeten Softwareversionen und die einzelnen Arbeitsschritte. Diese Software muss per DOI referenzierbar sein oder bereitgestellt werden.
4. Die Verwendung eines gut dokumentierten, quelloffenen und maschinenlesbaren Formats zur Speicherung der Daten.
5. Die Dokumentation der Rückführbarkeit soweit möglich (als Teil der Akkreditierung der gewählten Methode).
6. Eine Qualitätseinstufung der Datensätze, die abhängig von Punkt 1 vorgenommen werden kann.

7. Die Kennzeichnung von Datensätzen für Leistungstests (eng. Proficiency Testing (PT) Datasets), wenn eine Validierung entsprechend Punkt 1 nicht zutrifft aber ein berechtigtes (externes) Interesse besteht, sie ebenfalls als Referenzdaten bereitzustellen.

Nano-Referenzdatenbank

Zur strukturierten Bereitstellung von Datensätzen wird an der BAM eine zentrale Datenbank eingerichtet werden, um die Daten aus verschiedenen Quellen einzupflegen. Dazu werden Datenformate verwendet, die öffentlich dokumentiert und frei verfügbar sind, wie zum Beispiel mit HDF5 im NeXus-Format. Die Daten werden einer Qualitätskontrolle unterzogen und durch die Vergabe von DOI-Nummern zitierbar sein, zum Beispiel in wissenschaftlichen Veröffentlichungen.

Nano-SOP-Datenbank

Durch die vielfältigen Tätigkeitsfelder der BAM ergibt sich ein großes Potential an standardisierten Arbeitsanweisungen (SOPs). Eine strukturierte und zitierfähige Bereitstellung dieser Verfahren in digitaler Form ist die Grundlage für digitalisierte Entwicklung und Forschung sowie den Austausch zwischen Industrie und Wissenschaft. Die SOP-Datenbank ermöglicht Querverweise zu den Einträgen einer Datenbank mit Referenzdaten. Weiterhin wird durch die Datenbank ein Beitrag zur Information und Beteiligung der Öffentlichkeit im Bereich der Erforschung und Sicherheit neuer Materialien gewährleistet.

Nano-Referenzalgorithmen

In der Erforschung von Nanomaterialien kommen zur Analyse von Messdaten zahlreiche Computerprogramme zum Einsatz. Diese werden stetig weiterentwickelt. Mit jedem neuen Messverfahren oder Material werden auch neue Programme entwickelt, welche auf die speziellen Aufgaben zugeschnitten werden. Im Kern solcher Auswertungsprogramme stecken jedoch häufig ähnliche Algorithmen der Datenverarbeitung.

Um zukünftige Entwicklungen zu vereinfachen und bestehende Programme zu verbessern, wird eine Datenbank von Referenzalgorithmen aufgebaut und bereitgestellt. Diese wird Algorithmen enthalten, die in der BAM häufig verwendet werden und bildet eine referenzierbare Basis für neue Auswerteroutinen. Diese Datenbank von Referenzalgorithmen ermöglicht Querverweise zu den Einträgen einer Datenbank mit Referenzdaten.

Kontakt

Dr. Ingo Breßler

Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)

[Fachbereich Synthese und Streuverfahren nanostrukturierter Materialien](#)

Telefon: 030 8104-3370

E-Mail: Ingo.Bressler@bam.de

Dr. Michelle Unger

Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)

[Abteilung Material und Umwelt](#)

Telefon: 030 8104-4795

E-Mail: Michelle.Unger@bam.de