

# Herbstschule 2012: Gegenwart und Zukunft der Daten

21.11.2012

## Semantic Publishing: Die Zukunft wissenschaftlicher Publikationen

Cord Wiljes und Philipp Cimiano

AG Semantic Computing  
CITEC, Universität Bielefeld



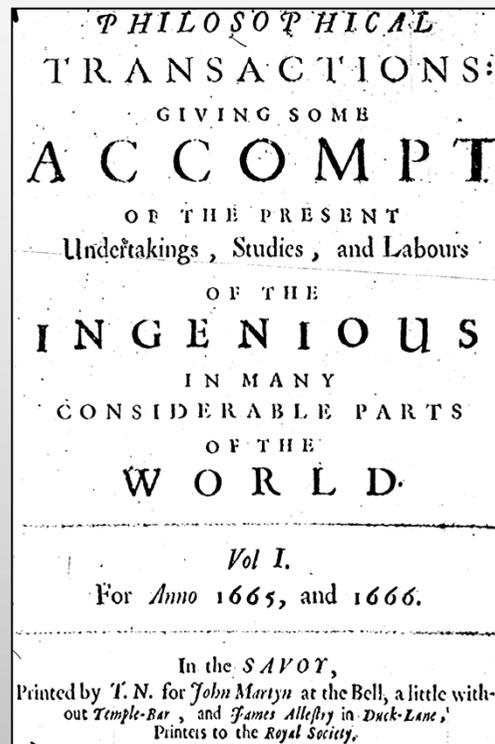
# Überblick

- 1. Publikationen und Daten**
- 2. Fallstudie: Atmosphärenchemie**
- 3. Semantic Publishing mit Linked Data**
- 4. Infrastruktur für Linked Open Science**
- 5. Publikationsverwaltung an der Universität Bielefeld**
- 6. Zusammenfassung und Ausblick**

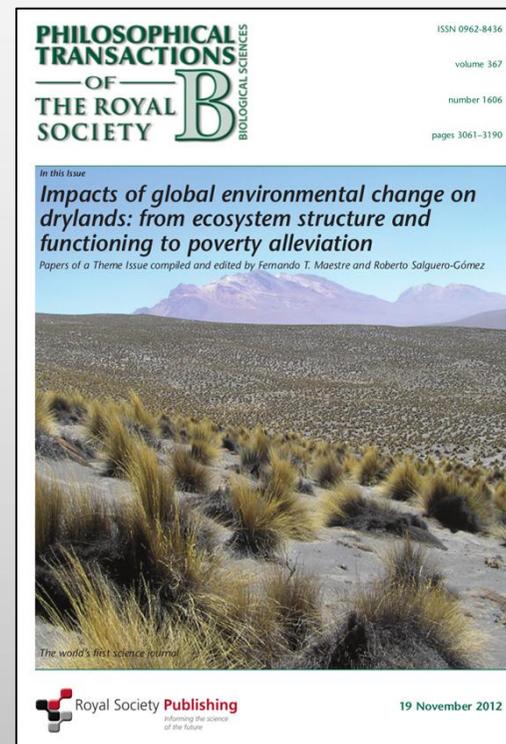
# Publikationen

## "Philosophical Transactions of the Royal Society"

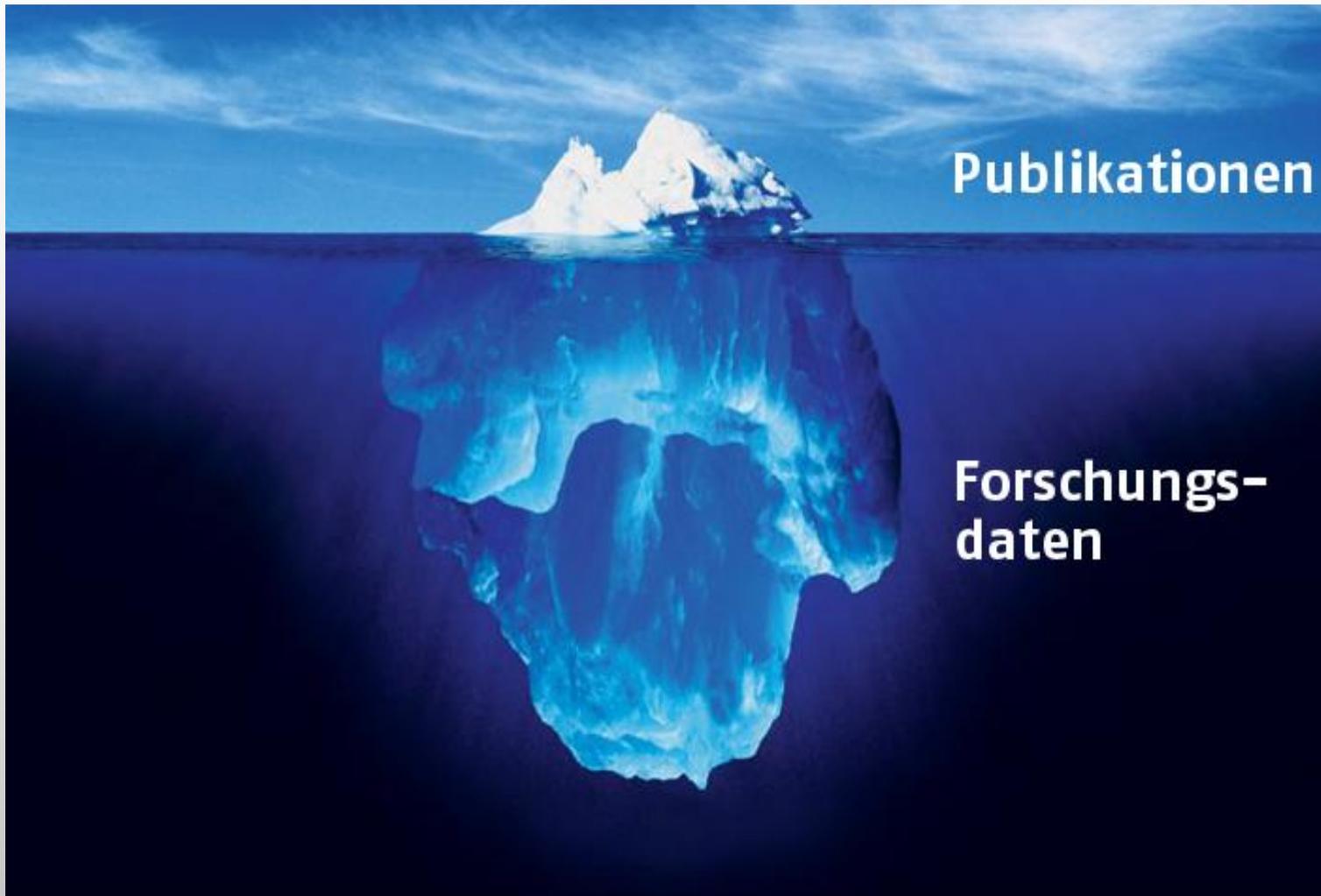
6. März 1665



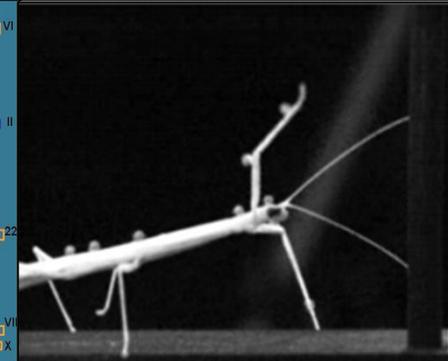
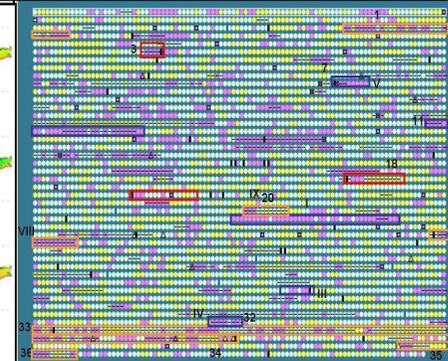
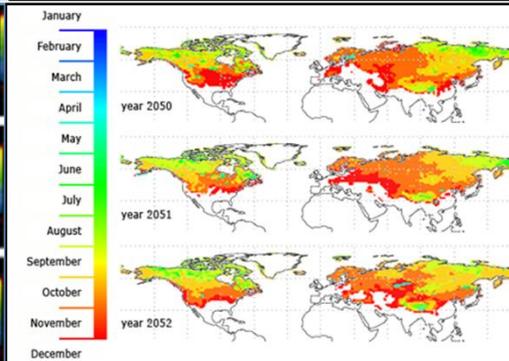
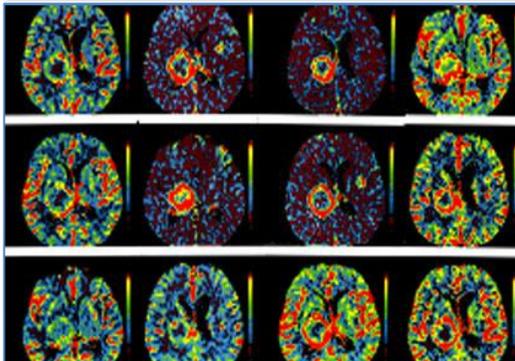
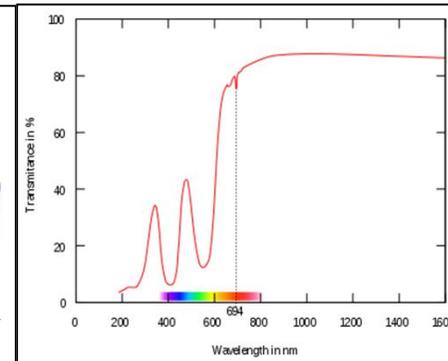
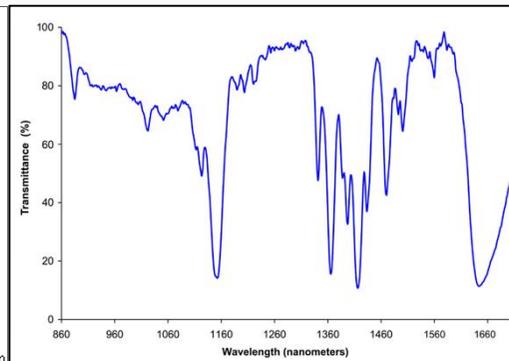
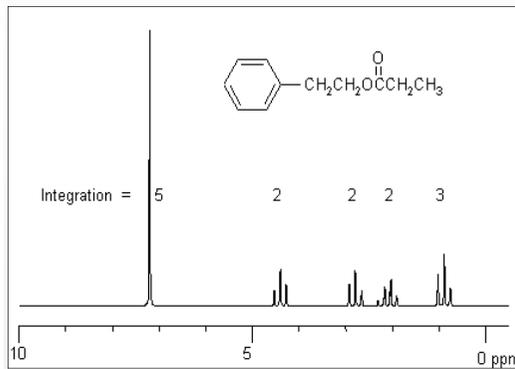
19. November 2012



# Publikationen und Daten

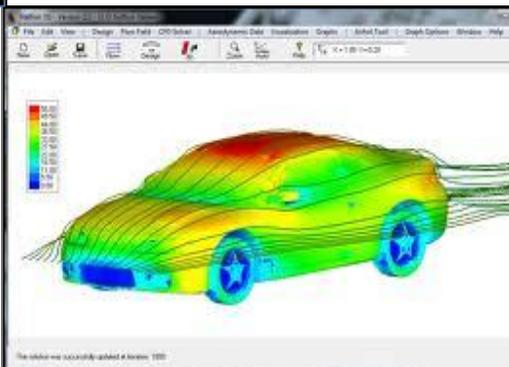


# Forschungsdaten



```

00221 Public Function GetChecksum(ByVal sentence As String) As String
00222 Dim Character As Char
00223 Dim Checksum As Integer
00224 For Each Character In sentence
00225     Select Case Character
00226     Case "$"
00227         ' Ignore the dollar sign
00228     Case "*"
00229         ' Stop processing before the asterisk
00230     Exit For
00231     Case Else
00232         ' Is this the first value for the checksum?
00233         If Checksum = 0 Then
00234             ' Yes. Set the checksum to the value
00235             Checksum = Convert.ToByte(Character)
00236         Else
00237             Checksum = Checksum Xor Convert.ToByte(Character)
00238         End If
00239     End Select
00240 Next
00241 Return Checksum.ToString("X2")
00242 End Function
    
```



	A	B	C	D	E	F
1						
2						
3	Q, 1/A	SAXS	esd	Qdiff		
4	1/A	a.u.	a.u.			
5	0.022756	1107.6	8.586		<ldata><Q unit=	
6	0.023296	1038.9	7.6445	0.00054	<ldata><Q unit=	
7	0.023837	1071	7.919	0.000541	<ldata><Q unit=	
8	0.024377	1054.7	8.0684	0.00054	<ldata><Q unit=	
9	0.024917	1061.3	8.2971	0.00054	<ldata><Q unit=	
10	0.025457	1115.1	8.3305	0.00054	<ldata><Q unit=	
11	0.025998	1276.1	8.5378	0.000541	<ldata><Q unit=	
12	0.026538	1499.2	9.0048	0.00054	<ldata><Q unit=	
13	0.027078	1738.2	10.172	0.00054	<ldata><Q unit=	
14	0.027619	1802.5	10.335	0.000541	<ldata><Q unit=	
15	0.02816	1728.5	10.12	0.000541	<ldata><Q unit=	

# Forschungsförderung

*“Full and open access to scientific data should be adopted as the international norm for the exchange of scientific data derived from publicly funded research.” (OECD 2007)*

*“Hier sehen alle Wissenschaftseinrichtungen einen dringenden Handlungsbedarf hinsichtlich der systematischen Sicherung, der professionellen Archivierung und einer nachhaltigen Bereitstellung dieser Daten für die Nachnutzung durch Dritte.” (Deutschland, Allianz-Initiative 2008)*

*“Die mit Beiträgen des SNF erhobenen Daten sind auch anderen Forschenden für die Sekundärforschung zur Verfügung zu stellen und gemäss den Vorschriften des SNF in anerkannte wissenschaftliche Datensammlungen einzubringen.” (Schweiz, SNF 2008)*

# Warum sollen Forschungsdaten veröffentlicht werden?

- ▶ **Kostensparnis (Doppelaufwände vermeiden)**
- ▶ **Reproduzierbarkeit und Überprüfbarkeit wissenschaftlicher Forschung**
- ▶ **Daten neu verknüpfen und in neuen Kontexten erschließen**
- ▶ **Globale, interdisziplinäre Herausforderungen meistern**

# Fallstudie: Atmosphärenchemie

## Glasübergangstemperaturen von organischen Aerosolen



Prof. Thomas Koop



Cirrus Wolken

# Fallstudie: Aufgabe

## **Aufgabe: Finde alle Glasübergangstemperaturen von organischen Verbindungen!**

- ▶ Es existiert keine zentrale Datensammlung, die diese Daten enthält
- ▶ Daten verstreut über dutzende von Publikationen
- ▶ unterschiedliche Zuverlässigkeit der Quellen
- ▶ Zeit für Literaturrecherche: > 100 h
- ▶ Ergebnis: 596 Werte aus 22 Publikationen

# Fallstudie: Publikation

PCCP Dynamic Article Links

Cite this: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2011, **13**, 19238–19255  
www.rsc.org/pccp

**PERSPECTIVE**

### Glass transition and phase state of organic compounds: dependency on molecular properties and implications for secondary organic aerosols in the atmosphere

Thomas Koop,<sup>a\*</sup> Johannes Bookhold,<sup>a</sup> Manabu Shiraiwa<sup>b</sup> and Ulrich Pöschl<sup>c</sup>

Received 15th August 2011, Accepted 20th September 2011  
DOI: 10.1039/c1cp22617g

Recently, it has been proposed that organic aerosol particles in the atmosphere can exist in an amorphous semi-solid or solid (i.e. glassy) state. In this perspective, we analyse and discuss the formation and properties of amorphous semi-solids and glasses from organic liquids. Based on a systematic survey of a wide range of organic compounds, we present estimates for the glass forming properties of atmospheric secondary organic aerosol (SOA). In particular we investigate the dependence of the glass transition temperature  $T_g$  upon various molecular properties such as the compounds' melting temperature, their molar mass, and their atomic oxygen-to-carbon ratios (O : C ratios). Also the effects of mixing different compounds and the effects of hygroscopic water uptake depending on ambient relative humidity are investigated. In addition to the effects of temperature, we suggest that molar mass and water content are much more important than the O : C ratio for characterizing whether an organic aerosol particle is in a liquid, semi-solid, or glassy state. Moreover, we show how the viscosity in liquid, semi-solid and glassy states affect the diffusivity of those molecules constituting the organic matrix as well as that of guest molecules such as water or oxidants, and we discuss the implications for atmospheric multi-phase processes. Finally, we assess the current state of knowledge and the level of scientific understanding, and we propose avenues for future studies to resolve existing uncertainties.

**1. Introduction**

Organic compounds account for a large fraction of fine air particulate matter (up to 50% and more). They influence the physical and chemical properties of atmospheric aerosol

<sup>a</sup> Bielefeld University, Faculty of Chemistry, D-33615 Bielefeld, Germany. E-mail: thomas.koop@uni-bielefeld.de  
<sup>b</sup> Max Planck Institute for Chemistry, Biogeochemistry Department, D-55128 Mainz, Germany

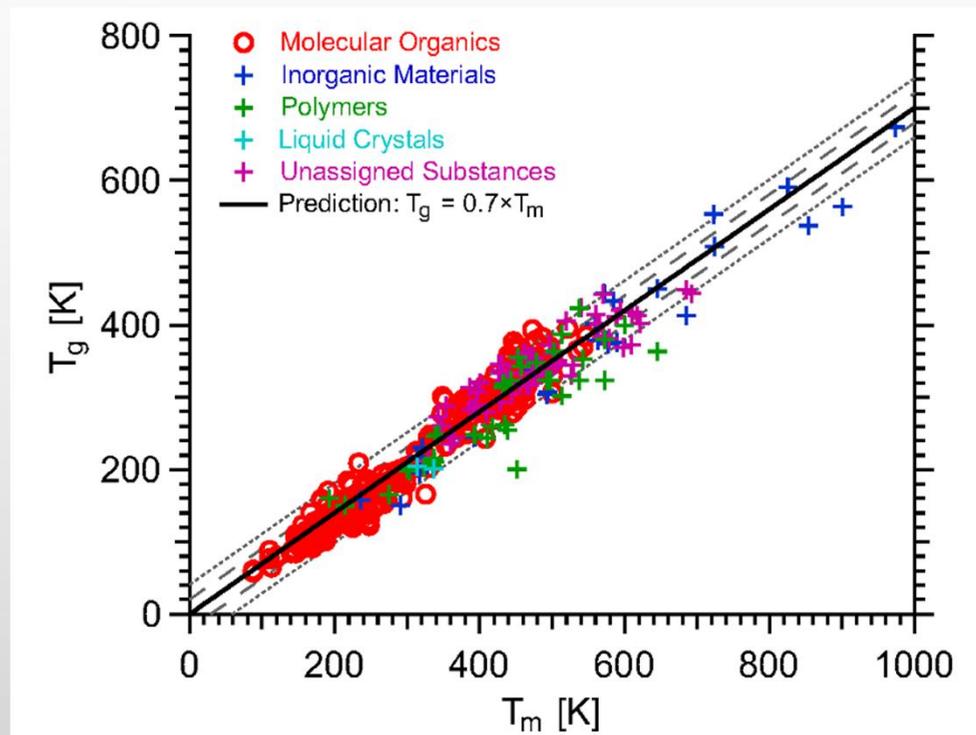


**Thomas Koop**  
Thomas Koop is a professor of physical chemistry at Bielefeld University, Germany. He studied chemistry at the University of Duisburg and did his PhD work at the Max Planck Institute for Chemistry. Thereafter he was a postdoc at Massachusetts Institute of Technology and a research scientist and lecturer at ETH Zurich, where he received his habilitation degree. His research focuses on the properties and transformation processes of atmospheric aerosols and clouds, both theoretically and in laboratory experiments. He is also working on the nucleation and growth behaviour of ice in supercooled aqueous solutions.



**Johannes Bookhold**  
Johannes Bookhold is a Master student at the Faculty of Chemistry at Bielefeld University, where he also received his Bachelor of Science in Chemistry. During his Bachelor thesis project he studied the glass transition behaviour of organic compounds representative of secondary organic aerosols using differential scanning calorimetry.

19238 | *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2011, **13**, 19238–19255 This journal is © the Owner Societies 2011



T. Koop et. al.: Glass transition and phase state of organic compounds [KOOP]

Beziehung zwischen Glasübergangstempertur  $T_g$  and Schmelzpunkt  $T_m$

# Forschungsdaten in Publikationen

**Executable Paper:** Forschungsdaten werden gemeinsam mit der Publikation veröffentlicht:

Thieme SYNTHESIS

Suche Volltextsuche

nicht eingeloggt Login Warenkorb

Lizenziert von: Universität Bielefeld Universitätsbibliothek Bielefeld

Synthesis 2008(17): 2747-2763  
DOI: 10.1055/s-2008-1067226

**PAPER**

© Georg Thieme Verlag Stuttgart · New York

**A Synthesis of 1-Lithiated Glycals and 1-Tributylstannyl Glycals from 1-Phenylsulfinyl Glycals via Sulfoxide-Lithium Ligand Exchange**

Krzysztof Jarowicki, Colin Kilner, Philip J. Kocienski\*, Zofia Komsta, Jacqueline E. Milne, Anna Wojtasiewicz, Victoria Coombs Institute of Process Research and Development, School of Chemistry, Leeds University, Leeds, LS2 9JT, UK

1-Lithiated glycals generated by reaction of 1-phenylsulfinyl glycals with either *t*-BuLi or PhLi are transformed to 1-tributylstannyl glycals on reaction with tributyltin chloride.

Quelle: [JARO]

Primary data for this article are available online and can be cited using the following DOI:  
10.4125/pd0001th:

> Primary Data

(added August 26<sup>th</sup>, 2009). FIDs and associated files for the <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C and DEPT NMR spectra for compounds **14**, (*S<sub>S</sub>*)-**23**, (*S<sub>S</sub>*)-**25**, (*R<sub>S</sub>*)-**26**, **27**, (*S<sub>S</sub>*)-**28**, (*R<sub>S</sub>*,*S<sub>S</sub>*)-**29**, **30**, (*R<sub>S</sub>*)-**36**, (*S<sub>S</sub>*)-**36**, (*S<sub>S</sub>*)-**37**, (*R<sub>S</sub>*)-**39**, (*S<sub>S</sub>*)-**39**, (*S<sub>S</sub>*)-**44**, (*R<sub>S</sub>*)-**46**, (*S<sub>S</sub>*)-**46**, (*R<sub>S</sub>*)-**48**, (*S<sub>S</sub>*)-**48**, (*S<sub>S</sub>*)-**49**, **52**, (*R<sub>S</sub>*)-**53**, (*R<sub>S</sub>*)-**55**, (*R<sub>S</sub>*)-**56**, (*S<sub>S</sub>*)-**57**, (*S<sub>S</sub>*)-**58**, (*R<sub>S</sub>*)-**61**, (*S<sub>S</sub>*)-**61**, (*R<sub>S</sub>*)-**62**, (*S<sub>S</sub>*)-**62**, (*R<sub>S</sub>*)-**65** and (*S<sub>S</sub>*)-**65** are summarized.

# Linked Data



**Autor**



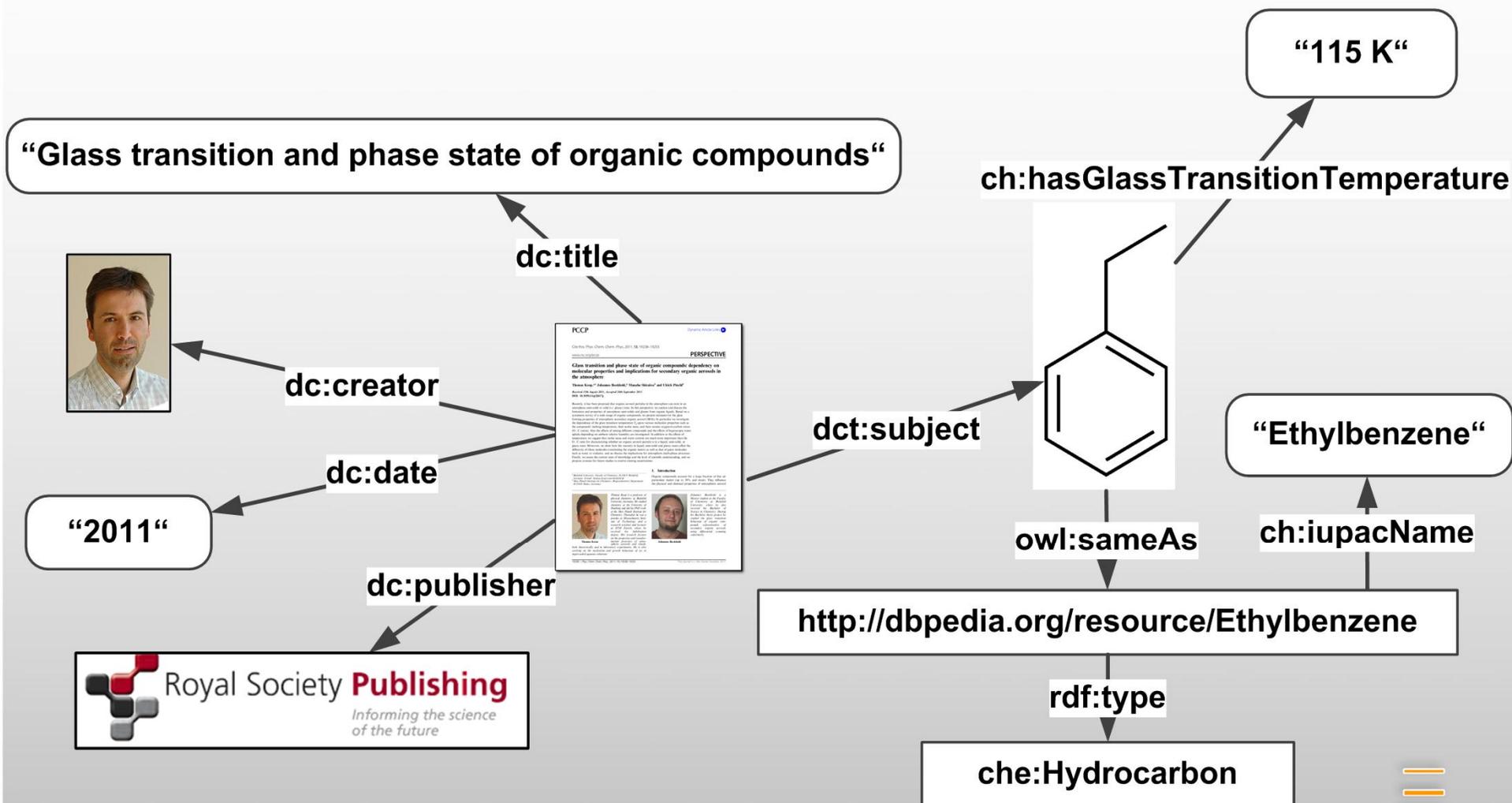
<http://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2011/cp/c1cp22617>

<http://purl.org/dc/elements/1.1/creator>

<http://uni-bielefeld.de/person/thomaskoop>



# Linked Open Science



# Warum Linked Data?

- ▶ **Maschinenlesbar und effizient auszuwerten**
- ▶ **Basiert auf bestehenden Web-Technologien**
- ▶ **Flexibel: Offene Standards des W3C (RDF, SPARQL)**
- ▶ **Existierende Taxonomien und Vokabulare können genutzt werden**
- ▶ **Semantische Erweiterung durch Ontologien möglich (RDFS, OWL, SKOS, Rules)**

# Infrastruktur für Linked Open Science

- ▶ **Institutionelles Repository (Langzeitarchivierung)**
- ▶ **Zitierbarkeit der Daten durch DOIs**
- ▶ **Support der Wissenschaftler und Tools zur Publikation als Linked Data**

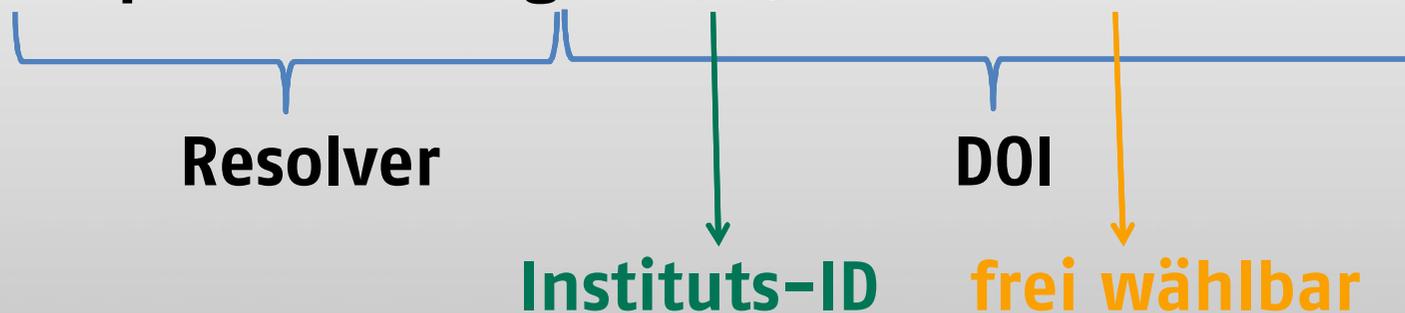
# Institutionelles Repositorium

- ▶ **zentraler Datenspeicher für Publikationen und Forschungsdaten**
- ▶ **Langzeitarchivierung (Verfügbarkeit der Daten)**
- ▶ **Sicherung der Integrität der Daten**

# Zitierbarkeit durch DOI

- ▶ DOI (Digital Object Identifier) = eindeutige Bezeichner für Datensätze
- ▶ Daten werden in Publikationen zitierbar
- ▶ Daten sind dauerhaft im Internet abrufbar

<http://dx.doi.org/10.4119/unibi/sfb882.2012.1>



# Scientific Data Curator

- ▶ **Experte in Linked Data + Semantic Web Technologien**
- ▶ **berät Wissenschaftler**
- ▶ **unterstützt bei der Auswahl der zu veröffentlichenden Daten**
- ▶ **wählt und erweitert Vokabulare**

# Rolle der Bibliotheken

- ▶ **Aufbau und Betrieb einer Infrastruktur für die Veröffentlichung von Forschungsdaten**
- ▶ **Experten für die Organisation großer inhomogener Datenmengen (Taxonomien, Vokabulare,...)**
- ▶ **Lokaler Support der Wissenschaftler**
- ▶ **Scientific Data Curator = Bibliothekar/Archivar für Forschungsdaten**
- ▶ **Garanten für qualitativ hochwertige und inhaltlich vertrauenswürdige Daten**

# PUB: Publikationen an der Universität Bielefeld

- ▶ **Management persönlicher Publikationslisten**
- ▶ **Integriert in der Informationsarchitektur der Universität Bielefeld**
- ▶ **OAI-PMH Schnittstelle**
- ▶ **Kennzahlen**
  - ▶ > 500 registrierte Nutzer
  - ▶ 25.000 Publikationen
  - ▶ davon > 5.000 Open Access
- ▶ **<http://pub.uni-bielefeld.de>**

# PUB: Backend

"Linked Data for the Natural Sciences: Two Use Cases in Chemistry and Biology" (Conference Proceeding/Paper)

Work Abstract + Subject Fulltext Message Show all tabs on one page

Work

Author\* +

	Given name(s) (*)	Surname (*)	Title:	Link to PEVZ Account (*)	
1	Cord	Wiljes		<input checked="" type="checkbox"/>	↓ × ?
2	Philipp	Cimiano		<input checked="" type="checkbox"/>	↑ ↓ × ?
3				<input type="checkbox"/>	↑ ↓ × ?
4				<input type="checkbox"/>	↑ × ?

Department/Affiliation +

1	AG Semantische Datenbanken und Wissensverarbeitung	Select	Clear	×	?
2	Technische Fakultät	Select	Clear	×	?
3	Center of Excellence - Cognitive Interaction Technology CITEC	Select	Clear	×	?

Project +

Research Group +

External (Non UniBi) Publication  Published while not employed at UniBi

Title\* Linked Data for the Natural Sciences: Two Use Cases in Chemistry and Biology

Alternative Title +

# PUB: Persönliche Publikationsliste



Universität Bielefeld

Center of Excellence Cognitive Interaction Technology






Deutsche Webseite

Universität Bielefeld > CITEC > Publications

**CITEC**

- ⌘ about CITEC
- ⌘ Research Areas
- ⌘ Research Projects
- ⌘ Research Groups
- ⌘ Publications
- ⌘ Central Labs
- ⌘ Graduate School
- ⌘ Gender and Diversity
- ⌘ Media
- ⌘ News
- ⌘ Events
- ⌘ CITEC Summer School Series

**Publications**

Latest publications: [2012](#) [2011](#) | [full list & search](#)

**Search Result - 1679 Hits**

📄 1 - 10 | [11-20](#) | [21-30](#) | [31-40](#) | [41-50](#) | [51-60](#) | 📄

- ➔ Rohde M (2013)  
Evolutionäre Robotik, Organic Computing und Künstliches Leben.  
In: Handbuch Kognitionswissenschaft. Stephan A, Walter S (Eds.); Metzler.  
[PUB](#)
- ➔ Castellini C, Koiva R (2013)  
Using a tactile sensor for intention detection.  
In: Karlsruhe, Germany.  
[PUB](#)
- ➔ Hilsenbeck B, Koiva R, Castellini C (2013)  
Using subsampling strategies for real-time prediction of finger forces.  
In: Karlsruhe, Germany.

**Filter List**

- Author / Editor ▾
- Publication Year ▾
- Publication Type ▾
- Standard Citation Style (Bio1) ▾
- 10 hits per page ▾

**Login to PUB**

[Login >>](#)

Cord Wiljes und Philipp Cimiano

22

# Zusammenfassung und Ausblick

- ▶ **Forschungsdaten werden verstärkt veröffentlicht.**
- ▶ **Semantische Publikationen gewinnen an Bedeutung.**
- ▶ **Support für die Wissenschaftler ist entscheidend.**
- ▶ **Bibliotheken werden eine Schlüsselrolle einnehmen.**

# Bibliographie

- [OECD] OECD: OECD Principles and Guidelines for Access to Research Data from Public Funding (2007), <http://www.oecd.org/science/scienceandtechnologypolicy/38500813.pdf>
- [AI] Schwerpunktinitiative „Digitale Information“ der Allianz der deutschen Wissenschaftsorganisationen: Forschungsdaten (2008), <http://www.allianzinitiative.de/de/handlungsfelder/forschungsdaten/>
- [SNF] SNF: Reglement über die Information, die Valorisierung und die Rechte an Forschungsergebnissen (2008), [http://www.snf.ch/SiteCollectionDocuments/allg\\_reglement\\_valorisierung\\_d.pdf](http://www.snf.ch/SiteCollectionDocuments/allg_reglement_valorisierung_d.pdf)
- [JARO] Jarowicki, K., Kilner, C., Kocienski, P., Komsta, Z., Milne, J., Wojtasiewicz, A., & Coombs, V. A Synthesis of 1-Lithiated Glycols and 1-Tributylstannyl Glycols from 1-Phenylsulfinyl Glycols via Sulfoxide-Lithium Ligand Exchange. *Synthesis* (2008), 2747–2763. [doi:10.1055/s-2008-1067226](https://doi.org/10.1055/s-2008-1067226)
- [KOOP] Koop, T., Bookhold, J., Shiraiwa, M., & Pöschl, U. (2011): Glass transition and phase state of organic compounds: dependency on molecular properties and implications for secondary organic aerosols in the atmosphere. *Physical chemistry chemical physics* (2011), 13(43), 19238–55. [doi:10.1039/c1cp22617g](https://doi.org/10.1039/c1cp22617g)