

April 2025

## Hexerei mit Small Data

Am Leibniz-Institut für Katalyse in Rostock, LIKAT, entwickelte ein Doktorand von Dr. David Linke KI-Modelle für das Fischer-Tropsch-Verfahren auf Basis von CO<sub>2</sub>. Ursprünglich stammt das Verfahren aus den 1920er Jahren, um aus Kohlenmonoxid und Wasserstoff, gewonnen aus Kohle und Erdöl, flüssige Kohlenwasserstoffe herzustellen. Weltweit forschen Labore daran, statt der fossilen Ausgangsstoffe künftig das Klimagas Kohlendioxid für die Fischer-Tropsch-Synthese zu verwenden.

Zu den Forschungszielen in der Chemie zählt der Ersatz der fossilen Rohstoffbasis durch klima- und umweltfreundliche Ausgangsstoffe. Ein vielversprechender Weg ist die Hydrierung von Kohlendioxid zu höheren Kohlenwasserstoffen, die CO<sub>2</sub>-Fischer-Tropsch-Synthese (CO<sub>2</sub>-FTS). CO<sub>2</sub> und Wasserstoff (H<sub>2</sub>) reagieren hierbei katalytisch z.B. zu synthetischem Kraftstoff, der keine Schwefel- und Stickstoffverbindungen enthält und somit sehr viel sauberer verbrennt als seine erdölbasierte Variante. Wird der Wasserstoff zudem aus erneuerbaren Quellen produziert, ist ein solches Verfahren vollkommen CO<sub>2</sub>-neutral.

### Erst die Daten, dann das Experiment

Weltweit steigt die Zahl an Veröffentlichungen zu dieser Reaktion und damit der Umfang an Daten aus den Experimenten. „Wer diese Daten intelligent analysiert, kann verborgene Zusammenhänge zwischen Katalysatoreigenschaften und chemischer Aktivität entdecken“, sagt LIKAT-Chemiker Dr. David Linke. Wertvolles Wissen, doch schwer zu bergen. Ein Fall für maschinelles Lernen und künstliche neuronale Netzwerke.

Aleksandr Fedorov, Doktorand von David Linke, ließ sich auf die Pionierarbeit ein. Promotionsziel war ein neuer Katalysator für die CO<sub>2</sub>-FTS und ein passendes KI-Modell dazu, das die Geschwindigkeit der komplexen Reaktion unter allen Bedingungen beschreiben kann. Das hieß zunächst, monatelang Daten zu sammeln, aufzubereiten und damit eine Datenbank zu füttern. David Linke: „Noch vor dem ersten Experiment gilt es so viel zu wissen wie möglich. Denn Experimente sind teuer und zeitraubend.“

### Hochselektiver Eisenkatalysator

Häufig laufen sowohl die klassische Fischer-Tropsch-Synthese als auch die CO<sub>2</sub>-FTS in sogenannten Blasensäulenreaktoren ab. Die gasförmigen Ausgangsstoffe, H<sub>2</sub> und CO<sub>2</sub> sowie später auch das Kohlenmonoxid (CO), das sich bildet, arbeiten sich dabei durch eine zähe Flüssigkeit, in der sich der Katalysator auf Eisen- oder Kobaltbasis sowie alle Zwischen- und Endprodukte befinden.

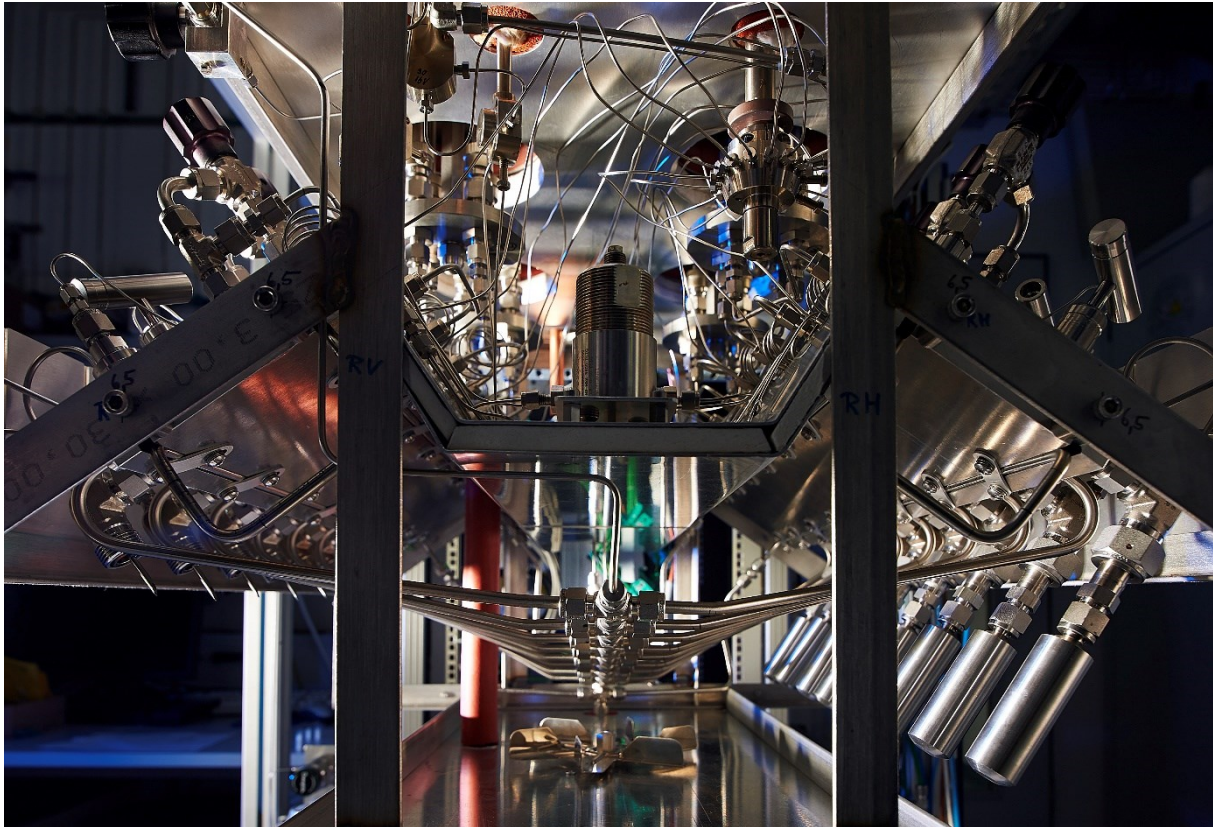


Abb. 1: Effektiv und schön anzusehen: die Hochdurchsatz-Katalyseanlage, mit der Aleksandr Fedorov arbeitet. Sie verfügt über 16 Parallelreaktoren – rechts sind deren Gefäße gut zu erkennen – und wird zur Prüfung von Katalysatoren bei der Hydrierung von CO oder CO<sub>2</sub> unter Druck verwendet. Die Anlage erlaubt u.a. die Umwandlung von CO in höhere Kohlenwasserstoffe (Fischer-Tropsch-Synthese) sowie die Methan- und Methanolsynthese aus CO oder CO<sub>2</sub>. Foto: LIKAT

Ergebnis der Forschungsarbeiten am LIKAT war ein Eisen-Katalysator mit sehr hoher Produktivität und hoher Selektivität, der im Produktionsreaktor aktiviert werden kann. Eine hohe Selektivität bedeutet, dass besonders wenig unerwünschtes Methan im Vergleich zu den gewünschten Zielprodukten gebildet wird. Dies wurde durch Zugabe von wenig Kalium, Kupfer und Aluminium erreicht.

#### Ohne viel Trial & Error

Bis heute dokumentieren Chemiker ihre Erkenntnisse zu den Reaktionen in Grafiken und Tabellen, die den Einfluss wichtiger Parameter wie Druck, Temperatur und Zusammensetzung der Proben darstellen. In rund hundert Publikationen analysierte Aleksandr Fedorov jeden einzelnen Messpunkt. Dabei ermittelte er nicht nur die entscheidenden Kriterien für Effektivität und Selektivität der Reaktion. Er deckte auch einen Widerspruch auf: Anders als in der Literatur dargestellt, wird das eingesetzte CO<sub>2</sub> in der Reaktion keineswegs immer nur zu CO umgesetzt. Diese Erkenntnis eröffnet einen Forschungsansatz für die weitere Katalysatorverbesserung.

Mit Daten seines Katalysators begann Fedorov künstliche neuronale Netzwerke zu trainieren, und zwar für die kinetische Modellierung der CO<sub>2</sub>-Hydrierung, sein KI-Modell. Dazu mussten wenige Daten reichen, weil es immer nur wenige Labordaten pro Messreihe gibt. David Linke:

„Anders als bei den üblichen Sprach-KI-Lösungen, den *Large-Language-Models*, arbeiten wir hier mit *small data*.“ Damit das Modell dennoch plausible Reaktionsverläufe errechnen kann, mussten ihm grundlegende physikalische Regeln beigebracht werden.

Im vergangenen Herbst kam der Durchbruch, wie sich David Linke erinnert. „Plötzlich bekommst du Modelle, die sich vernünftig verhalten! Das ist schon ein bisschen wie Hexerei.“ Üblicherweise sitze man tagelang am Computer um ein passendes Modell zu finden. „Jetzt trainiere ich das KI-Modell, und selbst der alte Laptop rechnet alles in 30 Minuten durch.“

### Quellcode als Open Source

Welchen Nutzen habe diese KI-Modelle? Die KI aus dem LIKAT ermöglicht neben kürzerer Laborzeit bei der weiteren Erforschung der CO<sub>2</sub>-FTS auch eine höhere Effizienz der Reaktion. Vor allem können Verfahreningenieure mit dem Modell von Aleksandr Fedorov nun den Blasensäulenreaktor technisch viel präziser als vorher auslegen und bauen. Und jedermann kann das Modell als Matrix verwenden, um eine eigene KI für x-beliebige Reaktionen zu trainieren.

David Linke, Aleksandr Fedorov u.a. haben ihre Erkenntnisse samt dem Quellcode als *Open Source* veröffentlicht. Als Teil der 2020 gegründeten Nationalen Forschungsdaten Infrastruktur (NFDI) werden solche KI-Tools die Entwicklung chemischer Verfahren vom Labor bis zum Reaktor revolutionieren, davon ist David Linke überzeugt.

Wissenschaftlicher Ansprechpartner:



Dr. David Linke

Bereichsleiter „Katalysatorentwicklung  
und Reaktionstechnik“

[David.Linke@catalysis.de](mailto:David.Linke@catalysis.de)



Aleksandr Fedorov

Wissenschaftlicher Mitarbeiter

[Aleksandr.fedorov@catalysis.de](mailto:Aleksandr.fedorov@catalysis.de)

Source code: <https://github.com/LIKAT-Rostock/kcnode-paper>

Preprint: <https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2023-x39xt>

Paper: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2023.146869>