

September 2025

Digitales Datenmanagement in der Katalyse: Förderung des NFDI4Cat-Konsortiums wird verlängert

Die Projekte zum digitalen Datenmanagement innerhalb des Katalyse-Konsortiums NFDI4Cat als Teil der Nationalen Forschungsdaten Infrastruktur (NFDI) werden auch in den nächsten Jahren gefördert. In einem entsprechenden Bescheid bewilligt die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) für die zweite Förderphase bis Ende 2028 gut 8,5 Mio Euro. Das Leibniz-Institut für Katalyse in Rostock erhält davon 600.000 Euro.

Der NFDI e.V. wurde im Oktober 2020 von Bund und Ländern mit dem Ziel des koordinierten Datenmanagements, vor allem der Digitalisierung im Forschungsdatenbereich, ins Leben gerufen. Dabei sollte von Anfang an auch die katalyserelevante Forschung gefördert werden, weshalb sich, koordiniert von der DECHEMA, das Konsortium NFDI4Cat gegründet hatte.

Vollständige digitale Dokumentation möglich

Das LIKAT bekam bereits in der ersten Ausschreibungsrunde einen Zuschlag für seine Projekte. Dort entstanden unter Federführung von Dr. David Linke Programme und Datenmodelle, mit deren Hilfe praktisch jedes Labor seine Daten aus der Katalyserecherche digital, also maschinenlesbar, bereitstellen kann. Diese Daten werden als FAIR-Daten bezeichnet, das steht für ihre Eigenschaften: Findable, Accessible, Interoperable, Reusable – also auffindbar, zugänglich, kompatibel und wiederverwendbar zu sein. Sie werden in einem NFDI4Cat-Datenraum bereitgestellt und dienen zum Beispiel zum Trainieren von KI-Modellen.



Geht mit NFDI4Cat in die zweite Förderphase: David Linke. (Foto: LIKAT)

David Linke: „Diese Daten sind für alle in der Wissenschaftscommunity von großem Nutzen. Sie dokumentieren vollständig die Vorgehensweise bei sämtlichen Experimenten, die für eine einzige Publikation in die Hunderte gehen können.“ Katalyseforscher veröffentlichen mit ihren wissenschaftlichen Artikeln bisher nur einen Bruchteil davon, wie der Chemiker weiter erläutert. „Doch es steckt die zehn- bis 50fache Menge an Daten dahinter. Zum Beispiel auch zu Versuchen, die erfolglos blieben, obgleich sie korrekt ausgeführt wurden. Und gerade dies muss ein KI-Modell auch lernen, um zuverlässiger zu werden.“

Dafür galt es u.a. ein präzises maschinenlesbares Vokabular zu entwickeln. Für seine Arbeiten im Rahmen dieses Projektes hatte David Linke 2024 den „NFDI4Cat – Digital Chemist Award“ erhalten.

Zweite Förderphase

In der nächsten Förderphase baut NFDI4Cat die datenraumbasierte Kooperation von Wissenschaft und Industrie aus. „Fortlaufende Schulungen, Community-Feedback, ein nachhaltiges Organisationsmodell sowie die Weiterentwicklung der interoperablen Werkzeuge sichern den langfristigen Transfer in Forschung, Lehre und Industrie“, sagt Dr. Linke.

Mit einem KI-kompatiblen Pool an Forschungsdaten werde wissenschaftliche Arbeit sehr viel effektiver als bisher. „Ich kann zu meinem Thema umfassend Querverbindungen schaffen, sehe zum Beispiel, wo andere Labors experimentelle Lücken ließen, die mit meinem Wissensstand wiederum interessant werden könnten.“ Der Pool an weltweit nutzbarem Wissen wird einfach größer.

Ansprechpartner:

Dr. David Linke

Bereichsleiter „Katalysatorentwicklung und Reaktionstechnik“

eMail: David.Linke@catalysis.de