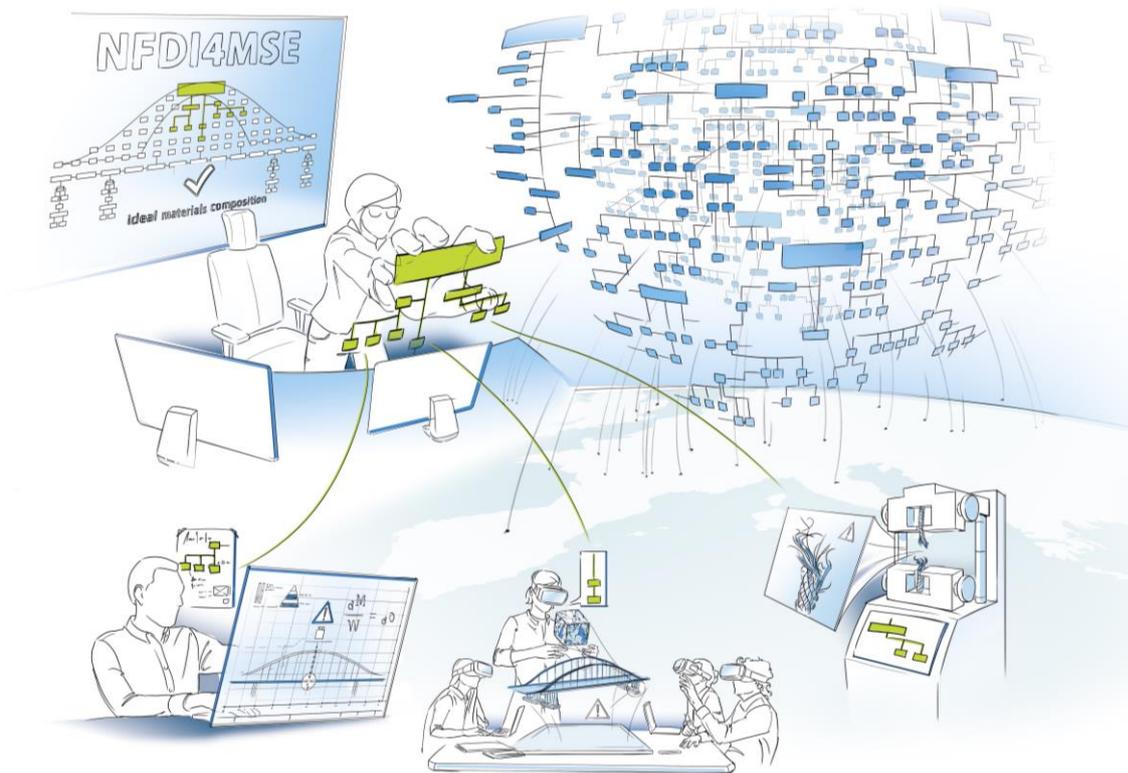


## Nationale Forschungsdateninfrastruktur für die Materialwissenschaft & Werkstofftechnik (NFDI-MatWerk, vorher NFDI4MSE)

Sprecher: Prof. Dr. Christoph Eberl, Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM,  
Wöhlerstr. 11, 79108 Freiburg, [chris.eberl@iw.fraunhofer.de](mailto:chris.eberl@iw.fraunhofer.de)



**Werkstoffe sind von grundlegender Bedeutung für die Gesellschaft:** Von erneuerbaren Energien, über moderne Transportlösungen bis zu medizinischen Implantaten – auch heute basiert nahezu jede technologische Innovation auf der Entwicklung und der Verarbeitung neuartiger Materialien. Die Herausforderung der immer noch jungen **Disziplin Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (MatWerk, Bereiche 405/406 der DFG-Fachsystematik)** ist es, diese Entwicklungen sowohl mit radikal neuen Konzepten als auch schrittweise und evolutionär voranzutreiben. Die Optimierung der Werkstoffeigenschaften für eine spezifische Anwendung ist dabei eng mit dem hierarchischen, physikalischen Aufbau des Materials verknüpft. Dazu muss die innere Materialstruktur auf höchst unterschiedlichen Längenskalen präzise eingestellt werden. Neben der chemischen Zusammensetzung hat die **Mikrostruktur den größten Einfluss auf die Eigenschaften von technischen Legierungen.** Sie entscheidet damit über die Funktionalität der Bauteile, und wird gezielt durch mechanische und thermische Prozessierung eingestellt. Allerdings verändert sich die Mikrostruktur während der Materialverarbeitung und oft auch in der Anwendung. Dies kann zu unerwünschten Eigenschaftsänderungen oder schlimmstenfalls zum Ausfall der Anwendung führen. Daher spielt die dokumentierbare Abfolge der Herstellungsprozesse und der Belastungsszenarien in der Anwendung die entscheidende Rolle und macht die erzielte Mikrostruktur und damit die Performanz eines Materials äußerst pfadabhängig.

Für die Forschungsdateninfrastruktur der Materialwissenschaft und Werkstofftechnik (MatWerk) ist somit ein strukturierter Umgang mit einem **höchst heterogenen und hierarchischen Spektrum von Materialdaten, Wissen und Verständnis** absolut essentiell.

Es ist notwendig, die **gesamte Prozesshistorie**, die ein Bauteil im realen oder virtuellen Modell vor der Messung durchlaufen hat, über die relevanten Größenskalen zu integrieren. Aufgrund der Vielzahl unterschiedlicher experimenteller, numerischer und analytischer Methoden existieren extreme Unterschiede bei den Datenformaten, den Datenmengen und den für die Interpretation notwendigen Metadaten. Gleichzeitig kann dieser sehr heterogene, unstrukturierte Datenraum nur durch die innere Verknüpfung zu einem Wissenszuwachs führen, weshalb praktisch jedes Labor eigenen, problemspezifische Lösungen entwickelt hat, die aktuell jedoch nicht interoperabel sind.

Das heißt, bisher wurden die **FAIR-Prinzipien in der MatWerk-Community** nur punktuell umgesetzt. Dieser Umstand behindert den wissenschaftlichen Fortschritt und unsere Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler können dringenden gesellschaftlichen Anforderungen (z.B. Wasserstoffwirtschaft, Hochleistungsbatterien, Kreislaufwirtschaft) an unsere Disziplin nur eingeschränkt gerecht werden.

Die NFDI-MatWerk-Initiative hat sich daher zum Ziel gesetzt, für die Materialwissenschaft und Werkstofftechnologie die infrastrukturellen Rahmenbedingungen zu schaffen, die den jetzt **notwendigen Paradigmenwechsel** zu einer nachhaltigen und gemeinsam entwickelten digitalen Forschungsumgebung ermöglichen.

Zur Erreichung dieser anspruchsvollen Aufgabe organisiert sich das Konsortium in fünf "Task Areas" (TAs): Materialdateninfrastruktur, Ontologie, Softwareentwicklung, Strategie und Community-Interaktion. Zusammen mit der eng eingebundenen Community arbeiten die TAs jeweils an der Implementierung der jeweiligen Infrastrukturaspekte. Dabei orientieren sie sich an gemeinsam definierten Ansprüchen der gesamten Community, die in Form von 'Use Cases' beschrieben werden. Die Use Cases bezeichnen dabei stets ein bestimmtes Szenario im Umgang mit Daten aus Anwendersicht und sind aus alltäglichen Herausforderungen von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern im digitalen Forschungsalltag abgeleitet.

Zentrale Maßnahme ist die durch die **TA Materialdateninfrastruktur** koordinierte Entwicklung und Implementierung einer digitalen Forschungsumgebung nach den FAIR-Bedingungen: das **Digital Materials Environment (DME)**. Das DME bietet die grundlegende Software- und Daten-Architektur, um Forschungsdaten in standardisierter Weise zu speichern (interoperable), zu teilen und zu referenzieren (findable), sowie Materialdaten direkt in rechnergestützte Analyseabläufe einzubinden (accessible) und diese nachzunutzen (reusable). Ein Web-basiertes Benutzerinterface bietet die niedrige Einstiegschwelle für die Suche und den Zugriff auf den entstehenden Datenraum.

Materialinformationen werden darin über einen Knowledge Graph als Linked (Open) Data repräsentiert, der über standardisierte Schnittstellen von Metadatendiensten und Forschungsdaten-Repositoryn gespeist wird. Die Metadatendienste unterstützen die in der **TA Ontologien** spezifizierten Material-Semantik und -Ontologien und bieten zusätzliche Funktionalitäten wie Rohdatenanreicherungen durch Annotationen und Harvester-Dienste. Ein feingranulares Identity Management sowie die nahtlose Integration von Datenzentren und -diensten, dezentralen Datensammlungen in Forschungsgruppen und den Werkzeugen aus der TA Softwareentwicklung runden die Infrastruktur ab.

Die **TA Softwareentwicklung** ist für die Entwicklung leistungsfähiger Werkzeuge zuständig, um eine automatisierte Datenverarbeitung von experimentellen und simulierten Ergebnissen mit etablierten MatWerk-Tools sowohl in Skript- als auch in grafischen Programmiersprachen zu ermöglichen. Darüber hinaus soll die TA Konzepte erarbeiten um Workflows in einheitlichen Datenverarbeitungsumgebungen mit Kollegen und Gutachtern zu teilen oder bspw. eine automatische Bereitstellung von Fehlerbalken bei Computersimulationen zu bekommen. In diesem Zuge ist auch die Entwicklung softwaregestützter Methoden zur Datenkuratation geplant. Die Umsetzung der Digitalisierung und der Einsatz der von NFDI-MatWerk entwickelten Konzepte und Werkzeuge erfordert nicht nur die Akzeptanz in allen Bereichen der Forschung, sondern eine aktive Mitgestaltung der NFDI-MatWerk. Die **TA Community-Interaktion** beschäftigt sich daher mit der Herausforderung, genau diese Akzeptanz und Teilnahme der Community zu stimulieren und zu moderieren. Sie dient als bidirektionale Schnittstelle zwischen NFDI-MatWerk und der Community, um einerseits Strukturen und Werkzeuge in der

Community zu vermitteln und zu lehren und andererseits die Teilnahme der Community an der Gestaltung der NFDI-MatWerk zu ermöglichen und zu fördern. Alle relevanten Fachgesellschaften, wie z.B. die Deutsche Gesellschaft für Materialkunde (DGM), der Deutsche Verband für Materialforschung- und -prüfung (DVM) und die Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik (GAMM) haben dafür bereits ihre Unterstützung zugesagt.

Die **TA Strategie** hat zur Aufgabe, aus der grundsätzlichen Vision des Konsortiums einen langfristigen Aktionsplan gemeinsam mit der Community und anderen NFDI-Projekten zu entwickeln und kontinuierlich fortzuschreiben. Die TA Strategie organisiert den Prozess im engen Austausch mit allen Stakeholdern. Entsprechend sind die Implementierung einer Governance, die Entwicklung und Umsetzung von Culture-Change-Ansätzen, die Implementierung von Anreizmechanismen und die internationale Verknüpfung der Initiative Schwerpunkte der TA-Aktivitäten.

Sämtliche Experten und Expertinnen der interdisziplinären TAs der NFDI-MatWerk bauen bei ihrer Arbeit auf ihr **umfangreiches themenspezifisches Netzwerk**, sowie vorhandene Erfahrungswerte zu ihrem Thema. So sind die Mitglieder und Organisationen des Konsortiums beispielsweise auch an namhaften nationalen und internationalen Fachausschüssen sachverwandter Initiativen beteiligt, wie der Research Data Alliance, dem European Materials Modelling Council oder der European Open Science Cloud. Transatlantische Mitgliedschaften bestehen unter anderem zu allen relevanten Fachverbänden wie der Materials Research Society oder der Minerals, Metals & Materials Society. Wichtige Beziehungen zu Standardisierungsgremien bestehen in Deutschland zum Deutschen Institut für Normung (DIN) sowie in den USA zum National Institut of Standards and Technology (NIST). Hier wird das Konsortium in Kooperation **zukünftig wegweisende Vereinheitlichungsmaßnahmen anstoßen**.

Existierende Datenbanklösungen für Materialdaten werden im Zuge der vereinheitlichenden Bemühungen des Konsortiums zudem berücksichtigt. Die Beteiligung von namhaften im Aufbau von Dateninfrastrukturen erfahrenen Organisationen wie dem FIZ Karlsruhe oder den Rechenzentren der RWTH Aachen und des KITs garantieren dem Konsortium NFDI-MatWerk die zum Aufbau und Betrieb einer leistungsfähigen technischen Forschungsdateninfrastruktur **notwendige Expertise**. Eine Stärke unserer Community, die dabei zum Tragen kommt, ist die Verknüpfung von Datengewinnung, -strukturierung und -auswertung anhand von wohldefinierten Protokollen. Das hochintegrierte Vorgehen wird sich auch in der Infrastruktur wiederfinden (Architektur der Software und Infrastruktur, Ontologieentwicklung, ...) und kann in abgewandelter Form für viele andere Initiativen einen sehr hohen Mehrwert bieten. Diese und weitere Ansätze sollen in Zukunft in Abstimmung mit anderen, fachverwandten NFDI-Konsortien implementiert und der **gesamten NFDI-Bewegung zur Verfügung gestellt** werden.

Die NFDI-MatWerk wird sich aktiv **an der Gesamt-Initiative beteiligen** und wünscht sich ein NFDI-weites gemeinsames Vorgehen in den Bereichen Nutzerauthentifizierung und -autorisierung, eine Abstimmung von Schnittstelle und später der Architektur von Software und Infrastruktur, eine Klärung des langfristigen Betriebs und der gemeinsamen organisatorischen Ausgestaltung der NFDI sowie eine Unterstützung bei rechtlichen Aspekten. Insbesondere mit den fachlich nahen NFDIs sollen zudem Übereinkünfte in den Bereichen Metadatensemantik, Ontologien und Schnittstellen getroffen werden. Das Konsortium hofft darauf, im Zuge der NFDI-Konferenz diese und weitere Querschnittsthemen gemeinsam zu konkretisieren.

**Vorgesehene Mitglieder des Konsortiums (Co-Sprecherinnen/Co-Sprecher und die weiteren, beteiligten Institutionen):**

<b>Co-Sprecher/in</b>	<b>Zugehörige Institution</b>
Prof. Dr. Erik Bitzek	Friedrich-Alexander-Universität, FAU Erlangen-Nürnberg Martensstr. 5a 91058 Erlangen
Prof. Dr. Peter Gumbsch	Karlsruhe Institute of Technology, KIT Straße am Forum 7 76131 Karlsruhe
Prof. Dr. Frank Mücklich	Universität des Saarlandes Campus D33 66123 Saarbrücken
Prof. Dr. Matthias S. Müller	RWTH Aachen Templergraben 55 52062 Aachen
Prof. Dr. Jörg Neugebauer	Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH, MPIE Max-Planck-Straße 1 40237 Düsseldorf
Prof. Dr. Harald Sack	FIZ Karlsruhe – Leibniz-Institut für Informationsinfrastruktur GmbH Hermann-von-Helmholtz-Platz 1 76344 Eggenstein-Leopoldshafen
Prof. Dr. Stefan Sandfeld	Technische Universität Bergakademie Freiberg TUBAF Lampadiusstrasse 4 09599 Freiberg
Prof. Dr. Philipp Slusallek	Deutsches Forschungszentrum für künstliche Intelligenz, DFKI Stuhlsatzenhausweg 3 D-66123 Saarbrücken
Prof. Dr. Achim Streit	Steinbuch Centre for Computing, Karlsruhe Institute of Technology, KIT Hermann-von-Helmholtz-Platz 1 76344 Eggenstein-Leopoldshafen
Prof. Dr. Martina Zimmermann	Fraunhofer-Institut für Werkstoff- und Strahltechnik IWS Winterbergstr. 28 01277 Dresden