



## Nationale Forschungsdateninfrastruktur für disziplinäre und transdisziplinäre Physik (NFDI4Phys)

*Sprecher: Prof. Dr. H.-G. Döbereiner, [hgd@uni-bremen.de](mailto:hgd@uni-bremen.de)  
Universität Bremen, Bibliothekstraße 1, 28359 Bremen*

Heterogene Datentypen, eine Fülle von Metadaten und Abhängigkeiten von Daten untereinander sind sowohl in **disziplinären Forschungsgruppen der Physik** als auch – und dort ganz besonders – in inter- und transdisziplinären Teams die größte Herausforderung im Forschungsdatenmanagement (FDM). An diese Gruppen verschiedener Größe wendet sich **NFDI4Phys**. Die Kernidee der **transdisziplinären Physik** ist es, die komplexen Strukturen einer bestimmten Disziplin innerhalb ihrer jeweiligen Fachsprache zu verstehen, um die relevanten Felder und ihre Interdependenzen zu identifizieren, die mit klassischen physikalischen Methoden nicht oder nur schwer zu benennen sind. Diese Vorgehensweise dient direkt der Ergänzung bereits bestehender **Fachontologien** und der Brückenbildung in und mit der Physik. Unser Ziel ist ein **integrierendes FDM**, um die physikalische Forschung in ihrer Breite und Diversität zu fördern und fachwissenschaftliche Grenzen zu überschreiten.

Die beiden übergreifenden Konzepte hinter dem FDM von NFDI4Phys sind **FAIR Digital Objects** (FDOs) und das Prinzip der **Emergenz**, dem zufolge alle wissenschaftlichen Fachgebiete basierend auf hierarchischer Ordnung über Skalen hinweg in Beziehung stehen, angefangen bei Atomen und Molekülen, über Makromoleküle und Plasmen, kondensierte Materie und Zellen, Gewebe und Organe, einzelne autonome Organismen bis hin zur Ebene von Kollektiven wie Gruppen, Populationen, Staaten und der Weltgesellschaft.

Die FAIR-Prinzipien sind die Grundlage unserer Arbeit, bilden jedoch noch kein fertiges Konzept zum Aufbau einer technischen Infrastruktur. Ein Vorschlag für ein ganzheitliches technisches Ökosystem wird im **FDO Framework** spezifiziert und **durch technische Lösungen konkretisiert**. Auch Digitale Zwillinge für Objekte oder Prozesse in der realen Welt sind FDOs. In unseren disziplinären und transdisziplinären Domänen implementieren wir Prototypen in enger Zusammenarbeit mit dem **FAIR Digital Objects Forum** und planen, eine FDO-basierte Dateninfrastruktur einem erweiterten Nutzerkreis als potentieller Basisservice der NFDI anzubieten. Das Forum erkennt die beiden konzeptionellen Varianten, digitale Objekte (DO) & verknüpfte Daten (LD), an und implementiert daher notwendige Querverbindungen. Unsere Erfahrungen mit dem Betrieb der Prototypen im Rahmen unserer transdisziplinären Agenda werden wir in das Forum einbringen.

Unsere disziplinäre wie transdisziplinäre Agenda berücksichtigt die heterogenen Bedürfnisse der verschiedenen physikalischen Fächer sowohl innerhalb als auch außerhalb der Kerndomäne. Dabei wenden wir uns einerseits an kleine Labore mit ihrer hochspezialisierten und diversen physikalischen Forschung, für die der Einstieg in das FDM eine große Herausforderung darstellt. Andererseits beeinflusst die Physik seit mindestens drei Jahrzehnten Entwicklungen jenseits ihrer disziplinären Grenzen. Durch die transdisziplinäre Zusammenarbeit finden typische Argumentationsweisen und Mechanismen der Physik ihre Anwendung in anderen wissenschaftlichen Disziplinen. Solche Tendenzen sind nicht nur in der Biologischen Physik sichtbar, die den disziplinären Kanon der Physik bereits erweitert hat, sondern auch in neueren Bereichen wie der Socio- oder der Econophysics. Dies spiegelt sich auch innerhalb dieser Fächer in Disziplinen wie Computational Social Sciences oder Digital Economics wider.<sup>1</sup> Diese Entwicklungen sind bereits verstärkt in der Neurobiologie und der Systembiologie, aber auch in Disziplinen wie Psychologie und Philosophie<sup>2</sup> zu beobachten. In dem

<sup>1</sup> Dies konkretisiert sich in der Sicht von Gesellschaften und Märkten als komplexe Netzwerke.

<sup>2</sup> Es gibt eine [Stochastische Thermodynamik des Lernens](#), das Konzept des [Netzwerkes von Netzwerken](#), [Beschreibung von Entscheidungen als Phasenübergänge](#), das Feld der [basalen Kognition](#), sowie die [Philosophie der Mechanismen](#).

neuen Feld der *Material Humanities*<sup>3</sup> geht dieser Prozess von der Kulturwissenschaft aus und die Physik wird zur Zielwissenschaft. Wir arbeiten durch einen Datenvergleich fachübergreifend strukturelle Analogien heraus, um ein integratives Forschungsdatenmanagement zu ermöglichen. Beispielhaft sei hier die Zusammenarbeit mit den Exzellenzclustern [PhoenixD](#) und [3DMM2O](#), sowie [Matters of Activity](#)<sup>4</sup> genannt. Wir schlagen eine Brücke zwischen disziplinären, inter- und transdisziplinären Konzepten in Bezug auf Experiment, Simulation, Anwendung und Theorie. Dieser Prozess wird durch [Schnittstellenbildung](#) mit anderen Konsortien<sup>5</sup> unterstützt.

Zentral für dieses Bestreben ist eine **informationstheoretische Charakterisierung von Komplexität**. Es gibt deutlich komplexer strukturierte Information, als mit der Shannon-Entropie der Zustandsverteilung gemessen werden kann, wie eine Welle von Aktivitäten auf dem Gebiet der Komplexitätsmessung belegt. Wir stellen Registraturen zur Verfügung, die ein semantisches Mapping erlauben. Der schrittweise Aufbau disziplinübergreifender Ontologien wird langfristig eine **semantische Quantifizierung**<sup>6</sup> ermöglichen. Dies ermöglicht eine Physik semantischer Muster gebildet durch die Anwendung semantischer Metriken auf qualitative Systeme.<sup>7</sup> Wir initiieren und führen eine allgemeine Diskussion über die Funktion von Informationen über die **hierarchischen Ebenen der Natur** hinweg. NFDI4Phys ermöglicht die Erstellung und Pflege der notwendigen FAIRen Daten, Metadaten und Werkzeuge für alle betrachteten Ebenen.

FAIRes Datenmanagement ist das eine Ziel von NFDI4Phys, des Weiteren und mit gleicher Wichtigkeit geht es darum, in den Wissenschaften die **digitale Transformation** mit ihren massiven Auswirkungen auf die Gesellschaft zu gestalten und zu verantworten. Zudem wird es einen weiteren fundamentalen Wandel geben. Das Konsortium NFDI4Phys wird zusammen mit der Quantum-Alliance Konzepte für das Forschungsdatenmanagement für das **Quantencomputing** (Q-RDM) unter Einbeziehung von künstlicher Intelligenz entwickeln<sup>8</sup> und unter Beachtung der notwendigen Schnittstelle zwischen klassischen und Quantencomputern in Kollaboration implementieren.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass unsere universellen Konzepte eine **Rückkopplung** zwischen einem **serviceorientierten Forschungsdatenmanagement** (FDM) und der Physik auf allen Skalen und über alle Ebenen hinweg ermöglichen. Physik und FDM befruchten sich gegenseitig. Der NFDI-Prozess schafft und birgt weitreichende Möglichkeiten für alle Disziplinen sich auf eine noch nie dagewesene Weise weiterzuentwickeln und wirklich zusammenzuarbeiten. Wir haben die konkrete Vision, dass physikalische Prinzipien zusammen mit einer fachlich und geisteswissenschaftlich fundierten Semantik in einer gemeinsamen Anstrengung aller Disziplinen dazu beitragen, einen quantitativen semantischen Raum<sup>9</sup> zu entfalten.

Unser Konsortium ist in sieben Aufgabenbereiche strukturiert. Startpunkt für ein nachhaltiges FDM ist der Aufgabenbereich [FAIR Laboratory](#), in dem wir lokal interoperable Strukturen für Rohdaten und deren Verarbeitung und Verwaltung entwickeln. [Metadata & Ontologies](#) stellt Tools, Service-Interfaces und Expertise zur Verfügung, um den Transfer der lokalen Daten und Metadaten auf Basis harmonisierter Schemata in die öffentliche Domäne zu ermöglichen. Der Aufgabenbereich [Federated Repositories](#) knüpft an diese Schemata an und sorgt für die Auffindbarkeit von Daten und Prozessen für die internationale Gemeinschaft. Der Aufgabenbereich [Quality Criteria and Standards](#)

---

<sup>3</sup> Im Gegensatz zu den *Material Sciences*.

<sup>4</sup> *Material Humanities* bezeichnet ein neues Feld, das den Materialwissenschaften einen kulturellen Aspekt hinzufügt, im Gegensatz zu der oft rein technologischen Sichtweise der Naturwissenschaften.

<sup>5</sup> Gespräche laufen mit BERD, Biodiversity, Bioimaging, DataScience, 4InG, 4Health, MatWerk, METHODS, Neuro, TEXT+ und weiteren Konsortien.

<sup>6</sup> [Gibson & Fedorenko 2009](#), [Olivetti et al. 2020](#)

<sup>7</sup> Romane lassen sich z.B. nach der Anzahl der im Text vorkommenden Charakteristiken (Personen, Orte, Kapitel, Szenen), sowie nach den Maßzahlen einer quantitativen Stilistik (Häufigkeit von Wortarten, Verteilung der Satzlängen) anordnen, wissenschaftliche Literatur nach der Anzahl der Figuren, Tabellen und Referenzen, sowie Häufigkeit und Beziehung von Kennwörtern.

<sup>8</sup> Hier tritt zur klassischen Unsicherheit (durch einen stochastischen Einfluss der Umgebung auf ein System) die Superposition quantenmechanischer Zustände hinzu.

<sup>9</sup> Siehe Referenzen zu [Knowlets](#) und [Nanopublikationen](#)

berücksichtigt das Bedürfnis nach Vertrauenswürdigkeit und Zuverlässigkeit. Nur wenn die Transparenz der Datenqualität gesichert ist, kann eine vernünftige Nachnutzung erfolgen. Im Bereich [Evolving Infrastructures](#) werden Konzepte für aktuelles, als auch zukünftiges FDM entwickelt und bereitgestellt. Insbesondere beschäftigen wir uns hier mit Q-RDM für und letztendlich auf Quantencomputern. **Künstliche Intelligenz** wird das klassische Computing ergänzen und die neuen Möglichkeiten der **Quantencomputer** gestalten und nutzen. Der Bereich [Community Interactions](#) mit unseren neun Domänen agiert mittels dreier Kanäle. Informationen fließen durch Data-Literacy-Schulungen in die Communities und durch Umfragen in Surveys aus den Communities heraus. Die Leiter der Domänen und Aufgabenbereiche arbeiten zudem gemeinsam daran paradigmatische Anwendungsfälle in ihren Communities durchzuführen. Schließlich sorgt der letzte Aufgabenbereich für [Governance](#).

Unsere neun fachlichen Domänen gliedern sich wie folgt:

<a href="#">Atome und Moleküle</a>	<a href="#">Dynamik, Statistische Physik u Weiche Materie</a>	<a href="#">Quanteninformation&amp;KI</a>
<a href="#">Optik und Photonik</a>	<a href="#">Biologische Physik</a>	<a href="#">Biomedizinische Physik</a>
<a href="#">Kaltes Plasma</a>	<a href="#">Sozioökonomische Physik</a>	<a href="#">Transdisziplinäre Physik</a>

Sechs dieser Domänen orientieren sich an der Sektionsstruktur der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG). Darüber hinaus haben wir zwei sektionsunabhängige Domänen, nämlich Quanteninformation und Künstliche Intelligenz, sowie Biomedizinische Physik. Diese acht Domänen ergänzen die physikalischen Konsortien FAIRmat, PUNCH und Daphne derart, dass alle Physikdisziplinen abgedeckt werden. Im Gegensatz dazu repräsentiert unsere neunte Domäne, die transdisziplinäre Physik, diejenigen Bereiche, in denen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler arbeiten, die nicht in einer der klassischen Disziplinen der Physik verwurzelt sind. Diese Domäne entspricht nicht wie die anderen acht jeweils einem oder mehreren Teilgebieten der Physik, sondern versammelt einzelne paradigmatische Anwendungsfälle aus Feldern, die transdisziplinäre Zieldisziplinen der Physik sind. Alle Domänen sind durch die Hierarchie der Ebenen in der Natur konzeptionell verbunden ([Anderson 1972](#)). In jüngster Zeit wurde diese Idee erweitert ([E. Hoel 2017](#)) ([G. Ellis 2019](#)) und damit die Grundlage eines theoretischen Konzepts für ein minimal heterogenes - Forschungsdatenmanagements durch Betrachtung von Universalitätsklassen von Datenstrukturen gelegt. Wir arbeiten daran, diese universellen Muster domänenübergreifend in unserer täglichen Arbeit zu identifizieren.

Um die gesamte Spanne des FDM abzudecken, benötigen wir innovative und ganzheitliche Datenkonzepte. Wir sehen einen dringenden Interoperabilitätsbedarf jenseits vereinbarter Standardschemata, um dem aktiven Abstimmungsbedarf der Forschung genüge zu tun. Wir haben einen Kompatibilitätsanspruch an lokale Metadatenerzeugung. Diese sollten automatisiert (aber mit manueller Kontrolle) semantisch integrierbar sein, aber nicht a priori standardisiert sein müssen. **FAIR Digital Objects**, wie oben beschrieben, sowie die Konzeptualisierung typischer Arbeitsschritte in kanonische Arbeitsabläufe, Canonical Workflow Framework of Research ([CWFRs](#)), leisten dies. Sie erlauben dynamische oder gar unbekannte Metadaten-Schemata zu teilen und heterogene aber wiederholt auftretende Arbeitsschritte zu abstrahieren. CWFRs sind selbst zeitabhängige FDOs, die als komplex strukturiertes Netzwerk aufgefasst werden können. FDM lässt sich also selbstreflexiv als die Dynamik eines komplexen dualen Netzwerkes beschreiben. Die Physik hat in den vergangenen Dekaden bereits ein tiefes Verständnis derartiger Systeme erreicht. Die weitere Entwicklung der Physik komplexer Netzwerke und die Ausarbeitung eines nachhaltigen FAIRen FDMs fördern sich gegenseitig.

<b>Co-Sprecher/in</b>	<b>Zugehörige Institution</b>
Prof. Dr. Sören Auer <a href="mailto:Auer@tib.eu">Auer@tib.eu</a>  Susanne Arndt <a href="mailto:Susanne.Arndt@tib.eu">Susanne.Arndt@tib.eu</a>	Technische Informationsbibliothek (TIB) Welfengarten 1B 30167 Hannover
Prof. Dr. Thorsten Fehr <a href="mailto:fehr@uni-bremen.de">fehr@uni-bremen.de</a>	Universität Bremen Bibliothekstraße 1 28359 Bremen
Prof. Dr. Holger Frahm <a href="mailto:frahm@itp.uni-hannover.de">frahm@itp.uni-hannover.de</a>	Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover Appelstraße 2 30167 Hannover
Prof. Dr. Marc-Thorsten Hütt <a href="mailto:m.huett@jacobs-university.de">m.huett@jacobs-university.de</a>	Jacobs University Campus Ring 1 28759 Bremen
Dr. Holger Israel <a href="mailto:holger.israel@ptb.de">holger.israel@ptb.de</a>	Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB) Bundesallee 100 38116 Braunschweig
Prof. Dr. Karl Jansen <a href="mailto:Karl.Jansen@desy.de">Karl.Jansen@desy.de</a>	Stiftung Deutsches Elektronen-Synchrotron (DESY) Platanenallee 6 15738 Zeuthen
Prof. Dr. Josef Käs <a href="mailto:jkaes@physik.uni-leipzig.de">jkaes@physik.uni-leipzig.de</a>	Universität Leipzig Linnéstraße 5 04103 Leipzig
Prof. Dr. Frank Kirchner <a href="mailto:frank.kirchner@dfki.de">frank.kirchner@dfki.de</a>	DFKI, Bremen Robert-Hooke-Str. 1 28359 Bremen
Prof. Dr. Stefan Krieg <a href="mailto:s.krieg@fz-juelich.de">s.krieg@fz-juelich.de</a>	Forschungszentrum Jülich GmbH Jülich Supercomputing Centre (JSC) 52425 Jülich
Prof. Dr. Stefan Luther <a href="mailto:stefan.luther@ds.mpg.de">stefan.luther@ds.mpg.de</a>	MPI für Dynamik und Selbstorganisation Am Faßberg 17 37077 Göttingen
Prof. Dr. Uwe Morgner <a href="mailto:morgner@iqo.uni-hannover.de">morgner@iqo.uni-hannover.de</a>	Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover Welfengarten 1 30167 Hannover
Prof. Dr. Giovanna Morigi <a href="mailto:giovanna.morigi@physik.uni-saarland.de">giovanna.morigi@physik.uni-saarland.de</a>	Universität des Saarlandes Campus, Geb. E2 6 66123 Saarbrücken

Prof. Dr. Joachim Rädler <a href="mailto:raedler@lmu.de">raedler@lmu.de</a>	Ludwig-Maximilians-Universität München Fakultät für Physik Geschwister-Scholl-Platz 1 80539 München
Prof. Dr. Harald Sack <a href="mailto:harald.sack@fiz-karlsruhe.de">harald.sack@fiz-karlsruhe.de</a>	FIZ Karlsruhe Leibniz-Institut für Informationsinfrastruktur GmbH (FIZ KA) Hermann-von-Helmholtz-Platz 1 76344 Eggenstein-Leopoldshafen
Prof. Dr. Georgeta Salvan <a href="mailto:salvan@physik.tu-chemnitz.de">salvan@physik.tu-chemnitz.de</a>	Technische Universität Chemnitz Institut für Physik Reichenhainer Straße 70 09126 Chemnitz
Dr. Lena Steinmann <a href="mailto:lena.steinmann@uni-bremen.de">lena.steinmann@uni-bremen.de</a>	Universität Bremen Bibliothekstraße 1 28359 Bremen
Dr. Alexander Schlemmer <a href="mailto:alexander.schlemmer@ds.mpg.de">alexander.schlemmer@ds.mpg.de</a>	MPI für Dynamik und Selbstorganisation Am Faßberg 17 37077 Göttingen
Prof. Dr. Stephan Schlemmer <a href="mailto:schlemmer@ph1.uni-koeln.de">schlemmer@ph1.uni-koeln.de</a>	Universität zu Köln Zülpicher Straße 77 50937 Köln
Prof. Dr. Holger Stark <a href="mailto:holger.stark@tu-berlin.de">holger.stark@tu-berlin.de</a>	Technische Universität Berlin Hardenbergstraße 36 10623 Berlin
Prof. Dr. Marc Timme <a href="mailto:marc.timme@tu-dresden.de">marc.timme@tu-dresden.de</a>	Technische Universität Dresden Zellescher Weg 17 01069 Dresden
Prof. Dr. Martin Wegener <a href="mailto:martin.wegener@kit.edu">martin.wegener@kit.edu</a>  Frank Tristram <a href="mailto:frank.tristram@kit.edu">frank.tristram@kit.edu</a>	Karlsruhe Institute of Technology (KIT) Schlossplatz 19 76131 Karlsruhe
Prof. Dr. Dirk Uhrlandt <a href="mailto:uhrlandt@inp-greifswald.de">uhrlandt@inp-greifswald.de</a>	Leibniz-Institut für Plasmaforschung und Technologie e.V. Felix-Hausdorff-Str. 2 17489 Greifswald