

Die wachsende Bedeutung von Forschungssoftware

8

Wie in allen Lebensbereichen findet auch in der Wissenschaft eine immer stärkere Digitalisierung statt. Dieser digitale Wandel bietet viele Chancen, ist aber auch mit tiefgreifenden Veränderungen und Risiken verbunden. Um sich diesen neuen Herausforderungen zu stellen, gründete die Allianz der deutschen Wissenschaftsorganisationen 2008 die Schwerpunktinitiative „Digitale Information“. Eines der Aufgaben- und Arbeitsfelder dieser Initiative besteht darin, das Bewusstsein für die Relevanz von Software im Forschungsprozess zu schärfen und Grundlagen für einen effizienten und nachhaltigen Umgang mit wissenschaftlicher Software zu schaffen.

Die Schwerpunktinitiative „Digitale Information“ ist ein gemeinsames Projekt der maßgeblichen Akteure im deutschen Wissenschaftssystem, darunter die Alexander von Humboldt-Stiftung, die Deutsche Akademie der Naturforscher Leopoldina, die Deutsche Forschungsgemeinschaft, der Deutsche Akademische Austauschdienst, die Fraunhofer-Gesellschaft, die Helmholtz-Gemeinschaft Deutscher Forschungszentren, die Hochschulrektorenkonferenz, die Leibniz-Gemeinschaft, die Max-Planck-Gesellschaft sowie der Wissenschaftsrat. Einer breiteren akademischen Öffentlichkeit ist sie u. a. durch das Projekt „DEAL“ bekannt, mit dem das Ziel verfolgt wird, bundesweite Lizenzverträge für das gesamte Portfolio elektronischer Zeitschriften großer Wissenschaftsverlage abzuschließen. Ein erklärtes Ziel der Initiative „Digitale Information“ ist, die Wissenschaftsgemeinschaft durch politische und fachliche Grundentscheidungen mit einer digitalen Informationsinfrastruktur auszustatten, die eine optimale Forschung ermöglicht. Zugleich dokumentiert sie den Willen, gemeinsam den digitalen Wandel in der Forschung voranzutreiben und zu gestalten.

Im Zuge des aktuellen Arbeitsprogrammes der Allianz-Initiative für 2018 bis 2022 werden die acht Handlungsfelder „Wissenschaftliches Publikationssystem“, „Digitale Werkzeuge – Software und Dienste“, „Digitale Datensammlungen und Textkorpora“, „Förderieren von IT-Infrastruktur“, „Digitales Lernen, Lehren und Vernetzen“, „Digital qualifiziertes Personal“, „Recht für Wissenschaft im digitalen Zeitalter“ und „Wissenschaftspraxis“ bearbeitet. In diesen Handlungsfeldern erarbeiten Arbeitsgruppen, die mit Vertretern aller teilnehmenden Wissenschaftsorganisationen besetzt sind, Lösungsansätze und tragen sie in die Forschungsgemeinschaft.

Wir wollen hier exemplarisch von der Arbeit der Arbeitsgruppe „Digitale Werkzeuge – Software und Dienste“ berichten, deren Mitglieder wir sind. Unser Ausgangspunkt ist, dass Software im wissenschaftlichen Alltag aufgrund wachsender Datenmengen und der zunehmenden Anwendung numerischer Simulationen immer weiter an Bedeutung gewinnt. Unter Software verstehen wir hier ein breites Spektrum von digitalen Artefakten,

- beginnend vom kleinen „Shell-Skript“, das ein einzelner Doktorand nutzt, um z. B. seine Mikroskopiebilder zu bearbeiten,
- über umfangreiche Softwareprojekte, die von einer Entwicklercommunity gemeinsam auf dem Onlinedienst GitHub, der Software-Entwicklungsprojekte auf seinen Servern bereitstellt, entwickelt werden,
- bis hin zum Webservice, der genutzt wird, um große Forschungsdaten zu organisieren.

Trotz ihrer zentralen Bedeutung wird Forschungssoftware, d. h. eigens zum wissenschaftlichen Erkenntnisgewinn erstellte Software-Anwendungen und -Bibliotheken, häufig noch eher stiefmütterlich behandelt. Dies betrifft verschiedene Ebenen, die von der langfristigen Finanzierung qualifizierten Personals bis zur Publikation des Quellcodes reichen. Obwohl die eingesetzte Software und deren Nutzung fundamental beeinflusst, wie aus rohen Daten Ergebnisse und neues Wissen generiert werden, ist z. B. eine Offenlegung von Quellcode und genutzten Laufparametern bei weitem noch nicht überall Standard. Exemplarische Fälle zeigen, wie fehlerhafte Software ganze Forschungsbereiche um Jahre zurückwerfen kann (z. B. Eklund et al., 2016, PNAS, <https://doi.org/10.1073/pnas.1602413113>). Trotz dieser mahnenden Beispiele fehlt es in den meisten Forschungsinstitutionen noch an einer systematischen Adressierung dieser Thematik.

Ziel der Arbeitsgruppe „Digitale Werkzeuge – Software und Dienste“ ist es, das Bewusstsein für die Relevanz von Software im Forschungsprozess zu schärfen und gleichzeitig die nötigen Grundlagen für effiziente Entwicklung, Betrieb und Umgang mit wissenschaftlicher Software zu schaffen. Hierbei versuchen wir, die verschiedenen Facetten des Problems sowie unterschiedliche Personenkreise (vom Entwickler bis zum Wissenschaftsmanager) zu adressieren. Zu den behandelten Themenkomplexen zählen z. B. Richtlinien für die Qualitätssicherung bei der Entwicklung von Software wie etwa automatische Tests und aussagekräftige Dokumentation, rechtliche Fragestellungen bei der Bereitstellung von Software und im Betrieb von Services als

Abbildung 1: Handlungsfelder der Allianz-Initiative „Digitale Information“



Informationsinfrastruktur sowie Möglichkeiten, Software separat oder im Zusammenspiel mit Daten zu publizieren und zu zitieren. Mit diesen neuen Ansprüchen ist natürlich auch eine Anpassung der Aus- und Fortbildung von wissenschaftlichem Personal im Hinblick auf Software nötig. Zudem muss die Finanzierung der Entwicklung von Forschungssoftware überdacht und verbessert werden.

Als eine erste Maßnahme hat unsere Arbeitsgruppe eine Handreichung entwickelt, die sich primär an die Leitungsebene sowie das Wissenschaftsmanagement richtet und grundsätzlich den Problemraum aufspannt, um die Herausforderungen beim Umgang mit Forschungssoftware stärker ins Bewusstsein zu rücken. Auf Basis dieser Handreichung entwickeln wir nun konkretere Handlungsempfehlungen, darunter etwa Richtlinien für die Softwareentwicklung in wissenschaftlichen Einrichtungen für Software-Entwickler ebenso wie für die Leitungsebene. Bezüglich des Kernziels einer nachhaltigen Softwareentwicklung denkt die Arbeitsgruppe über die Möglichkeit einer Kombination von verbindlichen und optionalen Richtlinien sowie über die Idee einer Art von „Baukasten“ zur Orientierung und (weiterhin) individuellen Gestaltung eigener Richtlinien für Forschungsinstitute nach.

Bei allen Maßnahmen der Arbeitsgruppen wird der Dialog der verschiedenen Fachdisziplinen gesucht, damit spezifische und nachhaltige Lösungen erarbeitet werden können. Wir möchten das Thema langfristig in der deutschen Politik sowie in der Forschungspraxis verankern und sehen hier Vorbilder wie z. B. das Software Sustainability Institute (SSI) aus dem Vereinigten Königreich, das im Jahr 2010 an der Universität Edinburgh gegründet wurde und ein Ansprechpartner für die Fragestellungen im Bereich wissenschaftlicher Software ist. Das Institut setzt sich u. a. für eine

stärkere Anerkennung der Rolle von Softwareentwicklern im Forschungsprozess ein. Das Motto des Instituts „Better software, better research“ beschreibt passend auch das Ziel der Arbeitsgruppe „Digitale Werkzeuge“.

Onlinepräsenz der Schwerpunktinitiative „Digitale Information“ (AG 2): <https://www.allianzinitiative.de/handlungsfelder/digitale-werkzeuge-software-und-dienste/>

Handreichung der AG „Digitale Werkzeuge“ zum Umgang mit Forschungssoftware: <https://zenodo.org/record/1172970#.W5A9rroyWpo>

Autoren

Konrad Förstner ist Professor für Informationskompetenz an der TH Köln und leitet gleichzeitig den Fachbereich Informationsdienste bei ZB MED (Informationzentrum Lebenswissenschaften). Im Zuge seiner Forschung im Bereich Bioinformatik und Systembiologie hat er zahlreiche wissenschaftliche Softwareentwicklungsprojekte durchgeführt und begleitet.
E-Mail: foerstner@zbmed.de

Dr. rer. nat. habil. Georg Feulner ist stellvertretender Leiter der Abteilung Erdsystemanalyse am Potsdam-Institut für Klimafolgenforschung, wo er Arbeitsgruppen zur Klimamodellentwicklung und zur Klimageschichte leitet. Er studierte Physik an der University of Cambridge (Großbritannien) und an der Ludwig-Maximilians-Universität München, an der er im Jahr 2004 auch seine Promotion abschloss. Zu seinen Forschungsschwerpunkten zählen Klimaveränderungen in der Erdgeschichte, die Energiebilanz des Klimasystems sowie der Einfluss der Sonnenaktivität auf das Klima. Er lehrt an der Universität Potsdam, an der er sich 2018 habilitiert hat.
E-Mail: feulner@pik-potsdam.de

Dr. Klaus Wannemacher ist wissenschaftlicher Mitarbeiter im Geschäftsbereich Hochschulmanagement des HIS-Instituts für Hochschulentwicklung e.V.
E-Mail: wannemacher@his-he.de



Konrad Förstner



Georg Feulner



Klaus Wannemacher