

Bausteine Forschungsdatenmanagement
Empfehlungen und Erfahrungsberichte für die Praxis von
Forschungsdatenmanagerinnen und -managern

Sicherstellung der Reproduzierbarkeit von Forschungsergebnissen durch Bewahrung des Zugriffs auf Forschungssoftware

Dirk von Suchodoletzⁱ Peter Brettschneiderⁱⁱ Alexandra Axtmannⁱⁱⁱ
Maximilian Heber^{iv} Lars Oberländer^v Jan Leendertse^{vi} Irene Schumm^{vii}
Olaf Brandt^{viii} Karsten Schmidt^{ix} Livia Gertis^x Michael Selzer^{xi}
Robert Ulrich^{xii} Dorothea Iglezakis^{xiii} Valerie Boda^{xiv}

2023

Zitiervorschlag

von Suchodoletz, Dirk, Brettschneider, Peter, Axtmann, Alexandra, Heber, Maximilian, Oberländer, Lars, Leendertse, Jan, Schumm, Irene, Brandt, Olaf, Schmidt, Karsten, Gertis, Livia, Selzer, Michael, Ulrich, Robert, Iglezakis, Dorothea, Boda, Valerie. 2023. Sicherstellung der Reproduzierbarkeit von Forschungsergebnissen durch Bewahrung des Zugriffs auf Forschungssoftware. *Bausteine Forschungsdatenmanagement. Empfehlungen und Erfahrungsberichte für die Praxis von Forschungsdatenmanagerinnen und -managern* Nr. 5/2023: S. 3-13. DOI: [10.17192/bfdm.2023.5.8555](https://doi.org/10.17192/bfdm.2023.5.8555).

Dieser Beitrag steht unter einer
[Creative Commons Namensnennung 4.0 International Lizenz \(CC BY 4.0\)](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

- ⁱORCID: 0000-0002-4382-5104
- ⁱⁱORCID: 0000-0003-0551-1363
- ⁱⁱⁱORCID: 0000-0001-5303-5352
- ^{iv}ORCID: 0009-0005-2208-6575
- ^vORCID: 0000-0003-0337-3024
- ^{vi}ORCID: 0000-0001-5676-493X
- ^{vii}ORCID: 0000-0002-0167-3683
- ^{viii}ORCID: 0000-0002-3379-1190
- ^{ix}ORCID: 0000-0002-8929-5970
- ^xORCID: 0000-0002-4382-5104
- ^{xi}ORCID: 0000-0002-9756-646X
- ^{xii}ORCID: 0000-0001-9063-2703
- ^{xiii}ORCID: 0000-0002-8524-0569
- ^{xiv}ORCID: 0000-0003-3399-7532

Abstract

Mit Blick auf die Replikationskrise in der Wissenschaft und die damit verbundenen Grundsatzfragen nach Validierbarkeit und Reproduzierbarkeit von Forschungsergebnissen rückt neben Forschungsdaten immer mehr auch Forschungssoftware in das Blickfeld von Wissenschaftsmanagement und Open-Science-Initiativen. Vor diesem Hintergrund widmet sich das vorliegende Papier mit Blick auf gute wissenschaftliche Praxis und FAIR-Prinzipien dem verantwortungsvollen Umgang mit Forschungssoftware. Im Anschluss an eine Einordnung der Bedeutung von Software im Forschungskontext werden unterschiedliche Ausformungen von Forschungssoftware dargestellt sowie eine Risikobetrachtung vorgenommen. Auf dieser Basis werden umfassende Empfehlungen ausgesprochen, wie auf unterschiedlichen institutionellen Ebenen dazu beigetragen werden kann, dass Forschungssoftware langfristig und nachhaltig verfügbar und nachnutzbar bleiben kann.

1 Einleitung und Abgrenzung

Wissenschaft ist geprägt von einer sukzessiven Suche nach neuer Erkenntnis¹. Dies impliziert, dass der Rückgriff auf alle Formen von Forschungsergebnissen sichergestellt werden muss, da nur auf dieser Grundlage neue Forschungsansätze verfolgt oder frühere Ergebnisse validiert werden können. Daher ist es nur folgerichtig, dass die DFG im Kodex *Leitlinien zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis* einfordert, dass „die [veröffentlichten Forschungsergebnissen] zugrunde liegenden Forschungsdaten [...] in der Regel für einen Zeitraum von zehn Jahren zugänglich und nachvollziehbar in der Einrichtung, in welcher sie entstanden sind, oder in standortübergreifenden Repositorien aufbewahrt“ werden müssen². Forschungsdaten wiederum sind nur im jeweiligen Kontext sinnvoll interpretier- und nachnutzbar. Entsprechend wird der nachhaltige Umgang mit Software implizit als Teil eines FAIRen Datenmanagements (Findable, Accessible, Interoperable, Reuseable)³ gesehen. In der Kommunikation insbesondere mit Forschenden, aber auch mit weiteren Stakeholdern gilt es allerdings, Forschungssoftware auch als eigenständiges Themenfeld zu betrachten und ihre besonderen Anforderungen im Hinblick auf den erfolgreichen Langzeitzugriff auf Forschungs-

¹Vgl. BVerfG, NJW 1973, S. 1176.

²Deutsche Forschungsgemeinschaft. „Leitlinien Zur Sicherung Guter Wissenschaftlicher Praxis. Leitlinie 17.“ Zenodo, 20. April 2022. <https://doi.org/10.5281/zenodo.6472827>; siehe dazu auch Deutsche Forschungsgemeinschaft. „Open Science als Teil der Wissenschaftskultur. Positionierung der Deutschen Forschungsgemeinschaft.“ Zenodo, 16.10.2022 <https://doi.org/10.5281/zenodo.7193838> sowie Deutsche Forschungsgemeinschaft. „Wissenschaftliches Publizieren als Grundlage und Gestaltungsfeld der Wissenschaftsbewertung.“ Zenodo, 18. Mai 2022. <https://doi.org/10.5281/zenodo.6538163>.

³Vgl. Wilkinson, Mark et al. „The FAIR Guiding Principles for Scientific Data Management and Stewardship“. *Scientific Data*, Nr. 3 (2016). <https://doi.org/10.1038/sdata.2016.18>.

ergebnisse zu berücksichtigen. Vor diesem Hintergrund wird das vorliegende Papier⁴ zunächst die Bedeutung von Software im Forschungskontext darlegen, sowie verdeutlichen, welche Ausformungen von Forschungssoftware existieren. Anschließend erfolgt eine Betrachtung des von Forschungssoftware ausgehenden Risikos für die Reproduzierbarkeit von Forschungsergebnissen. Auf Basis all dessen werden konkrete Empfehlungen ausgesprochen, wie auf verschiedenen Ebenen darauf hingewirkt werden kann, dass Forschungssoftware langfristig verfügbar und nachnutzbar bleibt. Das Papier betrachtet bewusst nicht die bereits für die Reproduzierbarkeit von Daten ausführlicher diskutierten Themen Versionskontrolle und Versionsvergabe von Software und die Bereitstellung der dazu notwendigen Hardwarebasis⁵. Auch etablierte Vorgehensweisen der Qualitätssicherung wie Test Driven Development und Continuous Integration werden an dieser Stelle nicht thematisiert. Beide Thematiken wurden bereits erschöpfend behandelt und werden somit nicht erneut aufgegriffen.

2 Software im Forschungskontext

Aufgrund ihrer Rolle im Entstehungs- und Verarbeitungskontext von Forschungsdaten ist Forschungssoftware ein elementarer Baustein der langfristigen Sicherung von Forschungsergebnissen. Dies ist nicht zuletzt vor dem Hintergrund der längst in einer breiten Öffentlichkeit diskutierten „Replikationskrise“⁶ der Wissenschaft essenzi-

⁴Dieses Papier basiert auf Diskussionen der gemeinsamen Arbeitsgruppe Recht der baden-württembergischen Science Data Center und des Projektes bw2FDM sowie auf dem DINI-Workshop *Forschungssoftware managen* gehaltenen Vortrag *Sicherstellung der Reproduzierbarkeit von Forschungsergebnissen durch Bewahrung des Zugriffs auf Forschungssoftware*. Zu den Science Data Center in Baden-Württemberg vgl. <https://forschungsdaten.info/fdm-im-deutschsprachigen-raum/deutschland/baden-wuerttemberg/science-data-center/>; zum AK FDM vgl. <https://forschungsdaten.info/fdm-im-deutschsprachigen-raum/deutschland/baden-wuerttemberg/arbeitskreis-forschungsdatenmanagement/>; Informationen zum Workshop finden sich unter https://www.forschungsdaten.org/index.php/Workshop_Forschungssoftware_managen#Programm, alle zugegriffen 17. November 2022. Das Papier wird vom Arbeitskreis der Leiterinnen und Leiter der wissenschaftlichen Rechenzentren in Baden-Württemberg (ALWR) unterstützt.

⁵Vgl. Hörnschemeyer, Jörg. „Möchten Sie das Programm wirklich löschen?“. Warum sich die Geisteswissenschaften mit der Nachhaltigkeit von Forschungssoftware auseinandersetzen sollten“. *Quellen und Forschungen aus italienischen Archiven und Bibliotheken*, Nr. 99/ 1 (2019): 491–501. <https://doi.org/10.1515/qufiab-2019-0019>; Van Lissa et al. „WORCS: A Workflow for Open Reproducible Code in Science“. *Data Science*, Nr. 4/ 1 (2021): 29–49. <https://doi.org/10.3233/DS-210031>.

⁶Pashler, Harold, und Eric-Jan Wagenmakers. „Editors’ Introduction to the Special Section on Replicability in Psychological Science: A Crisis of Confidence?“. *Perspectives on Psychological Science*, Nr. 7/6 (2012): 528–30. <https://doi.org/10.1177/1745691612465253>

ell⁷. Um dieser Glaubwürdigkeitskrise zu begegnen, ist ein verantwortungsvoller und nachhaltiger Umgang mit Forschungsdaten von entscheidender Bedeutung: Es gilt Grundlagen zu schaffen, die eine Replikation von Forschung überhaupt erst ermöglichen. Die Archivierung – sowie idealerweise die öffentliche Zugänglichmachung – der den Forschungsergebnissen zugrundeliegenden Forschungsdaten entsprechend den FAIR-Prinzipien ist hierfür ein wichtiger Schritt, ist aber allein nicht ausreichend. So wird eine Replikation in der Regel nur möglich sein, wenn auch die zur Datenerhebung, -verarbeitung und -auswertung eingesetzte Forschungssoftware gemäß den FAIR-Prinzipien verfügbar ist⁹. In diesem Zusammenhang ist es den DFG-Leitlinien folgend Teil der guten wissenschaftlichen Praxis, dass die verwendete Software kenntlich gemacht und der Quellcode entwickelter Software dokumentiert wird¹⁰. Darüber hinaus ist „selbst programmierte Software unter Angabe des Quellcodes öffentlich zugänglich“ zu machen¹¹. Empfehlungen zum Umgang mit nichtquelloffener und kommerzieller Software fehlen hingegen.

Die Anforderungen an den Umgang mit Software in ihren verschiedenen Repräsentationen (vgl. „Ausformungen von Forschungssoftware“) unterscheiden sich je nach Einsatzgebiet und fachlicher Community. Während in vielen Fällen Nutzende mit eher kurzen Produktlebenszyklen von Software gut umgehen können, bestehen durch die Forderung nach Reproduzierbarkeit sowohl im Wissenschaftsbetrieb als auch im Rah-

⁷So gelang es dem *Social Sciences Replication Project* lediglich in 62% von 21 in *Nature und Science* publizierten Studien, den zuvor beobachteten Effekt zu reproduzieren – zudem meist nur in deutlich abgeschwächter Form. Vgl. Camerer, Colin F. et al. "Evaluating the Replicability of Social Science Experiments in Nature and Science between 2010 and 2015". *Nature Human Behaviour*, Nr. 2 (2018): 637–44. <https://doi.org/10.1038/s41562-018-0399-z>. Ähnliche Ergebnisse erzielt eine Studie zur Replikation wirtschaftswissenschaftlicher Untersuchungen: Chang, Andrew C., und Phillip Li. "Is Economics Research Replicable? Sixty Published Papers from Thirteen Journals Say 'Usually Not'". *Finance and Economics Discussion Series (FEDS)* (2015). <https://doi.org/10.17016/FEDS.2015.083>. Die *American Statistical Association* sah sich gar genötigt, eine Klarstellung zur statistischen Signifikanz von Ergebnissen zu veröffentlichen. Vgl. Wasserstein, Roland L., und Nicole A. Lazar. "The ASA Statement on P-Values: Context, Process, and Purpose". *The American Statistician*, Nr. 70/2 (2016): 129–33. <https://doi.org/10.1080/00031305.2016.1154108>. Letztlich geht es also um nicht weniger als die Vertrauenswürdigkeit der Wissenschaft insgesamt.

⁸Vgl. Kovic, Marko. "Die Wissenschaft in der Replikationskrise". *Neue Zürcher Zeitung*, 6. März 2016. <https://www.nzz.ch/wissenschaft/physik/fallstricke-der-statistik-die-wissenschaft-in-der-replikationskrise-ld.86330>, zugegriffen 17. November 2022.

⁹Vgl. Lamprecht, Anna-Lena et al. "Towards FAIR Principles for Research Software". *Data Science*, Nr. 3/1 (2020): 37–59. <https://doi.org/10.3233/DS-190026>; vgl. Arbeitskreis Open Science der Helmholtz-Gemeinschaft. "Zugang zu und Nachnutzung von wissenschaftlicher Software. Positionspapier des Arbeitskreises Open Science der Helmholtz-Gemeinschaft". 2017. <https://os.helmholtz.de/open-research-software/zugang-und-nachnutzung/>, zugegriffen 17. November 2022.

¹⁰Deutsche Forschungsgemeinschaft. "Leitlinien Zur Sicherung Guter Wissenschaftlicher Praxis. Leitlinie 7." Zenodo, 20. April 2022. <https://doi.org/10.5281/zenodo.6472827>; Deutsche Forschungsgemeinschaft. "Leitlinien Zur Sicherung Guter Wissenschaftlicher Praxis. Leitlinie 12." Zenodo, 20. April 2022. <https://doi.org/10.5281/zenodo.6472827> [alle 17.11.2022].

¹¹Deutsche Forschungsgemeinschaft. "Leitlinien Zur Sicherung Guter Wissenschaftlicher Praxis. Leitlinie 13." Zenodo, 20. April 2022. <https://doi.org/10.5281/zenodo.6472827> [17.11.2022].

men der industriellen Anwendung Erwartungen nach einer langfristigen Verfügbarkeit sowie nach rechtlicher Klarheit, was eine potentielle Nachnutzung angeht. Entsprechend sind hier nicht nur technische Aspekte wie die Ausführbarkeit einer bestimmten Version, sondern auch rechtliche Implikationen beispielsweise bezüglich Lizenzen und deren Verwendung von hoher Bedeutung. Während die technischen Herausforderungen der Sicherstellung eines langfristigen Zugriffs bereits seit Längerem bearbeitet werden, sind viele Fragen des rechtlich-organisatorischen Rahmens offen.

3 Ausformungen von Forschungssoftware

Im Zusammenhang mit Forschungssoftware sind zunächst zwei grundlegende Unterscheidungen zu treffen: zum einen die Unterscheidung in Forschungssoftware und Software für Forschung¹², zum anderen die Unterscheidung in quelloffene und herstelleregebundene Software.

- **Forschungssoftware** ist explizit für die Zwecke von Forschung erstellte Software bzw. Software, die Funktionen für wissenschaftliche Analysen, Berechnungen oder andere Formen der wissenschaftlichen Datenverarbeitung bereitstellt. Vielfach kennzeichnet solche Software, dass verarbeitete Daten in eigenen, herstellerebundenen und oft nicht (ausreichend) dokumentierten Formaten abgelegt werden. Die zukünftige Nutzung ist in vielen Fällen an die Verfügbarkeit genau dieser Software (ggf. sogar nur in einer bestimmten Version) gebunden.
- **Software für Forschende** bezeichnet alle diejenigen digitalen (Hilfs-)Werkzeuge, die zusätzlich im Kontext eines Forschungsvorhabens genutzt werden. Dazu gehören z.B. Editoren, Bildbearbeitungssoftware oder unterschiedliche Programme zur Verarbeitung von Texten oder Tabellen.

In der Forschung kommt an vielen Stellen **quelloffene Software** zum Einsatz oder wird für einen speziellen Zweck im Rahmen von Forschungsvorhaben entwickelt. Für quelloffene Software wurden bereits Überlegungen zur Vergabe geeigneter Lizenzen und Anforderungen an die Versionskontrolle und Dokumentation publiziert¹³. Ebenso haben verschiedene Forschungseinrichtungen Richtlinien zum Umgang mit solchen Pro-

¹²Die Definition folgt Lamprecht, Anna-Lena et al. "Towards FAIR Principles for Research Software". *Data Science*, Nr. 3/1 (2020): 37–59. <https://doi.org/10.3233/DS-190026>.

¹³Vgl. Hörnschemeyer, Jörg. "Möchten Sie das Programm wirklich löschen?". Warum sich die Geisteswissenschaften mit der Nachhaltigkeit von Forschungssoftware auseinandersetzen sollten". *Quellen und Forschungen aus italienischen Archiven und Bibliotheken*, Nr. 99/ 1 (2019): 491–501.; Appel, Franziska et al. (2021) "Forschungssoftware – Nachhaltige Entwicklung und Unterstützung" *IAMO Policy Brief*, Nr. 42 (2021): <https://doi.org/10.22004/ag.econ.314673> [03.05.2023]; Röwenstrunk, Daniel. "Langzeitverfügbarkeit von wissenschaftlicher Software im Bereich historisch-kritischer Musikedition". *Bibliothek, Forschung und Praxis*, Nr. 42.2. (2018). <https://doi.org/10.1515/bfp-2018-0029>

dukten erlassen¹⁴. Vor diesem Hintergrund werden die Aspekte Lizenzierung, Dokumentation und Versionskontrolle hier nicht näher erläutert. Konkrete mit diesen Aspekten zusammenhängende Empfehlungen werden im weiteren Verlauf des Papiers ausgesprochen.

Forschung bewegt sich beim Einsatz von Software in einem Spannungsfeld. So ist in etlichen Fällen die Nutzung herstelleregebundener Produkte nicht vermeidbar und wird aus technischen, methodischen oder finanziellen Gründen vorgezogen. Insbesondere besteht ein Interesse der Forschenden daran, im jeweiligen Gebiet Instrumente und Softwarewerkzeuge zu nutzen, die dem neuesten Stand der Technik entsprechen. Ökonomische Rahmenbedingungen führen dazu, dass bei kommerzieller Software häufig Eigenschaften wie kurze Produktzyklen, Closed Source und mangelnde Anpassbarkeit zu beobachten sind. Diese stehen einer langfristigen Reproduzierbarkeit und Nachnutzung entgegen. Zudem kann sich herstelleregebundene Software aufgrund von zeit-, dienst- oder nutzergebundener Lizenzen einem gesicherten Langzeitzugriff entziehen. Im Folgenden wird das aus diesen Umständen erwachsende Risiko skizziert.

4 Risikobetrachtungen

Sowohl bei quelloffener als auch bei herstelleregebundener Software stehen verschiedene Faktoren einer langfristigen Verfügbarkeit entgegen. Dazu zählen bei nicht- quelloffenen Produkten Markteingriffe, Produkt- oder Firmenpolitik sowie das Auslaufen des Hardware- oder Softwaresupports. Bei quelloffener Software, die vielfach im Rahmen von Projekten entwickelt wird, kann es geschehen, dass das Interesse erlischt und Folgefinanzierungen fehlen, sodass das für Weiterentwicklung und Support notwendige Personal nach Ende des entsprechenden Projekts nicht mehr zur Verfügung steht.

Grundsätzlich ist es daher ratsam, anzustreben, dass die in der Forschung eingesetzten Werkzeuge von den Forschenden über die bloße Anwendung hinaus verstanden werden¹⁵. Insgesamt geht es darum, zu erfassen, welche möglichen Folgewirkungen der Einsatz eines Werkzeugs über die eigene Forschung hinaus haben kann. Dies schließt Kenntnisse darüber ein, wie mit Werkzeugen so umgegangen werden kann, dass sie u.a. mit Blick auf die Replikationskrise nachhaltig eingesetzt werden können. Software bildet hier keine Ausnahme, gerade Closed-Source-Software stellt allerdings

¹⁴Erenli, Kai. "Die rechtliche Relevanz von Open Source Lizenzen unter Berücksichtigung praktischer Problemstellungen". 2008. <http://www.it-law.at/wp-content/uploads/2014/09/Rechtliche-Rahmenbedingungen-von-Open-Source---Erenli.pdf>, zugegriffen 17. November 2022.

¹⁵Für den Bereich der Kardiologie anschaulich geschildert: Voigt, Jens-Uwe. "Making a Black Box Transparent". *European Heart Journal - Cardiovascular Imaging*, Nr. 14/ (2013): 201–202. <https://doi.org/10.1093/ehjci/jes213>.

für die Forschung oft ein „enigma“ dar¹⁶. Mit Blick auf Replikation und Offenheit entsteht so eine potenziell problematische Unschärfe, die mit den Grundprinzipien der guten wissenschaftlichen Praxis schwer zu vereinbaren ist.

Darüber hinaus können Versionsupdates im Extremfall auch angesichts ansonsten unveränderter Bedingungen zu abweichenden Ergebnissen führen. Falls derartige Änderungen an der Software unzureichend dokumentiert sind, können Forschungsergebnisse so unbemerkt verändert werden. Die Gründe für unzureichende Dokumentation sind vielseitig und reichen von Nachlässigkeit über Produktpolitik bis hin zu fehlenden Ressourcen und Kapazitäten. Quelloffene und gut dokumentierte Software hilft also zumindest Personen mit entsprechend geschulter Expertise, die Algorithmen zu überprüfen und entsprechend fehlerhafte Ergebnisse zu verhindern.

Ungeeignete, weil beispielsweise nicht oder schlecht dokumentierte, Dateiformate bergen Risiken für einen späteren Zugriff, da beispielsweise die zur Interpretation notwendige Software nicht mehr lauffähig ist. Deshalb kann es bei Archivierung bzw. Veröffentlichung erforderlich werden, Daten in offene Formate zu konvertieren. Insbesondere, wenn keine geeigneten Alternativformate existieren, kann es schlimmstenfalls bei einer Migration zur Veränderung von Daten oder sogar zum Verlust von Information kommen.

Ebenso können komplexe Versionsabhängigkeiten nicht mehr gepflegter Softwareprodukte notwendige Aktualisierungen von Systemumgebungen auf sicherere Softwarestände verhindern. So operieren beispielsweise teure, hochauflösende Mikroskope in Imaging Facilities über Steuerrechner mit verarbeitender Software, die keine Updates mehr erhalten. Der Umstand, dass Software keine Updates mehr erhält, kann sich dabei auf weitere Software auswirken, deren Updates im ungünstigsten Fall zu nicht mehr auflösbaren Abhängigkeiten und einem nicht mehr verwendbaren System führen.

Ein weiteres Risiko besteht darin, dass Open-Source-Projekte nicht selten vom Wissen und Einsatz weniger Freiwilliger abhängen¹⁷. Die mangelhafte Absicherung der langfristigen Verfügbarkeit und Nutzbarkeit von Forschungssoftware birgt daher eine Gefahr für die digitale Souveränität insgesamt. Das betrifft nicht nur Forschungseinrichtungen, sondern die Wissenschaft als Ganzes.

5 Anregungen für den Umgang mit Forschungssoftware

Im Sinne eines ganzheitlichen Ansatzes von Forschungsdatenmanagement ist die Berücksichtigung der langfristigen Verfügbarkeit von Forschungssoftware von zentraler

¹⁶In der Literatur auch als „black box“ bezeichnet, vgl. Passig, Kathrin. „Fünfzig Jahre Black Box“. *Merkur*, 23. November 2017. <https://www.merkur-zeitschrift.de/2017/11/23/fuenfzig-jahre-black-box/>, zugegriffen 17. November 2022.

¹⁷Vgl. Muna, Demitri. „The Astropy Problem“. arXiv, 2016. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1610.03159>.

Bedeutung. Da hierfür auf den verschiedenen institutionellen Ebenen wichtige Weichen gestellt und wesentliche Entscheidungen gefällt werden können, werden folgende Anregungen für den Umgang mit Forschungssoftware ausgesprochen. Die folgenden Empfehlungen gelten für offene und proprietäre Software, Ausnahmen werden entsprechend gekennzeichnet:

- Das **Bewusstsein** von Forschenden, Mitarbeitenden in Infrastruktureinrichtungen und anderen am Forschungsprozess Beteiligten für den nachhaltigen Umgang mit Forschungssoftware sollte gestärkt werden.
- Bei der **Bereitstellung eigener Software** soll geprüft werden, ob eine Veröffentlichung unter einer Open-Source-Lizenz erfolgen kann oder gar muss. Es wird empfohlen, in der Beratung auf unterschiedliche Lizenztypen (z.B. Copyleft, BSD-artige Lizenzen) einzugehen und Forschenden das Spannungsfeld zu anderen Rechtsfeldern, z. B. Patent- und Schutzrechten, aufzuzeigen. Dabei sollte darauf geachtet werden, auf bekannte und breit akzeptierte Lizenzen zu setzen.
- Schon in der **Planung von Forschungsvorhaben** sollte geprüft werden, ob Open-Source-Software eine gleichwertige Alternative zu Programmen darstellen kann, deren Quellcode nicht offengelegt ist. Insbesondere wird zur Nutzung von unter freien Lizenzen verfügbarer Software geraten. Mittelfristig sollte der Einsatz von Closed-Source-Software in der Forschung zur Ausnahme werden, die eine Begründung erfordert.
- Die langfristige Verfügbarkeit von Software und die Austauschbarkeit ihrer produzierten Datenformate sollte – soweit überhaupt prognostizierbar – bereits bei der **Auswahl und Beschaffung von Software** für Forschungsvorhaben berücksichtigt werden.
- Es wird angeregt – parallel zu den FAIR-Prinzipien für Daten¹⁸ – bestehende **Best Practices und Standards für den nachhaltigen Umgang mit Software und Programmen für Forschungssoftware**¹⁹ zu adaptieren und als Richtlinien bereitzustellen, die gegebenenfalls auch Grundlage für eine Zertifizierung sein können²⁰. Informatikinstitute, Open-Source-Initiativen, aber auch einzelne Projekte, z.B. die

¹⁸Ggf. lassen sich diese Prinzipien aber auch auf Software übertragen, vgl. Homburg, Timo et al. "Recommendations for the Review of Archaeological Research Software". *Archäologische Informationen*, Nr. 43 (2020): 359. <https://doi.org/10.11588/ai.2020.1.81423>.

¹⁹Z. B. Chue Hong, Neil P. "FAIR Principles for Research Software (FAIR4RS Principles)". Zenodo, 2022. <https://doi.org/10.15497/RDA00068>.

²⁰Erste Schritte sind bereits unternommen, vgl. Katerbow, Matthias, und Georg Feulner. "Handreichung zum Umgang mit Forschungssoftware". Zenodo, 2018. <https://doi.org/10.5281/zenodo.1172970>; Helmholtz Open Science Office. "Muster-Richtlinie Nachhaltige Forschungssoftware an den Helmholtz-Zentren". 21. November 2019. <https://os.helmholtz.de/open-research-software/muster-richtlinie/>, zugegriffen 17. November 2022]; Helmholtz Open Science Office. "Empfehlungen zur Implementierung von Leit- und Richtlinien zum Umgang mit Forschungssoftware an den Helmholtz-Zentren". 21. November 2019. <https://os.helmholtz.de/open-research-software/implementierung-leit-und-richtlinien/>, zugegriffen 17. November 2022; Jiménez, Rafael C. "Four Simple Recommendations to Encourage Best Practices in Research Software. Version 1." *F1000Research*, Nr. 6 (2017). <https://doi.org/10.12688/f1000research.11407.1>.

- Linuxentwicklung, können hier wertvollen Input liefern. So kann das Forschungsdatenmanagement auf viele Jahre Forschung und Praxis zurückgreifen.
- **Es wird angeregt, dass Softwareanbieter** den Quellcode ihrer Software offenlegen, soweit dem keine gewichtigen Gründe entgegenstehen. Dabei sollten auch Änderungen zwischen unterschiedlichen Versionen transparent gemacht werden. Eine Option könnte darin bestehen, den Code herstellergebundener Produkte bei nachlassendem Verwertungsinteresse unter geeigneten Lizenzen nachträglich zu veröffentlichen.
 - Für die Transparenz und Überprüfbarkeit von Software ist eine **Zusammenarbeit (z.B. durch Code-Review) zwischen Softwareentwickelnden und –nutzenden** von entscheidender Bedeutung²¹. Um potenzielle Einseitigkeiten (*bias*) in Programmen offenzulegen, wird angeregt, dass diese Kooperation über Unit-Testing an kompilierter Software hinausgeht.
 - Software sollte immer auch **Dokumentation sowie Beschreibung** umfassen.
 - Entwickelnde und Anbietende von herstellergebundener Software sollten sich gegenüber **technikethischen Fragen** öffnen, was z.B. die Nachverfolgung der Nutzenden, den Datenschutz, den Einsatz künstlicher Intelligenz beispielsweise für die Entscheidungsfindung und die Verwendung von Telemetriedaten angeht.
 - **Forschungssoftwarenutzende** sollten ihren Gebrauch der Software, inklusive der Angabe der verwendeten Versionen und Abhängigkeiten, transparent dokumentieren und den Softwareentwickelnden Anerkennung für ihre Arbeit geben.
 - **Lehrende** werden ermutigt, mögliche Einsatzfelder und Chancen offener Software in ihre Lehre zu integrieren und Alternativen zu herstellergebundenen Produkten aufzuzeigen.
 - **Forschungseinrichtungen** wird empfohlen, den nachhaltigen Umgang mit Forschungssoftware in ihre Forschungsdaten- bzw. Open-Science-Policy aufzunehmen²². Es ist ratsam, diese auf der Ebene der Fachgebiete und Projekte zu konkretisieren. Mittelfristig sollten hochschulrechtliche Regelungen (z.B. in Promotionsordnungen) angestrebt werden.
 - Wesentlich sind überdies **(Beratungs-)Angebote**, die Forschende bei der Auswahl, Beschaffung und Archivierung von Software sowie in lizenzrechtlichen Fragestellungen unterstützen. Generell empfiehlt es sich, in Beratungsgesprächen zum Forschungsdatenmanagement den Umgang mit Forschungssoftware routinemäßig zu thematisieren.
 - Im Sinne einer nachhaltigen Qualitätskontrolle kann der Aufbau **offener bzw. öffentlicher Reproducibility-Services** bei der Verbesserung von Forschung helfen. Es gibt zunehmend cloud-basierte Ansätze, die vergleichbar zum Prinzip der "Continuous Integration" in der Softwareentwicklung (automatisiert) Workflows anstoßen können. Solche Systeme lassen bestimmte Berechnungen oder Analy-

²¹Lem, Stanisław "Schlaflosigkeit"(1971), in: Lem, Stanisław, Pilot Prix (1978)

²²Vgl. auch Arbeitskreis Open Science der Helmholtz-Gemeinschaft. "Zugang zu und Nachnutzung von wissenschaftlicher Software. Positionspapier des Arbeitskreises Open Science der Helmholtz-Gemeinschaft". 2017. <https://os.helmholtz.de/open-research-software/zugang-und-nachnutzung/>, zugegriffen 17. November 2022.

sen automatisiert ablaufen. Wegen des mit dem Aufbau und Betrieb solcher Services verbundenen Aufwands werden hier oft zentrale Lösungen angestrebt. Es ist wichtig, darauf zu achten, dass Lizenzvereinbarungen diesen nicht im Wege stehen²³. Beim Ausgestalten der Nutzungsbedingungen von herstellergebundener Forschungssoftware sollte folglich darauf geachtet werden, dass die Möglichkeit, fremde Forschung zu überprüfen und zu reproduzieren, nicht potenziell von der Finanzierbarkeit der Lizenzgebühren abhängig wird²⁴.

- Beim **Aushandeln von Verträgen** über die Lizenzierung von Software sollte auf eine **treuhänderische Hinterlegung des Quellcodes** an dritter Stelle (Escrow) hingearbeitet werden, um entsprechend der ausgehandelten Bedingungen z.B. bei Einstellung der Software oder im Falle eines Konkurses der Anbieter, den Zugriff auf den Code und damit die spätere Reproduzierbarkeit sicherstellen zu können.
- Zudem sollten die **Entwicklung, Qualitätssicherung und Wartung von Forschungssoftware** als akademische **Leistung in Berufungsverhandlungen** anerkannt werden. Nach den aktuellen Empfehlungen der DFG sollte dies auch für die Forschungsförderung eine Rolle spielen²⁵.
- **Forschungsförderer** sollten auf ein erweitertes Verständnis von Open Science hinarbeiten, welches Open Software neben Open Access und Open Data als zentrale Säule einer offenen Wissenschaft versteht. So könnten Angaben zum nachhaltigen Umgang mit Forschungssoftware in Datenmanagementplänen eingefordert werden. Mittelfristig wäre wünschenswert, dass – vergleichbar mit dem im Hinblick auf Publikationen beschrittenen Weg – Empfehlungen durch verpflichtende Anforderungen in Förderbedingungen (z. B. zur Hinterlegung der eingesetzten Software) abgelöst werden.
- Es bedarf **Infrastrukturen**, die sich der Archivierung und langfristigen Verfügbarmachung von Forschungssoftware widmen. Hierzu zählt die organisatorische Funktion der Bereithaltung von Software beispielsweise in Funktion einer „Escrow-Stelle“ sowie die Bereitstellung geeigneter Laufzeitumgebungen aus notwendiger weiterer Software und einem (virtualisierten bzw. emulierten) Hardware-Stack. Für Forschungssoftware könnten beispielsweise Anbieter von Forschungsdatenrepositorien wie Archive, Bibliotheken oder andere Gedächtniseinrichtungen diese Aufgabe übernehmen. Infrastruktureinrichtungen sollten darauf hinwirken, dass sich die gemeinsame Archivierung von Software sowie der damit erzeugten bzw. analysierten Forschungsdaten als Standard etabliert.

²³Vgl. Nüst, Daniel, und Stephen J. Eglén. "CODECHECK: An Open Science Initiative for the Independent Execution of Computations Underlying Research Articles during Peer Review to Improve Reproducibility. Version 2." *F1000Research*, Nr. 10 (2021). <https://doi.org/10.12688/f1000research.51738.2>.

²⁴Teilweise erhalten Forschungseinrichtungen vergünstigte oder sogar kostenfreie Versionen relevanter Forschungssoftware. Dieses obliegt jedoch dem Ermessen des Anbieters, welches sich beispielsweise bei einem Eigentümerwechsel schnell ändern kann.

²⁵Vgl. Deutsche Forschungsgemeinschaft. „Wissenschaftliches Publizieren als Grundlage und Gestaltungsfeld der Wissenschaftsbewertung.“ Zenodo, 18. Mai 2022. <https://doi.org/10.5281/zenodo.6538163>.

- Da Forschungssoftware zum Kontext von Forschungsdaten zählt, sollten **Betreiber von Datenrepositorien** in ihren Nutzungsbedingungen bzw. -vereinbarungen Regelungen zum Umgang mit Forschungssoftware aufnehmen²⁶. Bisher unterliegt Software – auch im Zusammenhang mit Datenpublikationen – keiner klaren Pflichtablieferung, die die notwendige Transparenz und Reproduzierbarkeit von Forschungsdaten befördern würde. Es gibt bisher nur in begrenztem Umfang eine Pflichtablieferung an die Deutsche Nationalbibliothek (und weitere Bibliotheken) als Beilage von Papierpublikationen²⁷. Dem entgegen steht der Umstand, dass Fachzeitschriften zunehmend empfehlen bzw. fordern, Forschungssoftware im Rahmen von Artikelpublikationen bereitzustellen. Ein nächster konsequenter Schritt – gerade im digitalen Zeitalter – wäre daher eine offene Debatte, ob diese Ablieferungspflicht ausgedehnt werden kann.
- Es wird überdies eine Diskussion darüber angeregt, ob angesichts der Kurzlebigkeit von Software die **urheberrechtliche Gleichstellung mit anderen Sprachwerken in Hinblick auf die Schutzdauer angemessen** ist bzw. wie sich die Archivierung von Forschungssoftware durch (neue) gesetzliche Schranken befördern lässt.

6 Ausblick

Forschungssoftware wird von der überwiegenden Anzahl der Wissenschaftsdisziplinen eingesetzt. Es erscheint daher zentral, den Umgang damit auf einer übergeordneten Ebene anzugehen. Hier bietet sich für Deutschland insbesondere die Nationale Forschungsdateninfrastruktur (NFDI) an, wo zum Zweck „der Nachvollziehbarkeit von Ursprung und Veränderungen wissenschaftlicher [...] Software während des Forschungsprozesses“ Fragen im Umgang mit Forschungssoftware u.a. konsortienübergreifend im Rahmen der Sektionen *Common Infrastructures* und *Metadaten, Terminologien, Provenienz* behandelt werden²⁸. Neben der NFDI sind überdies Initiativen wie *de-RSE e.V. – Gesellschaft für Forschungssoftware* entstanden, die sich dem nachhaltigen Umgang mit Forschungssoftware überinstitutionell widmen²⁹. Insgesamt schafft die Verwendung großer Infrastrukturen mit verteiltem Rechnen wie beispielsweise das High Performance Computing neue Herausforderungen in der Skalierung für eine Reproduktion von Forschungsdaten und Workflows. Während diese Reproduktion oft technisch problemlos möglich ist, gilt das weniger für die zunehmend genutzten Angebote der cloud-basierten Bereitstellung von Software. Auf Nutzerebene sind einzel-

²⁶Hierzu könnten Betreiber auf weitere Angebote Dritter verweisen, vgl. vorherigen Punkt.

²⁷Vgl. § 7 Abs. 2 PflAV.

²⁸Vgl. Diepenbroeck et al. "Sektionskonzept Common Infrastructures zur Einrichtung einer Sektion im Verein Nationale Forschungsdateninfrastruktur (NFDI) e.V." Zenodo, 28. Oktober 2021. <https://doi.org/10.5281/zenodo.5607490>

²⁹Vgl. Anzt, Hartwig et al. „An environment for sustainable research software in Germany and beyond: current state, open challenges, and call for action [version 2; peer review: 2 approved]“ F1000Research, 26. Januar 2021. <https://doi.org/10.12688/f1000research.23224.2>

ne Software-Versionen nicht mehr voneinander abzugrenzen, da Updates im Cloud-Umfeld technisch bedingt deutlich impliziter geschehen. So werden neue Funktionen oder Einstellungen implementiert, ohne dass davon ein Anwender zwingend erfährt. Da dieser Umstand disziplinübergreifend gegeben ist, ist es ratsam, sich ihm auf übergeordneter Ebene zu widmen.

Wie die Empfehlungen zum Umgang mit Forschungssoftware darlegen, ist die übergeordnete Ebene allerdings nur eine Seite der Medaille. Zur Schaffung eines breiten Bewusstseins in der Community für den nachhaltigen Umgang mit Forschungssoftware sind zusätzlich lokale Maßnahmen wie die oben beschriebenen unerlässlich. Entsprechend können selbst kleine Institutionen sowie im Forschungsdatenmanagement beschäftigte Einzelpersonen ihren Beitrag dazu leisten, dass ein nachhaltiger Umgang mit Forschungssoftware auf breiter Basis etabliert wird.

7 Förderung

Wir danken dem Land Baden-Württemberg für die Förderung der Science Data Center, sowie dem Projekt bw2FDM und der Landesinitiative bwFDM.