o2r opening reproducible research

WWU Workshop
“Reproduzierbare Forschung”
11.02.2020

https://o2r.info/
Twitter: @o2r_project
https://github.com/o2r-project

Funded by:
DFG

Agenda

1. **Vorstellung &** Einleitung
2. Reproduzierbarkeit - **Konzepte & Werkzeuge, Projekte & Dienste@WWU**
3. **Pause** (bis 15:00)
4. Förderstrategische **Gruppendiskussion**
   (Ziel: Probleme, Ideen, Anknüpfungspunkte identifizieren)
5. **Pause** (bis 16:45)
6. **Plenardiskussion**
   Vision *Reproduzierbarkeit WWU 2030*
7. **Schluss**
   Zusammenfassung, nächste Schritte

Ende: ca. 18 Uhr

Berichterstattung, Daten, Notizen

1. **#reproWWU**
2. **Fotos** (Uni Webseite, Projektwebseite, social media) werden gemacht: bitte in der Pause melden wenn keine Veröffentlichung erwünscht ist!
3. Kollaborative Notizen + öffentliche Teilnehmerliste: **http://go.wwu.de/5weg8**
4. Einladung **Kurzbeiträge für Pressemitteilung** zu verfassen: “Reproduzierbare Forschung in X”, ca. 2000 Zeichen, ***Story!*** **Frist**: 17.02.; Ansprechpersonen: D. Nüst (d.n@wwu.de), K. Kottke (kathrin.kottke@wwu.de)

Kollaborative Notizen + öffentliche Teilnehmerliste: http://go.wwu.de/5weg8

Vorstellungsrunde

1. Wer sind Sie?
2. Was ist ihr Fachgebiet?
3. Was interessiert Sie am Thema “Reproduzierbare Forschung”?

Einleitung

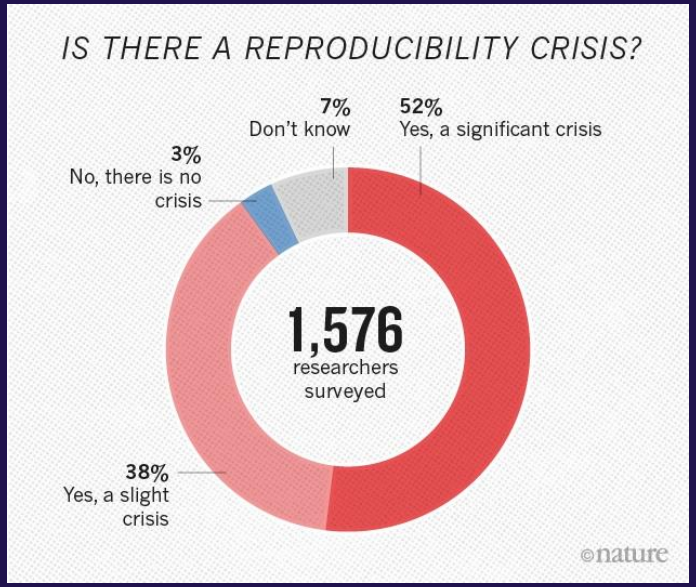
?

Offene Reproduzierbare Forschung (ORR)

Die Ergebnisse in einem wissenschaftlichen Artikel sind reproduzierbar, wenn man mit Hilfe der von den Autor*innen verwendeten Software (Source Code) und Daten exakt dieselben Abbildungen, Tabellen und Zahlen berechnen kann. In der offenen reproduzierbaren Forschung sind diese Materialien öffentlich zugänglich.

Die Ergebnisse eines Artikels sind replizierbar, wenn man mit Hilfe neu generierter Daten oder neu implementierter Analysen zu ähnlichen Ergebnissen kommt.

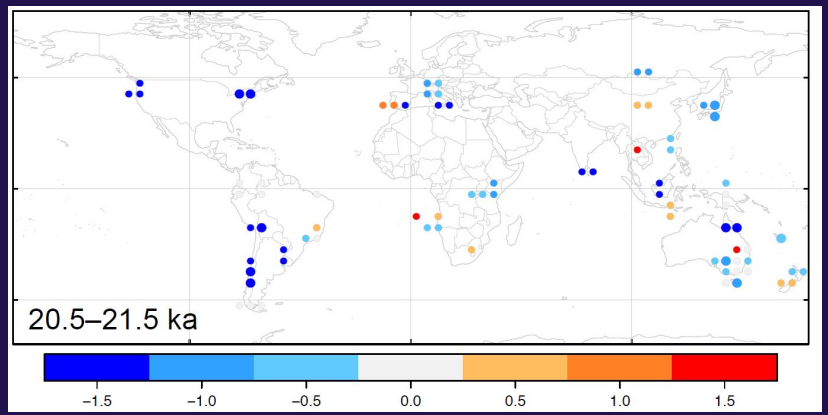
Reproduzierbarkeit & Replizierbarkeit sind Eckpfeiler der wissenschaftlichen Arbeit.

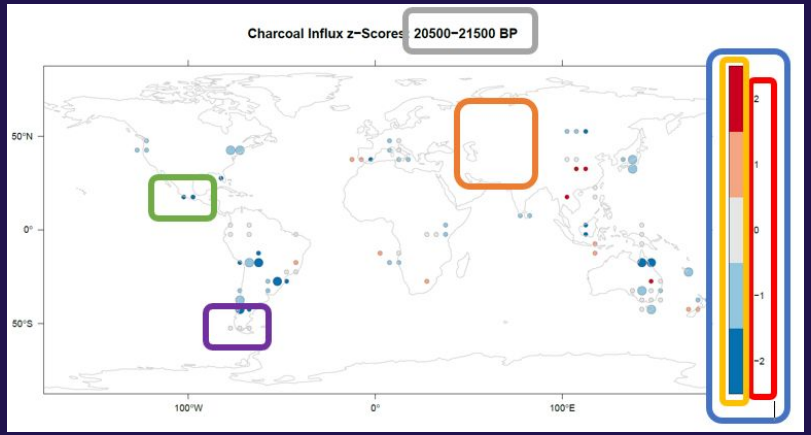


Die Ergebnisse in einem wissenschaftlichen Artikel sind reproduzierbar, wenn man mit Hilfe der von den Autor*innen verwendeten Software (Source Code) und Daten exakt dieselben Abbildungen, Tabellen und Zahlen berechnen kann. In der offenen reproduzierbaren Forschung sind diese Materialien öffentlich zugänglich.

Baker, M. (2016). 1,500 scientists lift the lid on reproducibility. *Nature News*, *533*(7604), 452.

Status Quo der ORR in den Geowissenschaften





Konkol et al. (2018): Comp. reproducibility in geoscientific papers: Insights from a series of studies with geoscientists and a reproduction study. https://doi.org/10.1080/13658816.2018.1508687

Warum ist nicht-reproduzierbare Forschung ein Problem?

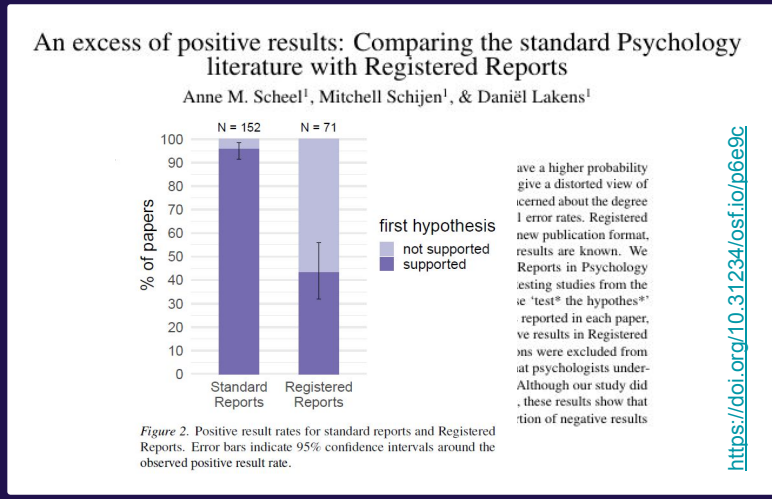
- Fehler in der Analyse schwer auffindbar (wenn überhaupt)
- Gutachter*innen können die Ergebnisse nicht verifizieren, sondern müssen ihnen trauen
- Die Analyse ist häufig nicht bis ins Detail verständlich
- Die Materialien sind nicht wiederverwendbar (Stichwort: Nachhaltigkeit)
- Anforderungen an Forschungsanträge und wiss. Artikel werden nicht erfüllt

Reproduzierbarkeit - Konzepte und Werkzeuge

Herausforderungen

Mechanismen für **Anerkennung in der Wissenschaft** (Impact Factor, ..) führen zu Publikationsbias, HARKing, Intransparenz und Mangel an Reproduzierbarkeit

> Leiden Manifesto http://www.leidenmanifesto.org/
> DORA https://sfdora.org/
> Vienna Principles https://viennaprinciples.org/
> Open Science
- Anerkennung von Software und Daten als wissenschaftliche Produkte (RSEng)
- Zitieren von Daten & Software
- Präregistrierung

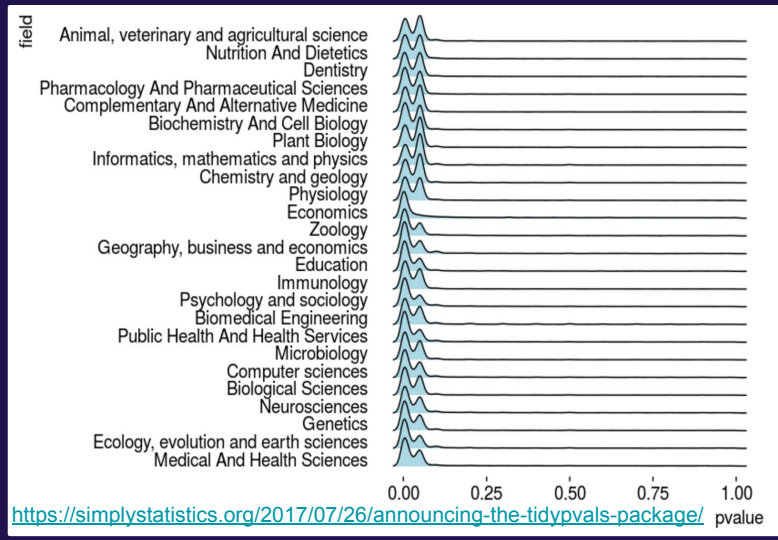

An excess of positive results: Comparing the standard Psychology literature with Registered Reports

Anne M. Scheel[1], Mitchell Schijen[1], & Daniël Lakens[1]

Figure 2. Positive result rates for standard reports and Registered Reports. Error bars indicate 95% confidence intervals around the observed positive result rate.

ave a higher probability
give a distorted view of
icerned about the degree
l error rates. Registered
new publication format,
results are known. We
Reports in Psychology
esting studies from the
e 'test* the hypothes*'
reported in each paper,
ve results in Registered
ons were excluded from
at psychologists under-
Although our study did
, these results show that
tion of negative results

https://doi.org/10.31234/osf.io/p6e9c



https://simplystatistics.org/2017/07/26/announcing-the-tidypvals-package/

Traditionelle und Moderne Wissenschaftler_innen

https://en.wikipedia.org/wiki/T-shaped_skills

https://doi.org/10.1007/s10816-015-9272-9

https://jakevdp.github.io/blog/2014/08/22/hacking-academia/

https://www.sciencemag.org/careers/2013/05/when-all-science-becomes-data-science

https://escience.washington.edu/community-level-data-science-and-its-spheres-of-influence-beyond-novelty-squared/

Ein gelöstes Problem ?!

Electronic Documents Give Reproducible Research a New Meaning REI.3

Jon F. Claerbout and Martin Karrenbach, Stanford Univ.

SUMMARY

A revolution in education and technology transfer follows from the marriage of word processing and software command scripts. In this marriage an author attaches to every figure caption a pushbutton or a name tag usable to recalculate the figure from all its data, parameters, and programs. This provides a concrete definition of reproducibility in computationally oriented research. Experience at the Stanford Exploration Project shows that preparing such electronic documents is little effort beyond our customary report writing; mainly, we need to file everything in a systematic way.

In 1990 we began experimenting with electronic documents that merge our scientific software with our word-processing software. A year later we manufactured a CD-ROM containing a new textbook, Joe Dellinger's doctoral dissertation, and two progress reports of the Stanford Exploration Project. We distributed these CD-ROMs[1] to sponsors and many friends at the 1991 SEG meeting.

In 1990, we set this sequence of goals:

- Learn how to merge a publication with its underlying computational analysis.
- Teach researchers how to prepare a document in a form where they themselves can reproduce their own research results a year or more later by "pressing a single button".
- Learn how to leave finished work in a condition where coworkers can reproduce the calculation including the final illustration by pressing a button in its caption.
- Prepare a complete copy of our local software environment so that graduating students can take their work away with them to other sites, press a button, and reproduce their Stanford work.
- Merge electronic documents written by multiple authors (SEP reports).
- Export electronic documents to numerous other sites (sponsors) so they can readily reproduce a substantial portion of our Stanford research.

We met all these goals and set new ones:

- produce all new documents in this form, including lab reports in formal classes and "lab notebooks" of research progress.
- make incremental improvements in electronic-document software
- seek partners for broadening standards (and making incremental improvements).

Our basic goal is reproducible research. The electronic document is our means to this end. In principle, reproducibility in research can be achieved without electronic documents and that is how we started. Our first nonelectronic reproducible document was a textbook in which the paper document contained the name of a program script in every figure caption. The program scripts were organized by book chapter and section so they could be correlated to an accompanying magnetic tape dump of the file system. The magnetic tape also contained all the necessary data to feed the program script.

Now that we have begun using CD-ROM publication, we can go much further. Every figure caption contains a pushbutton that jumps to the appropriate science directory (folder) and initiates a figure rebuild command and then displays the figure, possibly as a movie or interactive program. We normally display seismic images of the earth's interior. but to reach wider audiences, Figure 1 shows a satellite weather picture which the pushbutton will animate as seen on commerical television. We include all our plot software as well as freely available software from many sources, including compilers and the LaTeX word processing system. Naturally we cannot include licensed software, but with the exception of Fortran and C compilers and the UNIX system itself, our publication includes source code for everything needed. The CD-ROM, at 680 megabytes, is so large we have had room for many executable programs on popular brands of workstations. The presence of these executables gives our readers a fast start.

Nearly everyone would rather read a paper book than the bitmapped page images on a screen that you see with an electronic document. But the illustrations in the electronic book are mostly in color, many are movies, and some are interactive. So the electronic book gives the reader a better understanding of the results. We typically use an interactive movie program to compare seismic sections where successive frames include processing with various parameters. The movie medium is much more informative than comparing seismic sections side by side. 3-D volumes are much better exhibited by movies than static paper illustrations. We are delivering a volume of software that is accessed like a book.

[1]SEP-CD-1 is available from Stanford University Press, $15 plus shipping, tel 415-723-1593

- Learn how to merge a publication with its underlying computational analysis.
- Teach researchers how to prepare a document in a form where they themselves can reproduce their own research results a year or more later by "pressing a single button".
- Learn how to leave finished work in a condition where coworkers can repr
final illustration by
- Prepare a complete
ment so that gradu
away with them t
reproduce their Sta
- Merge electronic d
thors (SEP reports
- Export electronic
(sponsors) so they
portion of our Stan

We met all these goals and set new ones:

- produce all new documents in this form, including lab reports in formal classes and "lab notebooks" of research progress.
- make incremental improvements in electronic-document software
- seek partners for broadening standards (and making incremental improvements).

1992

https://doi.org/10.1190/1.1822162

Werkzeuge im Wissenschaftsalltag 2020

Computing Environments und Analysen

Dependency hell & **Paketverwaltung**, Containerisierung, Open Source, Softwarelizenzen, Hardware, **ausführbares digitales Notizbuch** (R Markdown, Jupyter Notebooks), **Versionskontrolle**, Repositorien, …

Sandstein @ Wikimedia Commons

CC0: https://pxhere.com/en/photo/1188160

Online Kollaboration & Kommunikation

GitHub/Lab, **Preprints**, **Forschungskompendien**/Research Compendia, …

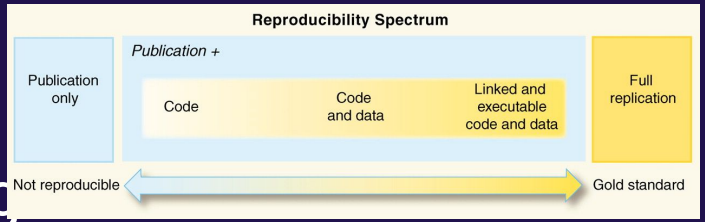
FAIRe Daten (und FAIRe Software)

Metadaten, **Lizenzen**, **Zitierung**, Archivierung, Benennung, Klartext-Formate, …
Lösungen für schützenswerte und große Datensätze: Anonymisierung, Demo, Enklaven, Domänen

Integrität in der Forschung

https://www.nature.com/articles/d41586-019-01727-0

Reproduzierbarkeit im Alltag



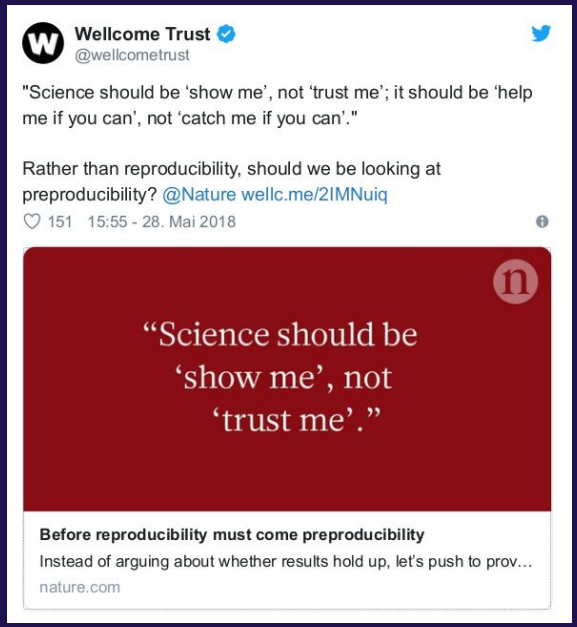
https://doi.org/10.1126/science.1213847

GWP = leg

Offenheit, Nachsichtigkeit, ehrliches Bemühen, Spektrum

Selber Prägen! Community!

1. Transparenz = **Effektivität** & Sichtbarkeit
2. Offene **Wissenschaft** = Wissenschaft
3. Reproduzierbare **Forschung** = Forschung



https://www.nature.com/articles/d41586-018-05256-0

Infrastrukturen/ Projekte an der WWU

eScience WWU - Infrastrukturen und Aktivitäten - Holger Przibytzin

Finanzierung nachhaltiger Software -
Stephan Rave

Reproduzierbarkeit in der Phylogenetik -
Ben Stöver

o2r's ERC

Bindings:
- Interaktive Abbildungen
- Ohne Programmierung

Software:
- Laufzeitumgebung
- Code Skripte
- 1-click reproduce

Executable Research Compendium

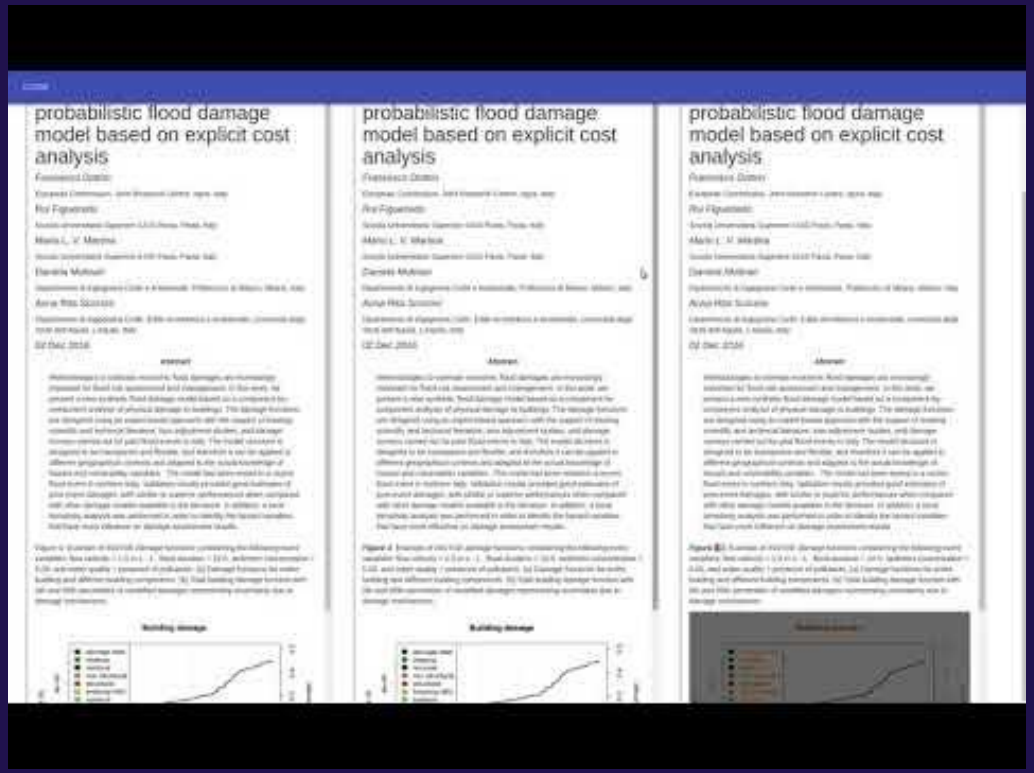
- bindings
- documentation
- software
- data

Dokumentation:
- Artikel
- Metadaten

Daten:
- idealerweise Rohdaten
- in Datenformat gespeichert

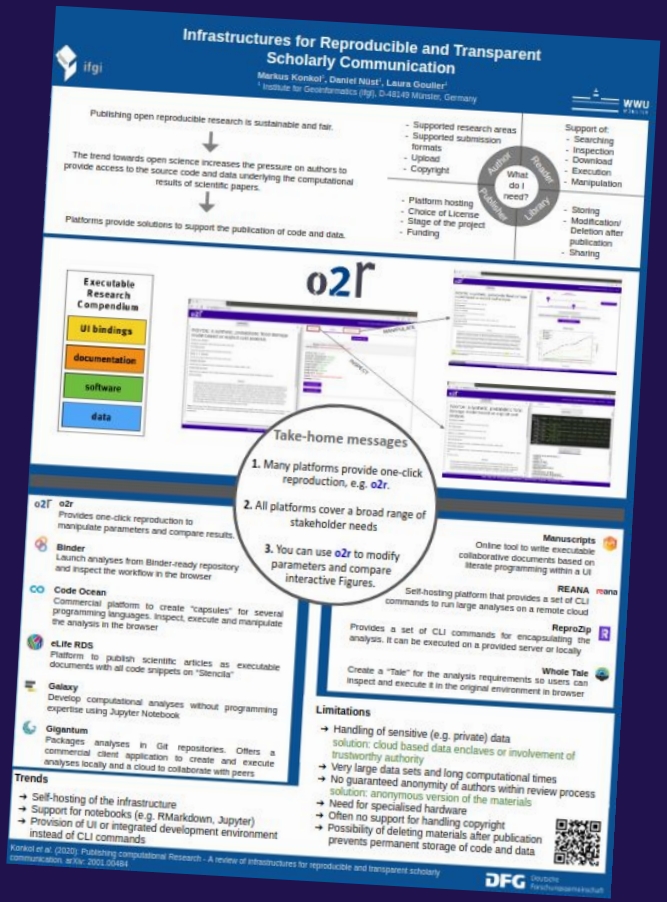
Nüst et al. (2017): Opening the publication process with executable research compendia. http://www.dlib.org/dlib/january17/nuest/01nuest.html

o2r's platform



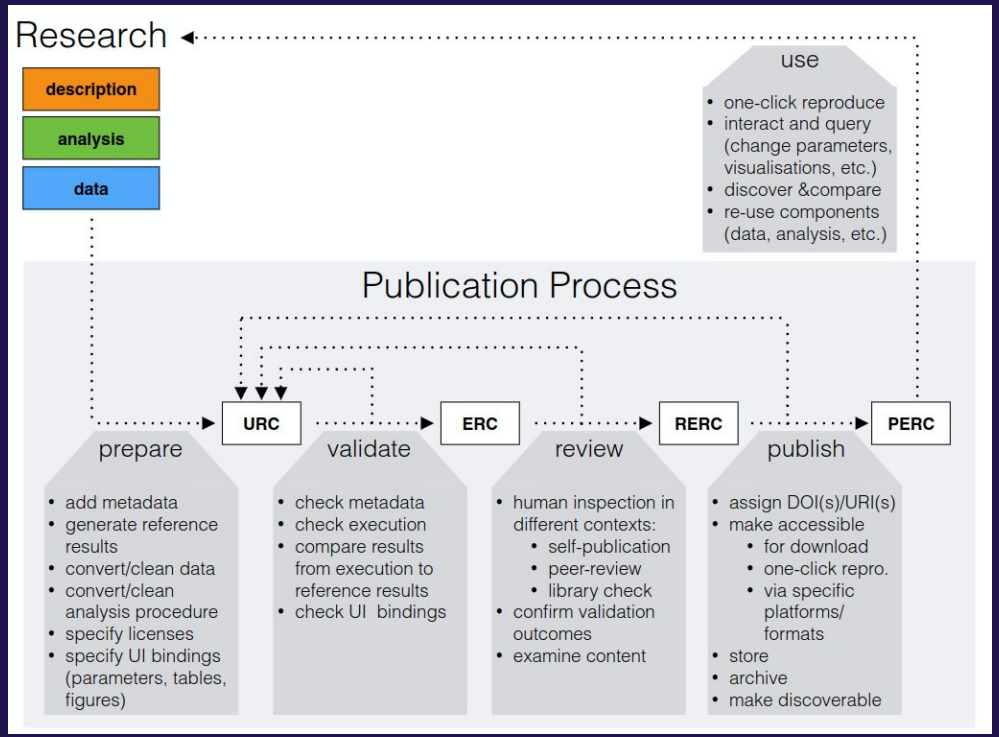
Offene Infrastrukturen

- Binder
- Code Ocean
- eLife RDS
- Galaxy
- Gigantum
- Manuscripts
- REANA
- ReproZip
- Whole Tale
- o2r



arXiv:2001.00484

Reproduzierbarkeit im Peer Review



Nüst et al. (2017): Opening the publication process with executable research compendia. http://www.dlib.org/dlib/january17/nuest/01nuest.html

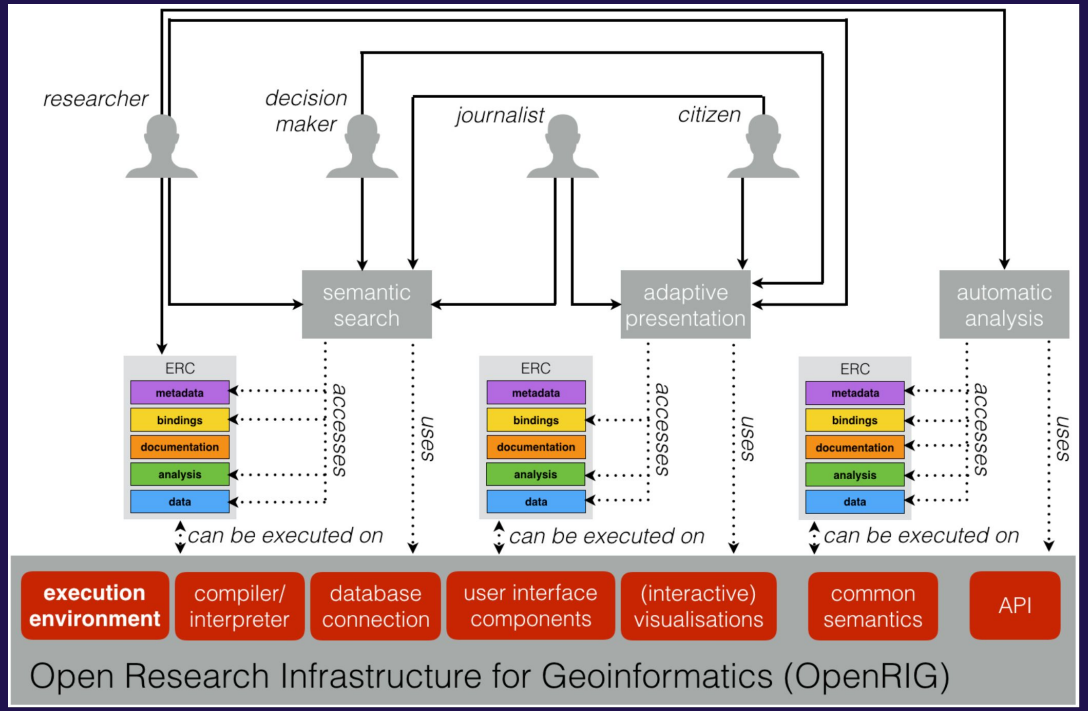
Pause bis 15:15 Uhr

Dann:
Förderstrategische Gruppendiskussion
Ideenentwicklung für gemeinsame Anträge

Bis dahin: Kaffee + Brötchen + Poster

Förderstrategische Gruppendiskussion

Open research infrastructure Geoinformatics (OpenRIG)



Kray, C. et al. (2019). Reproducible Research in Geoinformatics: Concepts, Challenges and Benefits. https://drops.dagstuhl.de/opus/volltexte/2019/11100/pdf/LIPIcs-COSIT-2019-8.pdf

Grenzen und Möglichkeiten der Reproduzierbarkeit

1. Artificial Intelligence / Machine Learning
2. Qualitative Forschung und Reproduzierbarkeit
3. Sensible Daten (u.a. DSGVO)
4. Wissenschaftskommunikation (CitSci, Lehre, AR/VR...)
5. Ergebnisse finden, vergleichen und (automatisch) weiter nutzen

Aufgabe
USP für gemeinsamen Antrag identifizieren, Antrags-vorbereitende Schritte sammeln (Gemeinsamkeiten, vorh./fehlende Infrastrukturen, Erfahrungen, Best practices/Richtlinien, Aus-/Fortbildung, …)

Förderstrategische Gruppendiskussion

Ziel: Potenzial ausloten, gemeinsame Interessen identifizieren, Ideen entwickeln, Weiterdenken)

Vorschlag Ablauf:

1. Kurze Runde individuelle Interessen [10 min]
2. Brainstorming (Ideen sammeln, nicht urteilen) [20 min]
3. Ideen sortieren-analysieren-kategorisieren [15 min]
4. potentielle Antragsrichtung ableiten (USP) [10 min]
5. Kurzpräsentation vorbereiten [5 min]

Zeit bis 16:15 Uhr; dann Kurzvorstellung Gruppen im Plenum

Forschungsgruppen/Kolleg-Forschungsgruppen im Bereich „Künstliche Intelligenz“

- Themengebiete: “Maschinelles Lernen, Logik und Reasoning, Data-Analytics und Data-Mining, Wissensrepräsentation, Wissensbasierte Systeme, Planung, Unsicherheitsmodellierung, Bayes’sche Methoden, Erklärbarkeit, Inferenz und insbesondere mathematische, statistische und informatische Analyse der Eigenschaften von Verfahren aus den vorgenannten Themengebieten.”
- Skizze: 17.06.2020, Antrag: 23.06.2021
- https://www.dfg.de/foerderung/info_wissenschaft/2020/info_wissenschaft_20_08/index.html
- https://www.dfg.de/foerderung/info_wissenschaft/2020/info_wissenschaft_20_07/index.html

Künstliche Intelligenz - Ihre Auswirkungen auf die Gesellschaft von morgen (VolkswagenStiftung)

- Forschungsprojekt mit 1,5 Mio. Euro für 4 Jahre
- Beteiligung von bis zu 5 Arbeitsgruppen
- Technikwissenschaften in Verbindung mit Gesellschafts-/Geisteswiss. (Eher für Geisteswissenschaftler*innen?)
- Wissenschaftler*innen aller Karrierestufen
- Zusatzleistungen: Förderung von Wissensvermittlung und -kommunikation
- Planning grant im Vorfeld: 150.000 Euro für 1 Jahr
    - Zusammenstellung eines Teams
    - Ausformulierung eines Full Grants
- Deadlines
    - Planning Grant: Juli, 2020
    - Full Grant: Oktober, 2020

Förderstrategische Gruppendiskussion

Zeit bis 16:15 Uhr

Dann: Kurzvorstellung der Gruppen
Anschließend: Pause bis 17:00

Reproduzierbarkeit @ WWU 2030