
Nachhaltige Infrastruktur zur Integration von Forschungssoftware in Forschungsdatenrepositorien

Anett Seeland¹, Timo Koch², Sibylle Hermann³ und Bernd Flemisch²

¹Technische Informations- und Kommunikationsdienste (TIK), Universität Stuttgart;

²Institut für Wasser- und Umweltsystemmodellierung (IWS), Universität Stuttgart;

³Universitätsbibliothek, Universität Stuttgart

Komplexe Forschungssoftware hat häufig hohe Einstiegshürden: Bei der Installation sind Kenntnisse des Betriebssystems nötig, außerdem erfordern oft selbst einfache Änderungen, z.B. von Parametern, Programmierkenntnisse. Architekturabhängige Installationskripte, die oft auch noch von speziellen Paketversionen ausgehen, erschweren die Reproduzierbarkeit von Forschungsergebnissen. Das Projekt „Sustainable infrastructure for the improved usability and archivability of research software on the example of the porous-media-simulator DuMux“ (SusI) hat zum Ziel, die Benutzbarkeit der freien Forschungssoftware DuMux (<https://dumux.org/>) zu erhöhen. Zielgruppe sind dabei sowohl Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler, die zum ersten Mal mit der Software arbeiten, als auch erfahrene Entwickler. Darüber hinaus soll die Archivierbarkeit von Softwareanwendungen mit Verlinkung zu einer Publikation ermöglicht werden. Dabei besteht der nachhaltige Lösungsansatz darin, bereits vorhandene Services der Universität (ViPLab, Datenrepositorium) so zu erweitern und zu vernetzen, dass eine von der verwendeten Forschungssoftware unabhängige Infrastrukturlösung geschaffen wird.

ViPLab (<https://www.tik.uni-stuttgart.de/forschung/projekte/vip>) ist eine virtuelle Programmierumgebung mit JavaScript-basiertem Editor zur Programmierung und Entwicklung. Der im Browser geschriebene Code wird dabei zu einem Server geschickt, dort ausgeführt und Ergebnisse (Text, 2D- und 3D-Grafiken) zurückgesandt. Bisher vor allem in der Lehre eingesetzt, hätte ViPLab für Forschungssoftware den Vorteil, dass Forschende die Software, zunächst ohne sie lokal installieren zu müssen, verwenden und konfigurieren können. Die Installation auf dem Server kann durch Container-Virtualisierung (z.B. mit Docker) robust realisiert werden. Verallgemeinert sollen aus den Erfahrungen mit DuMux Richtlinien zum Containerisieren von Software entwickelt werden, damit diese in ViPLab automatisiert ausgeführt werden kann.

Zentraler Interaktionsort, um aus Forschungsdaten Wissen zu gewinnen, ist ein Repository. Hier kann nach Daten gesucht sowie ihre Verarbeitung nachvollzogen und verstanden werden. Deshalb ist es naheliegend, auch Forschungssoftware in ein Repository zu integrieren. Dies ist in Form eines ViPLab-Plugins für die Repositoriensoftware Dataverse geplant. Das Webfrontend für ViPLab wird dabei anhand der Bedürfnisse der Forschenden erweitert. So soll es neben dem Editor weitere durch den Forscher spezifizierbare GUI-Elemente geben, die es gezielt erlauben die Komplexität der Interaktionsmöglichkeiten zu

reduzieren (von Code, über Inputfelder für bestimmte Parameter bishin zu Auswahllisten und Checkboxes). Dies ermöglicht außerdem die Konfiguration einfacher GUIs für Forschungssoftware die selbst keine GUI bereitstellt. Durch das Repositorium soll dabei die dauerhafte Verfügbarkeit und eindeutige Zitation – auch von verschiedenen Versionen der Software – sichergestellt werden. Die Beschreibung der veröffentlichten Software im Repositorium wird mit geeigneten Metadaten unterstützt. Diese sollen teilweise automatisiert aus der Software extrahiert und von den Softwareentwicklern ergänzt werden.

Die geplanten Maßnahmen gehen in ihrer Gesamtheit über bestehende Projekte hinaus. So eignen sich Jupyter-Notebooks (<http://jupyter.org>) eher für skriptbasierte Software und weniger für komplexe objektorientierte Programme. Andererseits berücksichtigen Archivierungslösungen (wie z.B. bwFLA) nicht vergleichbar die Interaktion der Software in der Nachnutzung. Zusammenfassend gewinnt die Forschungssoftware DuMux, auch durch erleichterten Zugang, an Benutzbarkeit. Gleichzeitig wird die Reproduzierbarkeit von Forschungsdaten erleichtert und nachhaltig gewährleistet.