

# Nachhaltige Entwicklung von Forschungssoftware – das pyMOR Projekt

Raimund Vogl – WWU Münster

WWU

# Software als Forschungsgegenstand und Ergebnis

Zahlreiche Beispiele aus MINT, Life Sciences, Geistes- und Sozialwiss.

Meist freie Open Source Lizenzen

Meist projektfinanzierte Entwicklung – Nachhaltigkeit (bei Personal und Infrastruktur) oft nicht sichergestellt/prekär

Nachhaltige Entwicklung(sumgebung) notwendig: standardisierte Umgebungen (Cloud-Dienste), bei Personalfluktuatation weiter betreibbar, externer Zugriff und Nachnutzbarkeit (in der eigenen Arbeitsgruppe und in der Community), Reproduzierbarkeit

Positionierung wie Forschungsdaten: FAIR Prinzipien

# Programme und Strukturen bei Forschungssoftware

DFG-Ausschreibung „Forschungssoftware“ November 2016 (e-Research Tech)

[https://www.dfg.de/download/pdf/foerderung/programme/lis/161026\\_dfg\\_ausschreibung\\_forschungssoftware\\_de.pdf](https://www.dfg.de/download/pdf/foerderung/programme/lis/161026_dfg_ausschreibung_forschungssoftware_de.pdf)

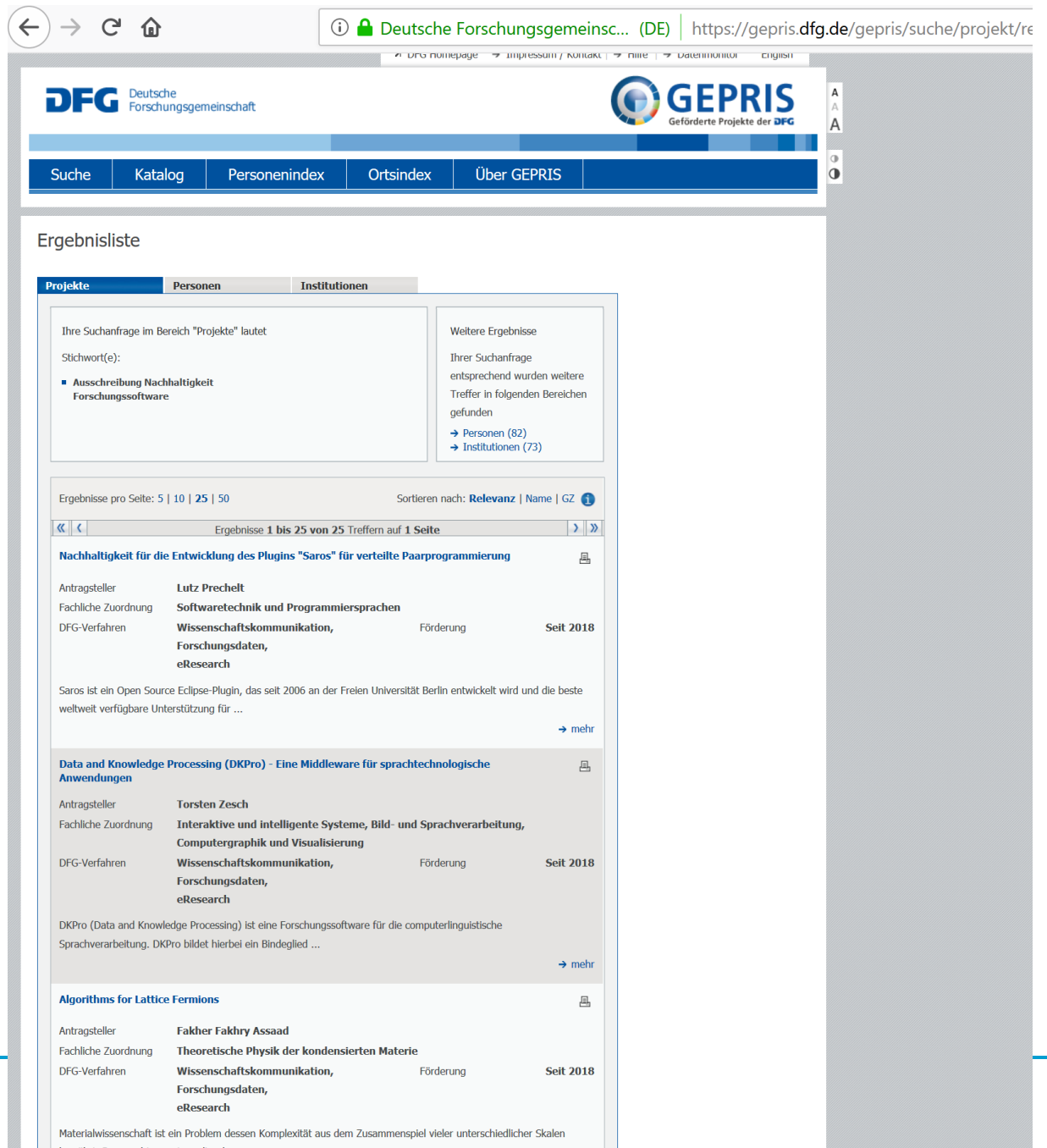
25 geförderte Projekte seit 2018 - Best-Practice-Beispiele mit positiver Signalwirkung für die wissenschaftliche Softwareentwicklung und für Infrastruktureinrichtungen - siehe GEPRIIS:

[https://gepris.dfg.de/gepris/suche/projekt/research\\_software](https://gepris.dfg.de/gepris/suche/projekt/research_software)

Formierung der „Research Software Engineers“ nun auch in DE: erste Tagung in Potsdam im Juni 2019: <https://www.de-rse.org/de/conf2019/>

DFG-Rundgespräch Nachhaltigkeit von Forschungssoftware (7./8.11. RKI Berlin)

# DFG Förderung für 25 Projekte



Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) | https://gepris.dfg.de/gepris/suche/projekt/re

**DFG** Deutsche Forschungsgemeinschaft

**GEPRIIS** Geförderte Projekte der DFG

Suche | Katalog | Personenindex | Ortsindex | Über GEPRIIS

### Ergebnisliste

Projekte | Personen | Institutionen

Ihre Suchanfrage im Bereich "Projekte" lautet  
Stichwort(e):  

- Ausschreibung Nachhaltigkeit Forschungssoftware

Weitere Ergebnisse  
Ihrer Suchanfrage entsprechend wurden weitere Treffer in folgenden Bereichen gefunden  
 → Personen (82)  
 → Institutionen (73)

Ergebnisse pro Seite: 5 | 10 | **25** | 50      Sortieren nach: **Relevanz** | Name | GZ

Ergebnisse 1 bis 25 von 25 Treffern auf 1 Seite

Projekt	Antragsteller	Fachliche Zuordnung	DFG-Verfahren	Förderung	Seit
<b>Nachhaltigkeit für die Entwicklung des Plugins "Saros" für verteilte Paarprogrammierung</b>	Lutz Prechelt	Softwaretechnik und Programmiersprachen	Wissenschaftskommunikation, Forschungsdaten, eResearch		Seit 2018
Saros ist ein Open Source Eclipse-Plugin, das seit 2006 an der Freien Universität Berlin entwickelt wird und die beste weltweit verfügbare Unterstützung für ...					
<b>Data and Knowledge Processing (DKPro) - Eine Middleware für sprachtechnologische Anwendungen</b>	Torsten Zesch	Interaktive und intelligente Systeme, Bild- und Sprachverarbeitung, Computergraphik und Visualisierung	Wissenschaftskommunikation, Forschungsdaten, eResearch		Seit 2018
DKPro (Data and Knowledge Processing) ist eine Forschungssoftware für die computerlinguistische Sprachverarbeitung. DKPro bildet hierbei ein Bindeglied ...					
<b>Algorithms for Lattice Fermions</b>	Fakher Fakhry Assaad	Theoretische Physik der kondensierten Materie	Wissenschaftskommunikation, Forschungsdaten, eResearch		Seit 2018
Materialwissenschaft ist ein Problem dessen Komplexität aus dem Zusammenspiel vieler unterschiedlicher Skalen					

## pyMOR – was ist das? URL: [pymor.org](http://pymor.org)

Partielle Differentialgleichungssysteme (PDGL): Modelle für num. Simulation

Umfang/Ordnung des PDGL-Systems verhindert oft Anwendbarkeit

MOR – Model Order Reduction: Generierung eines numerisch äquivalenten Ersatzmodells für PDG-Modell

pyMOR: Python Bibliothek, die verschiedene Ansätze der MOR (Reduced Basis und Systems Theory/IRKA) implementiert. Abstrakte Interfaces zu externen PDE-Solvern, aber auch NumPy/SciPy Implementierungen von FEM/FVM Methoden für eine reine Python Umgebung.

Für pyMOR: Transition zu nachhaltiger Entwicklung exemplarisch durchführen.

# pyMOR – wie sieht Nachhaltiges RSE aus?

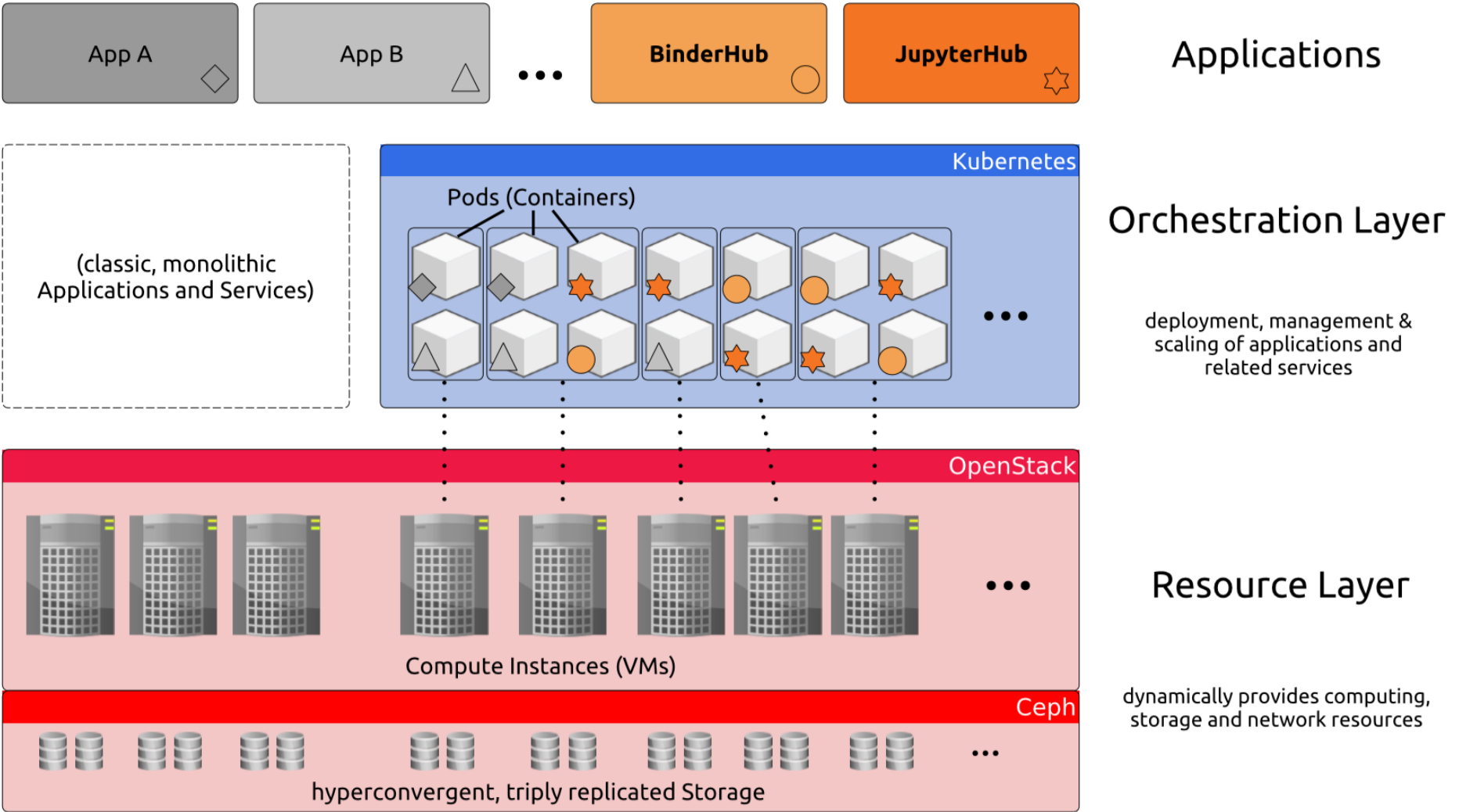
Gitlab Repository/Tools: Continuous Integration CI/Continuous Delivery CD

Mehr als traditionelles Unit Testing - nachhaltige Entwicklung und SW-Qualität (hypothesis.works; stateful testing); Guidelines für best practice effective testing

Cloud-native Technology: Jupyter Notebooks für Demos/Tutorials und externe User (no-install; JupyterHub, BinderHub) – WebGUI (ipywidgets); Interaktive Visualisierung mit K3D Python

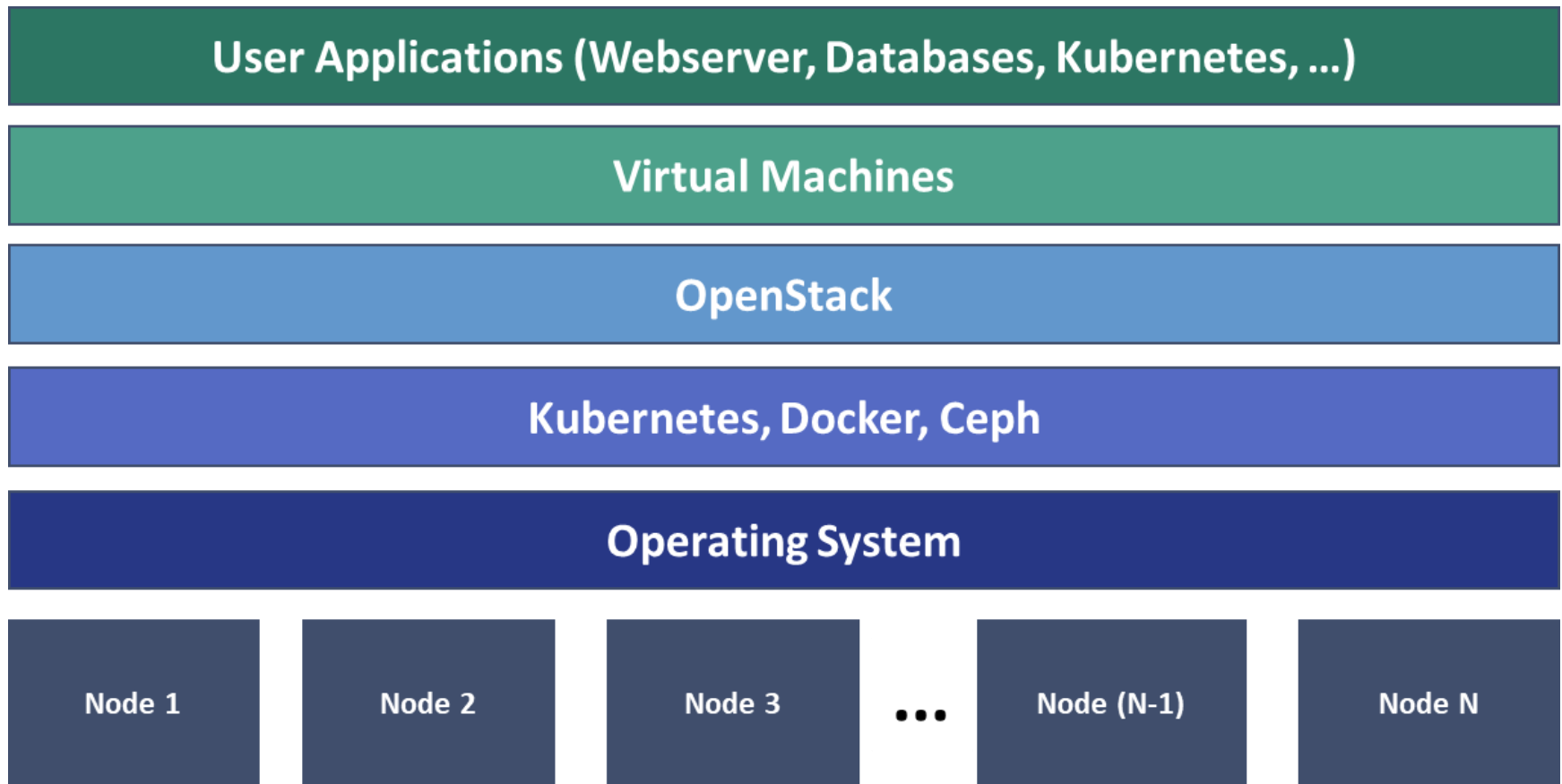
Bereitstellung über on-prem Cloud Umgebung (kubernetes/OpenStack/Ceph)

Enge Einbindung der HPC-Ressourcen für rechenintensive Jobs aus dem JupyterHub Interface (DASK) – KI/ML als zukünftige Top-Anwendung



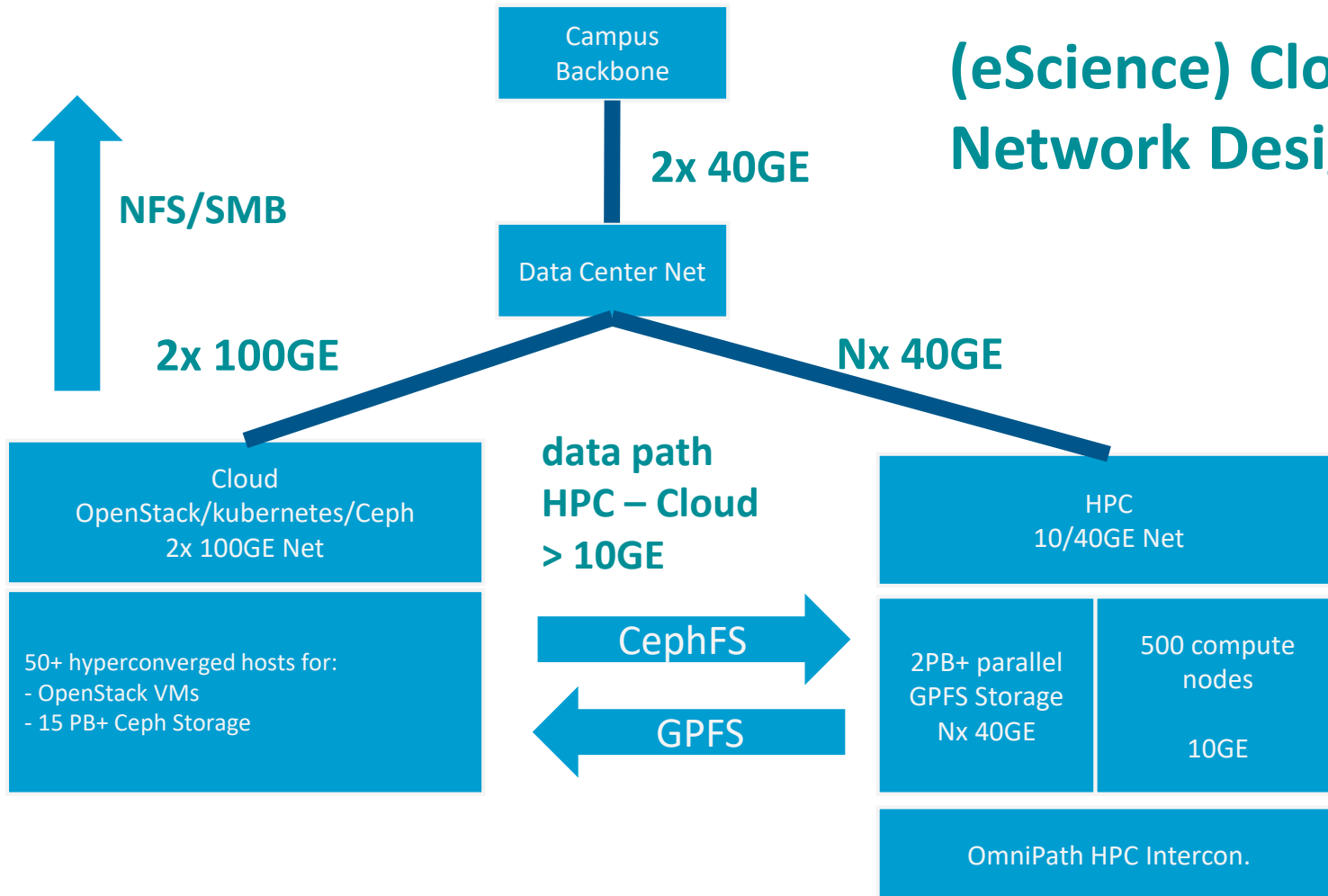
An on-premises GitLab instance provides Version Control, Continuous Integration, Continuous Delivery and per-project Docker Registries.

# Der Cloud Stack





# (eScience) Cloud Network Design



# eScience/Research: Governance Struktur

eScience WWU: Support Center, bündelt Kompetenz von ULB und ZIV

Service Center Digital Humanities, HPC, RDI, FDM, RSE, (DS)

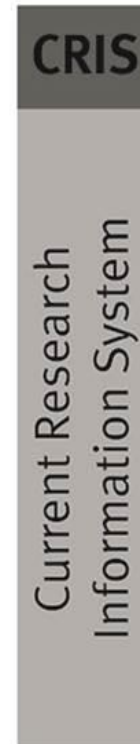
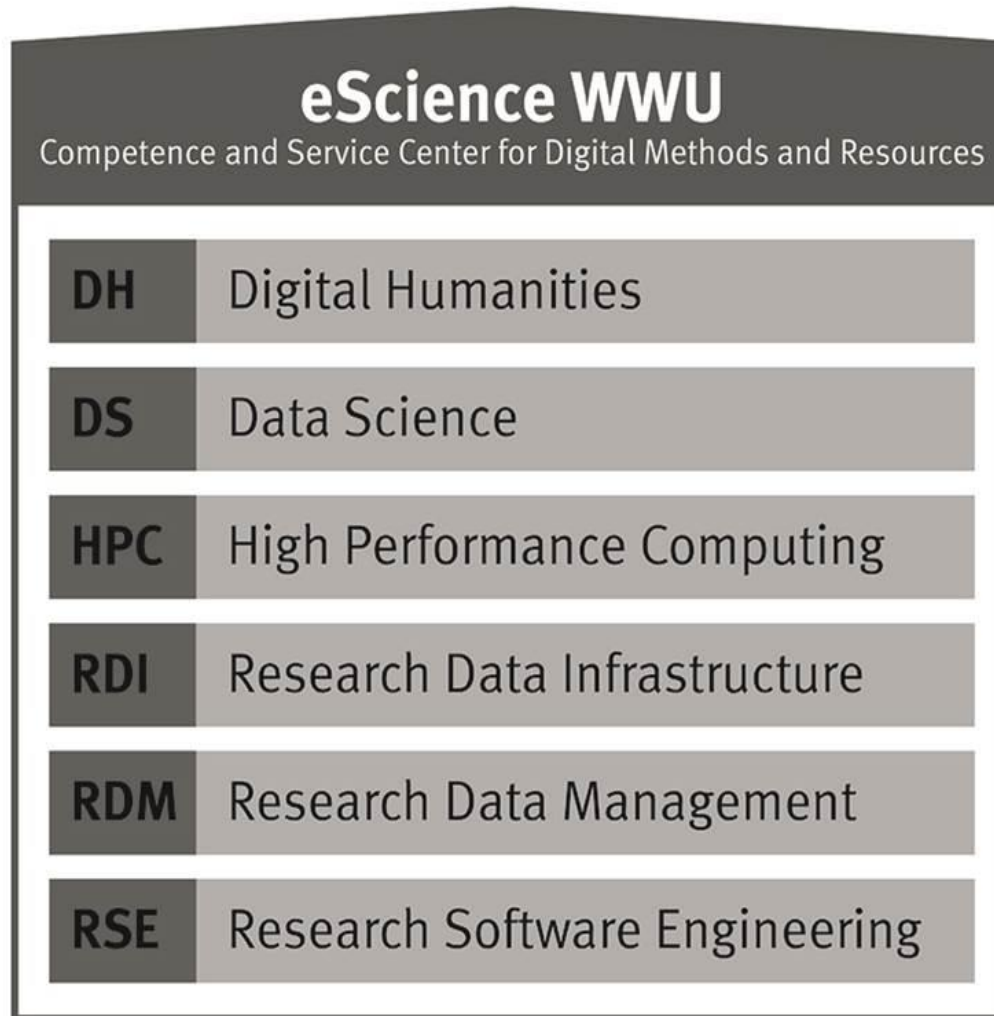
sciebo (owncloud-basierter sync&share Dienst für NRW) – Projekboxen

Research Data Infrastructure: on-prem kubernetes/OpenStack/Ceph Cloud  
(Konsortialprojekt mit Bonn, Bielefeld, Paderborn, Siegen; Phase 2019: 19 PB)

Angebundene Forschungsprojekte:

pyMOR (DFG), sciebo RDS (DFG), CS3MESH4EOSC (EU),

invenio RDM (CERN),



**Viele Dank für Ihre Aufmerksamkeit!**

**Fragen?**

**[rvogl@wwu.de](mailto:rvogl@wwu.de)**