

Software libre y reproducibilidad en ciencia

Alexandre Wagemakers

Grupo de dinámica no lineal, teoría del caos y sistemas complejos

I Jornadas de Cultura Libre
Universidad Rey Juan Carlos

Fuenlabrada

30/03/2022

Reproducibilidad en ciencia

Cuando colaboramos pasa a veces lo siguiente:

Librerías muy pillas

#1 ¡Oye! No me compila el programa que me pasaste.

#2 ¡Claro! Has instalado glibc++_2.343.4.lib y no glibc++_2.343.5.lib.

Reproducibilidad en ciencia

Cuando colaboramos pasa a veces lo siguiente:

Librerías muy pillas

- #1 ¡Oye! No me compila el programa que me pasaste.
- #2 ¡Claro! Has instalado `glibc++_2.343.4.lib` y no `glibc++_2.343.5.lib`.

Todo está en el contexto

- #1 He hecho como dijiste y no me sale lo mismo.
- #2 ¿Tienes Linux, Mac o Windows?

Reproducibilidad en ciencia

Cuando colaboramos pasa a veces lo siguiente:

Librerías muy pillas

- #1 ¡Oye! No me compila el programa que me pasaste.
- #2 ¡Claro! Has instalado `glibc++_2.343.4.lib` y no `glibc++_2.343.5.lib`.

Todo está en el contexto

- #1 He hecho como dijiste y no me sale lo mismo.
- #2 ¿Tienes Linux, Mac o Windows?

Diabólico

- #1 No consigo la misma figura con el algoritmo publicado.
- #2 ¡El diablo está en los detalles!

Reproducibilidad en ciencia

Cuando trabajamos en nuestros proyectos puede pasar lo siguiente:

Típicamente

1. No recuerdo con qué versión del código he hecho esta simulación.
2. ¿Donde está el programa que he usado para este artículo?
3. Ya no compila con la nueva versión de Ubuntu.
4. etc

Reproducibilidad en ciencia

Soluciones:

Accesibilidad de código

1. Abrir el código en una plataforma especializada tipo Github.
2. Poner una referencia al código en las publicaciones.

Reproducibilidad

1. Uso del lenguaje de programación Julia y el paquete Dr. Watson.
2. Uso del contenedor portable Apptainer.
3. Programar todo en un único archivo de 20000 líneas de código ANSI C.

Reproducibilidad en ciencia

Referencias:

Julia

<https://julialang.org/>

Dr. Watson

<https://juliadynamics.github.io/DrWatson.jl/dev/>

Apptainer (antes llamado Singularity)

<http://apptainer.org/>

Github

<http://github.com/>