

Programmierkonzepte in den Naturwissenschaften

0. Einführung zur Vorlesung

PD Dr. Till Biskup
Physikalische Chemie
Universität des Saarlandes
Sommersemester 2021



Warum diese Vorlesung?

Weil Wissenschaft hohe Ansprüche stellt



Programmierkonzepte in den Naturwissenschaften

Bausteine einer rechnergestützten Datenauswertung,
die den Kriterien der Wissenschaftlichkeit genügt

- ▶ Datenauswertung ist meist rechnergestützt
 - Die Komplexität heutiger Auswertungen erfordert häufig die Unterstützung durch Computer.
 - Programmierkenntnisse sind notwendige Voraussetzung
- ▶ Anspruch: saubere wissenschaftliche Arbeit
 - Reproduzierbarkeit, Nachvollziehbarkeit, Überprüfbarkeit
 - Betrifft sowohl die Datenhandhabung (Aufnahme, Lagerung) als auch die Datenverarbeitung (Auswertung, Darstellung)
- ▶ Realität: überwiegend schlechte Codequalität
 - entspricht nicht den Anforderungen an wissenschaftliches Arbeiten
 - oft aus Unwissen, weil Grundlagen nie vermittelt wurden
 - weder reproduzierbar noch nachvollziehbar noch überprüfbar
- ☞ Die Wissenschaftlichkeit selbst steht auf dem Spiel.

These

Die meisten Wissenschaftler haben nicht das Wissen und die (mentalen) Werkzeuge, um die Möglichkeiten, die ihnen heutige Computer und Programmiersprachen bieten, für ihre Zwecke sinnvoll und gewinnbringend einzusetzen.


- ▶ bewährte Lösungen existieren
 - Konzepte aus der professionellen Softwareentwicklung
 - intellektuell nicht herausfordernder als die Wissenschaft selbst
- ▶ Programmieren als Teil des wissenschaftlichen Curriculums
 - Code, der funktioniert, ist meist ungenügend.
 - konzeptionelle Durchdringung des Problems

- ▶ **Bewusstsein für die Wichtigkeit**
 - Wissenschaftler tragen Verantwortung
 - Wissenschaft stellt hohe Anforderungen
- ▶ **Grundlegende Programmiererfahrung**
 - Fokus der Vorlesung: allgemein gültige Konzepte
 - Programmierkenntnisse und -Erfahrung werden vorausgesetzt
- ▶ **Lust auf Konzepte und Ideen**
 - Vieles bleibt erstmal abstrakt
 - Viele Konzepte und Ideen sind sehr breit einsetzbar.
- ▶ **Bereitschaft, selbst in der Programmierung tätig zu werden**
 - Lernen und Verstehen nur durch den realen Einsatz
 - Programmieren lernt man nur durch Programmieren.



Fünf große Abschnitte

- 1 Motivation
 - zwei Aspekte: Naturwissenschaften und Programmierung
- 2 Infrastruktur
 - Editoren, Versionsverwaltung, Dokumentation, ...
- 3 Sauberer Code
 - Programmierparadigmen, Formatierung, Entwurfsmuster, Tests, ...
- 4 Softwarearchitektur
 - SOLID-Prinzipien
- 5 Datenverarbeitung und -Analyse in den Naturwissenschaften
 - Formate, Metadaten, Verarbeitung und Analyse, Präsentation

Ähnlicher Fokus wie die Vorlesung

-  Anthony Scopatz, Kathryn D. Huff
Effective Computation in Physics
O'Reilly, Sebastopol, 2015

Python mit Fokus auf Einsatz in den Naturwissenschaften

-  Christian Hill
Learning Scientific Programming with Python
Cambridge University Press, Cambridge UK, 2015
-  Allen B. Downey
Think Python
O'Reilly, Sebastopol, 2015

Material zu jeder Lektion

- ▶ Foliensatz
- ▶ Glossar
- ▶ Webcast
- ▶ weiterführende Hinweise
- ▶ Verständnisfragen
- ▶ Literatur



Webseite zur Vorlesung

<https://www.till-biskup.de/de/lehre/programmierkonzepte/>