



Institut für Physikalische Chemie

Vorlesung Physikalische Chemie V: Programmierkonzepte in der Physikalischen Chemie im Wintersemester 2018/19

Dr. Till Biskup

— Glossar zu Lektion 01: „Motivation (Physikalische Chemie)“ —

Hinweis: Die nachfolgend genannten Begriffe und Definitionen erheben keinen Anspruch auf formale Korrektheit, sondern dienen lediglich dem besseren Verständnis der in der Vorlesung behandelten Themen und sind im jeweiligen Kontext zu sehen. Mehrfache, voneinander abweichende Definitionen in unterschiedlichen Kontexten sind daher möglich. Englische Begriffe werden zwar nach Möglichkeit übersetzt, erscheinen aber ggf. unter ihrem englischen Namen in der Liste. Verweise untereinander sind durch ↑ gekennzeichnet.

größeres Projekt hier: Alles, was mehr als zwei Wochen Arbeit kostet und deutlich mehr als zweihundert Zeilen (reinen) Quellcode bzw. mehr als eine Handvoll Unterfunktionen umfasst. Wichtig ist der Fokus: Sobald ein Programm über längere Zeit und/oder von anderen verwendet werden soll (was eher die Regel statt die Ausnahme ist), ist es ein größeres Projekt.

Kristallkugel Nur in der Theorie funktionierendes Hilfsmittel für den Blick in die Zukunft, das u.a. hilfreich wäre, um Software bereits in ihrer Entstehung auf künftige Anforderungen hin auszulegen. Aufgrund anderer damit einhergehender Probleme ist die reale Funktionalität einer K. nicht wünschenswert.

Lizenz Nutzungsrecht; Software ist *per se* vom Urheberrecht geschützt, unabhängig von ihrer Funktionalität. Lizenzen übertragen Nutzungsrechte vom Urheber der Software an ihren Nutzer.

Modularisierung Aufteilung der Gesamtaufgabe in kleinere Abschnitte. Die Aufteilung wird so lange fortgesetzt, bis die Lösung für den aktuellen Abschnitt unmittelbar in Form von Quellcode offensichtlich ist. Setzt die Definition von ↑Schnittstellen voraus.

numerische Genauigkeit Zahlen lassen sich im Allgemeinen in einem Rechner nicht mit beliebiger Genauigkeit repräsentieren. Diese eingeschränkte numerische Genauigkeit kann teilweise zu erheblichen Problemen (und fehlerhaften Ergebnissen) führen.

Nutzerdokumentation Eine aktuelle, auf die Bedürfnisse des Anwenders zugeschnittene (ggf. kurzgefasste) Dokumentation, nach Möglichkeit mit realen Anwendungsbeispielen. Hilft gerade bei umfangreicheren Auswertungsprogrammen und bei Nutzern, die keinen direkten Zugang zum Entwickler haben, die Software aber trotzdem verwenden wollen.

Physikalische Chemie Wesentliche Charakteristika sind die Ordnung des experimentell gewonnenen Erfahrungsmaterials mithilfe der theoretischen, numerischen und experimentellen Methoden der Physik und der Theoretischen Chemie, das Auffinden qualitativer Zusammenhänge und das Aufstellen quantitativer Beziehungen. Kurz gefasst: In der Physikalischen Chemie geht es um das Verständnis der Grundlagen und Hintergründe. Entsprechend stehen Daten und ihre Auswertung (⇒ Verständnis) (oft) im Zentrum. Datenauswertung erfolgt heute meist rechnergestützt, entsprechende Kenntnisse im Programmieren

und dem Umgang mit komplexer(er) Software sind deshalb zunehmend wichtig.

Robustheit hier: Toleranz einer Software gegenüber fehlerhaften Nutzereingaben. Insbesondere sollte die Software in einem solchen Fall nicht einfach abstürzen und damit die bisherige Arbeit des Nutzers vernichten. Siehe auch ↑Validierung.

Schnittstelle mehrfache, leicht unterschiedliche Bedeutungen im Kontext der Softwareentwicklung; hier: Verbindung zwischen einem Stück Software (Programm, Routine) und seiner Umgebung. Dient der Trennung von Verantwortlichkeiten und ermöglicht ↑Modularisierung.

selbstdokumentierend hier: Eigenschaft von Auswertungssoftware, alle Prozessierungsschritte (automatisch) zu dokumentieren. Wesentliche Voraussetzung für die Nachvollziehbarkeit wissenschaftlicher Datenverarbeitung und -Auswertung.

Test hier: strukturiertes Vorgehen, eine Software zu überprüfen. Setzt die Definition klarer Anfangs- und Endbedingungen (Eingabe und Ergebnis) voraus und sollte idealerweise vollständig automatisiert ablaufen können.

Validierung hier: Überprüfung der Nutzereingaben eines Programms auf Sinnhaftigkeit und gül-

tigen Wertebereich. Wesentlicher Aspekt der ↑Robustheit von Software.

Versionsnummer hier: eindeutige Bezeichnung einer Version einer Software, deren Kenntnis es erlaubt, auf genau diese Version der Software Bezug zu nehmen.

Versionsverwaltung Software zur Verwaltung unterschiedlicher Versionen von Dateien und Programmen, die den Zugriff auf beliebige ältere als Versionen gespeicherte Zustände ermöglicht. Gleichzeitig ein wichtiges Werkzeug für die Softwareentwicklung und wesentlicher Aspekt einer Projektinfrastruktur.

Vorlagen *templates*, hier: Von der jeweiligen Software zur Datenverarbeitung weitgehend unabhängige Dokumente, die der strukturierten Präsentation von Daten bzw. Ergebnissen dienen. In gewisser Weise ein Lückentext, der automatisch ausgefüllt werden kann. Zentraler Aspekt ist die Trennung der Formatierung von der Software, die die Platzhalter ersetzt.

Wissenschaft Auf den Erkenntnisgewinn ausgeichtetes, systematisches menschliches Unterfangen, das in der Regel eine Reihe von Kriterien erfüllt bzw. erfüllen sollte: Unabhängigkeit vom Beobachtenden bzw. Durchführenden, gegründet auf den Erkenntnissen früherer Generationen, sowie überprüfbar, nachvollziehbar und ggf. reproduzierbar.