

# Programmierkonzepte in den Naturwissenschaften

## 0. Einführung zur Vorlesung

PD Dr. Till Biskup

Physikalische Chemie und Didaktik der Chemie

Universität des Saarlandes

Sommersemester 2020



## 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/>