

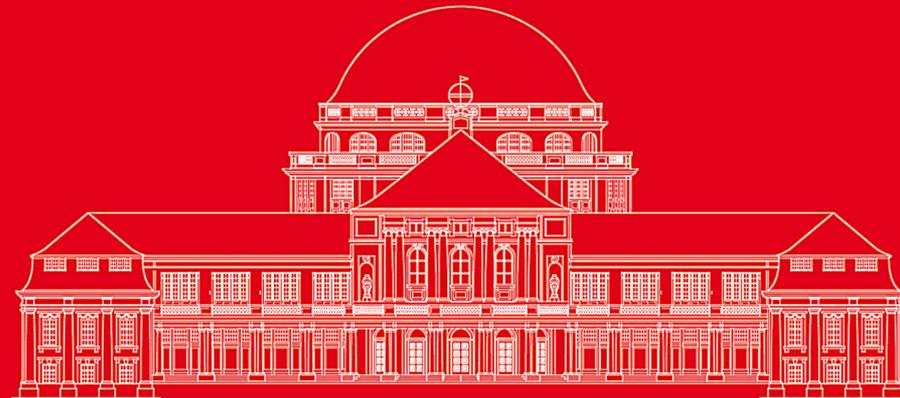


Universität Hamburg

DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG

Seminar Softwareentwicklung in der Wissenschaft

Hermann Lenhart, Christian Hovy, Jannek Squar, Jakob Lüttgau & Tobias Finn





Einordnung am Beispiel: „Workshop Dialekte der Klimaforschung Agenda“

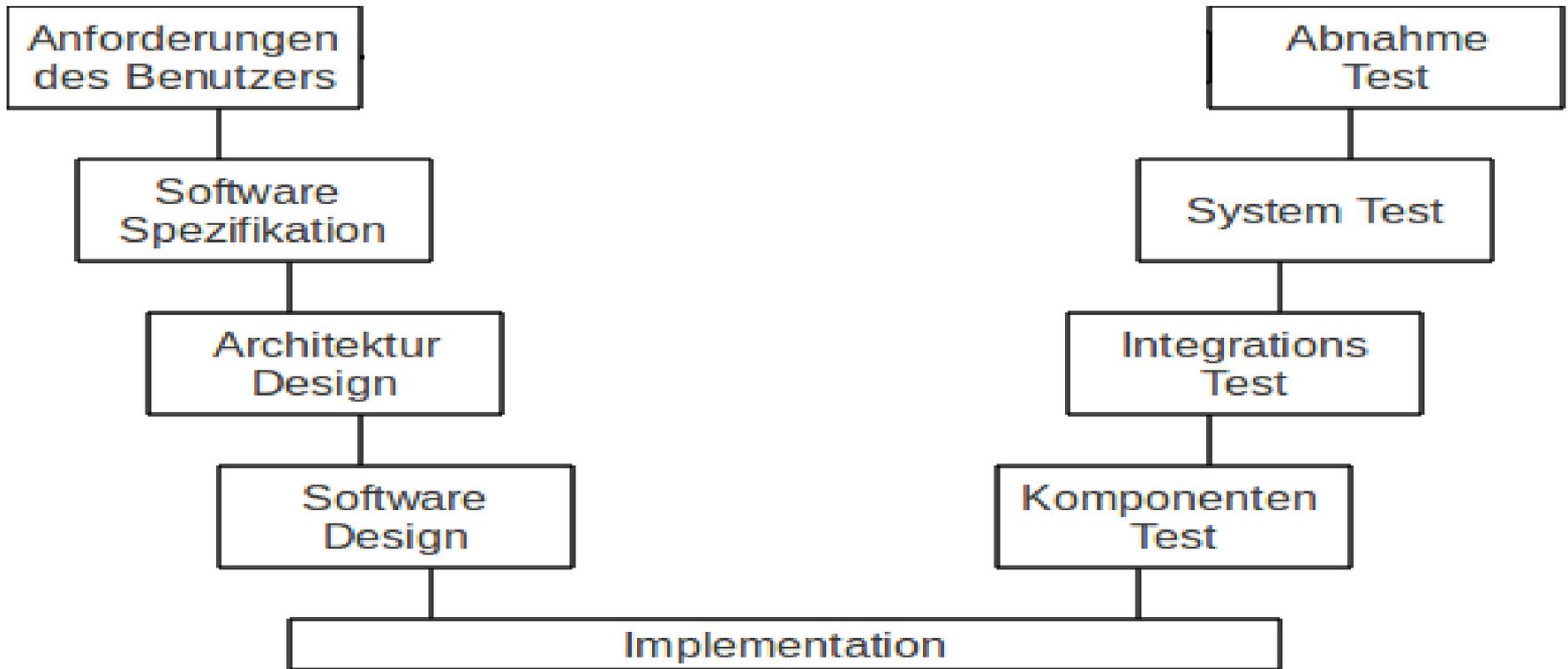
- Von der Anschauung und Messdaten zur mathematischen Modellierung
- Von der mathematischen Modellierung zum Fortran Programm
- Vom Fortran Programm zum parallelen Programm
- Vom parallelen Programm zu den Ergebnisdaten
- Von den Ergebnisdaten zur visuellen Darstellung
- Von der visuellen Darstellung zum Storytelling
- (Vom Storytelling zur Entscheidungsfindung)

benötigt Softwareentwicklung:

Im Sinne der Zusammenarbeit von Informatikern und Naturwissenschaftlern

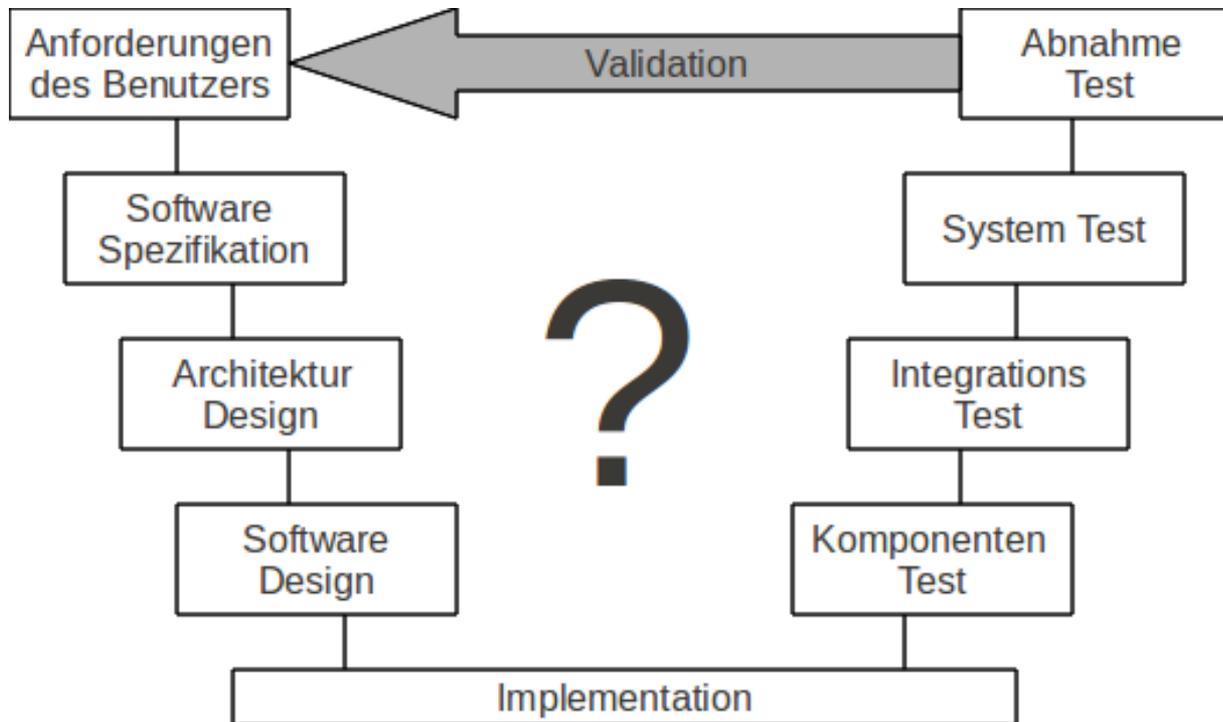


Theorie Softwareentwicklung: V-Konzept





V-Modell Ist Zustand in der Wissenschaft



Florian Ehmke
 Tests
 SiW WS2010/11



Problemstellung schon in der Sprache

Informatik:

Korrektheit der Ergebnisse

beinhaltet die mathematische Richtigkeit der berechneten Ergebnisse

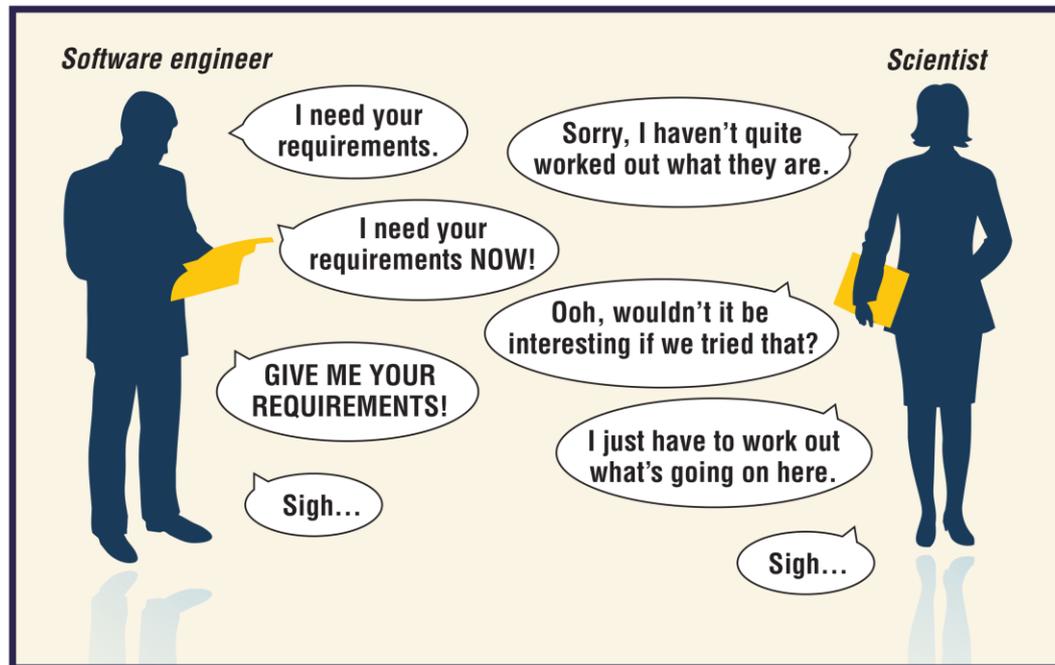
Naturwissenschaften (Modellierung):

Korrektheit der Ergebnisse im Sinne Informatik wichtige interne Voraussetzung

Validation bzw. Verifikation als Maß der Güte der Modellergebnisse



Interaktion Informatik und Naturwissenschaft



Quelle: Segal, Judith; Morris, Chris (2008)

Developing Scientific Software <https://dx.doi.org/10.1109/MS.2008.85>



Pro-Seminar - Softwareentwicklung in der Wissenschaft

Insgesamt 3 Themenbereiche:

- 1) Grundlegende Techniken zur Softwareentwicklung
- 2) Wissenschaftliche Paper zur Interaktion Informatik – Naturwissenschaften
- 3) Interviews mit Wissenschaftlern (vorwiegend Modellierer)



Pro-Seminar - Softwareentwicklung in der Wissenschaft

Themenbereiche: 1) Grundlegende Techniken zur Softwareentwicklung

- Arbeit mit Editoren (z.B. Eclipse)
- Programmiersprachen (z.B. FORTRAN, Python)
- Parallelisierung MPI oder Open MP
- Programmübersicht und Doku (z.B. Doxygen, Sphinx)
- Versionsverwaltung mit GIT
- LaTeX und Bibtex für wissenschaftliche Paper
- Jupyter Notebook



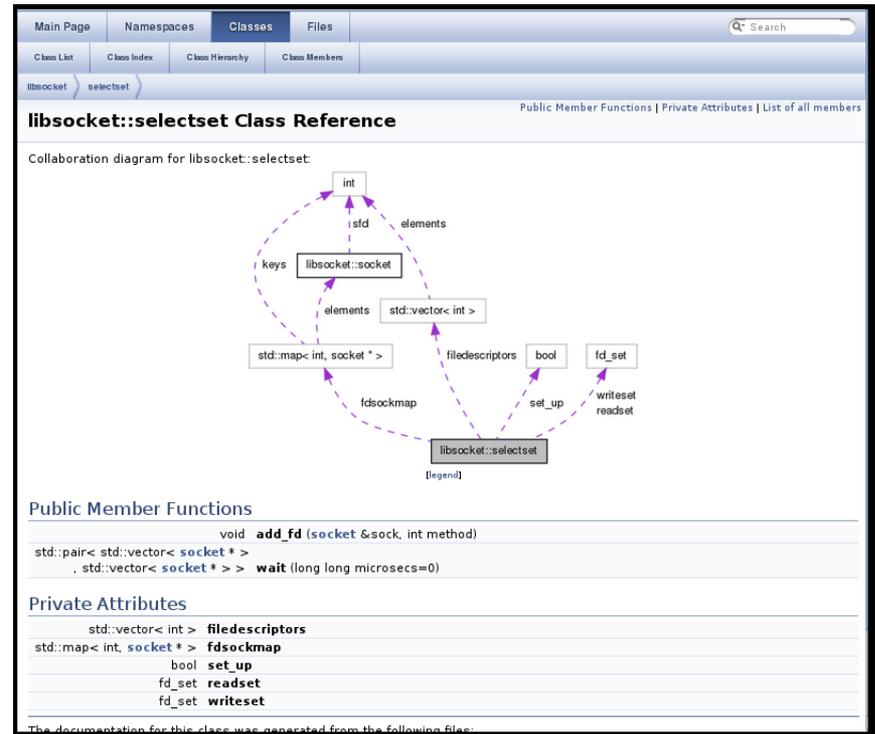
Pro-Seminar - Softwareentwicklung in der Wissenschaft

Themenbereiche: 1) Grundlegende Techniken zur Softwareentwicklung

- Programmübersicht und Doku (z.B. Doxygen, Sphinx)

DOXYGEN

Freie Dokumentationssoftware



The screenshot shows the Doxygen documentation for the `libsocket::selectset` class. It includes a navigation bar at the top with tabs for 'Main Page', 'Namespaces', 'Classes', and 'Files'. Below the navigation, there are sub-tabs for 'Class List', 'Class Index', 'Class Hierarchy', and 'Class Members'. The main content area displays the 'libsocket::selectset Class Reference' and a 'Collaboration diagram for libsocket::selectset:'. The diagram shows the class `libsocket::selectset` at the bottom, with dashed arrows indicating dependencies on `int`, `std::vector<int>`, `std::map<int, socket*>`, `libsocket::socket`, `std::vector<socket*>`, `fdsocketmap`, `filedescriptors`, `bool`, `set_up`, `fd_set`, `writeset`, and `readset`. Below the diagram, the 'Public Member Functions' section lists `void add_fd(socket &sock, int method)` and `std::pair< std::vector< socket * >, std::vector< socket * > > wait(long long microseconds=0)`. The 'Private Attributes' section lists `std::vector<int> filedescriptors`, `std::map<int, socket*> fdsocketmap`, `bool set_up`, `fd_set readset`, and `fd_set writeset`.

Quelle:
<https://de.wikipedia.org/wiki/Doxygen#/media/File:Doxygen-1.8.1.png>



Pro-Seminar - Softwareentwicklung in der Wissenschaft

Themenbereiche: 1) Grundlegende Techniken zur Softwareentwicklung

- Jupyter Notebook

created to "develop [open-source software](#), open-standards, and services for [interactive computing](#) across dozens of programming languages".

Quelle:

https://en.wikipedia.org/wiki/Project_Jupyter

IP[y]: Notebook Modulation Last Checkpoint: Jan 05 11:01 (autosaved)

File Edit View Insert Cell Kernel Help

Code Cell Toolbar: None

An angle modulated signal generally can be written as
 $u(t) = A_c \cos(2\pi f_c t + \phi(t))$
 In a phase modulated (PM) system, the phase is proportional to the message
 $\phi(t) = k_p m(t)$
 In a frequency modulated (FM) system, instantaneous frequency deviation is proportional to the message
 $f_i(t) - f_c = k_f m(t) = \frac{1}{2\pi} \frac{d}{dt} \phi(t)$

```
In [12]: from numpy.fft import fft, fftfreq
t = arange(-0.1, 0.1, 0.0001)
m = sinc(100*t)
int_m = empty(len(t))
for k in range(len(t)):
    int_m[k] = trapz(m[0:k], t[0:k])
u = cos(2*pi*250*t + 2*pi*100*int_m)
subplot(211)
plot(t, m)
subplot(212)
plot(t, u)
```

Out[12]: [matplotlib.lines.Line2D at 0xd3a490c<]

The figure displays two vertically stacked plots. The top plot shows the message signal $m(t) = \text{sinc}(100t)$, which is a sinc function centered at $t=0$ with a peak value of 1.0. The bottom plot shows the modulated signal $u(t) = \cos(2\pi \cdot 250t + 2\pi \cdot 100 \cdot \text{int}_m)$, which is a high-frequency cosine wave whose frequency varies according to the message signal, creating a frequency-modulated (FM) signal.

Quelle:

https://en.wikipedia.org/wiki/Project_Jupyter#/media/File:IPython-notebook.png



Pro-Seminar - Softwareentwicklung in der Wissenschaft

Themenbereich: 2) Wissenschaftliche Paper zur Interaktion

Informatik – Naturwissenschaften

- Versionskontrolle – Continuous Integration
- Testing
- Buildserver
- DSL
- Cloud Computing (in Bezug auf Portabilität)



Pro-Seminar - Softwareentwicklung in der Wissenschaft

Themenbereich: 2) Wissenschaftliche Paper zur Interaktion
Informatik- Naturwissensch.

Machine Learning

einmal Grundlagen und
Anwendungen in Geowissenschaften

Quelle:
Nature, April 2016





Pro-Seminar - Softwareentwicklung in der Wissenschaft

Machine Learning

Quelle:
Nature, April 2016

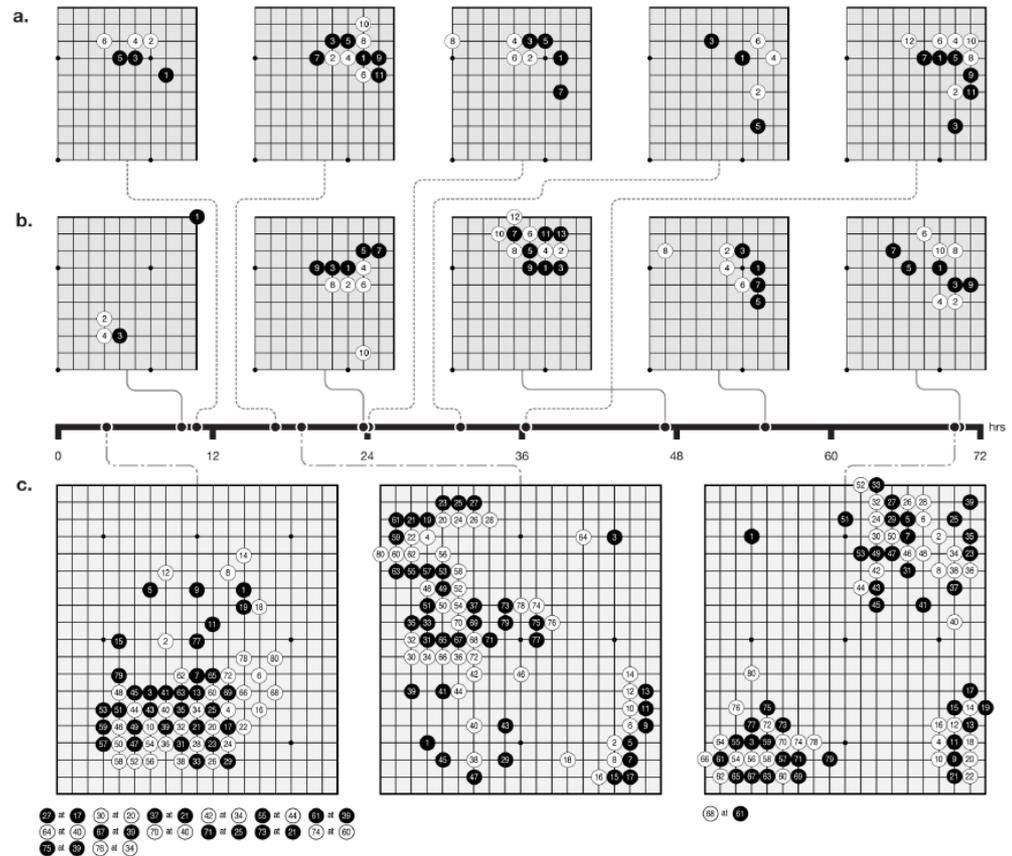
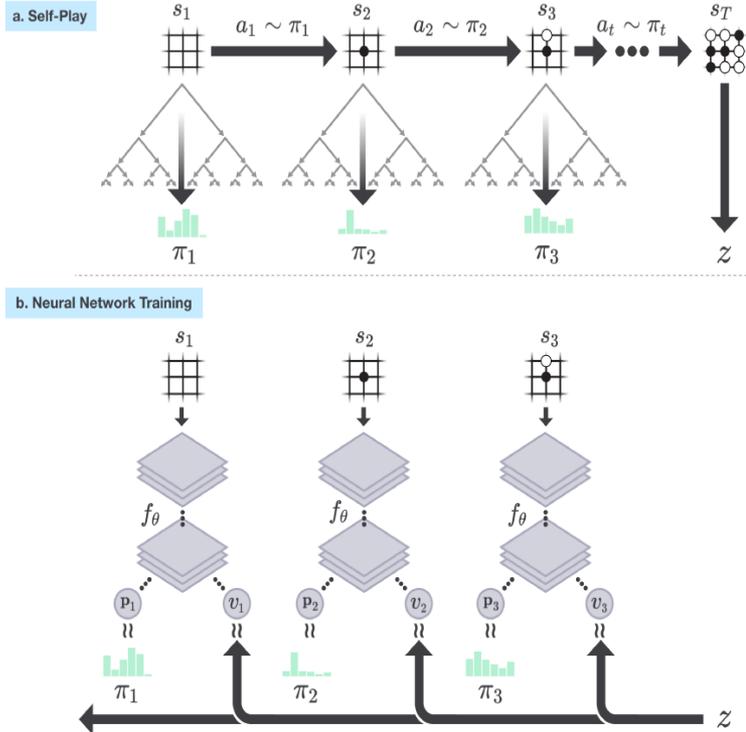


Figure 5: Go knowledge learned by AlphaGo Zero. a Five human joseki (common corner sequences) discovered during AlphaGo Zero training. The associated timestamps indicate the first time each sequence occurred (taking account



Universität Hamburg

DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG



Pro-Seminar - Softwareentwicklung in der Wissenschaft

Themenbereich: 3) Interviews mit Wissenschaftlern (vorwiegend Modellierer)

Interviewpartner:

aus **Bereichen Meteorologie, Ozeanographie oder andere CEN Institute** möglich,
nach Bedarf

oder andere Einrichtungen, z.B. Behörden (BSH), Consulting Firmen etc.

**Es können auch eigene Ideen eingebracht werden
z.B. aus der eigenen HiWi Arbeit**

-> Sollten aber einen gewissen Anspruch an das Thema haben!



Ablauf des Seminars:

- 1) Eintragen in Mailingliste
- 2) Aussuchen des Themas und Info dazu an Betreuer
- 3) Termin nach genauer Absprache der Themen und Gesprächen mit Betreuer
(Hinweis: siehe allgemeine Info zu Seminaren auf Webseite)
- 4) Bündelung der Vorträge für geeignete Termine (Vortrag ca.- 30 Min)
(Interviews in der Regel etwas später da Vorlauf nötig)
- 5) Danach schriftliche Ausarbeitung bis Ende Semester (d.h. **31. August**)



Ablauf des Seminars:

Weitere Fragen?





Universität Hamburg

DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG



Ablauf des Seminars: Terminfindung