# Programmierkonzepte in den Naturwissenschaften

8. (externe) Dokumentation

## PD Dr. Till Biskup

Physikalische Chemie und Didaktik der Chemie Universität des Saarlandes Sommersemester 2020







- Grundlegende Ideen und Konzepte lassen sich schwer durch den Quellcode selbst dokumentieren.
- Dokumentiert werden sollte das Was und Warum (bzw. Was warum nicht). Das Wie beantwortet der Quellcode.
- Eine minimale externe Dokumentation (README, INSTALL, erste Schritte) ist für größere Projekte unumgänglich.
- Einfach nutzbare Dokumentationswerkzeuge helfen, Dokumentation und Quellcode synchron zu halten.
- Externe Dokumentation ist essentieller Bestandteil von Software zur wissenschaftlichen Datenauswertung.

## Zur Einführung Effekte fehlender Dokumentation



66 You can download our code from the URL supplied. Good luck downloading the only postdoc who can get it to run, though

- Ian Holmes auf Twitter, 8. Jan. 2013

## Übersicht



Warum ist Dokumentation wichtig?

Vorurteile gegenüber Dokumentation

Arten von Dokumentation

Probleme mit (externer) Dokumentation

## Warum ist Dokumentation wichtig?

13

Ein Blick zurück – und nach vorne

### (minimale) Anforderungen an Software zur Datenauswertung

▶ wiederverwendbar, zuverlässig, überprüfbar

	Ø,	O	#		ŵ	@
wiederverwendbar	$\mathbf{Y}$	$\checkmark$		$\checkmark$		$\checkmark$
selbstdokumentierend			$\mathbf{V}$			
<b>⊘</b> zuverlässig	$\mathbf{Z}$				$\checkmark$	
<b>Q</b> überprüfbar	$\mathbf{Z}$			$\checkmark$		
nutzerfreundlich				$\checkmark$	$\checkmark$	$\mathbf{Z}$
rweiterbar	$\mathbf{Z}$	$\checkmark$		$\checkmark$		$\mathbf{Z}$
<b>C</b> reproduzierbar						

## Die Situation in den Wissenschaften

### Dokumentation wird vernachlässigt – mit hohen Kosten



- geringe durchschnittliche Verweildauer von Mitarbeitern
  - maximal ca. vier Jahre
  - meist kein langfristiger Mitarbeiter, der Codepflege betreibt
- ► Ziel: schnell funktionierendes Programm
  - Nachhaltigkeit höchstens zweitrangig
  - Neuschreiben oft einfacher (und schneller),
    als Code zu verstehen, weiterzuverwenden, zu erweitern
- viel zu viel schlechter Code in den Wissenschaften
  - mangelhafte Dokumentation (auf allen Ebenen)
  - erschwert (unnötig) die Nachvollziehbarkeit
- mangelnde Effizienz
  - Code wird (notgedrungen) viel zu oft neu geschrieben.

# Warum ist Dokumentation wichtig?



Eine Liste guter Gründe

- Absichten/Konzepte nur schwer im Code dokumentierbar
  - Ziel des Projekts, Fähigkeiten
  - Grund für die verwendete Architektur
- ► Nachweis der Urheberschaft an Gedanken/Konzepten
  - grundlegende Gedanken frühzeitig schriftlich festhalten
- Nachvollziehbarkeit der Entwicklung eines Konzeptes
  - setzt Zugang zu alten Versionen (z.B. VCS) voraus
- Voraussetzung für Bewältigung größerer Projekte
  - externe Projektdokumentation (Details folgen)
- Gedankenstütze
  - besonders hilfreich für Programmierung "nebenher"

## Warum ist Dokumentation wichtig?

Was soll dokumentiert werden?



- "Was" und "Warum" dokumentieren
  - Anforderungsanalyse
  - Übersicht über grundlegende Architektur
  - Begründung konkreter Entscheidungen (z.B. Sprache)
- konkretes "Wie" im Quellcode selbst
  - "Der Quellcode ist das Design."
  - (externe) Dokumentation nicht zu detailliert
- nicht gewählte Alternativen
  - bewahrt die Übersicht
  - vermeidet wiederholte (Fehl-)Entwicklungen
- Dokumentation oft parallel zur Implementierung
  - kein Problem, solange dokumentiert wird
- Dokumentation in der Wissenschaft nicht optional!

## Vorurteile gegenüber Dokumentation

Dokumentation ist die Zeit nicht wert, die sie benötigt.



### Dokumentation ist die Zeit nicht wert, die sie benötigt.

- Verständnis kostet viel mehr Zeit.
  - Code wird viel häufiger gelesen als geschrieben.
  - Hauptentwickler meist größter Nutznießer
- Dokumentation skaliert Entwicklerlebenszeit nicht.
  - Dokumentation muss nur einmal geschrieben werden.
  - Persönliche Einweisung in die Nutzung skaliert nicht.
- genauso wichtig wie der Methodenteil einer Arbeit
  - wird vermutlich (leider) genauso wenig wertgeschätzt . . .
  - mustergültiges Beispiel: Gregor Mendels Originalpublikation
- zwingt zum Nachdenken über den Code
  - Erst überlegen, was das Programm können soll.
  - Gedanken/Ideen *vorher* schriftlich festhalten erspart Arbeit.

## Vorurteile gegenüber Dokumentation

Dokumentation ist (zu) zeitaufwendig.



### Dokumentation ist (zu) zeitaufwendig.

- komplettes Nutzerhandbuch ist tatsächlich aufwendig
  - eher seltener Anwendungsfall
  - Fokus auf Konzepte und große Linien (wenig Änderung)
  - Wahl guter Werkzeuge entscheidend für den Aufwand
- Dokumentation nahe am Code Frage von Disziplin und Übung
  - Übung: selbstdokumentierender Code ultimatives Ziel
  - Disziplin: synchrone Änderung von Dokumentation und Code
- Entwicklerdokumentation weitestgehend automatisierbar
  - setzt Kenntnis der Werkzeuge voraus
  - erfordert Disziplin in der Umsetzung
  - Details in späterer Vorlesung ("Dokumentation im Code")
- konzeptionelle Dokumentation strukturiert und ist notwendig

## Vorurteile gegenüber Dokumentation

Dokumentation ist meist unvollständig und veraltet.



### Dokumentation ist meist unvollständig und veraltet.

- ▶ (leider) häufig beobachtbare Tatsache
  - oft fehlt grundlegende Information (Ziel, Fokus, Installation)
  - Frage von Bewusstsein, Disziplin und Kenntnis der Werkzeuge
  - Dokumentation skaliert, Lebenszeit nicht
- Hinweise für Nutzerhandbücher u.ä.
  - großes Aktualisierungsintervall (größere Versionssprünge)
  - vorab Gliederung erstellen
    - ggf. nur Abschnitte mit Inhalt veröffentlichen
- anders und besser statt nicht dokumentieren
  - selbstdokumentierender Code
  - feste Strukturen und Vorlagen (unterstützt durch Editor/IDE)
  - klare, eingeübte Abläufe

## Arten von Dokumentation

#### Eine erste Übersicht



- unterschiedliche Kategorisierung möglich
  - Adressaten (Nutzer, Administratoren, Entwickler)
  - Ort (extern, neben dem Quellcode, im Quellcode)
  - äußere Form (elektronisch/gedruckt; knapp/umfassend)
- ► Kontext wissenschaftlicher Software
  - theoretische Abhandlungen
  - Nutzer- und Entwicklerdokumentation
  - Kommentare im Quellcode
  - selbstdokumentierender Code



#### externe Dokumentation

Dokumentation, die nicht direkt im Quellcode vorliegt, sondern in separaten Dateien neben oder getrennt vom Quellcode

## Theoretische Abhandlungen

### Zusammenhängende Darstellung der Hintergründe



#### Charakteristika

- höchster Abstraktionsgrad von Dokumentation
- feste Form (These, Weißbuch, Bericht, Publikation)
- zusammenhängende Darstellung inkl. Literatur

#### ▶ Vorteile

- beschreibt wissenschaftliche Ziele und Herkunft des Codes
- meist hohe Qualität und gute Übersicht
- (i.d.R.) begutachtet
- (i.d.R.) zitierfähig

#### Nachteile

- Erstellung aufwendig
- statisch
- (meist) keine Beschreibung der konkreten Implementierung (keine Entwicklerdokumentation)

## Nutzerdokumentation

### Einfach zugängliche Informationen für den Anwender



- kurze Einführung (README)
  - obligatorisch für jedes Projekt
  - beschreibt Zielstellung und Fähigkeiten des Projekts (kurz!)
- Installationshinweise (INSTALL)
  - insbesondere bei Quellcode-Distributionen
  - Verweis auf Abhängigkeiten und Voraussetzungen
- Beispiele
  - gut gewählt und hinreichend beschrieben
  - möglichst getestet/testbar
- Beschreibung der Nutzerfunktionen
  - Unterscheidung: öffentliche API/Entwicklerdokumentation
  - alle Nutzerfunktionen sauber beschreiben
- ▶ Lizenz (LICENSE)

### Entwicklerdokumentation |

### Strukturierte Information zu den Details der Implementierung



- Details zur Implementierung
  - "Was" und "Warum"
  - "Was warum nicht": betrachtete, nicht gewählte Alternativen beschreiben
  - nicht zu detailliert: "Der Code ist das Design."
- ▶ (automatisch generierte) API-Dokumentation
  - wenig Mehrarbeit; Voraussetzung: Disziplin beim Programmieren
  - Beschreibung der API als Kommentarblock direkt im Code
  - formatierte Ausgabe vollständig automatisierbar
  - wird in späterer Vorlesung ausführlicher behandelt
- Projektdokumentation
  - Details folgen . . .

## Entwicklerdokumentation





### Bestandteile einer externen Projektdokumentation

- Anforderungsanalyse
  - kann sich ändern (gerade am Anfang)
- Architektur/High-Level-Design
  - nicht gewählte Alternativen benennen/begründen
- Roadmap
  - bei größeren Projekten bzw. limitierten Ressourcen
  - (flexible) Priorisierung einzelner Aufgaben
- Changelog
  - wichtig für Kompatibilität
- Konventionen
  - Beispiel: Coding Conventions
  - konsequente Umsetzung wichtiger als konkreter Inhalt

# Probleme mit (externer) Dokumentation



- Asynchronität zwischen Code und Dokumentation
  - Synchrone Änderung erfordert Disziplin.
  - veraltete Dokumentation ggf. schlimmer als fehlende
- Zeitaufwand für die Erstellung von Dokumentation
  - externe Dokumentation vom Code getrennt
  - Notwendige Vorausplanung ist Teil der Dokumentation.
  - nicht zu viele Details: "Der Code ist das Design."
- Unvollständige oder falsche Dokumentation
  - großes Problem vieler "Nebenher-Projekte"
  - Ursache oft mangelnde Disziplin
  - falsche Dokumentation ggf. schlimmer als fehlende
- einfache, strukturierte Ansätze zur externen Dokumentation

Gängige Probleme

## Probleme mit (externer) Dokumentation

Mögliche Lösungsansätze



- niederschwellig
  - Fokus: einfache Nutzbarkeit
  - Bsp.: Wiki
- Struktur/Konventionen
  - autoritative Antworten auf viele kleine alltägliche Fragen
  - hilft bei der Ausbildung von Routine
  - Konventionen sind nicht in Stein gemeißelt . . .
- Vorlagen (Templates)
  - befreiend, beschleunigend, vereinheitlichend
- klare Abläufe
  - Konventionen für den Akt des Dokumentierens
  - Automatisierung, ggf. Checklisten

## Probleme mit (externer) Dokumentation

Mögliche Lösungsansätze



- Automatisierung
  - vereinfacht und beschleunigt
  - sorgt für Konsistenz
- ein Ort
  - Informationen an einem Ort in einem (Meta-)Format
  - verhindert Inkonsistenzen
  - zentraler Speicherort mit gutem Zugriff (VCS, online)
- Disziplin
  - hilfreich: einfache Lösungen und Struktur/Konventionen
- Vorausplanung
  - Gliederung der gesamten Dokumentation
  - Priorisierung
  - ggf. nur Abschnitte mit Inhalt veröffentlichen





- Grundlegende Ideen und Konzepte lassen sich schwer durch den Quellcode selbst dokumentieren.
- Dokumentiert werden sollte das Was und Warum (bzw. Was warum nicht). Das Wie beantwortet der Quellcode.
- Eine minimale externe Dokumentation (README, INSTALL, erste Schritte) ist für größere Projekte unumgänglich.
- Einfach nutzbare Dokumentationswerkzeuge helfen, Dokumentation und Quellcode synchron zu halten.
- Externe Dokumentation ist essentieller Bestandteil von Software zur wissenschaftlichen Datenauswertung.