

# Programmierkonzepte in der Physikalischen Chemie

## 3. Modularität Dokumentation im Code

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

Dr. Till Biskup

Institut für Physikalische Chemie  
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg  
Wintersemester 2013/14



**UNI  
FREIBURG**

## Modularität

- Eine Aufgabe, eine Routine
- Klar definierte Schnittstellen
- Trennung von Datenverarbeitung und Nutzerschnittstelle
- Hintergrundwissen: Kontext der Ausführung

## Dokumentation

- Motivation: Warum dokumentieren?
- Arten von Dokumentation

## Dokumentation im Code

- Kein Code ohne Dokumentation
- Grundlegende Struktur eines Kommentarkopfes
- Dokumentationshilfen
- Probleme von Dokumentation

# Modularität

Der Schlüssel zur Wiederverwertbarkeit



Alan Chi, Flickr

### Aspekte

- ▶ Das Unix-Prinzip: eine Aufgabe, eine Routine
- ▶ Klar definierte Schnittstellen
- ▶ Strikte Trennung zwischen Datenverarbeitung und Nutzerschnittstelle
- ▶ Code wird nur einmal geschrieben.  
**DRY** — *Don't Repeat Yourself*

### Hintergrundwissen

- ▶ Lokale vs. globale Variablen, Kontext der Ausführung
- ▶ Objektorientierte Programmierung

Grundlegend zwei Konzepte:

- 1 ein Skript für jeden Datensatz
  - 2 eine Toolbox aus Funktionen, die generisch jeden Datensatz verarbeiten kann
- ☛ Beide Konzepte haben Vor- und Nachteile.
  - ☛ Wir werden uns im Folgenden auf das **Konzept der Toolbox** beschränken.

# Modularität

## Kurze Wiederholung: Toolbox



- ▶ Ein Werkzeug, eine Funktion
- ▶ Es gibt unterschiedliche Werkzeugkästen/Toolboxen für unterschiedliche Aufgaben.
- ▶ Ein gut sortierter Werkzeugkasten ist essentiell.

### Das „Lego-Prinzip“: Alles ist möglich

- ▶ Erfolg durch unendliche Kombinierbarkeit
- ▶ Einfach(st)e selbsterklärende Bausteine

### Die fehlende Kristallkugel: unvorhersehbare Anforderungen

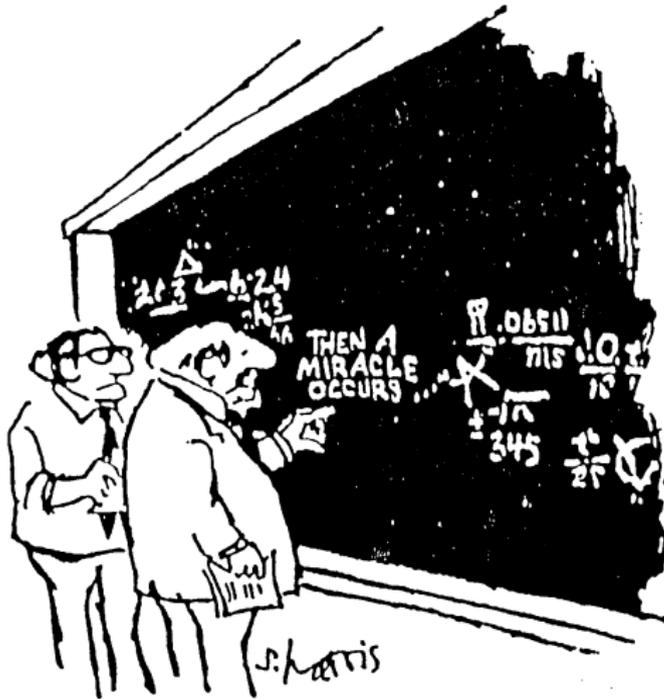
- ▶ Wir wissen (und ahnen) meist nicht, was kommt.
- ▶ Modularität ist zukunftsfähig.

### Eigenständigkeit und Eigenverantwortung

- ▶ Alles ist erlaubt, alles ist möglich – auch das „Sinnlose“.
- ▶ Grundrecht des Wissenschaftlers: Scheitern

# Modularität

Eine Aufgabe, eine Routine



„I think you should be more explicit here in step two.“

Sydney Harris

### Typischer Ablauf einer Datenverarbeitung:

- 1 (Roh-)Daten einlesen
  - 2 Vorverarbeitung der Daten  
(z.B. Hintergrundkorrektur, Glättung)
  - 3 Simulation anpassen
  - 4 Daten und Simulation darstellen
  - 5 Abbildung speichern
- ☛ Jeder einzelne dieser Schritte sollte in eine **eigene Funktion** ausgelagert werden.
  - ☛ Mancher Schritt erfordert mehr als eine Funktion.

## Skript

- ▶ Aufeinanderfolge einzelner Befehle
- ▶ Keine definierte Schnittstelle nach außen
- ▶ Alle definierten Variablen sind global
- ▶ Gut geeignet für „Rapid Prototyping“

## Funktion (Routine)

- ▶ Funktion verhält sich wie ein „normaler“ Befehl
- ▶ Klar definierte Schnittstelle nach außen
- ▶ Alle definierten Variablen sind lokal
- ▶ Gut geeignet für immer wiederkehrende Abläufe

### Listing 1: Skript zur Datenverarbeitung (schlecht formatiert)

```
1 fid=fopen('uvvis.txt');
2 k=1; while ~feof(fid) line{k}=fgetl(fid); k=k+1; end
3 fclose(fid);
4 line(1:2)=[]; data=[];
5 for k=1:length(line)
6 data(k,:)=cell2mat(textscan(strep(line{k}),' ','.'),'%f %f'));
7 end
8 bg=load('bg.txt'); bg=bg(1:length(data),:); bg(:,2)=bg(:,2)-bg(end,2);
9 bg(:,2)=bg(:,2)*(data(data(:,1))==520,2)/bg(bg(:,1))==520,2));
10 data(:,2)=data(:,2)-bg(:,2);
11 plot(data(:,1),data(:,2),'k-');
12 hold on; plot(data(:,1),zeros(length(data(:,2)),1),'k--'); hold off;
13 xlabel('\it wavelength / nm'); ylabel('\it intensity / OD');
14 set(get(gca,'xlabel'),'fontsize',12);set(get(gca,'ylabel'),'fontsize',12);
15 set(get(gca,'xlabel'),'fontname','Arial');
16 set(get(gca,'ylabel'),'fontname','Arial');
17 set(gca,'fontsize',12); set(gca,'fontname','Arial');
18 set(gcf,'paperunits','centimeters');set(gcf,'papersize',[16 10]);
19 set(gcf,'paperpositionmode','auto');
20 set(gca,'Units','centimeters');set(gca,'OuterPosition',[0 0 16 10]);
21 set(gcf,'Units','centimeters');oldpos = get(gcf,'Position');
22 set(gcf,'Position',[oldpos[1 2] 16 10]);
23 print(gcf,'data.pdf','-dpdf');
```

### Listing 2: Reihe von Funktionsaufrufen zur Datenverarbeitung

```
1 data = loadUVVisData('uvvis.txt');
2 bg    = loadUVVisData('bg.txt');
3 data = subtractBackgroundFromData(bg, data);
4 plotUVVisData(data, 'zeroLine', true);
5 figure2file(gcf, 'data.pdf');
```

## Anmerkungen

- ▶ Sprechende Funktionsnamen
  - Name impliziert Reihenfolge der Parameter
  - Code kommt quasi ohne Dokumentation aus
- ▶ Eine Aufgabe, eine Routine
  - Funktionen müssen implementiert werden
  - Routinen ggf. in der Realität komplexer als hier gezeigt

## Das „Unix-Prinzip“

Eine Aufgabe, eine Routine

Wie erkennt man, was „eine Aufgabe“ ist?

- ▶ **DRY** Code — *Don't Repeat Yourself*
- ▶ **KISS**-Prinzip — *Keep it simple and stupid.*

☛ Wenn man den Code in Blöcke aufteilen kann, kann man ihn in Funktionen aufteilen.

## Funktionen in Matlab

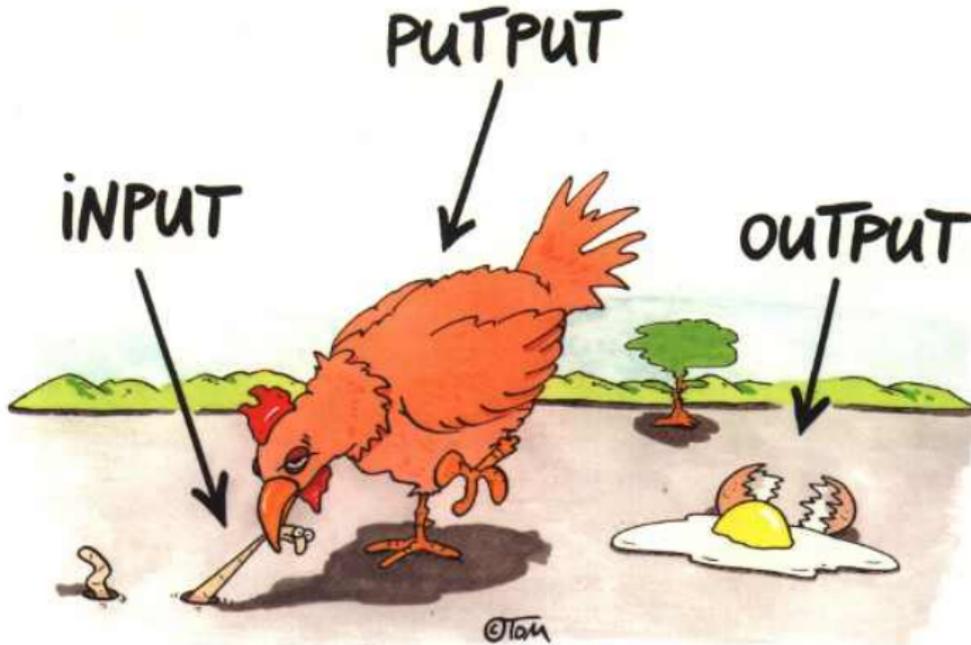
- ▶ Funktionsname und Dateiname müssen übereinstimmen.
- ▶ Nur eine Funktion pro Datei (Ausnahme: Unterfunktionen)

## Benennung von Funktionen in Matlab

- ▶ Matlab unterscheidet zwischen Groß- und Kleinschreibung.
  - ▶ Funktionsnamen müssen mit einem Buchstaben beginnen.
  - ▶ Sonderzeichen sind nicht erlaubt. (Ausnahme: „\_“)
- 
- ☛ Tipp: Sprechende Namen erhöhen die Lesbarkeit
  - ☛ Tipp: Präfix zur Vermeidung von Doppelungen

# Modularität

Klar definierte Schnittstellen



Thomas Körner, alias ©TOM

### Listing 3: Funktionsdeklaration in Matlab

```
function [out1,out2] = myFunction(in1,in2)
```

## Funktionsdeklaration in Matlab

- 1 Schlüsselwort „`function`“
- 2 Liste der Rückgabeparameter (output)
- 3 Funktionsname
- 4 Liste der Übergabeparameter (input)

 Es gibt Funktionen *ohne* Parameter

### Listing 4: Funktionsdeklaration mit optionalen Parametern

```
function [varargout] = myFunction(varargin)
```

---

## Erhöhung der Flexibilität: optionale Parameter

- ▶ optionale Übergabeparameter: `varargin`
  - ▶ optionale Rückgabeparameter: `varargout`
  - ▶ Lassen sich mit obligatorischen Parametern kombinieren
- ☛ „`varargin`“ immer als letzter Übergabeparameter bei der Funktionsdeklaration erhöht die Flexibilität.

### Vorgriff: Robuster Code

- ▶ Anzahl der Parameter überprüfen
  - `nargin`, `nargout`
- ▶ Typ der Übergabeparameter überprüfen
  - `isnumeric`, `ischar`, `iscell`, `isstruct`...
- ▶ Sinnvolles Verhalten bei falschen Parametern
  - „graceful exit“
  - `error` ist die schlechteste Lösung
- ▶ Rückgabeparameter zu Beginn der Funktion auf Standardwerte setzen
  - Führt sonst zu Fehlern je nach Funktionsaufruf
- ☞ Robustheit von Code wird separat behandelt

## Stabilität von Schnittstellen

- ▶ Schnittstellen sind das, was der Anwender von einer Funktion „sieht“ und was er verwendet.
  - Innerhalb der Funktion kann man (fast) alles ändern.
  - Schnittstellen sollten möglichst früh definiert werden.
  - Nachdenken zahlt sich aus: vorausschauend planen.
- ▶ Änderungen der Schnittstellen nur in begründeten Fällen
  - Inkompatible Änderungen führen zu Fehlern in Code, der auf älteren Versionen der Funktion basiert.
  - Wann immer möglich abwärtskompatibel programmieren
  - **Wichtig:** Dokumentation inkompatibler Änderungen

☞ Klares Konzept für Versionsnummern

## Ein Wort zu Versionsnummern

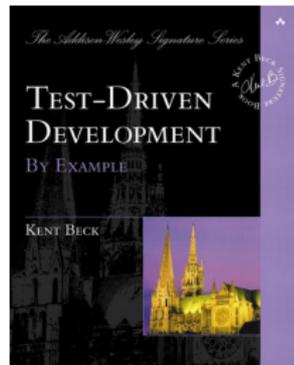
- ▶ **Stichwort:** „Semantic Versioning“
  - Dreistufige Versionsnummern: a.b.c
  - Hauptversion (a), Nebenversion (b), Revision (c)
  - Jede Veränderung in einer veröffentlichten Version führt zu einer Änderung der Versionsnummer.
  
- ▶ Ab Version 1.0.0 muß eine Schnittstelle innerhalb einer Hauptversion (n.x.x) abwärtskompatibel gestaltet werden.
  - Saubere Dokumentation der Schnittstelle
  - Dokumentation aller Änderungen
  - Ggf. Hilfsroutinen zur Gewährleistung der Kompatibilität

 <http://semver.org/>

## Testgetriebene Entwicklung

engl. *test-driven development*, konsequente Entwicklung von Tests *vor* den zu testenden Komponenten

- ▶ Zwei Prinzipien:
  - 1 Never write a single line of code unless you have a failing automated test.
  - 2 Eliminate duplication.
- ▶ Voraussetzungen
  - Tests mit ausreichender Abdeckung
  - Versionsverwaltung





## Nutzerschnittstelle

Abstrakte Schicht zwischen dem Nutzer und den eigentlichen Routinen, die dem Nutzer die Bedienung erleichtert.

### Beispiele für Nutzerschnittstellen

- ▶ Textschnittstelle (CLI)
  - ▶ graphische Schnittstelle (GUI)
- ☛ Nutzerschnittstellen verarbeiten Daten nie selbst, sondern rufen dazu die passenden Routinen auf!

### Gründe für die Trennung

- ▶ Saubere und fehlerfreie Datenverarbeitung ist in der Wissenschaft von allergrößter Bedeutung.
  - Nachvollziehbarkeit der Prozessierung der Daten
- ▶ Eine Routine für einen Schritt der Datenverarbeitung
  - Kann direkt oder von der jeweiligen Nutzerschnittstelle aufgerufen werden
  - Fehler müssen nur an *einer* Stelle behoben werden.
- ▶ Modularisierung vereinfacht die Programmierung von Nutzerschnittstellen
  - Konzentration auf die Schnittstelle
  - Die verarbeitenden Routinen sind bereits vorhanden.

### Gründe für die Trennung (Fortsetzung)

- ▶ Fehler in der GUI verhindern nicht die weitere Auswertung.
  - Komplexe Matlab-GUIs sind schwer plattformunabhängig und unabhängig von der Matlab-Version lauffähig zu halten.
  - Immer auch die Möglichkeit geben, die Auswerteroutinen händisch aufzurufen.
  
- ▶ Freiheit und Unvorhersehbarkeit
  - Eine feste Schnittstelle (CLI und besonders GUI) schränkt den Benutzer zu stark ein.
  - Wissenschaft lebt vom frischen Blick auf alte Probleme: „Lego-Prinzip“ als Erfolgsgarantie.
  
- ☞ Nutzerschnittstellen werden im Detail später an einem gesonderten Termin besprochen.

### Möglicher Kontext einer Variablen

lokal nur für die jeweilige Funktion „sichtbar“

global für alle Funktionen „sichtbar“

### Konsequenzen

- ▶ Unterschiedliche Funktionen können Variablen mit dem gleichen Namen verwenden.
- ▶ Eine Funktion kennt nur globale, ihr übergebene oder in ihr definierte Variablen.
- ▶ Die Trennung nach Kontext sorgt für Übersichtlichkeit.

### Kontext einer Variablen bei Matlab

- ▶ Variablen sind *per se* lokal.
- ▶ Die Verwendung globaler Variablen ist möglich, aber nicht zu empfehlen.
  - Alternative: Funktion mit sauberer Schnittstelle

### Besonderheiten bei Unterfunktionen in Matlab

- ▶ Unterfunktion innerhalb der Hauptroutine definiert
  - Variablen der Hauptroutine in der Unterfunktion sichtbar
- ▶ Unterfunktion außerhalb der Hauptroutine definiert
  - Variablen der Hauptroutine in der Unterfunktion nicht sichtbar

### Listing 5: Unterfunktion innerhalb der Hauptroutine

```
1 function [out1,out2] = myFunctionWithSubfunction(in1,in2)
2 % MYFUNCTIONWITHSUBFUNCTION Demonstrating subfunctions and variable context.
3
4     % Some nice code...
5
6     % Call to subfunction
7     mySubfunction;
8
9     function mySubfunction
10    % MYSUBFUNCTION Demonstrating a rather silly subfunction.
11
12        out1 = in2;
13        out2 = in1;
14    end % subfunction
15
16 end % function
```

- ☛ Unterfunktion kann direkt auf die Variablen der Hauptroutine zugreifen.

### Listing 6: Unterfunktion außerhalb der Hauptroutine

```
1 function [out1,out2] = myFunctionWithSubfunction(in1,in2)
2 % MYFUNCTIONWITHSUBFUNCTION Demonstrating subfunctions and variable context.
3
4     % Some nice code...
5
6     % Call to subfunction
7     [out1,out2] = mySubfunction(in1,in2);
8
9 end % function
10
11 function [out1,out2] = mySubfunction(in1,in2)
12 % MYSUBFUNCTION Demonstrating a rather silly subfunction.
13
14     out1 = in2;
15     out2 = in1;
16 end % subfunction
```

- ☛ Unterfunktion muss Variablen der Hauptroutine über ihre Schnittstelle übergeben bekommen.

### Unterfunktionen in Matlab

- ▶ Unterfunktion kann nur von der Hauptfunktion in der gleichen Datei aufgerufen werden.
- ▶ Vorteil: Unterfunktion „versteckt“
- ▶ Nachteil: Codeduplizierung wahrscheinlich

### Alternative: `private`-Verzeichnis

- ▶ Alle Funktionen in diesem Verzeichnis sind nur von Funktionen im Verzeichnis direkt darüber aufrufbar.
- ▶ Funktionen in diesem Verzeichnis erscheinen nicht im Matlab-Suchpfad.

### Objektorientierte Programmierung (OOP)

- ▶ Daten und verarbeitende Routinen in einem Objekt
- ▶ (Eigentlich) intuitiver als prozedurale Programmierung
- ▶ Erzwingt und erleichtert Modularisierung

### Grundbegriffe

**Klasse** Definition der Datenstruktur eines Objektes

**Objekt** Instanz einer Klasse

**Methoden** Algorithmen (Funktionen) eines Objekts

**Attribute** Eigenschaften eines Objekts

### Grundbegriffe (Fortsetzung)

- Abstraktion** Beschreibung der Fähigkeiten eines Objektes ohne Rücksicht auf Details der Implementation
- Kapselung** Kein (direkter) Zugriff auf die interne Datenstruktur eines Objektes
- Feedback** Objekte kommunizieren über einen Nachricht-Antwort-Mechanismus
- Persistenz** Objektvariablen existieren, solange die Objekte vorhanden sind.
- Vererbung** Abgeleitete Klassen „erben“ die Methoden und Attribute der Basisklasse.

# Modularität

Objektorientierte Programmierung einfach erklärt: das Auto



☛ Was macht ein Auto aus? Was hat es? Was kann es?

### Die abstrakte Klasse „Auto“

- ▶ Was *hat* ein Auto? (**Attribute**)
  - Räder (Wie viele?)
  - Türen (Wie viele?)
  - Sitze
  - Motor (Was für einer? Diesel? Benziner?)
  - Lenkrad
  - Gangschaltung (manuell? Automatik? Wie viele Gänge?)
  
- ▶ Was *kann* ein Auto? (**Methoden**)
  - Motor starten und stoppen
  - Fahren
  - Lenken
  - Gang wechseln
  - Blinken

### Vererbung: Die abgeleitete Klasse „VW Käfer“

- ▶ 4 Räder
- ▶ 3 Türen
- ▶ 4-Zylinder-Boxermotor
- ▶ 5-Gang-Schaltgetriebe
- ▶ ...



- ☞ „VW Käfer“ implementiert die abstrakte Klasse Auto.
- ☞ Das Objekt ist das einzelne Auto der Klasse VW Käfer.
- ☞ Autofahren: Wir kennen die Methoden der abstrakten Klasse Auto, die Implementierung ist Detail.

### Typische objektorientierte Programmiersprachen

- ▶ Smalltalk (damit fing alles an)
- ▶ C++
- ▶ Java

### Matlab und Objektorientierung

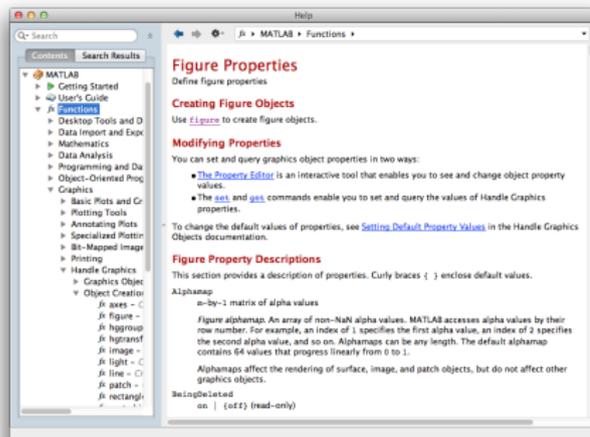
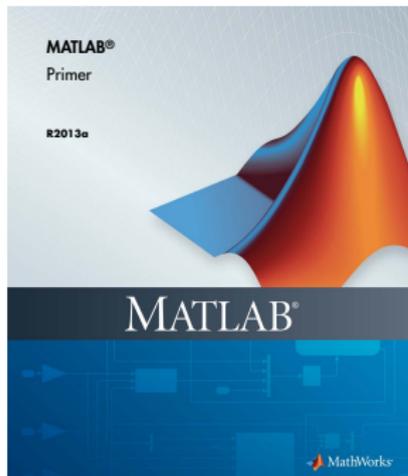
- ▶ Auf den ersten Blick prozedural
  - ▶ Intern stark objektorientiert, teils Java-basiert
  - ▶ Unterstützt (in neueren Versionen) Objekte und OOP
- ☞ Interessierte finden Details in den Matlab-Handbüchern.

# Kurze Pause

Gleich geht's weiter...



„Lunch atop a Skyscraper“, Charles C. Ebbets, 1932



Listing 7: linux-2.2.16/fs/buffer.c

```
1 /*  
2  * We used to try various strange things. Let's not.  
3  */
```

*Real programmers don't comment their code.  
If it was hard to write, it should be hard to read.*

## Warum dokumentieren?

- ▶ Weil andere das Programm nutzen/verstehen wollen.
- ▶ Weil man sich selbst nach zwei Monaten nicht mehr daran erinnern kann, was man da programmiert hat.
- ▶ Weil wir in aller Regel zu schlecht programmieren.
- ▶ Weil Dokumentation (gerade von Konzepten) für die weitere Entwicklung sehr hilfreich ist.
- ☛ Weil nur sauberer (dokumentierter) Code Zukunft hat.

# Dokumentation

## Motivation: Warum dokumentieren?



Dilbert.com DilbertCartoonist@gmail.com



2-27-10 ©2010 Scott Adams, Inc./Dist. by UFS, Inc.



Dilbert.com DilbertCartoonist@gmail.com



3-1-10 ©2010 Scott Adams, Inc./Dist. by UFS, Inc.



### Viele verschiedene Arten

- ▶ Im Quellcode
  - Schnittstellen-Dokumentation
  - Quellcode-Dokumentation (einzelne Zeilen)
- ▶ Im gleichen Verzeichnis wie die Funktionen/Toolbox
  - README
  - INSTALL
- ▶ Nutzerhandbuch
  - Beschreibung der Verwendung jeder Funktion
- ▶ Konzepte
- ▶ Beispiele

## Unterschiedliche Einteilung

- ▶ nach Zielgruppe
  - Programmierer
  - Anwender
  
- ▶ nach Inhalt
  - Quellcode-Dokumentation
  - Schnittstellen-Dokumentation
  - Dokumentation der Konzepte
  - Installation, Bedienung, ... (Anwenderdokumentation)
  
- ▶ nach Medium
  - im Quellcode
  - in Dateien neben dem Quellcode
  - getrennt vom Quellcode (Webseite, ...)



### Listing 8: linux-2.2.16/lib/vsprintf.c

```
1 /* vsprintf.c -- Lars Wirzenius & Linus Torvalds.
2 *
3 * Wirzenius wrote this portably, Torvalds fucked it up :-)
4 */
```

---

### Listing 9: linux-2.2.16/fs/buffer.c

```
1 /*
2 * After several hours of tedious analysis, the following
3 * hash function won. Do not mess with it... -DaveM
4 */
```

---

### Listing 10: linux-2.0.38/arch/m68k/atari/atafb.c

```
1 /* Nobody will ever see this message :-) */
2 panic("Cannot initialize video hardware\n");
```

---

*Real Programmers don't need comments—  
the code is obvious.*

— Ed Post, 1983

- ▶ Nicht dokumentierter Code ist (oft) wertlos.
- ▶ Fehlende Kommentare erschweren das Lesen von Code.
- ▶ Dokumentation im Code sollte kurz, prägnant und informativ sein.

☞ Beispiel gefällig?

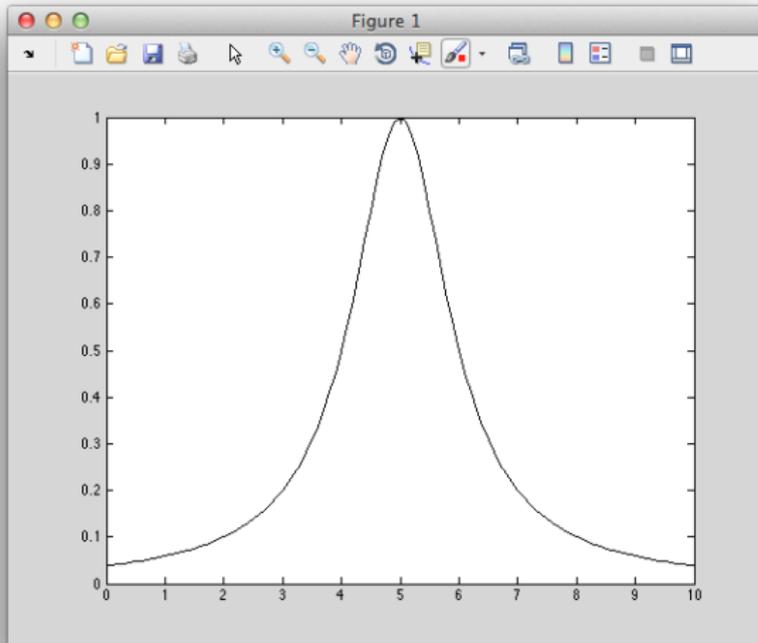
### Listing 11: Undokumentierter Code

```
1 fun = @(x,s,t)s^2/4./(s^2/4+(x-t).^2);  
2 s = 2;  
3 t = 5;  
4 x = 0:0.1:10;  
5 y = fun(x,s,t);  
6 plot(x,y,'k-');
```

- ▶ Keinerlei Kommentare
- ▶ Keine Gliederung des Codes durch Leerzeilen
- ▶ Keine oder wenige sprechende Variablennamen
- ☞ Irgendeine Idee, was der Code macht?
- ☞ Wie könnte der Code vernünftig dokumentiert aussehen?

# Dokumentation im Code

Kein Code ohne Dokumentation: Ein Beispiel



### Listing 12: Dokumentierter Code (lorentzian.m)

```
1 % LORENTZIAN Plot Lorentzian curve with fixed height.
2
3 % (c) 2013-14, Till Biskup <till.biskup@physchem.uni-freiburg.de>
4 % 2014-01-14
5
6 % Define Lorentzian with fixed height
7 %   s - width of the curve (FWHM)
8 %   t - position of the maximum
9 Lorentzian = @(x,s,t)s^2/4./(s^2/4+(x-t).^2);
10
11 % Define values for Lorentzian curve
12 width = 2;
13 maxpos = 5;
14
15 % Define x,y vectors
16 x = 0:0.1:10;
17 y = Lorentzian(x,width,maxpos);
18
19 % Plot
20 plot(x,y,'k-');
```

## Regel

Keine Datei (Routine, Skript) ohne Dokumentation am Anfang.

- ☛ Dokumentation ist eine **Frage der Disziplin**.
- ☛ Zum „Rapid Prototyping“ eignet sich die Kommandozeile.  
**Skripte werden dokumentiert!**
- ☛ Dokumentation muss zur Routine werden.  
Im Nachhinein zu dokumentieren ist keine Option,  
weil es dann nie gemacht wird.

## Zwei Arten von Dokumentation im Code

### 1 Kommentarköpfe von Funktionen

- kurze Zusammenfassung der Aufgaben der Routine
- präzise Beschreibung der Schnittstelle
- Autor, Copyright und Datum der letzten Änderung
- ggf. Hinweise auf Besonderheiten

### 2 (Meist) einzeilige Kommentare im Code

- kurze Erklärungen zum folgenden Code-Abschnitt
- **wichtig:** nicht das Offensichtliche dokumentieren

☞ Bis auf die Beschreibung der Schnittstelle gilt der Kommentarkopf für Skripte ebenso.

### Ein Kommentarkopf besteht mindestens aus drei Teilen

- 1 Kurze Zusammenfassung der Aufgaben der Routine
  - Mindestens ein Satz, besser ein kurzer Absatz, der die Aufgabe der Routine präzise beschreibt.
- 2 Präzise Beschreibung der Schnittstelle
  - Funktionsaufruf
  - Dokumentation der Ein- und Ausgabeparameter (Typ, Bedeutung)
- 3 Autor, Copyright und Datum der letzten Änderung
  - Wichtig: Datum der letzten Änderung immer anpassen!

 Der Kommentarkopf liefert dem Nutzer ein Maximum an Information auf minimalem Raum.

### Listing 13: Dokumentationsblock zu Beginn einer Routine

```
1 function spectrum = simCO2spectrum(x,fwhm,pos,height)
2 % SIMCO2SPECTRUM Function for simulating CO2 spectra using Lorentzians.
3 %
4 % Usage
5 %   spectrum = simCO2spectrum(x,fwhm,pos,height)
6 %
7 %   x           - vector
8 %                wavelength axis for spectrum
9 %
10 %   fwhm        - vector
11 %                spectral width of each Lorentzian
12 %
13 %   pos         - vector
14 %                position of each Lorentzian
15 %
16 %   height      - vector
17 %                height of each Lorentzian
18 %
19 %   spectrum    - vector
20 %                calculated spectrum
21 %                same length as x
22 %
23 % The vectors fwhm, pos, and height have to be of the same size.
```

### Listing 14: Copyrightinweis mit einem Autor

```
1 % (c) 2011-13, Till Biskup <till.biskup@physchem.uni-freiburg.de>  
2 % 2013-11-02
```

---

### Listing 15: Copyrightinweis mit mehreren Autoren

```
1 % (c) 1997-2005, A. Kabelschacht  
2 % (c) 2006-2013, Till Biskup <till.biskup@physchem.uni-freiburg.de>  
3 % 2013-11-02
```

---

- ☛ Die Angabe einer Email-Adresse ist optional.
- ☛ Der Copyrightinweis wird durch eine Leerzeile vom Kommentarkopf getrennt.

- ▶ Der erste Kommentarblock einer Datei wird beim Aufruf des Befehls `help` ausgegeben.
  - Ähnliches gilt für andere Sprachen und im Zusammenhang mit automatischer Generierung der Dokumentation (Doxygen, Javadoc etc.)
- ▶ Da der Copyright-Hinweis nicht ausgegeben werden soll, wird dieser durch eine Leerzeile vom ersten Kommentarblock abgetrennt.
- ▶ Symbolworte, die vom `help`-Befehl erkannt werden
  - `see also`

- ▶ Kommentare im Code idealerweise auf Englisch
  - Wissenschaft ist international.
  - Japanische oder russische Kommentare im Quellcode sind leider wenig hilfreich...
- ▶ Aber: Lieber deutsche als keine Kommentare!
  - Es ist (meist) einfacher, einen Übersetzer zu finden, als einen undokumentierten Code zu verstehen.
- ▶ Grundsätzlich nie Sonderzeichen (z.B. Umlaute)
  - Unicode hat sich (leider) immer noch nicht durchgesetzt.
  - Beschränkung auf den ASCII-7-bit-Zeichensatz

# Dokumentation im Code

## Der ASCII-7-bit-Zeichensatz

Hex	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	a	b	c	d	e	f
00	NUL ^@	SOH ^A	STX ^B	ETX ^C	EOT ^D	ENQ ^E	ACK ^F	BEL ^G	BS ^H	TAB ^I	LF ^J	VT ^K	FF ^L	CR ^M	SO ^N	SI ^O
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
10	DLE ^P	DC1 ^Q	DC2 ^R	DC3 ^S	DC4 ^T	NAK ^U	SYN ^V	ETB ^W	CAN ^X	EM ^Y	SUB ^Z	ESC ^[\	FS ^\ ^]	GS ^^	RS ^^	US ^?
	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31
20		!	"	#	\$	%	&	'	(	)	*	+	,	-	.	/
	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47
30	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	:	;	<	=	>	?
	48	49	50	51	52	53	54	55	56	57	58	59	60	61	62	63
40	@	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O
	64	65	66	67	68	69	70	71	72	73	74	75	76	77	78	79
50	P	Q	R	S	T	U	V	W	X	Y	Z	[	\	]	^	_
	80	81	82	83	84	85	86	87	88	89	90	91	92	93	94	95
60	`	a	b	c	d	e	f	g	h	i	j	k	l	m	n	o
	96	97	98	99	100	101	102	103	104	105	106	107	108	109	110	111
70	p	q	r	s	t	u	v	w	x	y	z	{		}	~	DEL
	112	113	114	115	116	117	118	119	120	121	122	123	124	125	126	127

 Zeichen 20<sub>Hex</sub> bis 7e<sub>Hex</sub> (32 bis 126) sind „druckbar“.

- ▶ Saubere Dokumentation im Code zahlt sich aus:
  - Automatische Generierung von Dokumentation aus den Kommentaren im Quellcode.
  
- ▶ Matlab
  - `help`-Befehl gibt ersten Kommentarblock aus.
  - Interne Funktionen sind gute Vorlagen/Beispiele.
  - Unterstützt das „Publizieren“ von Funktionen
  
- ▶ Dokumentationshilfen für andere Sprachen als Matlab
  - Doxygen, Javadoc, ROBODoc
  - Liefern Ideen für eine sinnvoll strukturierte Dokumentation
  - Erlauben die automatische Erstellung in diversen Formaten ( $\text{\LaTeX}$ , DocBook, RTF, ...)

### Problem

- ▶ Dokumentation hinkt der Entwicklung des Codes hinterher
  - Problem gerade bei Kommentarzeilen im Code:  
im schlimmsten Fall falsch und irreführend!

### Lösungsansatz

- ▶ Keine unnötigen Kommentare im Code
    - Offensichtliches nicht dokumentieren
    - Offensichtliche Programmierung der Dokumentation einer weniger offensichtlichen Lösung vorziehen
  - ▶ Beim Ändern von Code immer auf Kommentare achten
- ☞ Letztlich eine Frage der (persönlichen) Disziplin.

### Problem

- ▶ Fehlende Dokumentation der Installation und Bedienung
  - Nichts ist schlimmer als ein Verzeichnis voller Skripte/Funktionen ohne jegliche Beschreibung.

### Lösungsansatz

- ▶ Externe Dokumentation
  - Extern zu den Funktionen
  - ggf. in eigenem Unterverzeichnis (`doc`)
  - reine Textdateien, kurz und prägnant
  - mindestens `README`, ggf. `INSTALL`

### Problem

- ▶ Fehlende Dokumentation der Konzepte und Ideen
  - Schnittstellen-Dokumentation meist nicht ausreichend
  - Grundlegende Konzepte im Kontext dokumentieren
  - Statisches Dokument oft zu unflexibel

### Lösungsansatz

- ▶ Konzeptionelle Dokumentation in einem [Wiki](#)
  - Flexibel
  - Erlaubt einfache Aktualisierungen
  - Geeignet als primäre Informationsquelle für Anwender.

👉 Wird in der nächsten Lektion detaillierter besprochen.

*So long, and thanks for all the fish.*

Vorschau: [Infrastruktur](#)

- ▶ Versionsverwaltung
- ▶ Bug-Verwaltung
- ▶ Dokumentation (Wiki)



Dilbert.com DilbertCartoonist@gmail.com



3-3-10 © 2010 Scott Adams, Inc./Dist. by UFS, Inc.



- ☛ Saubere **Dokumentation** erspart anderen böse Überraschungen und schmerzhaft Erfahrungen.