Programmierkonzepte in der Physikalischen Chemie

3. Infrastruktur

UNI FREIBURG

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

Dr. Till Biskup

Institut für Physikalische Chemie
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg
Wintersemester 2017/18

Zentrale Aspekte

UNI FREIBURG

- Eine minimale Infrastruktur ist zwingende Voraussetzung zur Erfüllung der Kriterien für Auswertungssoftware.
- Infrastruktur kann die Softwareentwicklung vereinfachen, disziplinieren und strukturieren.
- Klare Abläufe sorgen für Konsistenz und Routine und erleichtern die Nutzung.
- Nur eine funktionierende und möglichst einfach bedienbare Infrastruktur wird auch regelmäßig genutzt werden.
- Entscheidend ist nicht der Einsatz konkreter Produkte, sondern der Werkzeuge als solcher.

Übersicht

UNI FREIBURG

Warum ist Infrastruktur wichtig?

Kosten-Nutzen-Abwägung

Übersicht über die nachfolgend behandelte Infrastruktur

Weitere Arten von Infrastruktur

Ausgangspunkt der Vorlesung

- Programmierung größerer Projekte
  - Beispiel: Datenauswertung
- Klar definierte Ansprüche an die entwickelte Software
  - Wiederverwendbarkeit, Zuverlässigkeit, Überprüfbarkeit
- Software für die wissenschaftliche Datenanalyse
  - Ansprüche wurden entsprechend definiert
  - führt (fast) zwangsläufig zu „größerem Projekt“
- Softwareentwicklung ist Mittel zum Zweck
  - Physikalische Chemie:
    Verständnis von Zusammenhängen, Auswertung von Daten
  - Softwareentwicklung so einfach und effizient wie möglich

Warum ist Infrastruktur wichtig?

Wiederholung: Größeres Projekt

UNI FREIBURG

Größeres Projekt

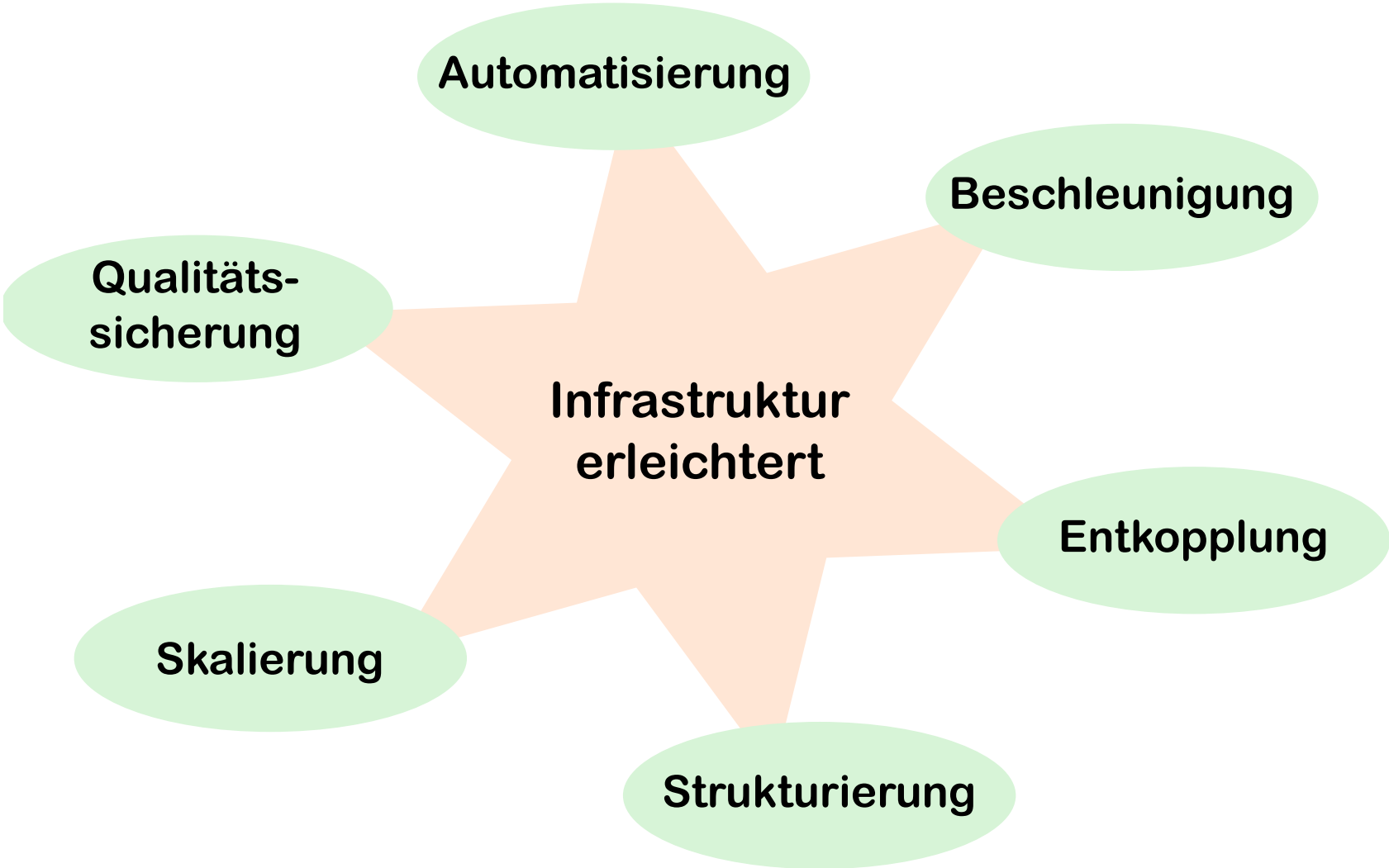
Alles, was mehr als zwei Wochen Arbeit kostet und deutlich mehr als zweihundert Zeilen (reinen) Quellcode bzw. mehr als eine Handvoll Unterfunktionen umfasst.

- Genaue Zahlen sind immer problematisch.
- Wichtig ist der Fokus:
  Verwendung über längere Zeit bzw. von anderen

☛ Qualitativ hochwertige Software zur wissenschaftlichen Datenauswertung fällt in diese Kategorie.

Warum ist Infrastruktur wichtig?

Gründe für die Nutzung



Gründe für die Nutzung von Infrastruktur (I)

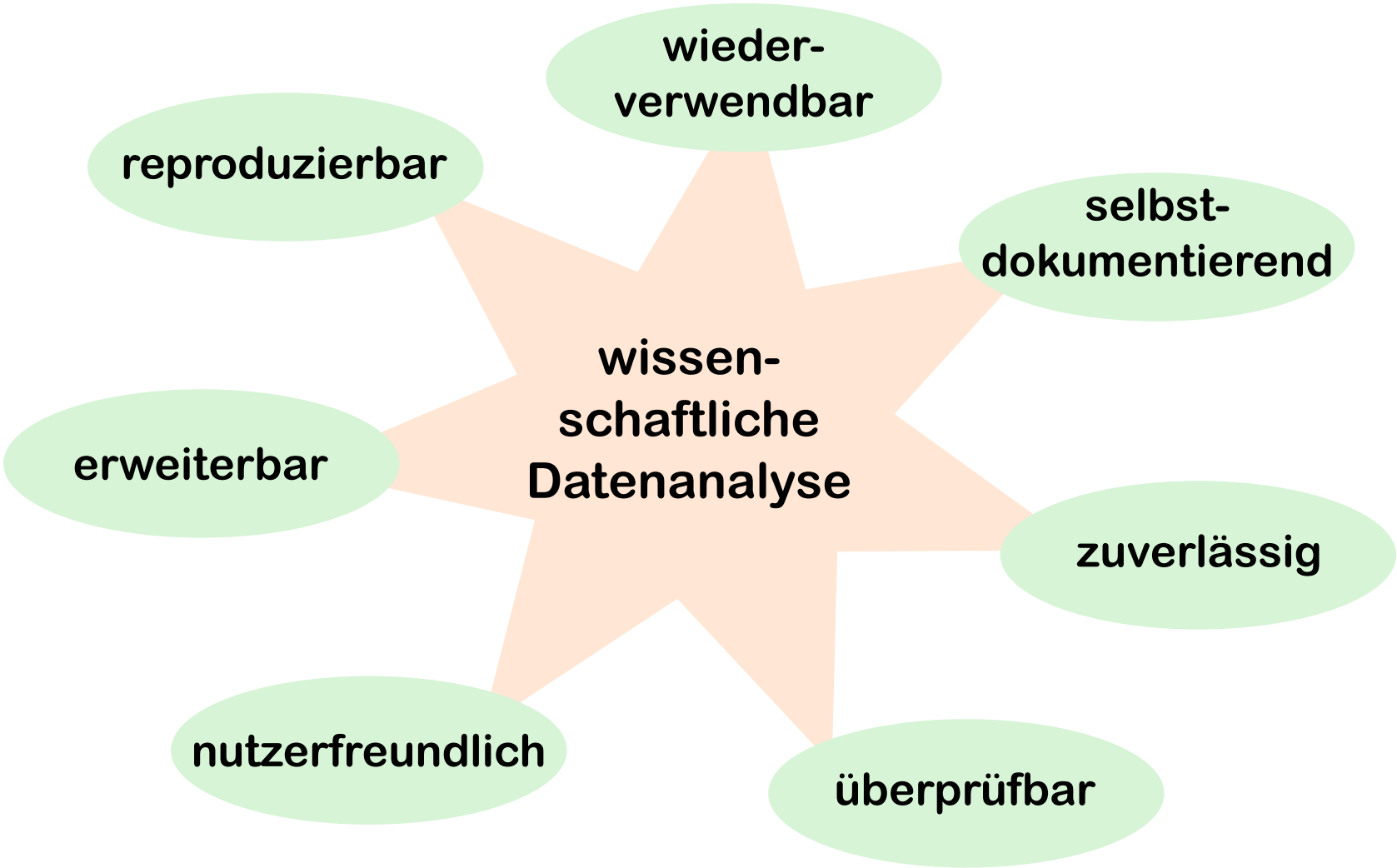
- Automatisierung
  - nimmt dem Programmierer/Entwickler Arbeit ab
  - Automatisierung von Routineaufgaben
- Beschleunigung
  - Routineaufgaben automatisierbar und so beschleunigbar
  - Formalisierung sorgt für Konsistenz und Fokussierung.
  - Der Kopf ist frei für das Wesentliche.
- Entkopplung
  - entkoppelt den einzelnen Entwickler von der Software
  - erleichtert die Übernahme durch andere Entwickler
  - im akademischen Kontext stark unterschätzter Aspekt
  - einer der Hauptantriebe für diese Vorlesung

Gründe für die Nutzung von Infrastruktur (II)

- Strukturierung
  - diszipliniert und strukturiert die Softwareentwicklung
  - Projektmanagement als Antwort auf die Softwarekrise
  - für jedes größere Projekt unumgänglich
  - Nutzen für die Entwickler steht im Vordergrund
- Skalierung
  - essentiell für größere Projekte/bei mehreren Entwicklern
  - Entwickler müssen nicht notwendigerweise gleichzeitig am Projekt arbeiten.
- Qualitätssicherung
  - Voraussetzung für hochwertige Auswertungssoftware
  - Kriterien wurden eingangs aufgestellt.

Warum ist Infrastruktur wichtig?

Wiederholung: Kriterien für Auswertungssoftware



Warum ist Infrastruktur wichtig?

Eine minimale Infrastruktur für wissenschaftliche Datenauswertung

UNI FREIBURG

Minimale Infrastruktur für jede Auswertungsroutine

- Versionskontrolle
- eindeutige Versionsnummer
- Urheberrechtshinweis

Hilfreich und dringend angeraten

- Dokumentation
- Lizenz

☛ Für größere Projekte werden alle nachfolgend genannten Aspekte von Infrastruktur benötigt.

Kosten-Nutzen-Abwägung

Infrastruktur und Projektmanagement sind nicht kostenneutral

UNI FREIBURG

Aspekte einer Kosten-Nutzen-Abwägung

- Umgang mit Infrastruktur muss erlernt werden.
  - Programmierung ist bereits Mittel zum Zweck.
  - Infrastruktur erschwert initial die Arbeit.
- Betrieb der Infrastruktur bindet Ressourcen.
  - Infrastruktur sollte langlebig sein ($>$10 Jahre).
  - Pflege muss entsprechend sichergestellt werden.
- Infrastruktur schränkt die individuelle Freiheit ein.
  - Studenten sollen selbst geeignete Konzepte entwickeln.
- Infrastruktur macht Manches erst möglich, u.a.:
  - verteiltes Arbeiten an einem Projekt, Versionsverwaltung, ...

☛ Nutzung möglichst komfortabel gestalten (Akzeptanz!)

Umgang mit Infrastruktur muss erlernt werden

- Programmierung ist nur Mittel zum Zweck.
  - Jede weitere (Einstiegs-)Hürde will gut motiviert sein.
- Lösungsansatz: Reduktion auf das Notwendige
  - vorgestellte Aspekte praxisnah und auf den akademischen Kontext zugeschnitten
  - größere Projekte nicht anders sinnvoll beherrschbar
- Fokus der Vorlesung: Konzepte statt konkrete Programme
  - konkrete Lösungen oft von persönlichen Vorlieben und vom gegebenen Umfeld abhängig

☞ Kenntnis im Umgang mit der vorgestellten Infrastruktur ist eine gute Zusatzqualifikation.

Betrieb der Infrastruktur bindet Ressourcen

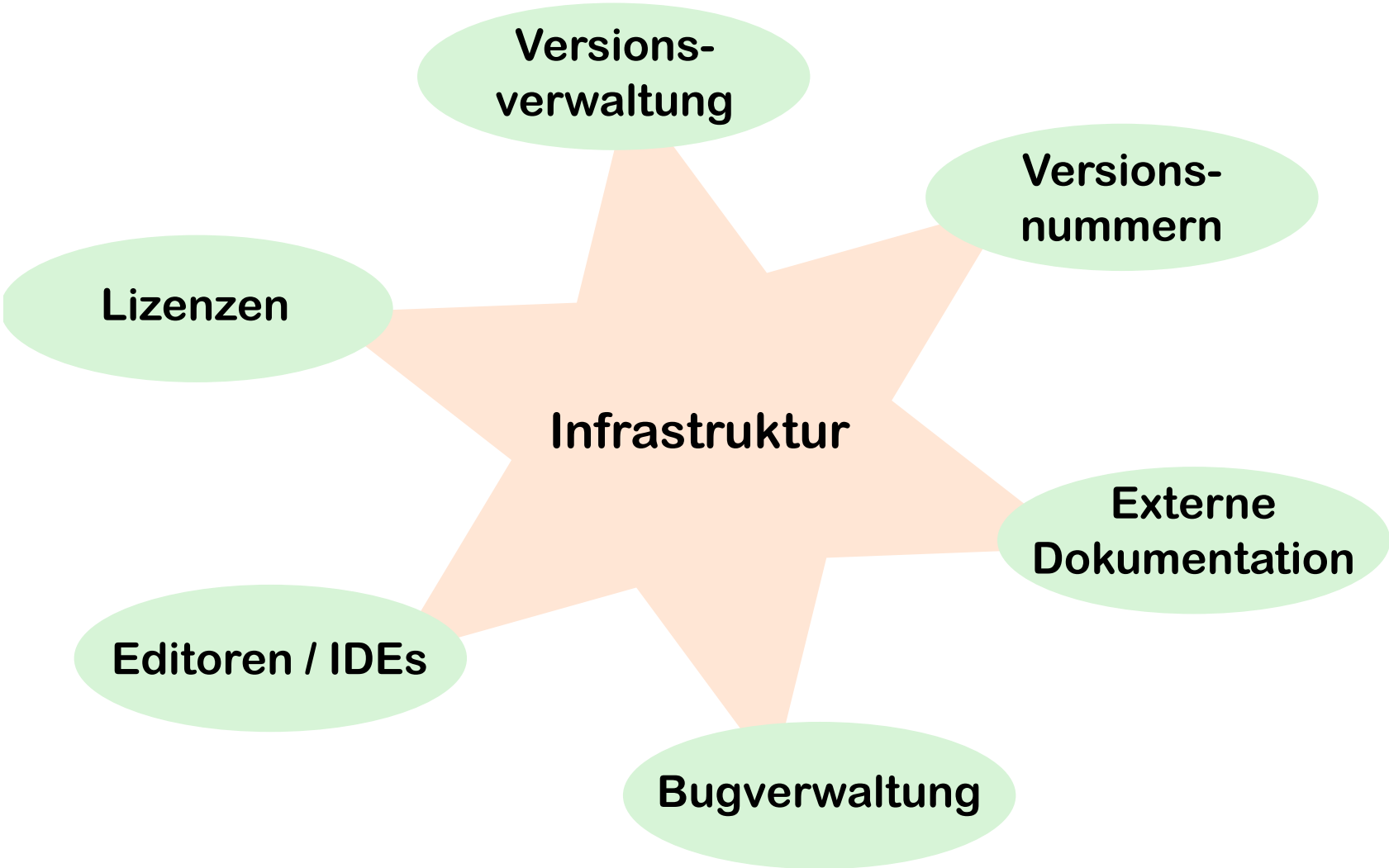
- Arten möglicher Kosten für Infrastruktur
  - Software
  - Hardware (Rechner, zentrale Server)
  - Wartung und Pflege (Personalkosten)
- viele Lösungen als freie Software verfügbar
  - alle hier vorgestellten Aspekte über freie Software lösbar
- integrierte Lösungen über kostenlose Online-Services
  - vorher ggf. rechtliche Aspekte klären
- Hardware
  - In kleinen Gruppen reicht ein Arbeitsplatzrechner.
  - Ein dedizierter Server pro Gruppe ist relativ günstig.

Infrastruktur schränkt die individuelle Freiheit ein

- Freiheit ist essentiell für die Wissenschaft
  - gilt auch für Datenaufnahme, -Ablage, -Auswertung
- Problem: Freiheit kollidiert mit Wissenschaftlichkeit
  - oft fehlen Wissen und der notwendige zeitliche Horizont
- Vorgaben sind noch keine Einschränkung der Freiheit
  - immer nur Empfehlungen verknüpft mit der Aufforderung, kritisch zu hinterfragen und weiterzuentwickeln
- eigentliche kreative Aufgabe: Entwicklung guter Software
  - entsprechend den Kriterien für Wissenschaftlichkeit
  - erfordert tiefes Verständnis und Abstraktionsvermögen

Übersicht über die Infrastruktur

Jeder Aspekt wird separat im Detail behandelt werden



Einzelne Aspekte einer Projekt-Infrastruktur (I)

- Versionsverwaltung (VCS)
  - erlaubt jederzeit den Rückgriff auf beliebige vorherige Versionen einer einzelnen Routine/des ganzen Projektes
  - befreiend für den Entwickler (Sicherheitsnetz!)
- Versionsnummern
  - eineindeutig für jede Version einer Routine
  - *per se* unabhängig von der Versionsverwaltung
- (externe) Dokumentation
  - Konzepte, Anforderungsanalysen, Coding Conventions etc.
  - Alles, was nicht sinnvoll direkt im Quellcode ablegbar ist

Einzelne Aspekte einer Projekt-Infrastruktur (II)

- Bugverwaltung
  - formalisiert Fehlerberichte an die Entwickler
  - eindeutige Bezeichner erleichtern Bezugnahme
  - räumliche und zeitliche Trennung von Entwicklern und Anwendern
- Editoren/IDEs
  - IDEs können die Produktivität immens steigern.
  - Einarbeitung oft zeitintensiv
- Lizenzen und Urheberrechte
  - Quellcode unterliegt *per se* dem Urheberrecht.
  - Wiederverwendbarkeit nur bei klarer Rechtslage/Lizenz
  - im akademischen Kontext oft vernachlässigt

Infrastruktur und wissenschaftliche Datenanalyse

Welcher Aspekt benötigt welche Infrastruktur?

UNI FREIBURG

		#			
wiederverwendbar	☑		☑		☑
selbstdokumentierend		☑			
zuverlässig				☑	
überprüfbar			☑	☑	
nutzerfreundlich			☑	☑	
erweiterbar	☑		☑		☑
reproduzierbar	☑	☑	☑		

– Versionsverwaltung, # – Versionsnummern,
– Dokumentation, – Bugverwaltung, – Lizenzen

Weitere Arten von Infrastruktur

Eine unvollständige Übersicht

UNI FREIBURG

- Automatisierte Tests
  - zentraler Aspekt für zuverlässigen Code
- Codeanalyse-Werkzeuge
  - statische und dynamische Codeanalyse
  - stark von der verwendeten Programmiersprache abhängig
- Generierung von Dokumentation
  - für Entwicklerdokumentation geeignet
  - setzt Disziplin bei der Codedokumentation voraus
- Build-Umgebungen
  - für komplexere Projekte (z.B. plattformübergreifend)
- Projektmanagement-Software
  - meist nur für große Projekte relevant

Aspekte einer „weichen“ Infrastruktur

- regelmäßige Projekttreffen
  - klein und groß, formal und informell
  - Code-Review, Strategiediskussionen, ...
- Kommunikation
  - auf allen Ebenen und Kanälen
  - Konventionen/Entscheidungen schriftlich fixieren
- Weiterbildungsangebote
  - ausgewählte Literatur
  - Kurse zu spezifischen Themen
- „Pair Programming“
  - Zweierteams gemeinsam an einem Rechner
  - kaum zu überschätzende Wirkung

Zentrale Aspekte

UNI FREIBURG

- Eine minimale Infrastruktur ist zwingende Voraussetzung zur Erfüllung der Kriterien für Auswertungssoftware.
- Infrastruktur kann die Softwareentwicklung vereinfachen, disziplinieren und strukturieren.
- Klare Abläufe sorgen für Konsistenz und Routine und erleichtern die Nutzung.
- Nur eine funktionierende und möglichst einfach bedienbare Infrastruktur wird auch regelmäßig genutzt werden.
- Entscheidend ist nicht der Einsatz konkreter Produkte, sondern der Werkzeuge als solcher.