

Computeranwendung in der Chemie Informatik für Chemiker(innen)

3. Software

Grundlagen

Software steuert Computersysteme

Vor der Ausführung muß Software in den Speicher des Computersystems geladen werden

⇒ Ladevorgang wird von Software ausgeführt

Mehrstufiges Konzept zum Laden von Software

- BIOS
- Betriebssystem
- Anwendungssoftware

BIOS

- Abkürzung für Basic Input-Output System
- In Festspeicher abgelegt, kann direkt ausgeführt werden
 - Wird in normalen Speicherraum eingeblendet und bei Systemstart ausgeführt
 - Früher: in ROM (read-only memory)
 - Heute: Überschreibbarer Festspeicher („Flash-Speicher“), BIOS daher veränderbar
- Stellt einfache Ein- und Ausgabefunktionen bereit um Betriebssystem zu laden

Betriebssystem

- Schnittstelle zwischen Anwendungsprogrammen und Hardware
- Schnittstelle zwischen Benutzer und Anwendungsprogramm
- Ladevorgang des Betriebssystems (Operating System, OS): Booten (engl: „to boot“ von „bootstrap“ („Schnürsenkel“))
- BIOS lädt ausführbaren Code von Datenträger (z.B. Festplatte, CD, Diskette, USB-Stick)

Betriebssystem

- Datenträger enthält Boot-Loader („Boot-Block“)
- Boot-Loader nutzt BIOS-Funktionen um Betriebssystem-Kern („Kernel“) zu starten
- Kernel kann BIOS oder eigene Funktionen nutzen, um auf Hardware zuzugreifen
- Heute normalerweise Betriebssystem-Funktionen (Treiber, engl. Driver) für Hardwarezugriff, da flexibler

Betriebssystem

- Stellt Anwendungsprogrammen Schnittstellen zu Hardware zur Verfügung
- Lädt Programme und führt sie aus
- Ist für Speicherzuweisung verantwortlich

Optional:

- Multitasking: Scheinbar laufen mehrere Programme gleichzeitig
- Multiuser: Mehrere Benutzer können an System angemeldet sein

Betriebssystem

- Schnittstelle zwischen Benutzer und Anwendungsprogramm
- Organisiert Ein- und Ausgabefunktionen
- Benutzerschnittstelle: „user interface“, UI
- Grafische Benutzerschnittstelle („graphical user interface“, GUI)
- Stellt Funktionen für Programmentwicklung zur Verfügung („application programming interface“, API)
 - Funktionen in „Bibliotheken“ (engl. library)

Prozesse

Programme werden als Prozesse ausgeführt

- Prozesse sind voneinander abgeschottet
- Prozessen wird vom Betriebssystem Zugriff auf Hardware gewährt
- Jeder Prozess hat eigenen Adressraum
- Betriebssystem wird ebenfalls in Prozessen ausgeführt
 - Privilegierte Prozesse

Virtueller Speicher

- Prozess hat virtuellen Adressraum (32 Bit: 4 GB)
- Physikalischer Speicher wird von Betriebssystem verwaltet
- Prozess kann Speicher anfordern, Betriebssystem ordnet physikalischen Speicher zu virtuellem Speicher zu
- Auslagerung möglich: Physikalischer Speicher von inaktiven Prozessen wird ausgelagert und anderweitig vergeben

Speicheranforderung

- Prozesse haben kleinen Speicherbereich für lokale Variablen
 - Stack („Stapelspeicher“)
 - Anforderung während Programmentwicklung
 - Statische Größe
- Zur Laufzeit angeforderter Speicher
 - Heap
 - Dynamische Größe

Multitasking

- Prozesse laufen scheinbar gleichzeitig ab
- Betriebssystem weist Prozessen reihum Hardwarezugriff (insbesondere CPU-Zeit) zu
 - „Scheduling“
- Benutzereingaben werden in Warteschlange („Queue“) abgelegt, bis Zielanwendung ausgeführt wird
- Bevorzugung von Prozessen möglich („Prozess-Priorität“), z.B. für graphische Oberfläche

Programmmentwicklung

- Maschinensprache/Assembler
 - Sehr aufwendig
 - Nicht portabel
- Hochsprache (z.B. C/C++, Basic, Fortran, Java)
 - Einfacher zu benutzen als Assembler
 - Portabel durch Neuübersetzung, Anpassung von API
 - Nicht direkt ausführbar, muß übersetzt werden

Programmmentwicklung

Möglichkeiten für Übersetzung:

- Interpreter
 - Übersetzung zur Laufzeit
 - Langsam
- Compiler
 - Übersetzung bei Programmmentwicklung
 - Schnell, Möglichkeit zur Codeoptimierung

Compiler

Stufe	Ausgabe
Compiler-Frontend	Assembler-Code
Assembler (Optimierer)	Objektcode
Linker	Ausführbares Programm

Linkvorgang bindet Bibliotheken ein

- statisch (zur Compile-Zeit)
- dynamisch (bei Ausführung)