Dr. Jens Döbler
Institut für Chemie
Humboldt-Universität zu Berlin

WS2003-04

Computeranwendung in der Chemie
Informatik für Chemiker(innen)

6. Grundlagen der Programmierung

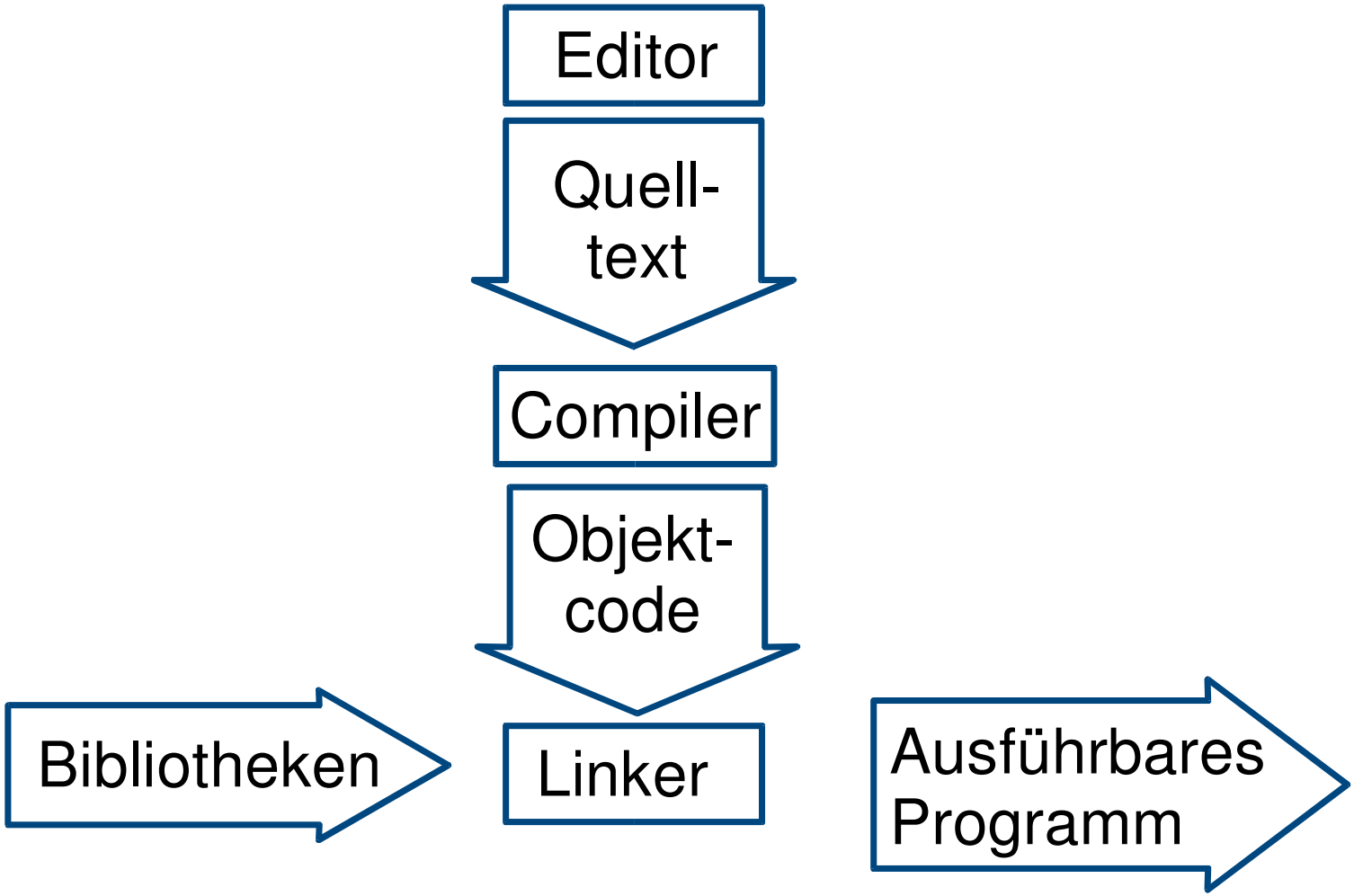
Grundlagen

Programmierung in Hochsprachen

- Abstrakte Konzepte erleichtern Programmierung
  - Schleifen
  - Verzweigung/bedingte Ausführung
  - Funktionen
- Programm muß für Ausführung in Maschinencode übersetzt werden
  - Interpreter
  - Compiler

Dr. Jens Döbler
Institut für Chemie
Humboldt-Universität zu Berlin

Programmerstellung



C

- Entwickelt von B. W. Kernighan und D. M. Ritchie (1972)
- Weit verbreitet, C-Compiler für fast alle Computer verfügbar
- Sehr flexibel
- Systemnah („low level“)
  - Einfache Datentypen
  - Komplexe Aufgaben (wie I/O, Speicherverwaltung) als Bibliotheksfunktionen

Ein einfaches Programm

C-Code

```
#include <stdio.h>

main()

{

printf("hello, world\n");

}
```

Ausführung:

```
> hello

hello, world
```

Assembler-Code

```
        .file   "hello.c"
        .section        .rodata
.LC0:
        .string "hello, world\n"
        .text
.globl main
        .type   main, @function
main:
        pushl   %ebp
        movl    %esp, %ebp
        subl    $8, %esp
        andl    $-16, %esp
        movl    $0, %eax
        subl    %eax, %esp
        subl    $12, %esp
        pushl   $.LC0
        call    printf
        addl    $16, %esp
        leave
        ret
        .size   main, .-main
        .ident  "GCC: (GNU) 3.3.1 (SuSE
        Linux)"
```

Programme

Programme:

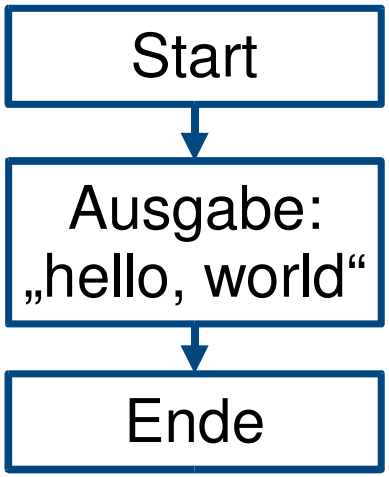
- Folge von Anweisungen
- Sequenzielle Ausführung
- Programmsteuerung
  - Bedingte Ausführung (abhängig von Bedingung)
  - Schleifen (Programmblock wird mehrfach ausgeführt)
  - Unbedingte Sprünge (nicht notwendig, sollten vermieden werden)

Dr. Jens Döbler
Institut für Chemie
Humboldt-Universität zu Berlin

Flußdiagramme

Stellen Programmablauf graphisch dar

- Anweisungen: Rechteck
- Bedingte Ausführung: Rhombus
- Ablauf: Pfeil




```
#include <stdio.h>

main()

{

printf("hello, world\n");

}
```

Dr. Jens Döbler
Institut für Chemie
Humboldt-Universität zu Berlin

Variablen

Speicherung von veränderlichen Werten

- Name (z.B. `wert`)
- Inhalt durch Zuweisung (z.B. `wert = 1`)
- Variablen haben einen Typ (z.B. Integer, Fließkomma, etc)
- Variablen müssen vor Benutzung *deklariert* werden (z.B. `int wert` – `wert` vom Typ Integer)

Dr. Jens Döbler
Institut für Chemie
Humboldt-Universität zu Berlin

Ausdrücke

- Zusammengesetzt aus Operatoren und Werten
  - Arithmetische Ausdrücke
    - wert + 1
    - 3 * 4
    - a & b (bitweise Und-Verknüpfung)
  - Logische Ausdrücke
    - a < b
    - c == 1 (Achtung: c = 1 Zuweisung!)

Arithmetische Operatoren

- Zuweisung: =
- Grundrechenarten: +, -, *, /
- Modulo (Rest bei Ganzzahldivision): %
- Bitweise logische Operationen
  - and: &
  - or: |
  - Shift (Verschiebung aller Bits): <<, >>
- Inkrement (Erhöhung um 1): ++
- Dekrement (Erniedrigung um 1): --

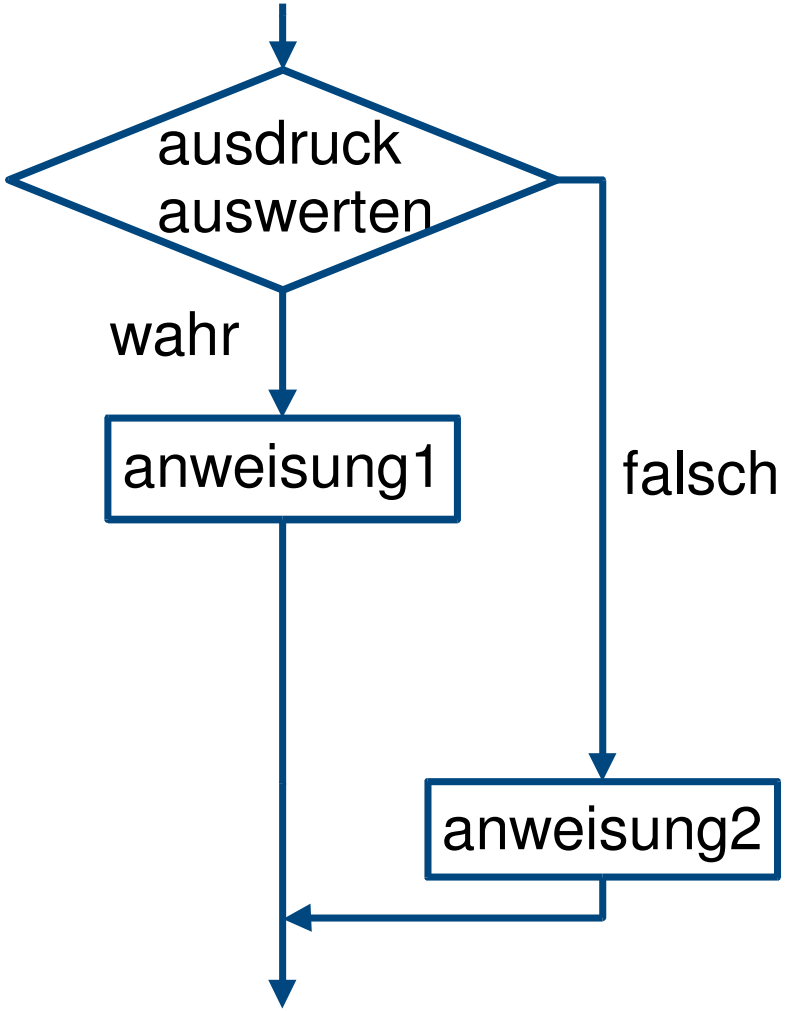
Bool'sche Operatoren

- Gleichheit: ==
- Ungleichheit: !=
- Relationale Operatoren:
  - kleiner, größer: <, >
  - kleiner gleich, größer gleich, <=, >=
- Und: &&
- Oder: ||

Dr. Jens Döbler
Institut für Chemie
Humboldt-Universität zu Berlin

Bedingte Ausführung

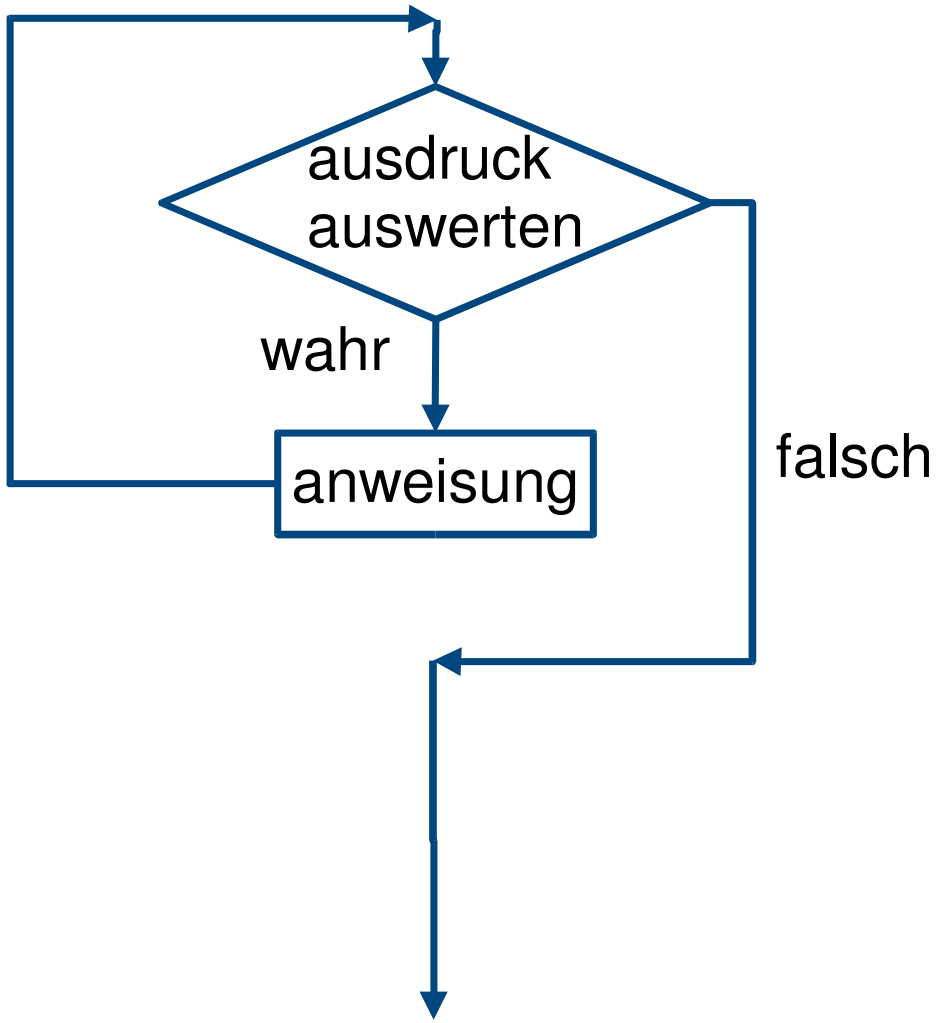
```
if ausdruck

anweisung1

else

anweisung2
```



while Schleife

while ausdruck

anweisung



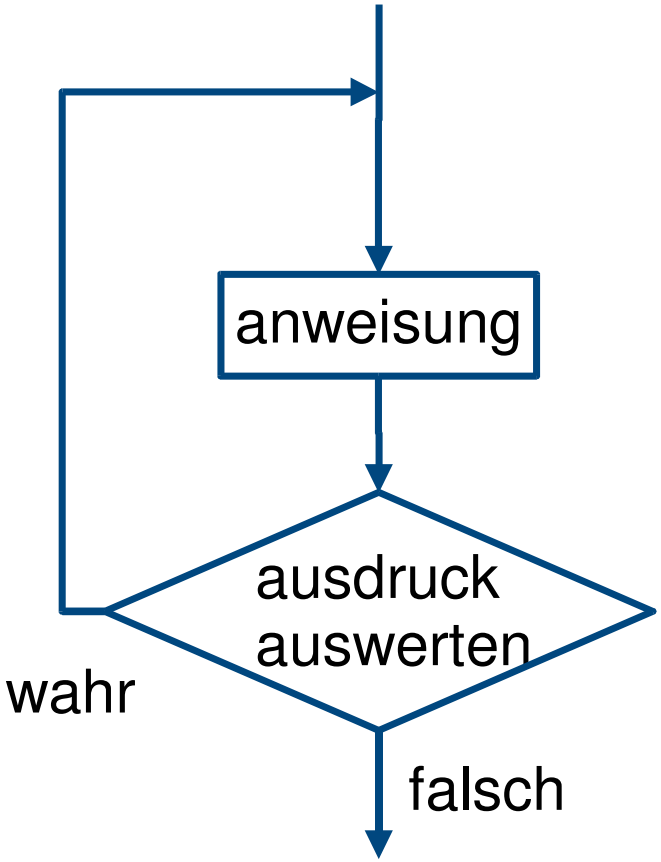
Dr. Jens Döbler
Institut für Chemie
Humboldt-Universität zu Berlin

do Schleife

do

anweisung

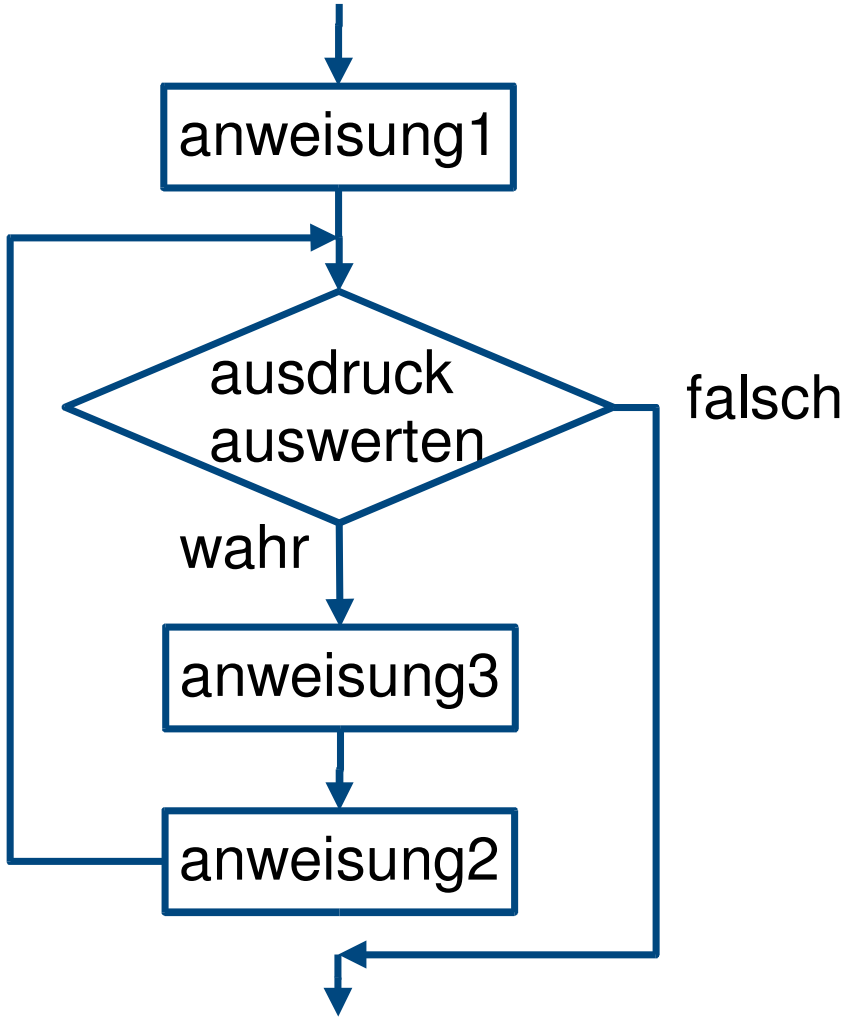
while ausdruck



Dr. Jens Döbler
Institut für Chemie
Humboldt-Universität zu Berlin

for Schleife

```
for (anweisung1;
      ausdruck;
      anweisung2)

anweisung3
```

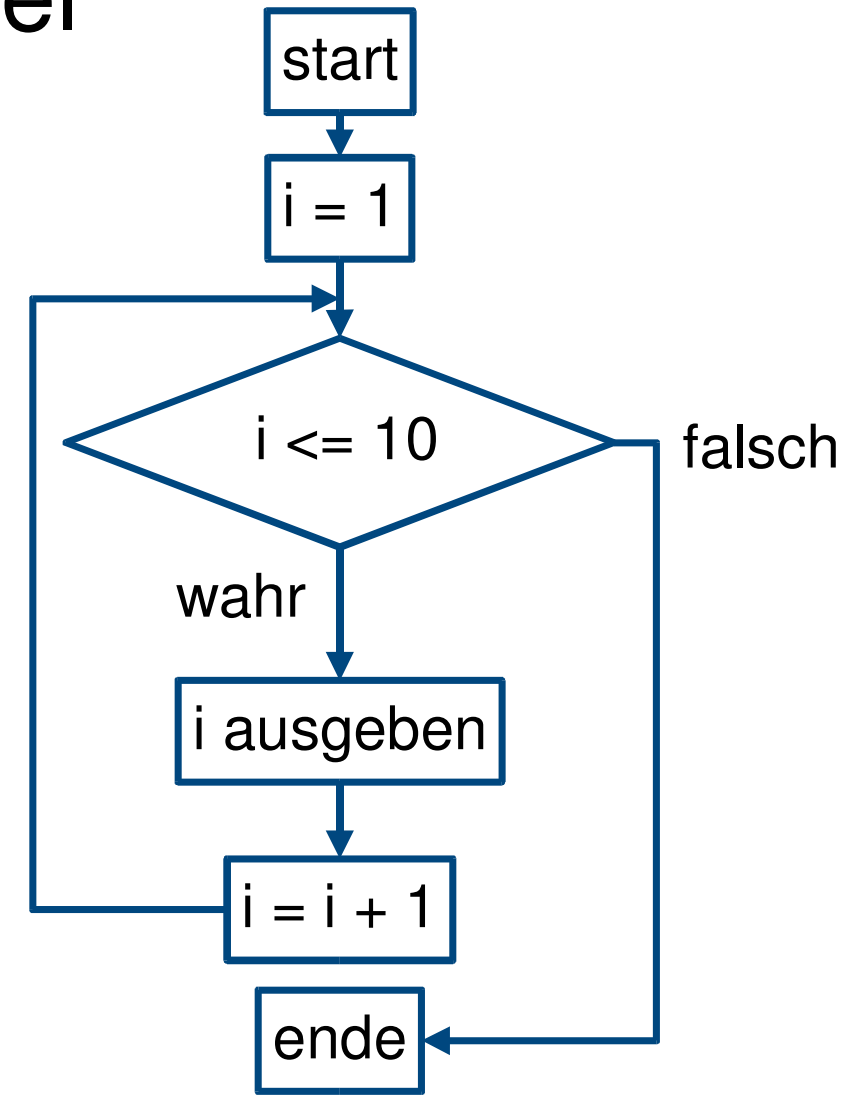


Dr. Jens Döbler
Institut für Chemie
Humboldt-Universität zu Berlin

Beispiel

C-Code

```
#include <stdio.h>
main()
{
    int i;
    i=1;
    while (i <= 10)
    {
       printf("%d\n",i);
       i = i+1;
    }
}
```



Programmfehler

Syntaxfehler

- Werden vom Compiler erkannt, einfach zu finden

Semantische oder logische Fehler

- Treten während der Ausführung auf
- Oftmals schwer zu finden („Debugging“)
  - Auftreten von Programmzustand abhängig
  - Vollständiger Test unmöglich
- Fehlerfreiheit nicht beweisbar