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

Computeranwendung in der Chemie
Informatik für Chemiker(innen)

8. Algorithmen

Grundlagen

- Algorithmen: Allgemeine Handlungsanweisungen zur Lösung eines Problems
  - Einteilung von Problem in Teilschritte
  - Endliche Anzahl an Schritten
  - Allgemein, unabhängig von Implementierung
  - Oftmals verschiedene Algorithmen für das gleiche Problem möglich
  - Effizienz

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

Vergleich von Algorithmen

Kriterium für Vergleich: Laufzeit

- Verhalten im durchschnittlichen Fall
- Verhalten im ungünstigsten Fall (engl. „worst-case“)
- Skalierung
  - Änderung der Laufzeit bei Änderung der Problemgröße

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

Skalierung

Typische Skalierungverhalten:

Problem mit N Komponenten

linear	N
logarithmisch	$\log N$
quadratisch	N^2
polynomiell	N^M
exponentiell	M^N

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

Skalierung

N	linear	logarithmisch	quadratisch	exponentiell
1	1	1	1	1
5	5	3,3	25	32
10	10	4,3	100	1024
100	100	5,3	10000	1,30E+030
1000	1000	6,3		

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

Such-Algorithmus

Einfacher („sequenzieller“) Algorithmus:

- Vergleiche erstes Element mit zu suchendem Element
- Gleichheit: Erfolg
- Ungleichheit: Gehe zum nächsten Element

Skalierung:

Durchschnitt: N/2

Worst-Case: N

Binäre Suche

Erfordert sortiertes Feld

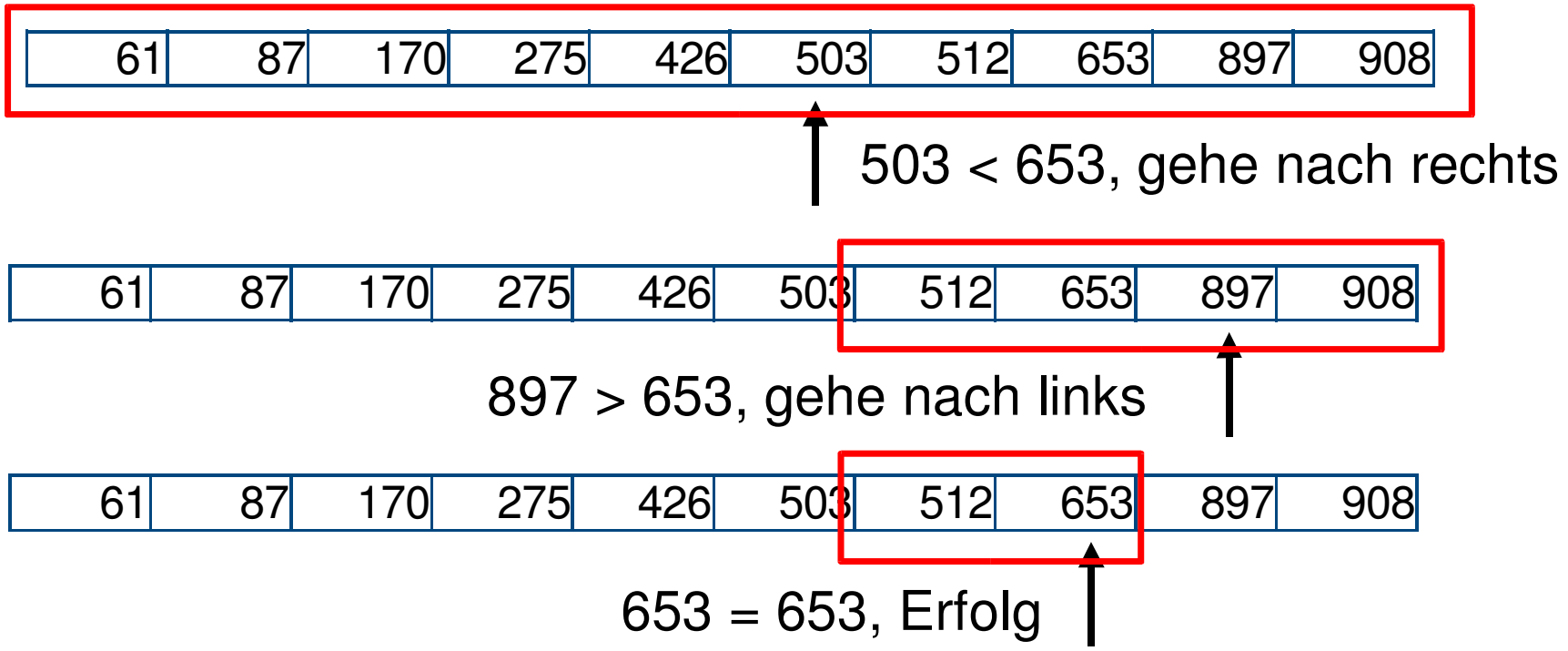
- Vergleiche Element in der Mitte des Feldes mit zu suchendem Element
- Gleichheit: Erfolg
- Kleiner: Gehe zum mittleren Element der rechten Teilliste
- Größer: Gehe zum mittleren Element der linken Teilliste

„Divide and conquer“ („Teile und Herrsche“, Problem wird aufgeteilt)

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

Binäre Suche – Beispiel

Suche nach 653



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

Vergleich Suchalgorithmen

Skalierung:

- Sequenzieller Algorithmus: N
- Binäre Suche: $\log_2 N$

Binäre Suche sinnvoll bei großen Feldern, bzw. häufiger Suche

Zusätzlicher Zeitaufwand durch Sortieren

Bessere Skalierung durch Grundvoraussetzung (sortiertes Feld)

Bubble-Sort

Sortierung durch Vertauschung von benachbarten Elementen:

- Gehe zu erstem Element
- Vergleiche mit nächstem Element
- Größer: Vertausche Elemente
- Gehe zum nächsten Element

- Wenn Elemente vertauscht: Gehe zum Anfang
- Sonst: Ende

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

Bubble-Sort Beispiel

Beginn

503	87	512	61	908	170	897	275	653	426
87	503	61	512	170	897	275	653	426	908
87	61	503	170	512	275	653	426	897	908
61	87	170	503	275	512	426	653	897	908
61	87	170	275	503	426	512	653	897	908
61	87	170	275	426	503	512	653	897	908

Skalierung: N^2

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

Quick-Sort

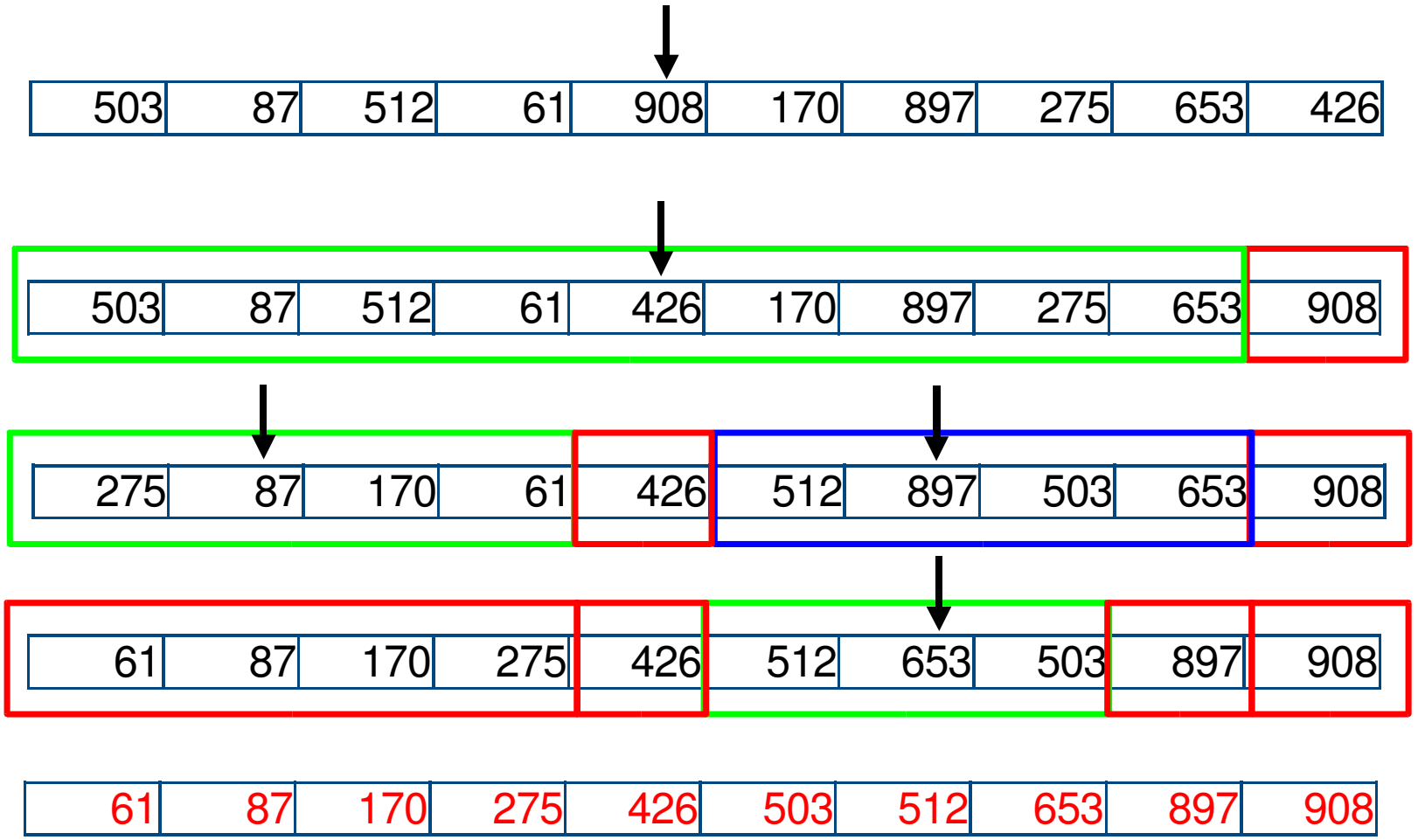
Normale Sortierung skaliert mit N^2:

- kleine Felder schneller zu sortieren
- Unterteilung in kleinere Felder

- Start mit Element in Mitte der Liste
- Vertauschen, so daß kleinere Element im linken Teil und größere Elemente im rechten Teil
- Quicksort von rechter und linker Teilliste („Rekursion“)

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

Quick-Sort Beispiel



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

Quicksort

- Skalierung:
  - Durchschnitt: N * log N
  - Worst-Case: N^2

Worst-Case Fall: Bei jedem Schritt wird Element am Listenanfang oder -ende gewählt

- Worst-Case Fall kann durch modifizierte Elementauswahl vermieden werden

Komprimierung

- Lauflängencodierung (engl. run length encoding, RLE)
  - Wiederholung von Symbolen wird durch Symbol + Anzahl der Wiederholungen ersetzt
  - Beispiel für Anwendung: Rastergraphiken mit einfarbigen Flächen

Komprimierung

- Entropiekodierung
  - Häufig vorkommende Symbole werden mit kürzeren Codes gespeichert
  - Speicherung von Codes z.B. in binärem Baum
  - Problem bei Übertragung: Codetabelle muß mitübertragen werden
  - Beispiel: „Huffmann-Kodierung“