Ein kleiner Programmierkurs

Peter Bastian

Universität Heidelberg
Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen
Im Neuenheimer Feld 205, D-69120 Heidelberg
email: Peter.Bastian@iwr.uni-heidelberg.de

4. Februar 2022

Programmierumgebung

- Wir benutzen die Programmiersprache C++.
- Wir behandeln nur die Programmierung unter LINUX mit den GNU compilern.
- Windows: On your own.
- Wir setzen Grundfertigkeit im Umgang mit LINUX-Rechnern voraus:
  - Shell, Kommandozeile, Starten von Programmen.
  - Dateien, Navigieren im Dateisystem.
  - Erstellen von Textdatein mit einem Editor ihrer Wahl.
- Idee des Kurses: „Lernen an Beispielen“, keine rigorose Darstellung.
- Blutige Anfänger sollten zusätzlich ein Buch lesen.

Workflow

C++ ist eine „kompilierte“ Sprache. Um ein Programm zur Ausführung zu bringen sind folgende Schritte notwendig:

1. Erstelle/Ändere den Programmtext mit einem **Editor**.
2. Übersetze den Programmtext mit dem **C++-Übersetzer** (auch C++-Compiler) in ein Maschinenprogramm.
3. Führe das Programm aus. Das Programm gibt sein Ergebnis auf dem Bildschirm oder in eine Datei aus.
4. Interpretiere Ergebnisse. Dazu benutzen wir weitere Programme wie **gnuplot** oder **grep**.
5. Falls Ergebnis nicht korrekt, gehe nach 1!

HDNUM

- C++ kennt keine Matrizen, Vektoren, Polynome, ...
- Wir haben C++ erweitert um die **Heidelberg Educational Numerics Library**, kurz **HDNum**.
- Alle in der Vorlesung behandelten Beispiele sind dort enthalten.
- Dieser Programmierkurs ist auch Teil von HDNUM

Herunterladen von HDNUM

1. Einloggen
2. Herunterladen von HDNUM

   ```
   git clone https://parcomp-git.iwr.uni-heidelberg.de/Teaching/hdnum.git
   ```

3. Wechsle in das Verzeichnis

   ```
   $ cd hdnum/examples/progkurs
   ```

4. Anzeigen der Dateien mittels

   ```
   $ ls
   ```

Wichtige UNIX-Befehle

- `ls --color -F` - Zeige Inhalt des aktuellen Verzeichnisses
- `cd` - Wechsle ins Home-Verzeichnis
- `cd <verzeichnis>` - Wechsle in das angegebene Verzeichnis (im aktuellen Verzeichnis)
- `cd ..` - Gehe aus aktuellem Verzeichnis heraus
- `mkdir < verzeichnis>` - Erstelle neues Verzeichnis
- `cp <datei1> <datei2>` - Kopiere datei1 auf datei2 (datei2 kann durch Verzeichnis ersetzt werden)
- `mv <datei1> <datei2>` - Benenne datei1 in datei2 um (datei2 kann durch Verzeichnis ersetzt werden, dann wird datei1 dorthin verschoben)
- `rm <datei>` - Lösche datei
- `rm -rf <verzeichnis>` - Lösche Verzeichnis mit allem darin

Hallo Welt !

Öffne die Datei `hallohdnum.cc` mit einem Editor:

```
$ gedit hallohdnum.cc
```

```
1  // hallohdnum.cc
2  #include <iostream>     // notwendig zur Ausgabe
3  #include <vector>
4  #include "hdnum.hh"     // hdnum header
5
6  int main ()
7  {
8    std::cout << "Numerik␣0␣ist␣ganz␣leicht!" << std::endl;
9    std::cout << "1+1=" << 1+1 << std::endl;
10
11   return 0;
12 }
```

- `iostream` ist eine sog. „Headerdatei“
- `#include` erweitert die „Basissprache“.
- `int main ()` braucht man immer: „Hier geht's los“.
- `{ ... }` klammert Folge von Anweisungen.
- Anweisungen werden durch Semikolon abgeschlossen.

Hallo Welt laufen lassen

- Gebe folgende Befehle ein:

```
$ g++ -I../../ -o hallohdnum hallohdnum.cc
$ ./hallohdnum
```

- Dies sollte dann die folgende Ausgabe liefern:

```
Numerik 0 ist ganz leicht!
1+1=2
```

(Zahl-) Variablen

- Aus der Mathematik: „$x \in M$“. Variable x nimmt einen beliebigen Wert aus der Menge M an.
- Geht in C++ mit: `M x;`
- **Variablendefinition**: `x` ist eine Variable vom **Typ** `M`.
- Mit **Initialisierung**: `M x(0);`
- Wert von Variablen der „eingebauten“ Typen ist sonst nicht definiert.

```
1  // zahlen.cc
2  #include <iostream>
3
4  int main ()
5  {
6    unsigned int i; // uninitialisierte natuerliche Zahl
7    double x(3.14); // initialisierte Fliessommazahl
8    float y(1.0);   // einfache Genauigkeit
9    short j(3);     // eine 'kleine' Zahl
10   std::cout << "(i+x)*(y+j)=" << (i+x)*(y+j) << std::endl;
11
12   return 0;
13 }
```

Andere Typen

- C++ kennt noch viele weitere Typen.
- Typen können nicht nur Zahlen sondern viele andere Informationen repräsentieren.
- Etwa Zeichenketten: `std::string`
- Oft muss man dazu weitere Headerdateien angeben.

```
1  // string.cc
2  #include <iostream>
3  #include <string>
4
5  int main ()
6  {
7    std::string m1("Zeichen");
8    std::string leer("␣␣␣");
9    std::string m2("kette");
10   std::cout << m1+leer+m2 << std::endl;
11
12   return 0;
13 }
```

- Jede Variable *muss* einen Typ haben. Strenge Typbindung.

Mehr Zahlen

```
1  // mehrzahlen.cc
2  #include <iostream> // header für Ein-/Ausgabe
3  #include <complex>  // header für komplexe Zahlen
4
5  int main ()
6  {
7    std::complex<double> y(1.0,3.0);
8    std::cout << y << std::endl;
9
10   return 0;
11 }
```

- GNU Multiprecision Library `http://gmplib.org/` erlaubt Zahlen mit vielen Stellen (hier 512 Stellen zur Basis 2).
- übersetzen mit:

  ```
  $ g++ -I../../ -o mehrzahlen mehrzahlen.cc -lgmpxx -lgmp
  ```

- Komplexe Zahlen sind Paare von Zahlen.
- `complex<>` ist ein Template: Baue komplexe Zahlen aus jedem anderen Zahlentyp auf (später mehr!).

Mehr Ein- und Ausgabe

```
1  // eingabe.cc
2  #include <iostream> // header für Ein-/Ausgabe
3  #include <iomanip>  // für setprecision
4  #include <cmath>    // für sqrt
5
6  int main ()
7  {
8    double x(0.0);
9    std::cout << "Gebe␣eine␣Zahl␣ein:␣";
10   std::cin >> x;
11   std::cout << "Wurzel(x)=␣"
12             << std::scientific << std::showpoint
13             << std::setprecision(15)
14             << sqrt(x) << std::endl;
15
16   return 0;
17 }
```

- Eingabe geht mit `std::cin >> x;`
- Standardmäßig werden nur 6 Nachkommastellen ausgegeben. Das ändert man mit `std::setprecision`.
- Dazu muss man die Headerdatei `iomanip` einbinden.
- Die Wurzel berechnet die Funktion `sqrt`.

Zuweisung

- Den Wert von Variablen kann man ändern. Sonst wäre es langweilig :-)
- Dies geht mittels Zuweisung:

```
double x(3.14); // Variablendefinition mit Initialisierung
double y;       // uninitialisierte Variable
y = x;          // Weise y den Wert von x zu
x = 2.71;       // Weise x den Wert 2.71, y unverändert
y = (y*3)+4;    // Werte Ausdruck rechts von = aus
                // und weise das Resultat y zu!
```

Blöcke

- Block: Sequenz von Variablendefinitionen und Zuweisungen in geschweiften Klammern.

```
{
  double x(3.14);
  double y;
  y = x;
}
```

- Blöcke können rekursiv geschachtelt werden.
- Eine Variable ist nur in dem Block *sichtbar* in dem sie definiert ist sowie in allen darin enthaltenen Blöcken:

```
{
  double x(3.14);
  {
    double y;
    y = x;
  }
  y = (y*3)+4; // geht nicht, y nicht mehr sichtbar.
}
```

Whitespace

- Das Einrücken von Zeilen dient der besseren Lesbarkeit, notwendig ist es (fast) nicht.
- `#include`-Direktiven müssen *immer* einzeln auf einer Zeile stehen.
- Ist das folgende Programm lesbar?

```
1  // whitespace.cc
2  #include <iostream> // includes auf eigener Zeile!
3  #include <iomanip>
4  #include <cmath>
5
6  int main(){
7    double x(0.0);
8    std::cout<<"Gebe␣eine␣lange␣Zahl␣ein:␣";std::cin >> x;
9    std::cout<<"Wurzel(x)=␣"<<std::scientific<<std::showpoint
10             <<std::setprecision(16)<<sqrt(x)<< std::endl;
11
12   return 0;
13 }
```

If-Anweisung

- Aus der Mathematik kennt man eine „Zuweisung“ der folgenden Art.
  Für $x \in \mathbb{R}$ setze

$$y = |x| = \begin{cases} x & \text{falls } x \geq 0 \\ -x & \textit{sonst} \end{cases}$$

- Dies realisiert man in C++ mit einer `If`-Anweisung:

```
double x(3.14), y;
if (x>=0)
{
  y = x;
}
else
{
  y = -x;
}
```

Varianten der `If`-Anweisung

- Die geschweiften Klammern kann man weglassen, wenn der Block nur eine Anweisung enthält:

```
double x(3.14), y;
if (x>=0) y = x; else y = -x;
```

- Der `else`-Teil ist optional:

```
double x=3.14;
if (x<0)
  std::cout << "x␣ist␣negativ!" << std::endl;
```

- Weitere Vergleichsoperatoren sind < <= == >= > !=
- Beachte: = für Zuweisung, aber == für den Vergleich zweier Objekte!

While-Schleife

- Bisher: Sequentielle Abfolge von Befehlen wie im Programm angegeben. Das ist langweilig :-)
- Eine Möglichkeit zur Wiederholung bietet die While-Schleife:
  `while` (*Bedingung*)
  { *Schleifenkörper* }
- Beispiel:

```
int i=0; while (i<10) { i=i+1; }
```

- Bedeutung:
  1. Teste Bedingung der While-Schleife
  2. Ist diese *wahr* dann führe Anweisungen im Schleifenkörper aus, sonst gehe zur ersten Anweisung nach dem Schleifenkörper.
  3. Gehe nach 1.
- Anweisungen im Schleifenkörper beeinflussen normalerweise den Wahrheitswert der Bedingung.
- Endlosschleife: Wert der Bedingung wird nie *falsch*.

Pendel (analytische Lösung; `while`-Schleife)

- Die Auslenkung des Pendels mit der Näherung $\sin(\phi) \approx \phi$ und $\phi(0) = \phi_0$, $\phi'(0) = 0$ lautet:

$$\phi(t) = \phi_0 \cos\left(\sqrt{\frac{g}{l}}t\right).$$

- Das folgende Programm gibt diese Lösung zu den Zeiten $t_i = i\Delta t$, $0 \leq t_i \leq T$, $i \in \mathbb{N}_0$ aus:

Pendel (analytische Lösung, while-Schleife)

```
 1 // pendelwhile.cc
 2 #include <iostream> // header für Ein-/Ausgabe
 3 #include <cmath>    // mathematische Funktionen
 4 int main ()
 5 {
 6   double l(1.34);    // Pendellänge in Meter
 7   double phi0(0.2);  // Amplitude im Bogenmaß
 8   double dt(0.05);   // Zeitschritt in Sekunden
 9   double T(30.0);    // Ende in Sekunden
10   double t(0.0);     // Anfangswert
11
12   while ( t<=T )
13   {
14     std::cout << t << "␣"
15               << phi0*cos(sqrt(9.81/l)*t)
16               << std::endl;
17     t = t + dt;
18   }
19
20   return 0;
21 }
```

Wiederholung (for-Schleife)

- Möglichkeit der Wiederholung: `for`-Schleife:
  `for` (*Anfang*; *Bedingung*; *Inkrement*)
  { *Schleifenkörper* }
- Beispiel:

```
for (int i=0; i<=5; i=i+1)
{
  std::cout << "Wert␣von␣i␣ist␣" << i << std::endl;
}
```

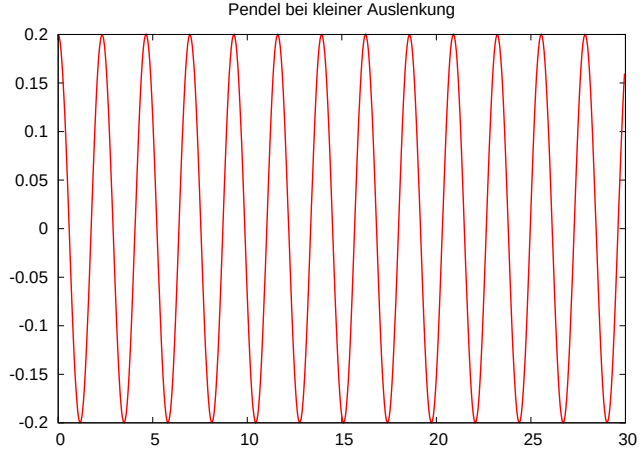
- Enthält der Block nur eine Anweisung dann kann man die geschweiften Klammern weglassen.
- Die *Schleifenvariable* ist so nur innerhalb des Schleifenkörpers sichtbar.
- Die `for`-Schleife kann auch mittels einer *while*-Schleife realisiert werden.

Pendel (analytische Lösung, for-Schleife)

```
 1 // pendel.cc
 2 #include <iostream> // header für Ein-/Ausgabe
 3 #include <cmath>    // mathematische Funktionen
 4
 5 int main ()
 6 {
 7   double l(1.34);    // Pendellänge in Meter
 8   double phi0(0.2);  // Amplitude im Bogenmaß
 9   double dt(0.05);   // Zeitschritt in Sekunden
10   double T(30.0);    // Ende in Sekunden
11   for (double t=0.0; t<=T; t=t+dt)
12   {
13     std::cout << t << "␣"
14               << phi0*cos(sqrt(9.81/l)*t)
15               << std::endl;
16   }
17
18   return 0;
19 }
```

Visualisierung mit `Gnuplot`

- `Gnuplot` erlaubt einfache Visualisierung von Funktionen $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ und $g : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.
- Für $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ genügt eine zeilenweise Ausgabe von Argument und Funktionswert.
- Umlenken der Ausgabe eines Programmes in eine Datei:
  `$ ./pendel > pendel.dat`
- Starte `gnuplot`
  `gnuplot> plot "pendel.dat"with lines`



Geschachtelte Schleifen

- Ein Schleifenkörper kann selbst wieder eine Schleife enthalten, man spricht von *geschachtelten* Schleifen.
- Beispiel:

```
for (int i=1; i<=10; i=i+1)
  for (int j=1; j<=10; j=j+1)
    if (i==j)
      std::cout << "i␣gleich␣j:␣" << std::endl;
    else
      std::cout << "i␣ungleich␣j!" << std::endl;
```

Numerische Lösung des Pendels

- Volles Modell für das Pendel aus der Einführung:

$$\frac{d^2\phi(t)}{dt^2} = -\frac{g}{l}\sin(\phi(t)) \qquad \forall t > 0,$$

$$\phi(0) = \phi_0, \qquad \frac{d\phi}{dt}(0) = u_0.$$

- Umschreiben in System erster Ordnung:

$$\frac{d\phi(t)}{dt} = u(t), \quad \frac{d^2\phi(t)}{dt^2} = \frac{du(t)}{dt} = -\frac{g}{l}\sin(\phi(t)).$$

- Eulerverfahren für $\phi^n = \phi(n\Delta t)$, $u^n = u(n\Delta t)$:

$$\begin{aligned} \phi^{n+1} &= \phi^n + \Delta t\, u^n & \phi^0 &= \phi_0 \\ u^{n+1} &= u^n - \Delta t\,(g/l)\,\sin(\phi^n) & u^0 &= u_0 \end{aligned}$$

Pendel (expliziter Euler)

```
1  // pendelnumerisch.cc
2  #include <iostream> // header für Ein-/Ausgabe
3  #include <cmath>    // mathematische Funktionen
4
5  int main ()
6  {
7    double l(1.34);   // Pendellänge in Meter
8    double phi(3.0);  // Anfangsamplitude in Bogenmaß
9    double u(0.0);    // Anfangsgeschwindigkeit
10   double dt(1E-4);  // Zeitschritt in Sekunden
11   double T(30.0);   // Ende in Sekunden
12   double t(0.0);    // Anfangszeit
13
14   std::cout << t << " " << phi << std::endl;
15   while (t<T)
16   {
17     t = t + dt;          // inkrementiere Zeit
18     double phialt(phi);// merke phi
19     double ualt(u);     // merke u
20     phi = phialt + dt*ualt;              // neues phi
21     u = ualt - dt*(9.81/l)*sin(phialt);// neues u
22     std::cout << t << " " << phi << std::endl;
23   }
24
25   return 0;
26 }
```

Funktionsaufruf und Funktionsdefinition

- In der Mathematik gibt es das Konzept der *Funktion*.
- In C++ auch.
- Sei $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, z.B. $f(x) = x^2$.
- Wir unterscheiden den *Funktionsaufruf*

```
double x,y;
y = f(x);
```

- und die *Funktionsdefinition*. Diese sieht so aus:

  Ergebnistyp Funktionsname (*Argumente*)
  { *Funktionsrumpf* }

- Beispiel:

```
double f (double x)
{
  return x*x;
}
```

Komplettbeispiel zur Funktion

```
 1 // funktion.cc
 2 #include <iostream>
 3
 4 double f (double x)
 5 {
 6   return x*x;
 7 }
 8
 9 int main ()
10 {
11   double x(2.0);
12   std::cout << "f(" << x << ")=" << f(x) << std::endl;
13
14   return 0;
15 }
```

- Funktionsdefinition muss vor Funktionsaufruf stehen.
- Formales Argument in der Funktionsdefinition entspricht einer Variablendefinition.
- Beim Funktionsaufruf wird das Argument (hier) *kopiert*.
- `main` ist auch nur eine Funktion.

Weiteres zum Verständnis der Funktion

- Der Name des formalen Arguments in der Funktionsdefinition ändert nichts an der Semantik der Funktion (Sofern es überall geändert wird):

```
double f (double y)
{
  return y*y;
}
```

- Das Argument wird hier kopiert, d.h.:

```
double f (double y)
{
  y = 3*y*y;
  return y;
}

int main ()
{
  double x(3.0),y;
  y = f(x); // ändert nichts an x !
}
```

Weiteres zum Verständnis der Funktion

- Argumentliste kann leer sein (wie in der Funktion `main`):

```
double pi ()
{
  return 3.14;
}

y = pi(); // Klammern sind erforderlich!
```

- Der Rückgabetyp `void` bedeutet „keine Rückgabe“

```
void hello ()
{
  std::cout << "hello" << std::endl;
}

hello();
```

- Mehrere Argument werden durch Kommata getrennt:

```
double g (int i, double x)
{
  return i*x;
}
std::cout << g(2,3.14) << std::endl;
```

Pendelsimulation als Funktion

```
1  // pendelmitfunktion.cc
2  #include <iostream> // header für Ein-/Ausgabe
3  #include <cmath>    // mathematische Funktionen
4
5  void simuliere_pendel (double l, double phi, double u)
6  {
7    double dt   = 1E-4;
8    double T    = 30.0;
9    double t    = 0.0;
10
11   std::cout << t << "␣" << phi << std::endl;
12   while (t<T)
13   {
14     t = t + dt;
15     double phialt(phi),ualt(u);
16     phi = phialt + dt*ualt;
17     u = ualt - dt*(9.81/l)*sin(phialt);
18     std::cout << t << "␣" << phi << std::endl;
19   }
20 }
21
22 int main ()
23 {
24   simuliere_pendel(1.34,3.0,0.0);
25
26   return 0;
```

Funktionsschablonen

- Oft macht eine Funktion mit Argumenten verschiedenen Typs einen Sinn.
- `double f (double x) {return x*x;}` macht auch mit `float`, `int` oder `mpf_class` Sinn.
- Man könnte die Funktion für jeden Typ definieren. Das ist natürlich sehr umständlich. (Es darf mehrere Funktionen gleichen Namens geben, sog. *overloading*).
- In C++ gibt es mit Funktionsschablonen (engl.: *function templates*) eine Möglichkeit den Typ variabel zu lassen:

```
template<typename T>
T f (T y)
{
  return y*y;
}
```

- `T` steht hier für einen beliebigen Typ.

Pendelsimulation mit Templates I

```
1  // pendelmitfunktionstemplate.cc
2  #include <iostream> // header für Ein-/Ausgabe
3  #include <cmath>    // mathematische Funktionen
4
5  template<typename Number>
6  void simuliere_pendel (Number l, Number phi, Number u)
7  {
8    Number dt(1E-4);
9    Number T(30.0);
10   Number t(0.0);
11   Number g(9.81/l);
12
13   std::cout << t << "␣" << phi << std::endl;
14   while (t<T)
15   {
16     t = t + dt;
17     Number phialt(phi),ualt(u);
18     phi = phialt + dt*ualt;
19     u = ualt - dt*g*sin(phialt);
20     std::cout << t << "␣" << phi << std::endl;
21   }
22 }
23
```

Pendelsimulation mit Templates II

```
24 int main ()
25 {
26   float l1(1.34);   // Pendellänge in Meter
27   float phi1(3.0); // Anfangsamplitude in Bogenmaß
28   float u1(0.0);    // Anfangsgeschwindigkeit
29   simuliere_pendel(l1,phi1,u1);
30
31   double l2(1.34);   // Pendellänge in Meter
32   double phi2(3.0); // Anfangsamplitude in Bogenmaß
33   double u2(0.0);    // Anfangsgeschwindigkeit
34   simuliere_pendel(l2,phi2,u2);
35
36   return 0;
37 }
```

Referenzargumente

- Das Kopieren der Argumente einer Funktion kann verhindert werden indem man das Argument als *Referenz* definiert:

```
void f (double x, double& y)
{
  y = x*x;
}

double x(3), y;
f(x,y); // y hat nun den Wert 9, x ist unverändert.
```

- Statt eines Rückgabewertes kann man auch ein (zusätzliches) Argument modifizieren.
- Insbesondere kann man so den Fall mehrerer Rückgabewerte realisieren.
- Referenzargumente bieten sich auch an wenn Argumente „sehr groß“ sind und damit das kopieren sehr zeitaufwendig ist.
- Der aktuelle Parameter im Aufruf *muss* dann eine Variable sein.