

Anwendung von (Mathematica und) Matlab in der Physikalischen Chemie

2. Einleitung – Matlab

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

Dr. Till Biskup

Institut für Physikalische Chemie
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg
Sommersemester 2016



**UNI
FREIBURG**

Allgemeines zu Matlab

- Toller Taschenrechner – und Programmiersprache
- Was man mit Matlab u.a. alles machen kann
- Bezugsquellen und Verfügbarkeit

Stärken und Schwächen von Matlab

Matlab – eine praktische Einführung

- Das Matlab-Hauptfenster
- Weitere Matlab-Fenster

Hilfe zur Selbsthilfe

- Quellen für Hilfe
- Ein Wort zu „Google-Lösungen“

1970er – Argonne National Lab

- ▶ LINPACK/EISPACK
- ▶ Fortran-Routinen für lineare Algebra

Ende 1970er – University of Mexico

- ▶ Matlab (MATrix LABoratory)

1984

- ▶ MathWorks Inc.: **Kommerzialisierung**



Cleve Moler

- ☞ Einfacher Zugang zu LINPACK/EISPACK (später LAPACK)
- ☞ Fokus auf Anwendung – ohne Fortran-Kenntnisse

Eine interessante Parallele

Die Motivation hinter der Entwicklung von GNU Octave



1988 – U Wisconsin–Madison/U Texas

- ▶ Kurs in chemischem Reaktordesign
- ▶ Zugang ohne Fortran-Kenntnisse

1992 – U Wisconsin–Madison

- ▶ Beginn der Vollzeit-Entwicklung

2015

- ▶ Version 4.0: integrierte GUI
- ☞ Einfacher Zugang zu numerischen Simulationen
- ☞ Fokus auf Anwendung – ohne Fortran-Kenntnisse



GNU Logo

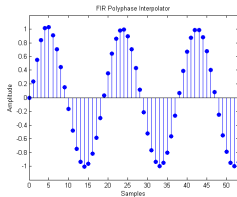
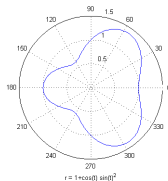
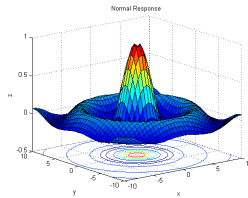
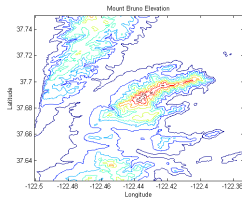
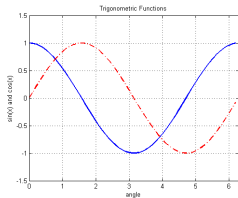
Toller Taschenrechner – und Programmiersprache

- ▶ Toller Taschenrechner
 - Auf der Matlab-Kommandozeile
 - Matlab beherrscht viele mathematische Funktionen
 - Ausführliche Befehlshistorie
- ▶ Programmiersprache
 - An Pascal und C angelehnt
 - Erlaubt die Programmierung komplexer Auswertungen
 - Unterstützung moderner Programmierkonzepte in jüngerer Zeit dazugekommen (z.B. OOP)
- ☛ Zwei Arbeitsmodi
 - Befehle direkt auf der Kommandozeile eingeben
 - Befehlslisten in Skripten/Funktionen

Was man mit Matlab u.a. alles machen kann

- ▶ Rechnen
 - Auch komplexere Rechnungen intuitiv durchführbar
- ▶ Abläufe automatisieren
 - Befehlsfolgen in Skripten oder Funktionen
 - Gleiche Verarbeitung ähnlicher Daten
- ▶ Abbildungen erstellen
 - Matlab unterstützt viele verschiedene Abbildungstypen
 - (Halbwegs) publikationsfähige Abbildungen
- ▶ Komplexe Auswerteprogramme schreiben
 - „Toolboxen“
 - Nutzerschnittstellen (CLI und GUI)

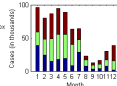
Galerie



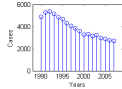
Childhood Diseases



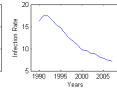
Childhood Diseases



Tuberculosis Cases



Tuberculosis Cases



Toolboxen zur Simulation von Spektren



EasySpin – *by Stefan Stoll*

MATLAB toolbox for simulating and fitting Electron Paramagnetic Resonance (EPR) spectra.

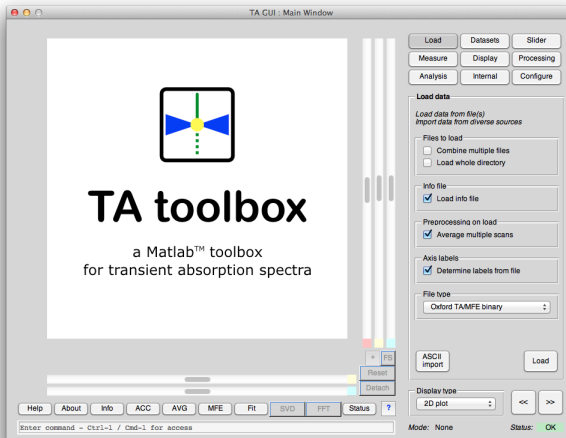
- ▶ *De-facto*-Standard für die EPR-Spektrensimulation
- ▶ Komplette kommandozeilenbasiert
- ▶ Implementiert viele verschiedene Algorithmen
- ▶ Gemeinsame Schnittstelle für alle Simulationen

Allgemeines zu Matlab

Was man mit Matlab u.a. alles machen kann



Toolboxen mit grafischen Schnittstellen





- ▶ Matlab ist in Baden-Württemberg über eine **Landeslizenz** an allen Universitäten verfügbar.
- ▶ Die Lizenz erlaubt die Installation auf **privaten Computern**.
- ▶ Zum Bezug muss auf der MathWorks-Seite ein persönliches Konto angelegt werden.
 - Dazu ist eine **Uni-Email-Adresse** zwingend notwendig.
- ▶ Details auf den Seiten des Rechenzentrums

Seite des Rechenzentrums

`https://www.rz.uni-freiburg.de/services/beschaffung/software/matlab-landeslizenz`

Stärken

- ▶ Relativ einfach erlernbar
- ▶ Mächtig
- ▶ interaktive Kommandozeile
- ▶ Integration aller Komponenten in einer GUI
- ▶ Ausführliche Hilfe
- ▶ Online-Plattform zum Austausch von Code und Tipps
- ▶ Gut geeignet für „Rapid Prototyping“:
Schnell (halbwegs) vernünftige Ergebnisse

- ☞ Es gibt gute Gründe, warum Matlab/Simulink
de-facto-Standard in den Ingenieurwissenschaften ist.

Schwächen

- ▶ Kommerziell (I): teuer
 - Akademische Einzelplatzlizenz: ca. 1000 EUR
 - Pro kommerzieller Toolbox zusätzlich ca. 300-400 EUR
 - Zzgl. jährlicher Lizenzkosten
- ▶ Kommerziell (II): Abhängigkeit von MathWorks
 - Halbjährlich neue Versionen
 - Keine garantierte Abwärtskompatibilität
 - Keine garantierte Unterstützung alter Plattformen
- ▶ Langsam
 - Nicht für zeitkritische/-aufwändige numerische Rechnungen
 - Nur über Einbindung von C/Fortran-Code

Alternativen (I): Ähnlich einfach zu benutzen

- ▶ GNU Octave
 - weitgehend kompatibel zu Matlab
 - mittlerweile (seit 2015) ebenfalls mit GUI
 - ▶ Python mit SciPy/NumPy
 - vollwertige Programmiersprache
 - SciPy/NumPy u.a. von ehem. Matlab-Nutzern entwickelt
 - ▶ Julia
 - Programmiersprache speziell für technische Berechnungen
 - Fokus auf hoher Geschwindigkeit
- ☞ alle mit interaktiver Kommandozeile

Alternativen (II): Schnell

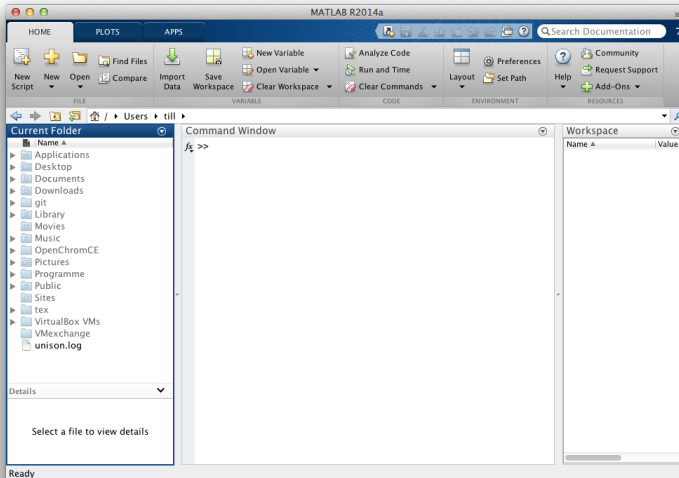
- ▶ C/C++
 - C++ bietet moderne Techniken wie Objektorientierung
- ▶ Fortran
 - unübertroffene Geschwindigkeit numerischer Rechnungen
- ☞ Erfordert vertiefte Kenntnis von Programmierung (Fokus weniger auf Anwendung als auf Programmierung)
- ☞ Standard-Bibliotheken für lineare Algebra (LAPACK/BLAS) sind in Fortran geschrieben (werden in Matlab verwendet)
- ☞ Letztlich kommt es auf die Problemstellung und die eigenen Fähigkeiten an.

Ein erster Blick auf das Arbeiten mit Matlab

- ▶ Matlab ist eine „integrierte Entwicklungsumgebung“ (IDE)
 - Bringt alles zur Arbeit Notwendige mit
 - Das Meiste spielt sich in einem Fenster ab.
- ▶ Einzelne „Teile“ von Matlab
 - Hauptfenster (mit Kommandozeile, ...)
 - Editor (für die Programmierung)
 - Abbildungen (Grafikfenster)
- ▶ Zwei Arbeitsmodi
 - Befehle direkt auf der Kommandozeile eingeben
 - Befehlslisten in Skripten/Funktionen

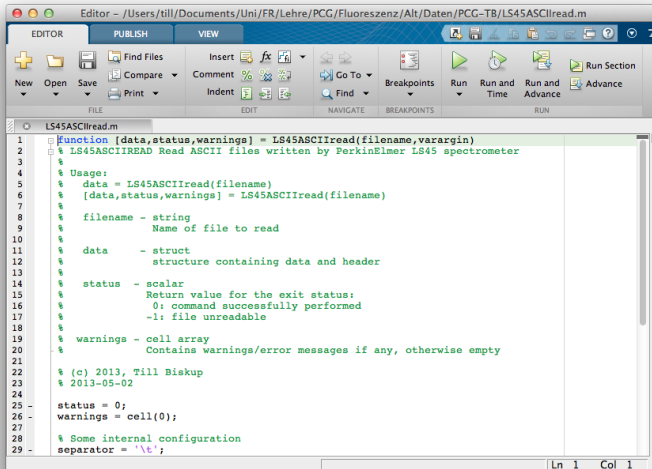
Matlab – eine praktische Einführung

Das Matlab-Hauptfenster



Elemente des Matlab-Hauptfensters

- ▶ **Command Window**
 - „Kommandozeile“
 - Das Fenster, in das Befehle direkt eingetippt werden.
 - ▶ **Workspace**
 - Übersicht über die momentan definierten Variablen
 - ▶ **Current Folder**
 - Anzeige des aktuellen Verzeichnisses
 - ▶ **Command History**
 - Übersicht über die Befehlshistorie
- ☛ Es gibt darüber hinaus noch weitere Fenster und Elemente, z.B. den Editor, Abbildungen, ...



Editor - /Users/till/Documents/Uni/FR/Lehre/PCG/Fluoreszenz/Alt/Daten/PCG-TB/LS45ASCIIread.m

EDITOR PUBLISH VIEW

New Open Save Find Files Compare Comment % Indent Insert fx Go To Breakpoints Run Run and Time Run and Advance

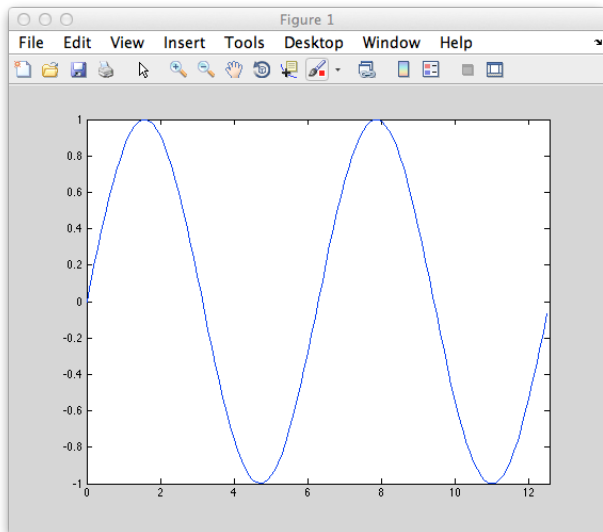
FILE EDIT NAVIGATE BREAKPOINTS RUN

```
1 function [data,status,warnings] = LS45ASCIIread(filename,varargin)
2 % LS45ASCIIREAD Read ASCII files written by PerkinElmer LS45 spectrometer
3
4 % Usage:
5 % data = LS45ASCIIread(filename)
6 % [data,status,warnings] = LS45ASCIIread(filename)
7 %
8 % filename - string
9 %           Name of file to read
10 %
11 % data      - struct
12 %           structure containing data and header
13 %
14 % status    - scalar
15 %           Return value for the exit status:
16 %           0: command successfully performed
17 %           -1: file unreadable
18 %
19 % warnings  - cell array
20 %           Contains warnings/error messages if any, otherwise empty
21
22 % (c) 2013, Till Biskup
23 % 2013-05-02
24
25 - status = 0;
26 - warnings = cell(0);
27
28 % Some internal configuration
29 - separator = '\t';
```

Ln 1 Col 1

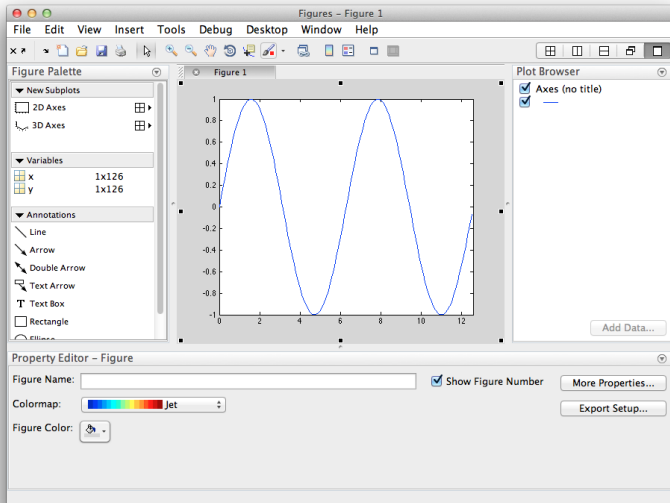
Matlab – eine praktische Einführung

Das Matlab-Abbildungsfenster



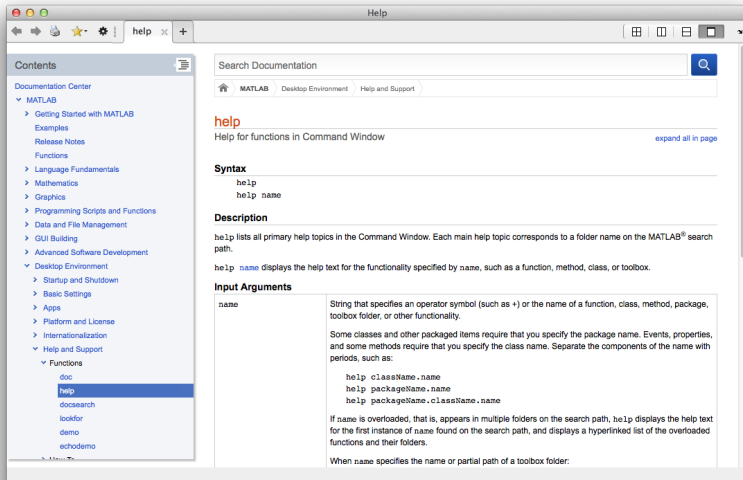
Matlab – eine praktische Einführung

Das Matlab-Abbildungsfenster



Das Matlab-Abbildungsfenster

- ▶ Alle Eigenschaften über Kommandozeile steuerbar
 - Hilfreich für die automatisierte Erstellung von Abbildungen
 - Manches weder intuitiv noch trivial
- ▶ Achsenbeschriftungen
 - Auf korrekte Formatierung achten
 - Matlab unterstützt grundlegende \LaTeX -Befehle
- ▶ Export
 - Matlab unterstützt Export in Bitmap- und Vektorformate
 - Viele Einstellungen weder intuitiv noch trivial
- ☞ Abbildungen werden in einer eigenen Lektion behandelt



The screenshot shows the MATLAB Help window with the following content:

- Search Documentation** (with a search icon)
- Navigation tabs: **MATLAB**, Desktop Environment, Help and Support
- help** (in red)
- Help for functions in Command Window [expand all in page](#)
- Syntax**

```
help
help name
```
- Description**

help lists all primary help topics in the Command Window. Each main help topic corresponds to a folder name on the MATLAB® search path.

help *name* displays the help text for the functionality specified by *name*, such as a function, method, class, or toolbox.
- Input Arguments**

name	
	String that specifies an operator symbol (such as +) or the name of a function, class, method, package, toolbox folder, or other functionality.
	Some classes and other packaged items require that you specify the package name. Events, properties, and some methods require that you specify the class name. Separate the components of the name with periods, such as: <pre>help className.name help packageName.name help packageName.className.name</pre>
	If <i>name</i> is overloaded, that is, appears in multiple folders on the search path, help displays the help text for the first instance of <i>name</i> found on the search path, and displays a hyperlinked list of the overloaded functions and their folders.
	When <i>name</i> specifies the name or partial path of a toolbox folder:

Man lernt nur durch Anwendung

- ▶ Matlab macht es dem neuen Nutzer leicht
 - Alles in einer grafischen Oberfläche
 - Schnelle Erfolge gewährleistet
 - Einfache Syntax
 - Einfach zu erlernende Sprache
 - Anwendungs-/lösungsorientiert

- ▶ Ab jetzt wird es praktisch
 - Matlab ist von den Pool-Rechnern aus nutzbar
 - Jeder Studierende der Universität hat Zugriff über die Landeslizenz

- ☞ Der Kurs fokussiert auf die praktische eigene Arbeit.

Satz

Man muss nicht alles wissen, sollte aber wissen, wo es steht.

- ▶ Programmieren lernen ist wie eine Sprache lernen.
 - ▶ Grundlegende Sprachkonzepte müssen bekannt sein.
 - ▶ Details können in der Dokumentation nachgeschlagen werden.
-
- ☛ Kenntnis der vorhandenen Dokumentation und wie man sie nutzt.

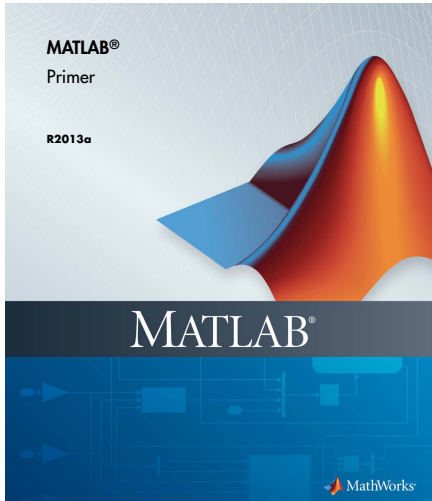
Offline verfügbar

- ▶ **Eingebaute Hilfe in Matlab**
 - `help <Befehlsname>` (auf der Kommandozeile)
 - `doc <Befehlsname>` (eigenes Fenster, ausführlicher)

- ▶ **Handbücher zu Matlab und kommerziellen Toolboxen**
 - mittlerweile nur noch elektronisch als PDF-Dokumente
 - Zugriff nur mit Konto bei der MathWorks-Seite

- ▶ **Bücher**

- ▶ **Kollegen, Betreuer, Freunde**



Inhalte

- ▶ Quick Start
- ▶ Language Fundamentals
- ▶ Mathematics
- ▶ Graphics
- ▶ Programming

Online verfügbar

- ▶ **MathWorks-Webseite**
 - Webcasts (kleine Filme) zur Einführung
 - Matlab Central
 - Matlab File Exchange

- ▶ <http://undocumentedmatlab.com/>
 - Richtet sich eher an Experten
 - Sehr viele Interna zu Matlab

- ▶ (manche) Kollegen, Betreuer, Freunde

- ▶ <http://lmgty.com/>

Trendy

Connect the dots

Cody

Let the games begin

MathWorks Careers

Find Code
Solve Problems

File Exchange

Recent Files

- [Image Registration App](#) *Brett Shelton*
- [Maximum Weight Independent Set instance](#) *Richard*
- [Multidimensional path-generator](#) *Erwin Torrea Dassen*
- [MIMO aliamouti](#) *Leila nasraoui*
- [psoToolbox](#) *Sandeep Solanki*
- [CIRCLE FIT IN HEART SHAPE](#) *Prashant Somani*

Cody

Recent Problems

- [Kaggle: Reverse Game of Life - Single Move to One Cell Case](#) *Richard Zapor*
- [Grid traversal](#) *Ziko*
- [Finding neighbors of \[-1:1\] in a matrix...](#) *Chris E.*

MATLAB Answers

Recent Questions

- [I need matlab code for probabilistic box counting \(PBC\) algorithm.](#) *Vinod Shrivastava*
- [Help plotting interpolation ploynomial.](#) *Yuvod*
- [How to scan a hex file and then search for the required byte and display](#) *Prashant*
- [Simscape - transforming a rotational motion into an oscillating translational motion](#) *Rano*
- [How to fix code?](#) *John Foster*
- [how to convert grayscale image to rgb image](#) *taushend jan*

Trendy

Popular Plots



Files on the File Exchange
Ned Gallely

Blogs

Recent Updates



[Guy and Seth on Simulink](#)
[Don't Engineer The Hyperloop in a Vacuum](#) 30 Oct 2013
[View archive](#)



[MATLAB Spoken Here](#)
[MathWorks Support Solutions in MATLAB Answers](#) 29 Oct 2013
[View archive](#)



[Cleve's Corner](#)
[The Intel Hypercube, part 1](#) 28 Oct 2013
[View archive](#)



[File Exchange Pick of the Week](#)
[Visualizing the frequency distribution of 2-Dimensional Data](#) 25 Oct 2013
[View archive](#)



[Doug's MATLAB Video Tutorials](#)
[Custom interactive graphics in MATLAB](#) 24 Oct 2013

File Exchange

- Files
- Categories
- Authors
- Tags
- Comments

Submit a File

About File Exchange

Search Files [Advanced Search](#)

Browse



Functions



Apps



Examples



Simulink Models



Videos



Instrument Drivers



Hardware Support Packages

Most Recent [\(see all\)](#)

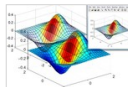
Image Registration App by Brett Shoelson



UI environment for registering a Moving image to a Fixed image

Most Popular [\(see all\)](#)

export_fig by Oliver Woodford



Exports figures nicely to a number of vector & bitmap formats.

<http://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/>

Ein Wort zu „Google-Lösungen“

- ▶ Code immer erst verstehen und dann einsetzen
 - ▶ Schwarm-Intelligenz sorgt meist nicht für bessere Code-Qualität.
 - ▶ Google verhilft zu schnellen Lösungen – aber:
Oft sind „offizielle“ oder spezifische Quellen besser.
- ☞ Viele Wege führen nach Rom.
Man kann von anderen viel lernen, sollte sich aber immer die Mühe machen, deren Code zu verstehen.

Have a break, have a 

...gleich geht's weiter

Vorschau: [Interaktive Kommandozeile](#)

- ▶ Grundaspekte der Programmierung
- ▶ Matlab als Taschenrechner
- ▶ Weitere Aspekte
- ▶ Kosmetik und Komfort