Anwendung von (Mathematica und) Matlab in der Physikalischen Chemie

8. Grafiken

UNI FREIBURG

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

Dr. Till Biskup

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

Übersicht

UNI FREIBURG

Motivation

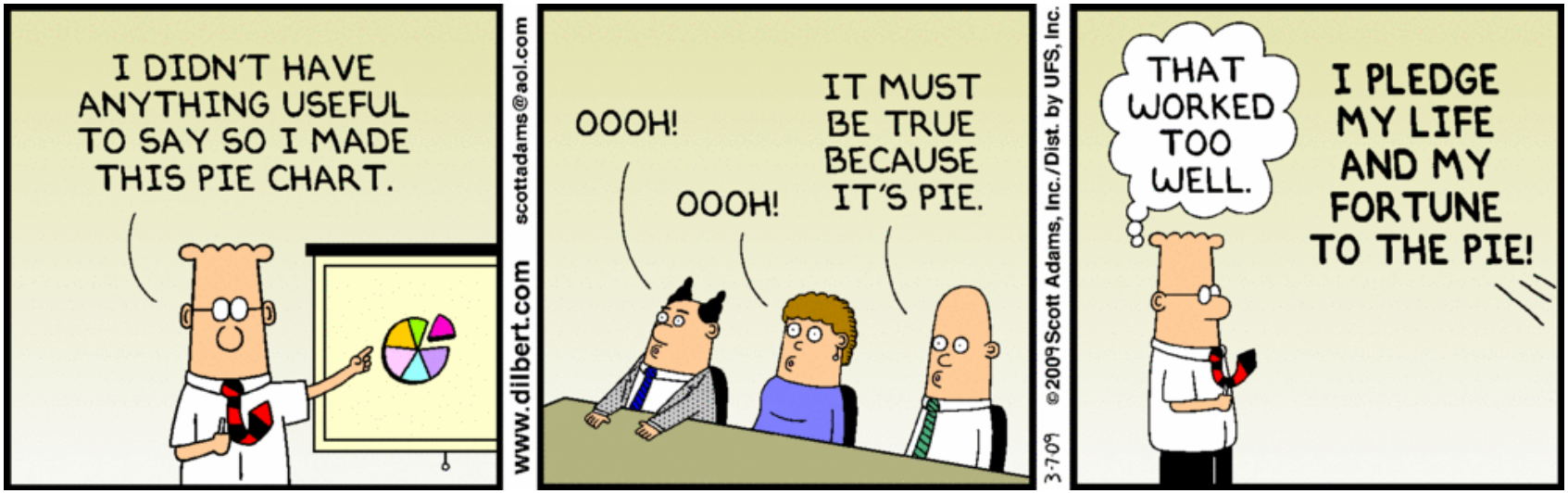
Formatierung von Abbildungen

Plot-Befehle in Matlab

Abbildungen exportieren

Motivation

Ein Bild sagt mehr als tausend Worte



- Excel ist gut geeignet für Business-Grafiken,
  aber nicht zur Darstellung wissenschaftlicher Daten.

© Scott Adams, `http://dilbert.com/2009-03-07/`

Warum sind grafische Darstellungen relevant?

- Ein Bild sagt mehr als tausend Worte
  - Abbildungen dienen der schnellen Übersicht
  - Übersichtliche und ansprechende Darstellung
  - Ähnlich viel Zeit investieren wie in den begleitenden Text
- Auswertung und grafische Darstellung beeinflussen sich
  - Ein erster Eindruck der Daten steht oft am Anfang.
  - Manche Auswertung erst durch die Darstellung möglich.

☞ Auswertungen mit Matlab erstellen,
die wissenschaftlichen Kriterien entsprechen
(und den nervigen Betreuer zufriedenstellen).

Formatierung von Abbildungen

- Konventionen in den Naturwissenschaften
  - Diskrete Datenpunkte (normalerweise) nicht verbinden
  - Formelgrößen *kursiv* setzen
  - Einheiten aufrecht und *nie* in eckigen Klammern
  - Achsenbeschriftungen: *Größe* / Einheit
- Matlab unterstützt grundlegende LaTeX-Formatierung
  - kursiver Text: „{\it Text}“
  - hochgestellter Text: „^{Text}“
  - tiefgestellter Text: „_{Text}“
- Hinweis zu Sonderzeichen
  - Matlab unterstützt (noch) kein Unicode
  - Sonderzeichen sind mitunter betriebssystemabhängig

Formatierung von Abbildungen

Noch einmal: Korrekte Achsenbeschriftung

UNI FREIBURG

- Korrekte und vollständige Achsenbeschriftungen
  - Größe *kursiv*, Einheit aufrecht
  - Schrägstrich „/“ als Trenner zwischen Größe und Einheit
  - Einheiten *nie* in eckigen Klammern

Notation physikalischer Größen

Der Wert einer physikalischen Größe kann als Produkt eines Zahlenwertes und einer Einheit ausgedrückt werden:

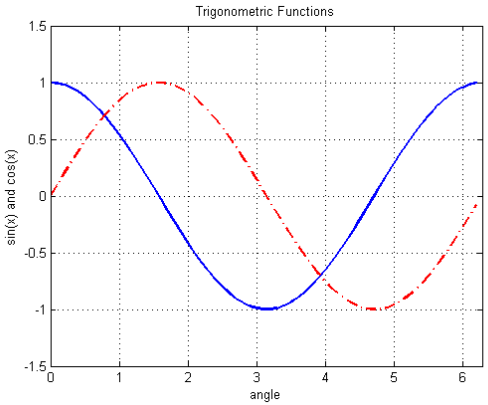
$B = 1\,\mathrm{mT}$	Größe mit Wert
$\{B\} = 1$	Zahlenwert
$[B] = \mathrm{mT}$	Einheit

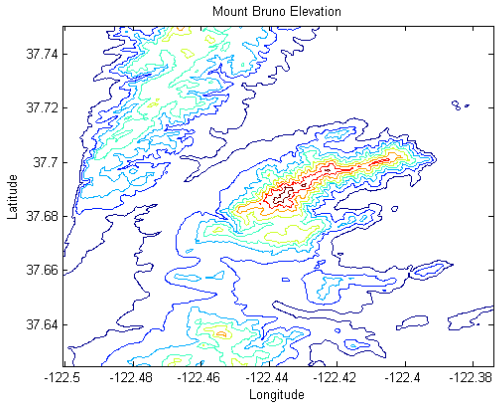
Formatierung von Abbildungen

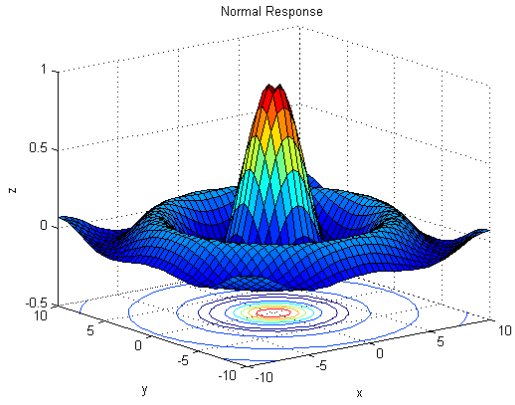
- Vorhandenen Platz sinnvoll nutzen
  - Matlab hat mitunter eigene Vorstellungen...
- Vergleich mehrerer Abbildungen
  - Achsen mit identischem Wertebereich
  - Achsenformatierungen konsistent
  - Daten ggf. (identisch) skalieren
  - Konsistentes Farbschema
- Abbildungen für Präsentationen
  - Achsenbeschriftung ausreichend groß
  - Liniendicke und Farbe präsentationskompatibel
  - Weniges ist nerviger und hinderlicher als fehlende oder unlesbare Achsenbeschriftungen

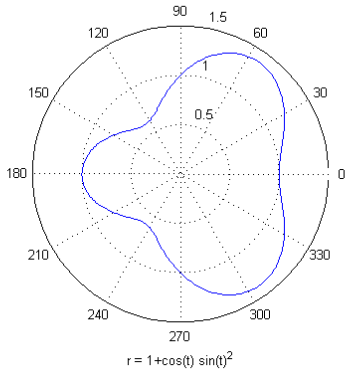
Plot-Befehle in Matlab

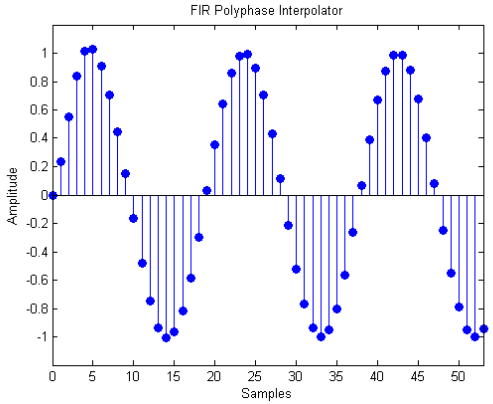
Galerie von Abbildungstypen in Matlab

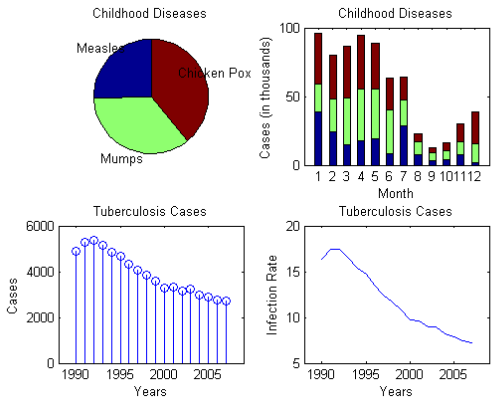












Hinweis: Diese Abbildungen haben viel zu kleine Achsenbeschriftungen für eine Präsentation...

http://www.mathworks.de/discovery/gallery.html

Grundlegende Plot-Befehle in Matlab

- Eindimensionale Abbildungen in Matlab: `plot`
  - Eine Dimension: $f(x)$ gegen x auftragen
  - Häufigste (und einfachste) Darstellungsform
- Achsen beschriften: `xlabel`, `ylabel`
  - Wichtig: Auf korrekte Formatierung achten
  - Größe und Einheit (wenn es eine Einheit gibt)
- Legende: `legend`
  - Box innerhalb der Achsen
  - Beschreibung jeder einzelnen „Kurve“
  - Position (in gewissen Grenzen) kontrollierbar

☛ Details und weitere Plot-Befehle in der Matlab-Hilfe

Grundlegende Plot-Befehle in Matlab: `plot`

Listing 1: Beispiele für den `plot`-Befehl

```
% Define x,y vectors
x = 0:0.1:2*pi;
y = sin(x);

% Plot y = f(x)
plot(x,y);

% Same plot, but with different colouring
% "k" - black (from cmyk)
% "-" - solid line
plot(x,y,'k-');

% Same plot, but with different colouring and line style
% "r" - red (from rgb)
% "x" - crosses, no solid line connecting the data points
plot(x,y,'rx');
```

Linienstile, -Marker und -Farben in Matlab

- Können auf zwei Wegen angegeben werden
  - Als drittes Argument nach x und y (als String)
  - Als Schlüssel-Wert-Paare
- Schlüssel
  - `Color`, `LineStyle`, `Marker`
- Farben
  - Kürzel: `r, g, b, c, m, y, k, w`
  - RGB-Tripel als Vektor mit Werten zwischen 0 und 1
- Automatische Abfolge von Linienfarben und -Stilen
  - Bei mehreren Linien in einem Plotbefehl
  - Reihenfolge kann vom Nutzer festgelegt werden

Linienstile in Matlab

Kürzel	Linienstil
`-`	durchgezogen
`--`	gestrichelt
`:`	gepunktet
`-.`	gestrichpunktet
`none`	keine Verbindungslinie

- Standard ist die durchgezogene Linie.
- Wissenschaftliche Darstellungen
  - Punkte in der Regel nicht verbinden
  - Stattdessen Marker setzen (die Punkte sind viel zu klein)

Linienmarker in Matlab

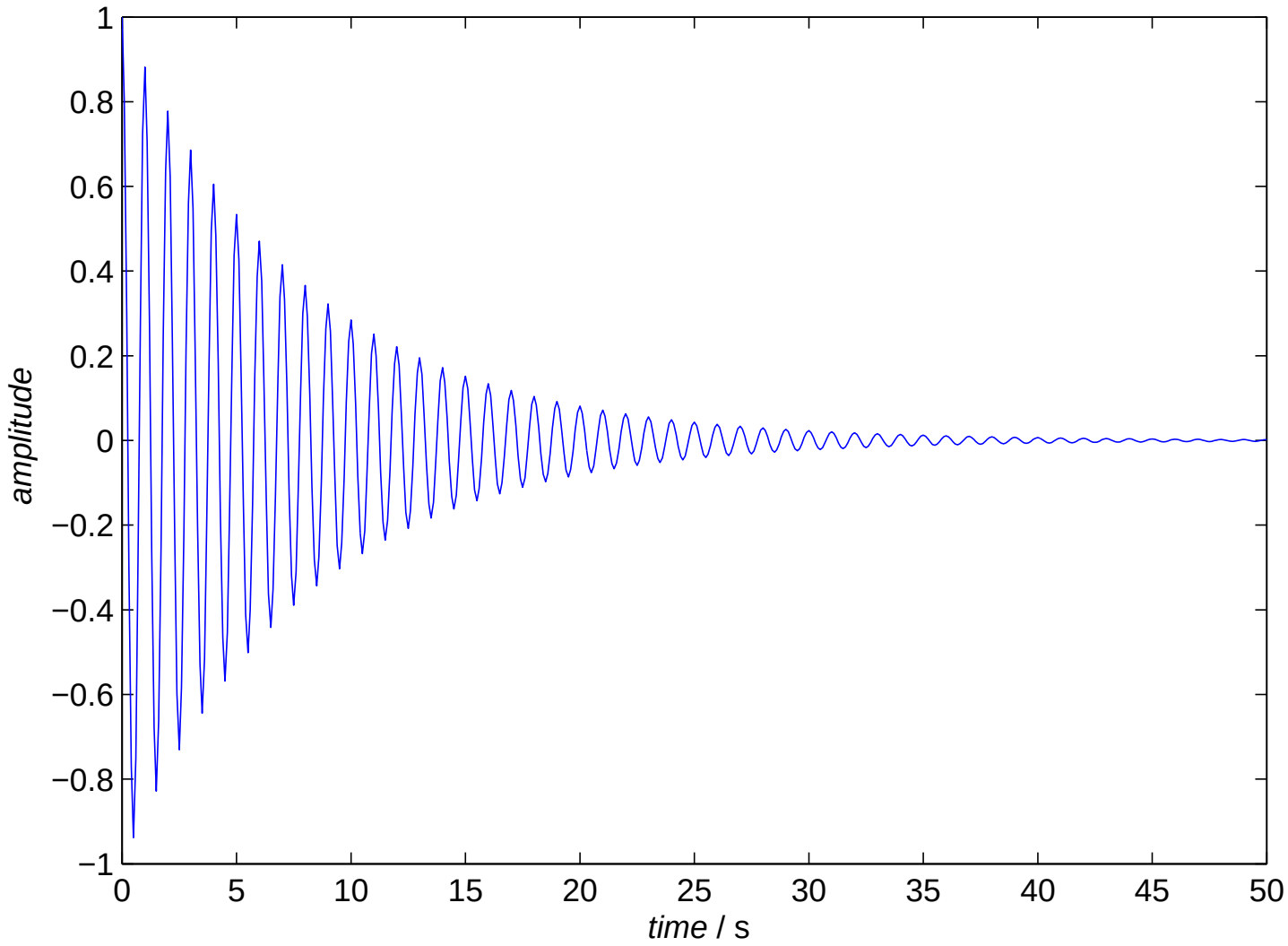
Kürzel	Marker
`+`	Pluszeichen
`o`	Kreis
`*`	Stern
`.`	Punkt
`x`	Kreuz
`s`, `square`	Quadrat
`d`, `diamond`	Raute
`^`, `v`, `>`, `<`	Dreieck (nach oben, unten, rechts, links)
`p`, `pentagram`	Pentagramm
`h`, `hexagram`	Hexagramm
`none`	kein Marker

Grundlegende Plot-Befehle in Matlab: `xlabel`, `ylabel`

Listing 2: Beispiele für Achsenbeschriftungen (`xlabel`, `ylabel`)

```
1 % Define x,y vectors and plot y = f(x)
2 t = 0:0.1:50; % time in seconds
3 A = cos(t*(2*pi)).*exp(-0.02*t*(2*pi)); % damped oscillation
4 plot(t,A);
5
6 % Set x and y labels
7 xlabel('{\it time} / s');
8 ylabel('{\it amplitude}');
```

- Auf korrekte Formatierung achten
  - *Größe* / Einheit
- Matlab unterstützt grundlegende LaTeX-Formatierung
  - kursiver Text: „{\it Text}“

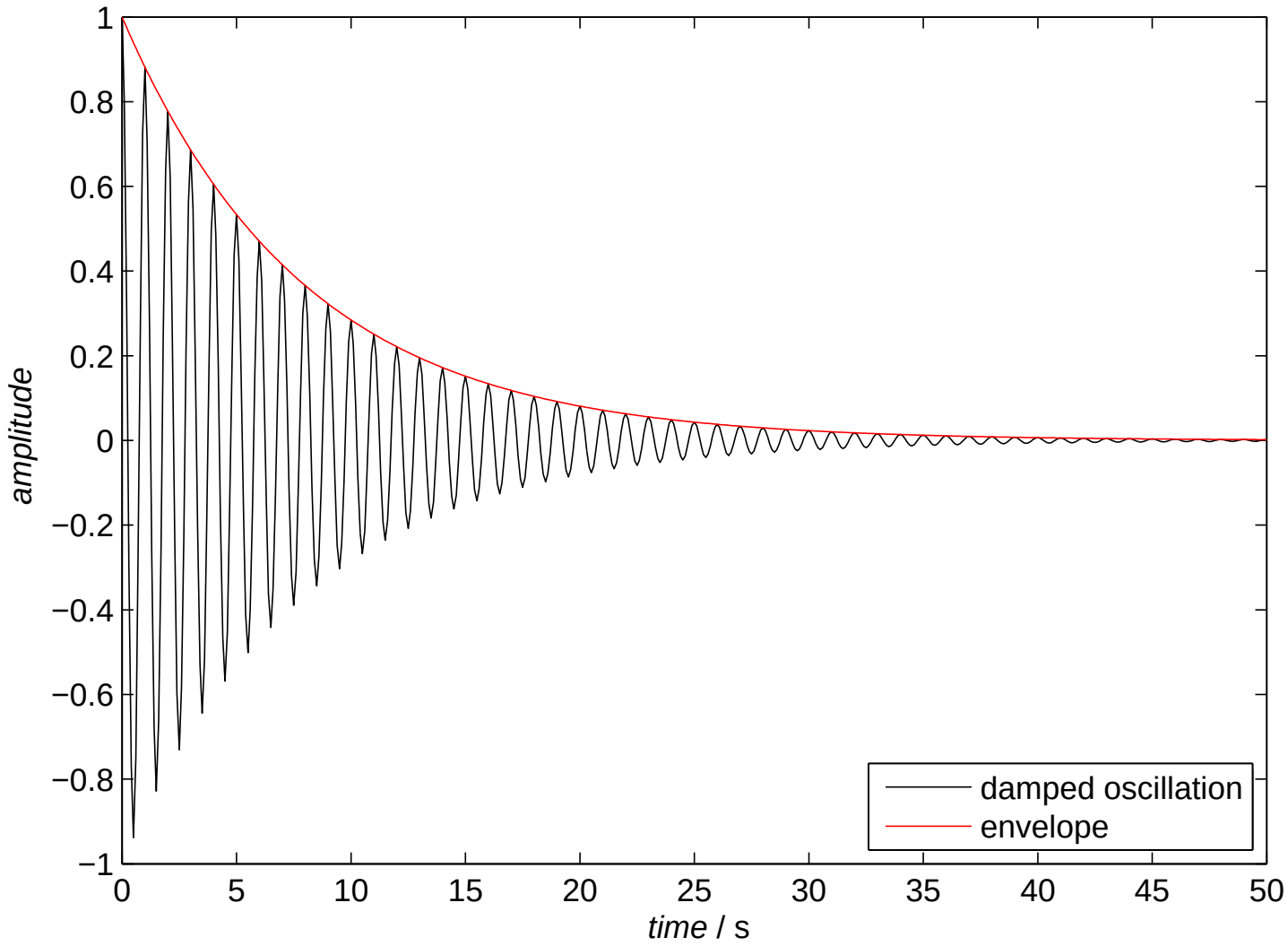

1
0.8
0.6
0.4
0.2
0
−0.2
−0.4
−0.6
−0.8
−1
amplitude
0
5
10
15
20
25
30
35
40
45
50
time / s

Grundlegende Plot-Befehle in Matlab: `legend`

Listing 3: Beispiele für eine Legende (`legend`)

```
1  % Plot damped oscillation and envelope
2  plot(...
3      t,A,'k-',...
4      t,exp(-0.02*t*(2*pi)),'r-' ...
5      );
6
7  % Plot legend
8  legend({'damped oscillation','envelope'});
9
10 % Plot legend at specific location
11 legend({'damped oscillation','envelope'},'Location','SouthEast');
```

- Position der Legende
  - Zusätzlicher Parameter `'Location'` (wenig intuitiv)
  - Vier Ecken über Himmelsrichtungen
  - Wenn nicht angegeben: „beste“ Position (laut Matlab)


amplitude
time / s
damped oscillation
envelope
1
0.8
0.6
0.4
0.2
0
−0.2
−0.4
−0.6
−0.8
−1
0
5
10
15
20
25
30
35
40
45
50

Problem

- Jeder `plot`-Befehl löscht das aktuelle Grafikfenster.

Lösungen für mehrere Linien im gleichen Fenster

- Mehrere x, y-Wertepaare im `plot`-Befehl
  - ✔ Matlab permutiert Linienfarbe/-Stil automatisch
  - ✘ wird im `plot`-Befehl schnell unübersichtlich
- `hold on`, `hold off`
  - ✔ Auch nachträglich (bei aktivem Fenster) anwendbar
  - ✘ Linienfarbe/-Stil muss manuell angegeben werden
- Low-level-Routine: `line`
  - ✔ Viele Freiheiten
  - ✘ Keinerlei automatische Anpassung der Achsen

Subplots: Mehrere Plots in einem Fenster

Listing 4: Beispiele für Subplots

```
1 % Divide figure into 2x1 grid, active axis in grid position 1
2 subplot(2,1,1)
3 plot(t,A,'k-');
4
5 % Active axis in grid position 2
6 subplot(2,1,2)
7 plot(t,A,'r:');
```

- Nummerierung der Subplots zeilenweise
  - Erst alle Subplots einer Zeile, dann nächste Zeile
- Aufruf von `subplot` aktiviert nur die jeweilige Achse
  - Eigentlicher Plot erst durch nachfolgende Befehle
  - Hilfreich zum Wechseln zwischen Achsen in Subplots

Abbildungen in Matlab sind Objekte

- Grafik-Objekte verhalten sich ähnlich wie Strukturen
  - Hierarchisch verschachtelt
  - Jedes Grafik-Objekt hat Eigenschaften (*properties*)
  - Jedes Objekt hat eine Referenz (*handle*) für den Zugriff
- Standard-Hierarchie eines Matlab-Abbildungsfensters
  - Grafikfenster
  - Achse
  - Linie (und andere Objekte innerhalb der Achse)
- Standard-Referenzen (*handles*) in Matlab:
  - `gcf` – aktives Abbildungsfenster (*current figure*)
  - `gca` – aktive Achse (*current axes*)
  - `gco` – aktives Grafikobjekt (*current object*)

Kontrolle der Eigenschaften

- Über „Getter“ und „Setter“
  - Funktionen `get` und `set`
  - Erstes Argument ist jeweils die Objektreferenz
  - Eigenschaften werden durch Schlüssel-Wert-Paare gesetzt
- Sehr viele Eigenschaften
  - Kontrollieren das Aussehen in relativ großem Detail
  - Details zu den Eigenschaften in der Matlab-Hilfe

- Auf den ersten Blick nicht sehr intuitiv
- Seit Matlab 2014b große Änderungen
- Wird noch wichtig beim Export der Grafiken

Abbildungen aus Matlab exportieren

- Matlab unterstützt Export in diverse Grafikformate
  - Vektorisiert: EPS, PDF
  - Bitmap: PNG, JPG, ...
  - Vektorgrafiken sind *immer* zu bevorzugen (einfache Nachbearbeitung mit anderen Programmen)
- Grundsätzlich zwei Wege zum Export von Abbildungen
  - Grafisch über die Matlab-GUI bzw. das Menü des Fensters
  - Über die Kommandozeile
- Befehle zum Speichern von Abbildungen in Matlab
  - `saveas`, `print`

☛ Export führt mitunter zu überraschenden Ergebnissen

Abbildungen aus Matlab exportieren

- Vorteile von Vektorgrafiken
  - Ermöglichen Nachbearbeitung (oft notwendig)
  - Benötigen weniger Speicherplatz
  - Sind beliebig skalierbar
- Strategie für die Erstellung von Abbildungen
  - Möglichst viel in Matlab automatisieren
  - Export als Vektorgrafik (über Routine)
  - Nachbearbeitung in externem Vektorgrafikprogramm
- Umfangreiche Kontrolle des Aussehens möglich
  - Papierformat, Schriftart und -größe, ...
  - Eigenschaften der Abbildungen über `set` setzen
- Tipp: Eigene Routine zum Export von Abbildungen

Abbildungen exportieren

Ein paar grundsätzliche Überlegungen

UNI FREIBURG

Warum Abbildungen automatisiert exportieren?

- Sorgt für ein möglichst konsistentes Aussehen.
- Erleichtert den Reexport nach Änderungen an den Daten.

Warum Abbildungen als PDF-Dateien exportieren?

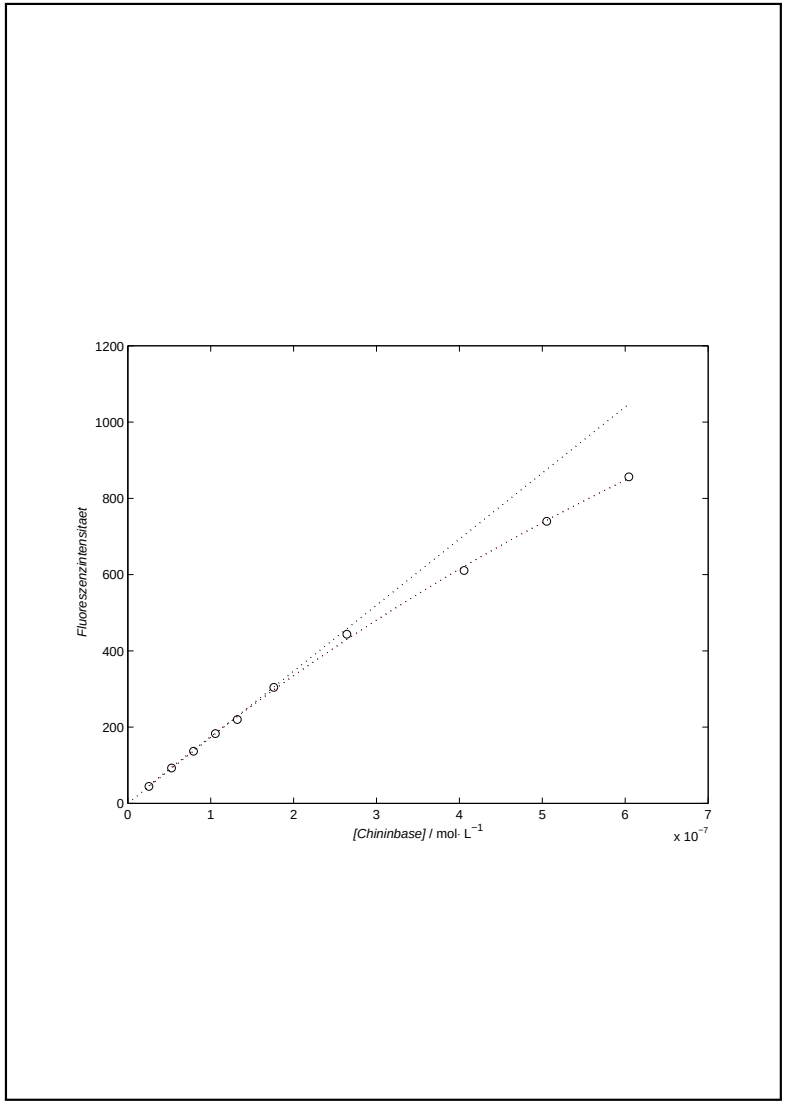
- PDF-Dateien sind (in der Regel) vektorisiert, können also beliebig skaliert und einfach nachbearbeitet werden.

Listing 5: Grundlegender Abbildungsexport als PDF-Datei

```
1 print(gcf,'erster-test.pdf','-dpdf');
```

Abbildungen exportieren

Der erste Versuch – noch nicht ganz das gewünschte Ergebnis



Abbildungen exportieren

Auf dem Weg zu sinnvollem Abbildungsexport

UNI FREIBURG

Listing 6: Anpassungen der Seitengröße

```
1  % Anpassung der Seitengroesse
2  set(gcf,'paperunits','centimeters');
3  set(gcf,'papersize',[16 10]);
4
5  % Anpassung der Positionierung auf der Seite
6  set(gcf,'paperpositionmode','auto');
7  set(gcf,'Units','centimeters');
8
9  % Anpassung der Groesse der Achsen
10 set(gca,'Units','centimeters');
11 set(gca,'OuterPosition',[0 0 16 10]);
12
13 % Positionierung auf dem Papier
14 oldpos = get(gcf,'Position');
15 set(gcf,'Position',[oldpos([1 2]) 16 10]);
```

- Die Reihenfolge der Befehle ist nicht immer egal.
- Manchmal erschließt sich die Logik nicht zwangsläufig...

Ausblick

Wie geht's weiter?

...Zeit für eigene praktische Arbeit...

Vorschau: Lineare und nichtlineare Regression

- Allgemeines zu Regression und Kurvenanpassung
- Lineare Regression
- Nichtlineare Regression