Anwendung von (Mathematica und) Matlab in der Physikalischen Chemie

13. Ausblick: Matlab im echten Leben

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

UNI FREIBURG

Dr. Till Biskup

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

Motivation zur Verwendung von Matlab

- Wir haben Daten gemessen und wollen diese Daten auswerten und (sinnvoll) darstellen.

Warum Matlab

- Komplexe Auswertungen
  - Nicht mehr einfach bzw. per Hand durchführbar
  - Automatisierung durch Programmierung einzelner Schritte
  - Reproduzierbarkeit und Nachvollziehbarkeit
- Einfache Erlernbarkeit von Matlab
  - Programmiersprache mit Ähnlichkeiten zu C und Pascal
  - Grafische Oberfläche
  - Relativ einfach und schnell erste Erfolge

Einsatzgebiet in der Physikalischen Chemie

Ein Plädoyer für's Programmieren lernen

UNI FREIBURG

Programmierkenntnisse sind (fast) unerlässlich

- Kernaspekte der Physikalischen Chemie:
  - Vertieftes Verständnis gemessener Daten
  - Simulation basierend auf den physikalischen Grundlagen

Programmieren ist kein Teil des Studiums

- Die wenigsten Chemiker können gut programmieren.
- Einfach zu erlernende Sprachen sind hilfreich.
  - Geschwindigkeit spielt eher selten eine Rolle.
  - Matlab & Co. sind ein guter Einstieg.

Übersicht

UNI FREIBURG

Automatisierung von Routineaufgaben

Toolboxen: Satz aufeinander bezogener Funktionen

Interaktive Datenauswertung (Nutzerschnittstellen)

Ausblick: Programmieren größerer Projekte

Automatisierung von Routineaufgaben

Motivation

UNI FREIBURG

Warum Automatisierung?

- Konsistenz der Ergebnisse
- Zeitökonomie: der Computer kann nicht denken...

Wann Automatisierung?

- Wenn klar ist, dass die Aufgabe häufiger auftritt.
- Wenn die Implementierung weniger Zeit braucht.

Welche Aufgaben eignen sich dafür?

- Einfache Aufgaben
- Aufgaben, die keiner Nutzerinteraktion bedürfen

PCG-Assistent: Versuchsauswertung

- Pro Semester $\gg$ 15 Gruppen
- Der Fluoreszenz-Versuch war sehr dankbar...
  (Messdaten elektronisch, einfach automatisierbar)

Darstellung spektroskopischer Daten

- Import in Matlab in der Regel einfach programmierbar.
- Schnelle Darstellung (mit korrekten Achsenbeschriftungen) hilft für einen ersten Eindruck.
- „Einfachstes“ Beispiel: UV/Vis-Spektrum

Toolboxen

Was ist eine Toolbox?

UNI FREIBURG

Grundlegend zwei Konzepte:

1. ein Skript für jeden Datensatz
2. eine Toolbox aus Funktionen,
   die generisch jeden Datensatz verarbeiten kann

☛ Beide Konzepte haben Vor- und Nachteile.

Toolbox

In sich geschlossene Sammlung von Funktionen (Routinen)
für eine bestimmte Aufgabe

Toolboxen in Matlab

- Matlab selbst ist sehr modular aufgebaut.
- Viele hilfreiche zusätzliche Funktionalität ist über Toolboxen realisiert.
- Toolboxen sind in sich geschlossene Sammlungen von Funktionen für eine bestimmte Aufgabe.
- Matlab bietet Unterstützung bei der Entwicklung eigener Toolboxen.
- Es gibt grundsätzlich zwei Arten von Toolboxen
  1. kommerziell (meist von MathWorks selbst)
  2. nichtkommerziell (meist frei im Netz verfügbar)

UNI FREIBURG

Kommerzielle Toolboxen

- Optimization Toolbox
- Global Optimization Toolbox
- ...

Nichtkommerzielle Toolboxen

- EzyFit Toolbox
- EasySpin
- DEER Analysis
- trEPR Toolbox, TA Toolbox
- ...

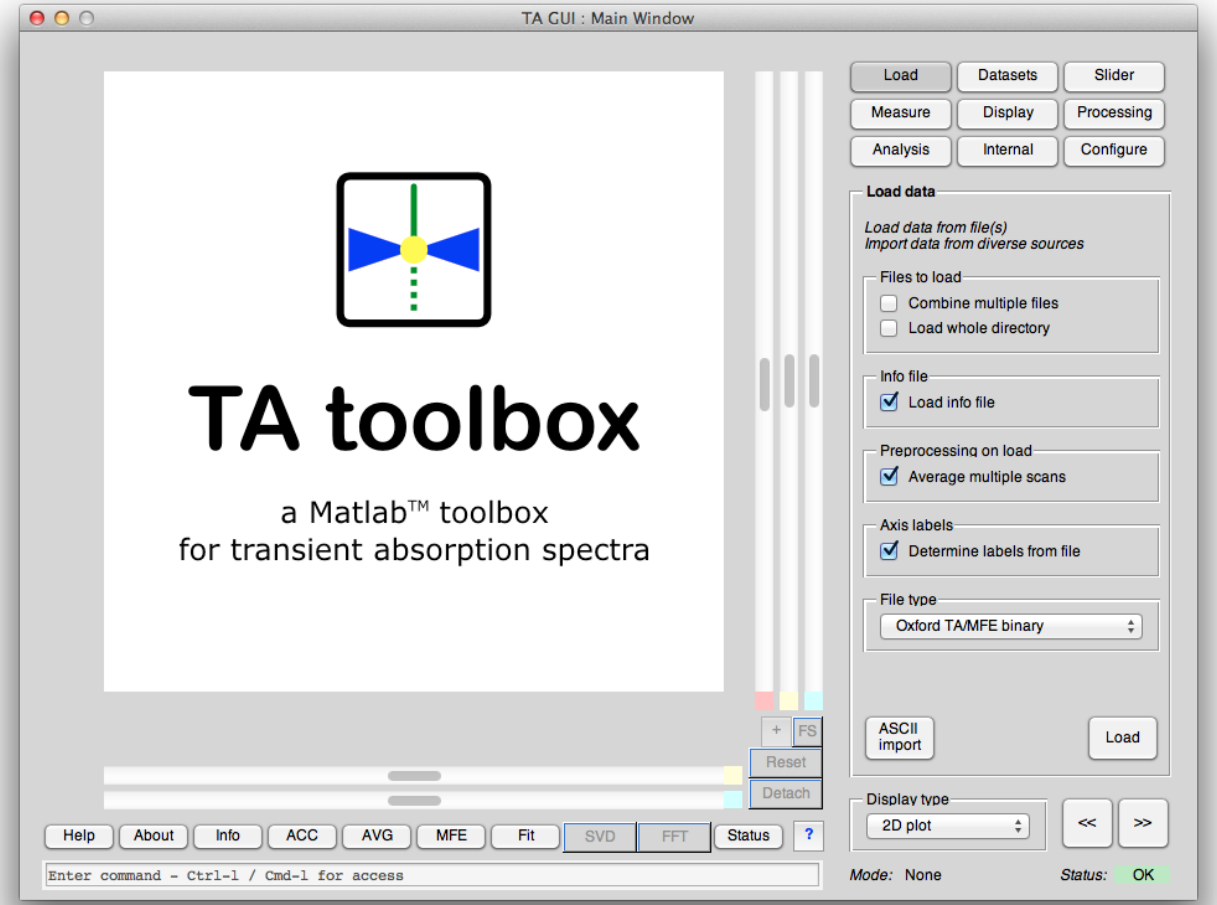
Toolboxen zur Simulation von Spektren

EasySpin – *by Stefan Stoll*

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

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

Toolboxen mit grafischen Schnittstellen



Nutzerschnittstelle

Abstrakte Schicht zwischen dem Nutzer und den eigentlichen Routinen, die dem Nutzer die Bedienung erleichtert.

Zwei Arten von Nutzerschnittstellen

- Textbasierte Schnittstelle
  command line interface, CLI
- grafische Schnittstelle
  graphical users interface, GUI

☞ Jede dieser Schnittstellen hat ihre Vor- und Nachteile.

Textbasierte Nutzerschnittstelle (CLI)

- Menüs und Nutzereingaben in einer Textkonsole
- Vollständig deterministisch (bis auf Nutzereingaben)
- Linear: immer nur eine Entscheidungsmöglichkeit
- Strukturiert, aber mit wenig Freiheiten

Grafische Nutzerschnittstelle (GUI)

- Grafische Anordnung von Bedienelementen
- Reihenfolge der Ereignisse unvorhersehbar
- Nichtlinear: beliebige Entscheidungsmöglichkeiten
- Große Freiheit: Alles (implementierte) jederzeit möglich

Beispiel: Textbasierte Nutzerschnittstelle (CLI)

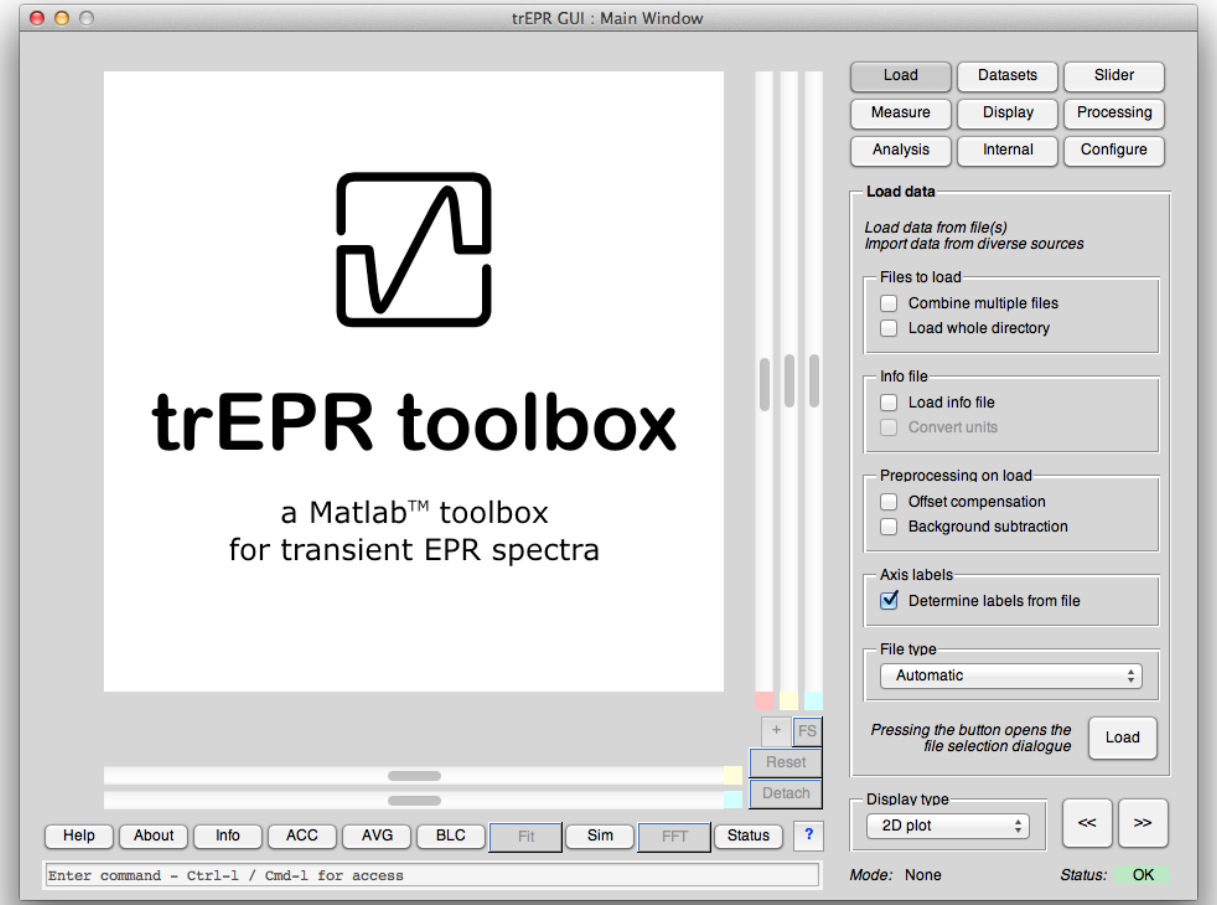
Listing 1: Programm zur Simulation von EPR-Spektren

```
Do you wish to simulate or to fit?
 [f] Fit
 [s] Simulate
 [q] Quit
Your choice (default: [f]): s

Do you wish to load experimental data?
 [y] Yes
 [n] No
Your choice (default: [n]): n

The simulation parameters currently chosen:
g               2.0200     2.0200     2.0200
D            3900.0000
E             130.0000
mwFreq          9.7000
nPoints       361.0000
Range         260.0000   440.0000
Temperature     0.0000     0.4500     0.5500
Method      matrix
```

Beispiel: Grafische Nutzerschnittstelle (GUI)



Ausblick: Programmieren größerer Projekte

Ein Wort vorweg

Code as if whoever maintains your program
is a violent psychopath who knows where you live.

— Anonymous

Ausblick: Programmieren größerer Projekte

Größere Projekte und typische Probleme

UNI FREIBURG

Was ist ein größeres Projekt?

- Zeitaufwand
  - Programmierung braucht deutlich länger als eine Woche
- Komplexität:
  - mehrere Funktionen
  - andere Anwender als der Programmierer

Was sind typische Probleme?

- Mangelnde Wiederverwertbarkeit
  - fehlende Dokumentation
  - Funktionen nicht ausreichend robust
- Korrektheit schwer zu überprüfen

Programmieren ist ein Handwerk

- Informatik hat relativ wenig mit Programmieren zu tun...
- Programmieren lässt sich lernen.
  - Entscheidend ist die eigene Motivation.
  - Viel läuft über Praxis und Erfahrung.
  - Es gibt viele gute Bücher zum Thema.
- (Selbst-)Disziplin ist entscheidend.
  - Schlechte Programmierung zahlt sich nicht aus.
  - Meist ist man selbst der nächste Anwender...

☛ Code wird in der Praxis viel zu häufig neu geschrieben – aufgrund mangelnder Wiederverwertbarkeit.

Ausblick

Wie geht's weiter?

UNI FREIBURG

Vorlesung PC V:
„Programmierkonzepte in der Physikalischen Chemie“

☛ im Wintersemester 2016/17 ☚

`http://www.till-biskup.de/de/lehre/programmierkonzepte/`

© Scott Adams, `http://dilbert.com/strip/2009-03-21`