

Anwendung von (Mathematica und) Matlab in der Physikalischen Chemie

5. Präsentation möglicher Lösungen für die gestellten Aufgaben

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg



**UNI
FREIBURG**

Dr. Till Biskup

Institut für Physikalische Chemie
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg
Wintersemester 2015/16

Ein reales Beispiel: Fluoreszenz-Versuch aus dem PCG

- ▶ Ausgangslage
 - Daten wurden alle gemessen
 - Daten liegen als Textdateien (ASCII) vor

- ▶ Zielstellung
 - Vollständige Auswertung gemäß Fragestellung
 - Abbildungen, die den Assistenten zufriedenstellen (und den wissenschaftlichen Standards entsprechen)

- ▶ Vorgehen
 - 1 Pflichtenheft erstellen (was muss getan werden?) ✓
 - 2 Notwendige Grundlagen von Matlab aneignen ✓
 - 3 Auswertung gemäß Pflichtenheft programmieren ✓

Pflichtenheft: Einzelne Schritte der Auswertung

- ▶ Daten einlesen
 - Daten importieren in Matlab
- ▶ Spektren darstellen
 - Daten in Matlab grafisch darstellen (ploten)
 - Achsenbeschriftungen gemäß Vorgaben
 - Abbildungen aus Matlab exportieren
- ▶ Intensitäten für eine Wellenlänge aus mehreren Spektren
 - Mehrere Spektren einlesen
 - Zugriff auf einen bestimmten Wert in einem Vektor
- ▶ Lineare und nichtlineare Kurvenanpassung
 - Matlab-Routinen zur Kurvenanpassung

- ▶ Viele Wege führen nach Rom.
 - Es gibt viele verschiedene Möglichkeiten, die gestellten Aufgaben zu lösen.
 - Die nachfolgend vorgestellten Lösungen sind nicht unbedingt die besten.

- ▶ Hilfe zur Selbsthilfe
 - Programmieren lässt sich nur durch praktische Arbeit erlernen.
 - Lösungen im Detail (in *jedem* Schritt) zu verstehen, ist zentral für eigene Fortschritte.
 - Aufgaben und Lösungen sollen zeigen, dass Matlab bei realen Problemen helfen kann.

Daten importieren

Anregungsspektrum darstellen

Streubande identifizieren

Intensität als Funktion der Konzentration

Kurvenanpassungen

Abbildungen exportieren

Wie sehen die Dateien aus?

- ▶ Dezimaltrennzeichen
 - Punkt
 - ▶ Anzahl der Zeilen im Dateikopf
 - 54
 - ▶ Spaltentrennzeichen
 - Tabulator
- ☞ Wir können die Funktion `importdata` verwenden.

Listing 1: Befehl zum Datenimport

```
1 data = importdata('1A-01.sp', '\t', 54);
```

Listing 2: Matlab-Rückgabe auf der Kommandozeile

```
1 >> data = importdata('1A-01.sp', '\t', 54)
2
3 data =
4
5     data: [261x2 double]
6     textdata: {54x1 cell}
7
8 >>
```

Listing 3: LS45ASCIIread.m

```
1 function data = LS45ASCIIread(filename)
2 % LS45ASCIIREAD Load ASCII export from PerkinElmer LS45 spectrometer.
3 %
4 % Usage:
5 %   data = LS45ASCIIread(filename)
6 %
7 %   filename - string
8 %             Name of file to read
9 %
10 %   data      - struct
11 %             data      - numerical data
12 %             textdata - header information
13
14 % Copyright (c) 2016, Till Biskup <till.biskup@physchem.uni-freiburg.de>
15 % 2016-02-10
16
17 separator = '\t';
18 nheaderlines = 54;
19
20 data = importdata(filename, separator, nheaderlines);
21
22 end
```


Warum eine eigene Funktion für einen effektiven Einzeiler?

Listing 4: Vergleich von Funktionsaufruf und direktem Import

```
data = LS45ASCIIread('1A-01.sp');  
data = importdata('1A-01.sp', '\t', 54);
```

- ▶ Weil es Code leserlicher macht.
 - In beiden Fällen werden offensichtlich Daten importiert, aber `LS45ASCIIread` verrät, welche Art von Daten.

- ▶ Weil man nur einmal denken muss.
 - Spaltentrenner und Anzahl der Kommentarzeilen müssen nur einmal in der Funktion definiert werden.
 - Der Nutzer der Funktion muss sich nicht darum kümmern.

Anregungsspektrum darstellen

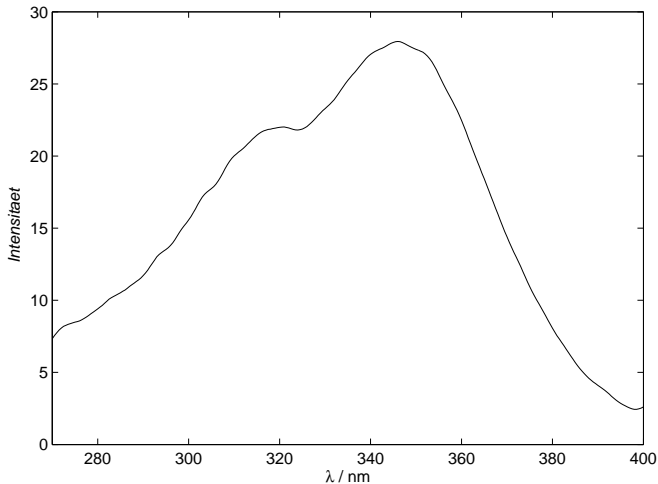
Ein einfacher `plot`-Befehl und ein bisschen Kosmetik

Listing 5: Anregungsspektrum darstellen

```
1 % Daten importieren
2 data = LS45ASCIIread('1A-01.sp');
3
4 % Einfacher Plot
5 % Die Daten liegen in data.data in zwei Spalten vor
6 plot(data.data(:,1),data.data(:,2),'k');
7
8 % Achsenbeschriftungen
9 xlabel('\it\lambda / nm');
10 ylabel('\it Intensitaet');
11
12 % ZUSATZ: Dimension der x-Achse anpassen
13 set(gca,'XLim',[min(data.data(:,1)),max(data.data(:,1))]);
```

Anregungsspektrum darstellen

Das Ergebnis erster Plotversuche

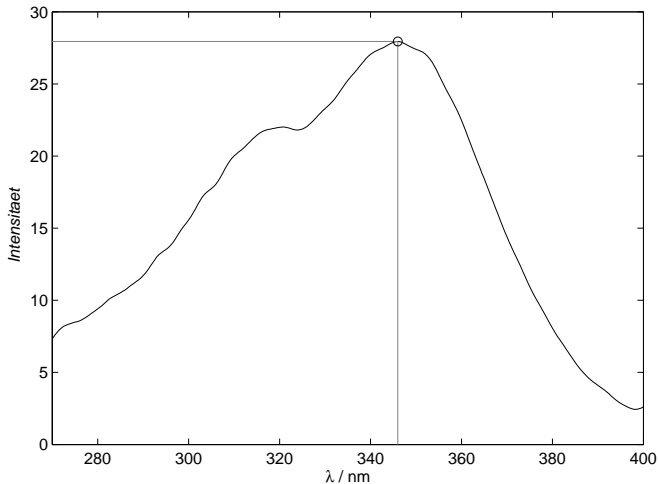


Listing 6: Intensitätsmaximum des Anregungsspektrums hervorheben

```
1 % Wert und Index des Maximums
2 [maxValue,maxIndex] = max(data.data(:,2));
3
4 % Wellenlaenge des Maximums
5 lambdaMax = data.data(maxIndex,1);
6
7 % Senkrechte Linie einzeichnen
8 line([lambdaMax,lambdaMax],[0,maxValue],'color',[.5 .5 .5]);
9
10 % Horizontale Linie einzeichnen
11 line([lambdaMax,data.data(1,1)],[maxValue,maxValue],'color',[.5 .5 .5]);
12
13 % ZUSATZ: Anregungsmaximum mit Kreis hervorheben
14 hold on;
15 plot(lambdaMax,maxValue,'ko');
16 hold off;
```

Anregungsspektrum darstellen

Das Ergebnis in grafischer Form

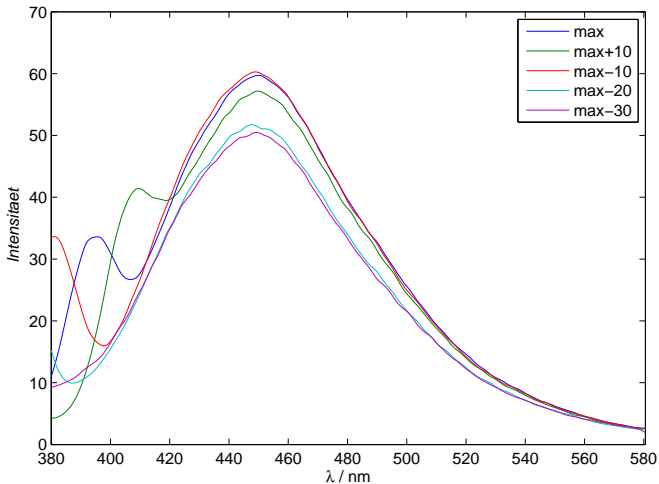


Listing 7: Anregungsspektrum darstellen

```
1 % Daten importieren
2 spek1 = LS45ASCIIread('1E-01.sp');
3 spek2 = LS45ASCIIread('1E-02.sp');
4 spek3 = LS45ASCIIread('1E-03.sp');
5 spek4 = LS45ASCIIread('1E-04.sp');
6 spek5 = LS45ASCIIread('1E-05.sp');
7
8 % Einfacher Plot
9 plot(...
10     spek1.data(:,1), spek1.data(:,2), ...
11     spek2.data(:,1), spek2.data(:,2), ...
12     spek3.data(:,1), spek3.data(:,2), ...
13     spek4.data(:,1), spek4.data(:,2), ...
14     spek5.data(:,1), spek5.data(:,2));
15
16 % Achsenbeschriftungen
17 xlabel('\it\lambda / nm');
18 ylabel('\it Intensitaet');
19
20 % Dimension der x-Achse anpassen
21 set(gca, 'XLim', [min(spek1.data(:,1)), max(spek1.data(:,1))]);
22
23 % Legende
24 legend({'max', 'max+10', 'max-10', 'max-20', 'max-30'}, 'Location', 'ne');
```

Streubande identifizieren

Das Ergebnis in grafischer Form



Listing 8: Daten laden und Intensitäten extrahieren

```
1 dateinamen = {'2E-01.sp', '2E-02.sp', '2E-03.sp', '2E-04.sp', '2E-05.sp', ...
2             '2E-06.sp', '2E-07.sp', '2E-08.sp', '2E-09.sp', '2E-10.sp', '2E-11.sp'};
3
4 for messung = 1:length(dateinamen)
5     data = LS45ASCIIread(dateinamen{messung});
6     % Intensitaet bei 448 nm
7     Imax(messung) = data.data(data.data(:,1)==448,2);
8 end
9
10 % Korrektur der Intensitaeten mit Blindprobe
11 Imax = Imax-Imax(1);
```


Listing 9: Konzentration berechnen

```
1 % Volumina der beiden Loesungen
2 VChinin = [ 290 600 : 300 : 1500 2000 3000 40 50 60 ];
3 VPuffer = [ 3210 2900 : -300 : 2000 1500 500 3000 3000 3000 ];
4
5 % Konzentration von Chinin in ppm
6 cChinin = VChinin./(VPuffer+VChinin);
7
8 % Korrektur um den Faktor 100 fuer die letzten drei Punkte
9 cChinin(end-2:end) = cChinin(end-2:end)*100;
10
11 % Molekulargewicht von Chinin (freie Chininbase) in g/mol
12 MwChinin = 324.41;
13
14 % Konvertierung ppm -> mol/L
15 cChinin = cChinin*1e-4/MwChinin;
```

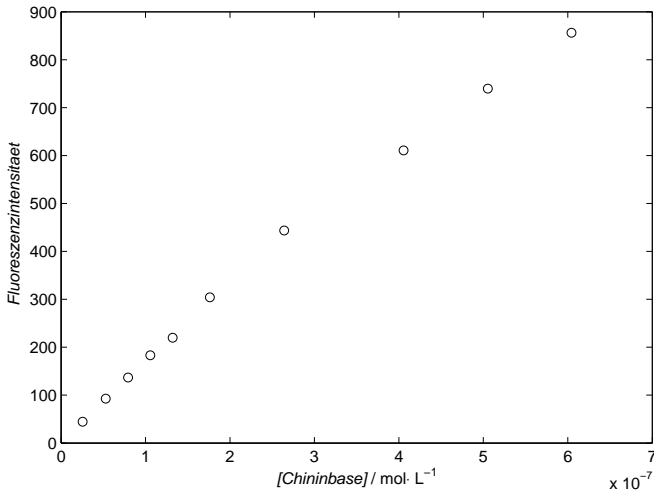


Listing 10: Darstellung der Konzentrationsabhängigkeit

```
1 % Punkte nicht verbinden, auf die Laenge der Vektoren achten
2 plot(cChinin, I_max(2:end), 'ko');
3
4 % Achsenbeschriftungen
5 xlabel('\it[Chininbase] / mol\cdot L^{-1}');
6 ylabel('\it Fluoreszenzintensitaet');
```

Intensität als Funktion der Konzentration

Das Ergebnis in grafischer Form





Listing 11: Lineare Regression durch die ersten vier Datenpunkte

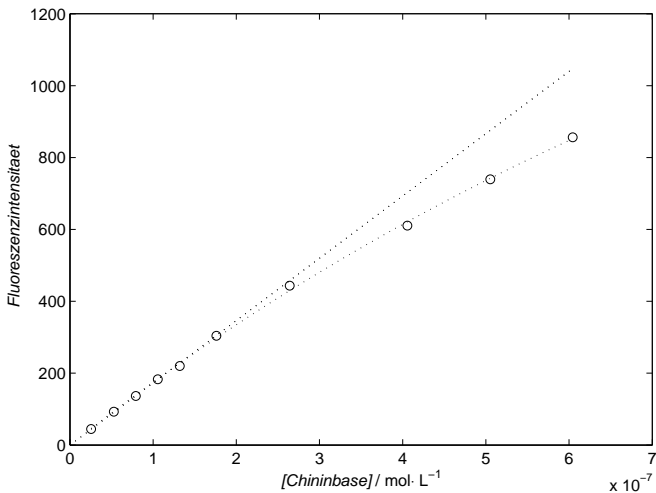
```
1 % Lineare Regression durch die ersten vier Punkte
2 [anstieg, fehler] = lscov(cChinin(1:4)', Imax(2:5)');
3
4 % ALTERNATIVE: Backslash-Operator
5 anstieg = cChinin(1:4)' \ Imax(2:5)';
6
7 % Berechnung der Werte der linearen Regression: y = anstieg * x
8 x = [0 cChinin(end)];
9 y = anstieg * x;
10
11 % Darstellung der linearen Regression
12 hold on;
13 plot(x, y, 'k:');
14 hold off;
```

Listing 12: Nichtlineare Kurvenanpassung

```
1 % Funktion, die angepasst werden soll: f(x) = a * (1-10^(-b*x))
2 fun = @(a,x) a(1).*(1-10.^(-a(2).*x));
3
4 % Minimierungsfunktion: Summe der Quadrate der Abweichungen
5 fitfun = @(a) sum((Imax(2:end)-fun(a,cChinin)).^2);
6
7 % Startwerte definieren
8 a(1) = 1e3;
9 a(2) = 5e4;
10
11 % Minimierung
12 fita = fminsearch(fitfun,a);
13
14 % X-Werte und Funktion fuer die glatte Darstellung der Kurve
15 xWerte = cChinin(1):(cChinin(end)-cChinin(1))/100:cChinin(end);
16
17 % Darstellung der nichtlinearen Kurvenanpassung
18 hold on;
19 plot(xWerte, fun(fita,xWerte), 'k:');
20 hold off;
```

Kurvenanpassungen

Das Ergebnis in grafischer Form



Warum Abbildungen automatisiert exportieren?

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

Warum Abbildungen als PDF-Dateien exportieren?

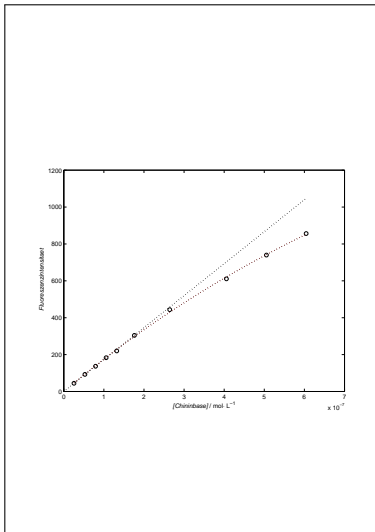
- ▶ PDF-Dateien sind (in der Regel) vektorisiert, können also beliebig skaliert und einfach nachbearbeitet werden.

Listing 13: Grundlegender Abbildungsexport als PDF-Datei

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

Abbildungen exportieren

Der erste Versuch – noch nicht ganz das gewünschte Ergebnis



- ▶ Abbildungen sind (so etwas wie) Objekte
 - Objekte haben Eigenschaften (*properties*).
 - Eigenschaften können abgefragt oder gesetzt werden.
 - Objekte haben eine Referenz (*handle*) für den Zugriff.

- ▶ Funktionen zum Arbeiten mit Eigenschaften
 - `get` fragt eine Eigenschaft ab
 - `set` setzt eine Eigenschaft

- ▶ Spezielle Referenzen für Grafikobjekte
 - `gcf` aktives Abbildungsfenster (*current figure*)
 - `gca` aktive Achse (*current axes*)
 - `gco` aktives Grafikobjekt (*current object*)

Listing 14: 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...

...gleich geht's weiter

Vorschau: [Matlab im echten Leben](#)

- ▶ Automatisierung von Routineaufgaben
- ▶ Interaktive Datenauswertung (Kommandozeile)
- ▶ Interaktive Datenauswertung (grafisch)
- ▶ Ausblick auf weiterführende Veranstaltungen