Anwendung von (Mathematica und) Matlab in der Physikalischen Chemie

4. Skripte und Funktionen

UNI FREIBURG

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

Dr. Till Biskup

Institut für Physikalische Chemie
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg
Wintersemester 2016/2017

Übersicht

UNI FREIBURG

Motivation

Editor

- Was muss ein guter Editor können?
- Funktionen des Matlab-Editors
- Refactoring

Programme

- Unterschied zwischen Skripten und Funktionen
- Vor- und Nachteile von Skripten und Funktionen

Funktionen

- Schnittstellen von Funktionen
- Kontext von Variablen
- Zugriff auf Funktionen

Motivation

Warum Skripte und Funktionen?

UNI FREIBURG

- Bislang alles auf der interaktiven Kommandozeile
  - Großartig für „Rapid Prototyping“
  - Gut für erste Schritte mit Matlab
  - Ungeschickt für größere Auswertungen
- Problem
  - Sobald wir Matlab beenden, ist alles weg.
  - Die Befehlshistorie ist auch eher mühsam...
- Lösung
  - Befehlsfolgen in eine Datei schreiben: Programm

☛ Wir brauchen einen Editor

- Was macht einen guten Editor aus?
- Was davon erfüllt der Matlab-Editor?

Was muss ein guter Editor können?

- Syntaxhervorhebung („Syntax highlighting“)
- automatische Codeeinrückung
- Zusammenfalten von Codeteilen („Code folding“)
- automatische Codevervollständigung
- Codeüberprüfung während der Eingabe
- Hilfe aus dem Editor heraus erreichbar
- Refaktorierung („Refactoring“)

☛ Der Matlab-Editor unterstützt die meisten Kriterien mittlerweile recht gut (bis auf Refactoring).

Syntaxhervorhebung

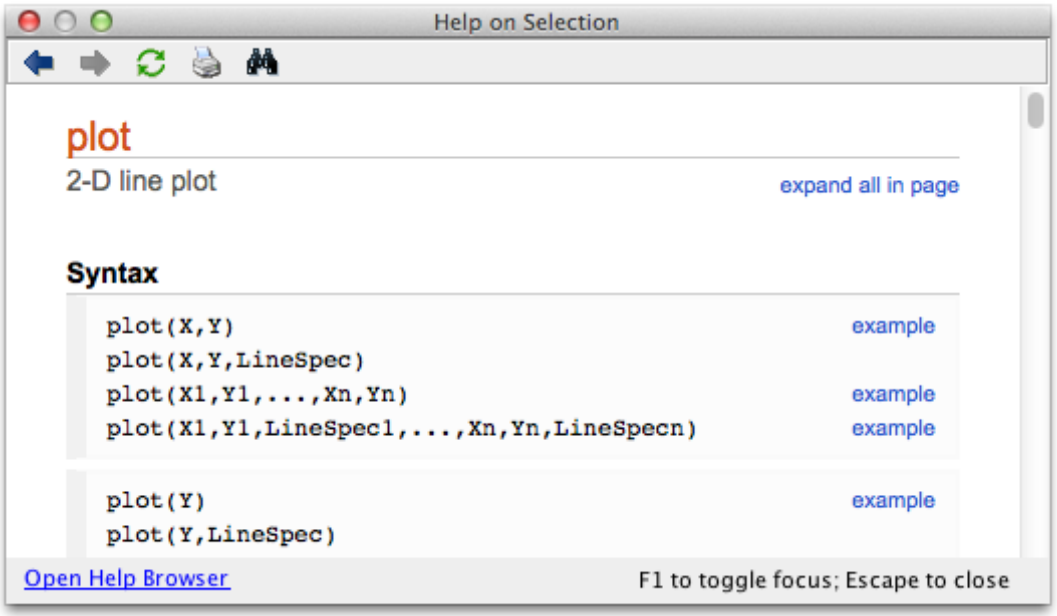
- Unterschiedliche Farben u.a. für
  - Befehle/Variablen
  - Zeichenketten
  - Kommentare
- Erhöht die Übersichtlichkeit und Lesbarkeit von Code.

Automatische Codevervollständigung

- Durch die Tabulatortaste
- Vervollständigt Befehle/Variablen
- Hilfreich zur Vermeidung von Tippfehlern

Hilfe aus dem Editor aufrufen

- Zwei Möglichkeiten
  - Rechtsklick mit der Maus auf einen Befehl
  - Cursor im Befehl platzieren und F1 drücken



Codeeinrückung: Allgemeine Aspekte

- Automatische Codeeinrückung erhöht die Lesbarkeit.
- Beginn und Ende von Schleifen sind einfach erkennbar.

☞ Saubere Codeeinrückung ist nicht optional.

Codeeinrückung im Matlab-Editor

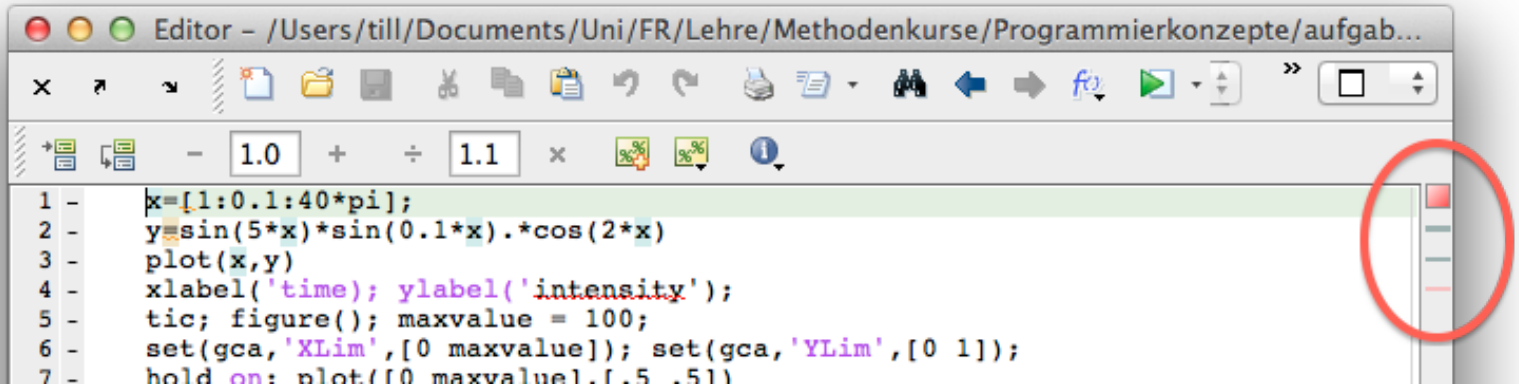
- Der Editor beherrscht automatische Codeeinrückung.
- Codebereiche können im Nachhinein automatisch eingerückt werden.

Codeüberprüfung im Matlab-Editor

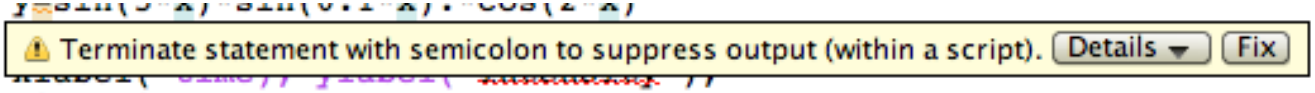
- Der Matlab-Editor zeigt drei Zustände an.
  (alles in Ordnung, Warnungen, Fehler)
- Für Warnungen und Fehler können
  zusätzliche Hinweise angezeigt werden.
- Häufig wird für Warnungen und Fehler eine
  automatische Behebung angeboten („Autofix“).
- Warnungen können ignoriert/abgeschaltet werden
  (im Einzelfall sinnvoll).

☞ Warnungen und Fehler sollten *in jedem Fall*
ernst genommen und deren Ursache behoben werden.

Codeüberprüfung im Matlab-Editor



Autofix im Matlab-Editor



UNI FREIBURG

Refactoring (noun)

a change made to the internal structure of software to make it easier to understand and cheaper to modify without changing its observable behavior.

- Beispiele für Refactoring:
  - Umbenennung von Variablen
  - Umbenennung von Funktionen (inkl. der Aufrufe)
  - Auslagerung von Codeblöcken in Funktionen

- Matlab beherrscht nur Variablenumbenennung (in *einem* Dokument)

Martin Fowler: Refactoring, Addison Wesley, Boston 1999, p. 53

Listing 1: Beispiel für ein (reales) Matlab-Programm

```
1  % Setup of basic spin system
2  Sys.S = 1;          % Triplet
3  Sys.g = 2.002;      % g_iso
4  Sys.lw = [0 1];     % Only Lorentzian linewidth (in mT)
5
6  % Setting some experimental parameters
7  Exp.Range = [280 410];
8  Exp.mwFreq = 9.7;
9  Exp.Harmonic = 0;
10
11 % ZFS parameters and populations
12 Sys.D = [1300 70];              % D and E values (in MHz)
13 Exp.Temperature = [0 0.1 0.9]; % ZF populations (see note on top)
14
15 [x1,y1] = pepper(Sys,Exp);
16 figure(101);
17 plot(x1,y1);
18 set(gca,'XLim',Exp.Range);
19 title('{\it D} > 0, {\it E} > 0');
```

Programme

Grundlegende Aspekte von Matlab-Programmen

UNI FREIBURG

- Reine Text-Dateien
  - Keine Sonderzeichen, nur ASCII-7-bit-Zeichen
  - Matlab beherrscht kein Unicode
  - Grundsätzlich ist jeder Text-Editor geeignet
- Dateiendung: `.m`
- Benennung
  - Nur Buchstaben, Zahlen und „_“ sind erlaubt.
  - Name muss mit einem Buchstaben beginnen.
- Zugriff auf Programme in Matlab
  - Durch den Matlab-Suchpfad bestimmt
  - Alternativ: lokales Verzeichnis
  - Zur Rangfolge vgl. die Matlab-Hilfe.

Programme

Unterschied zwischen Skripten und Funktionen

UNI FREIBURG

Skript

- Liste von Befehlen
- Alle Variablen sind global zugreifbar
- Name beliebig (aber eindeutig)

Funktion

- Zusammengehörender Codeblock mit einer Aufgabe
- Parameterübergabe beim Aufruf
- Variablen lokal für die Funktion
- Funktions- und Dateiname müssen übereinstimmen

Programme

Vor- und Nachteile von Skripten und Funktionen

UNI FREIBURG

Skript

- ✔ Nachvollziehbarkeit dank intrinsischer Dokumentation
- ✔ Reproduzierbarkeit: Daten und Skript immer beisammen.
- ✘ Schwierige Versionierung und Wiederverwendbarkeit
- ✘ Alle Variablen auf der Kommandozeile

Funktion

- ✔ Modularität und Wiederverwendbarkeit
- ✔ Alle Variablen lokal
- ✘ Nachvollziehbarkeit und Reproduzierbarkeit nur mit zusätzlichem Aufwand erreichbar

Funktionen

Die „Wörter“ einer Programmiersprache

UNI FREIBURG

Befehle und Funktionen

- Befehle sind Funktionen
- (Selbst geschriebene) Funktionen sind Befehle

Möglichkeiten des Aufrufs

1. Kommandozeile
   - Befehl wird direkt eingetippt und ausgeführt
2. Skript
   - Liste von Befehlen in einer Datei
3. Funktion selbst schreiben
   - Grund: „Ich will etwas tun, was Matlab nicht kann.“
   - Spracherweiterung mithilfe vorhandener Befehle

Funktionen in Matlab

- Funktionsname und Dateiname müssen übereinstimmen.
- Nur eine Funktion pro Datei (Ausnahme: Unterfunktionen)

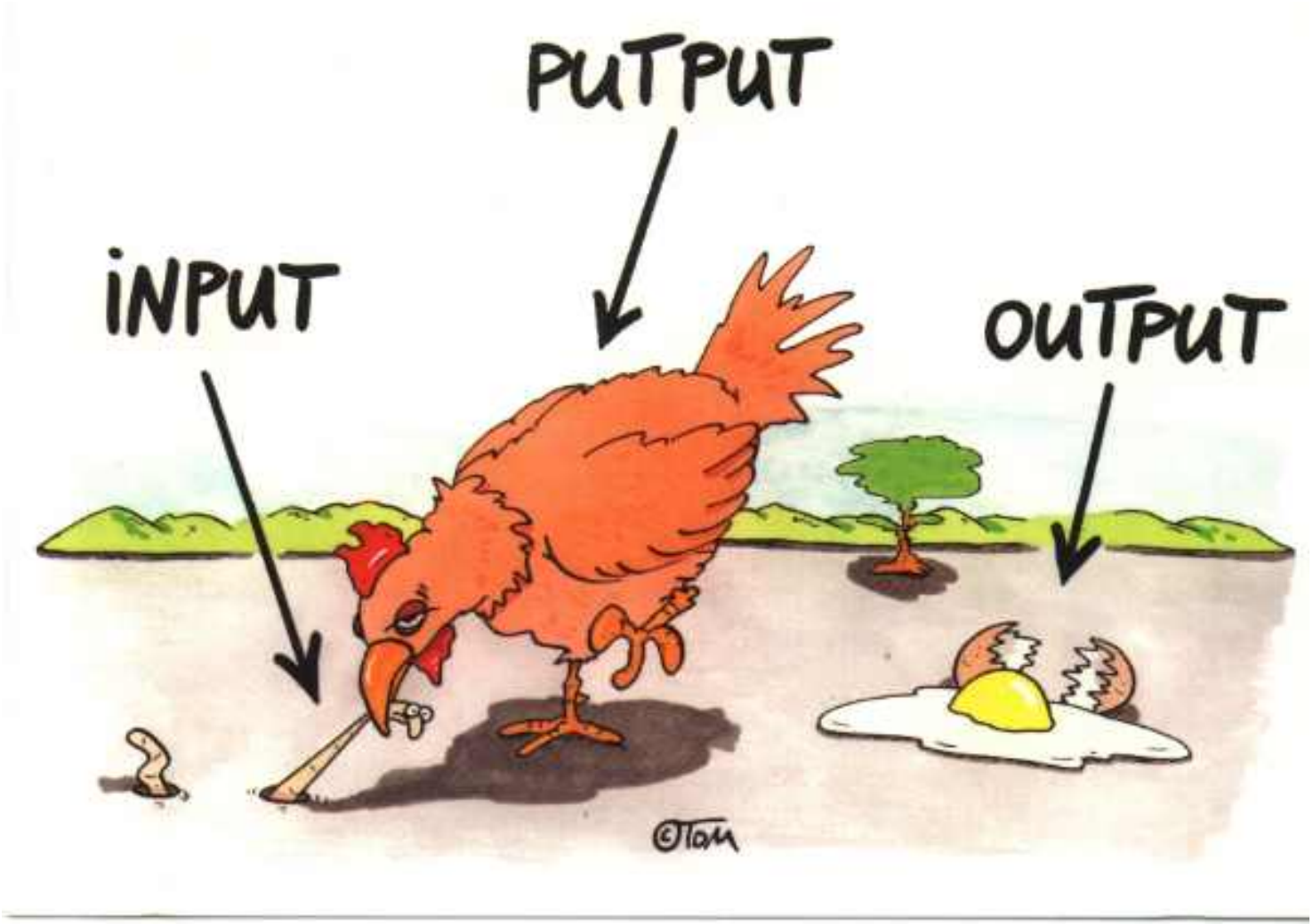
Benennung von Funktionen in Matlab

- Matlab unterscheidet zwischen Groß- und Kleinschreibung.
- Funktionsnamen müssen mit einem Buchstaben beginnen.
- Sonderzeichen sind nicht erlaubt. (Ausnahme: „_“)

- Tipp: Sprechende Namen erhöhen die Lesbarkeit
- Tipp: Präfix zur Vermeidung von Doppelungen

Funktionen

Klar definierte Schnittstellen



Thomas Körner, alias ©TOM

Listing 2: Funktionsdeklaration in Matlab

```
function [out1,out2] = myFunction(in1,in2)
```

Funktionsdeklaration in Matlab

1. Schlüsselwort „`function`“
2. Liste der Rückgabeparameter (output)
3. Funktionsname
4. Liste der Übergabeparameter (input)

☛ Es gibt Funktionen *ohne* Parameter.

Möglicher Kontext einer Variablen

lokal nur für die jeweilige Funktion „sichtbar“

global für alle Funktionen „sichtbar“

Konsequenzen

- Unterschiedliche Funktionen können Variablen mit dem gleichen Namen verwenden.
- Eine Funktion kennt nur globale, ihr übergebene oder in ihr definierte Variablen.

☞ Skripte haben (im Gegensatz zu Funktionen) Zugriff auf alle Variablen im Matlab-„Workspace“.

Zugriff auf Funktionen

- Grundlegende Unterscheidung
  - Eingebaute Befehle
  - Zusätzliche Funktionen
- Wo Matlab nach Funktionen sucht
  - Aktuelles Verzeichnis
  - Pfaddefinition über `pathdef`
- Vordefinierte Rangfolge bei Namenskonflikten
  - Details in der Matlab-Hilfe
- Welche Funktion wird aufgerufen?
  - `which`-Befehl gibt Auskunft.

Unterfunktionen

- Matlab erlaubt Unterfunktionen in Funktionen
  - Nur aus der Hauptfunktion aufrufbar
- Zwei Arten von Unterfunktionen
  - Innerhalb der Hauptfunktion definiert
  - Unterhalb der Hauptfunktion definiert
- Vorteile
  - Können den Code sehr übersichtlich/lesbar gestalten.
  - Geeignet für besondere Aufgaben innerhalb einer Funktion.
- Nachteile
  - Unterfunktion nur aus der Hauptfunktion aufrufbar.
  - Kann schnell zu Code-Doppelungen führen.

Unterfunktion innerhalb der Hauptfunktion

Listing 3: Unterfunktion innerhalb der Hauptfunktion

```
function [...] = mainFunction(...)

    function [...] = subFunction(...)

    end

end
```

- Die Unterfunktion hat Zugriff auf alle Variablen der Hauptfunktion.
- Veränderung der Variablen in der Unterfunktion wirkt auf die Hauptfunktion zurück.

Unterfunktion außerhalb der Hauptfunktion

Listing 4: Unterfunktion außerhalb der Hauptfunktion

```
function [...] = mainFunction(...)

end

function [...] = subFunction(...)

end
```

- Die Unterfunktion hat *keinen* Zugriff auf die Variablen der Hauptfunktion.
- Parameterübergabe wie bei normalen Funktionen nur über die Schnittstelle.

Das `private`-Verzeichnis

- Besonderheit des `private`-Verzeichnisses
  - Alle Funktionen in diesem Verzeichnis sind nur von Funktionen im Verzeichnis direkt darüber aufrufbar.
  - Funktionen in diesem Verzeichnis erscheinen nicht im Matlab-Suchpfad.
- Vorteile
  - Kann Code-Duplizierung vermeiden.
  - Mehrere Funktionen können auf dieselben Funktionen im `private`-Verzeichnis zugreifen.
- Nachteile
  - Zugriff nur von Funktionen aus möglich, die direkt oberhalb des jeweiligen `private`-Verzeichnisses liegen.

Stabilität von Schnittstellen

- Schnittstellen sind das, was der Anwender von einer Funktion „sieht“ und was er verwendet.
  - Innerhalb der Funktion kann man (fast) alles ändern.
  - Schnittstellen sollten möglichst früh definiert werden.
  - Nachdenken zahlt sich aus: vorausschauend planen.
- Änderungen der Schnittstellen nur in begründeten Fällen
  - Inkompatible Änderungen führen zu Fehlern in Code, der auf älteren Versionen der Funktion basiert.
  - Wann immer möglich abwärtskompatibel programmieren
  - Wichtig: Dokumentation inkompatibler Änderungen

☛ Greift voraus auf die Entwicklung eigener Programme.

Ausblick

Wie geht's weiter?

...Zeit für eigene praktische Arbeit...

Vorschau: Grundlegende Sprachkonzepte

- Syntax
- Operatoren
- Datentypen
- Entscheidungsstrukturen
- Schleifen