

# Anwendung von (Mathematica und) Matlab in der Physikalischen Chemie

## 7. Datenein- und -Ausgabe

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg



**UNI  
FREIBURG**

**Dr. Till Biskup**

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

## Motivation

### Daten importieren

Von Matlab unterstützte Formate  
Möglichkeiten des Datenimports  
„Low-level“-Routinen

### Daten exportieren

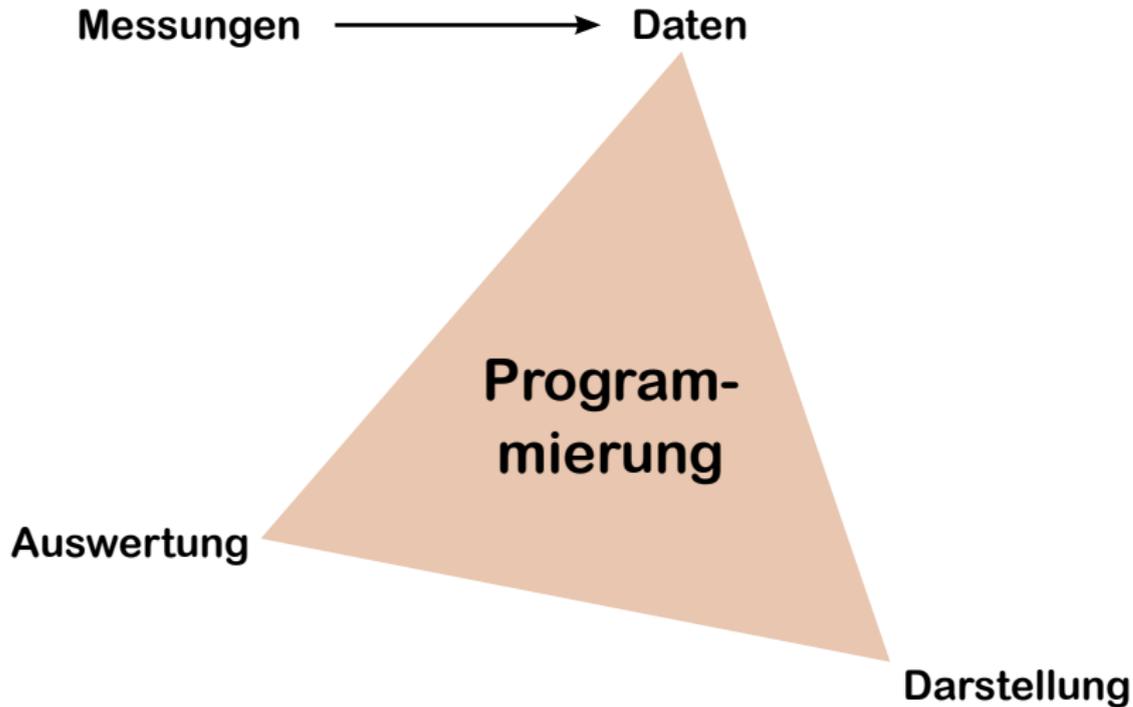
Von Matlab unterstützte Formate  
„Low-level“-Routinen

### Parsen von Textdateien

### Arbeit mit Binärdateien

# Motivation

Wir haben Daten gemessen



## Warum sich mit Datenein- und -Ausgabe beschäftigen?

- ▶ Wir haben Daten gemessen...
  - ...und wollen diese Daten auswerten.
  - Idealerweise liegen die Daten bereits elektronisch vor.
  - Oft müssen spezielle Formate importiert werden.
  
- ▶ Wir haben Daten ausgewertet...
  - ...und wollen die Ergebnisse der Auswertung speichern.
  - ...und wollen die Parameter der Auswertung speichern.
  
- ☞ Daten liegen i.d.R. in Formaten vor,  
die nicht direkt von Matlab verarbeitet werden können.
  
- ☞ Auswertungen sollten nicht im Matlab-internen Format  
gespeichert werden (Unabhängigkeit).

### Listing 1: ASCII-Export eines LS45-Fluoreszenzspektrometers

```
1 PE FL          SPECTRUM   ASCII      PEDS      1.60
2   -1
3 1A-01.SP
4 13/05/02
5 13:55:40.00
6 13/05/02
7 13:56:11.00
8
9
10 400.000000
11 1
12 #DATA
13 270.000000  7.640000
14 270.500000  7.712395
15 271.000000  7.775626
16 271.500000  7.830389
17 272.000000  7.877049
18 272.500000  7.925246
19 273.000000  7.979488
20 273.500000  8.035135
21 274.000000  8.080773
22 274.500000  8.139876
23 275.000000  8.216758
24 275.500000  8.314536
```

## Daten importieren

- ▶ Messdaten liegen meist in elektronischer Form vor
  - Oft proprietäre Formate
  - Meist Möglichkeit des Exports in ein „Standardformat“ (notfalls reiner Text)
  
- ▶ Datenimport in Matlab
  - Matlab unterstützt eine Reihe an Formaten.
  - Möglichkeiten des Imports: GUI/Kommandozeile
  
- ▶ Routine zum Einlesen von Messdaten
  - Routinevorgang: Daten werden häufig eingelesen
  - Eigene Routine für speziellen Datentyp oft hilfreich

## Von Matlab unterstützte Formate

- ▶ Matlab unterstützt nativ eine Reihe von Formaten.
  - (einfache) Textdateien
  - Standardformate (XML, CDF, HDF, netCDF, ...)
- ▶ Selbstgeschriebene Importroutinen für weitere Formate
  - Viele Geräte speichern in proprietären Formaten.
  - Matlab: „low-level“-Funktionen zum Rohimport

## Hinweis zu Textdateien (ASCII)

- ▶ Matlab akzeptiert nur den Punkt als Dezimaltrenner.
  - Selbstgeschriebene Importroutine für Dateien mit Komma

## Von Matlab unterstützte Formate

Format	Funktion
Matlab	load
Text (ASCII)	load, dlmread, csvread
Spreadsheet	xlsread
XML	xmlread
CDF, HDF, netCDF, ...	<b>diverse</b>
Bilder	imread
Audio	audioread
Video	VideoReader

 [Details in der Matlab-Dokumentation](#)

## Möglichkeiten des Datenimports

- ▶ Grundsätzlich zwei Herangehensweisen
  - 1 Grafisch über die Matlab-GUI
  - 2 Über die Kommandozeile (Befehlsaufruf)
  
- ▶ Grafisch über die Matlab-GUI
  - „Intuitiv“
  - Gut geeignet für Einzelfälle
  - Nicht automatisierbar
  
- ▶ Über die Kommandozeile (Befehlsaufruf)
  - Für Routineaufgaben
  - Bei Verwendung in Skripten/Funktionen
  - Automatisierbar

## Konkretes Beispiel: Import von Textdateien

- ▶ Ausgangspunkt
  - Textdateien mit Messdaten (z.B. ASCII-Export)
  - Punkt als Dezimaltrenner

- ▶ Zwei Funktionen

- 1 `load`
- 2 `importdata`

## Wiederholung: Dezimaltrennzeichen

- ▶ Matlab akzeptiert nur den Punkt als Dezimaltrenner.
  - Selbstgeschriebene Importroutine für Dateien mit Komma
  - Zeilenweises Einlesen
  - Ersetzen des Punktes durch Komma

## Import von Textdateien (ASCII): `load`

### ► Voraussetzungen

- Datei enthält *ausschließlich* Zahlenwerte
- Jede Reihe muss die identische Anzahl Spalten aufweisen

#### Listing 2: Beispiel einer mit `load` einlesbaren Textdatei

```
1 270.000000 7.640000
2 270.500000 7.712395
3 271.000000 7.775626
4 271.500000 7.830389
5 272.000000 7.877049
```

#### Listing 3: Aufruf der `load`-Funktion

```
data = load('filename');
```

## Import von Textdateien (ASCII): `importdata`

- ▶ Einsatzgebiet
  - Textdateien mit Kopfzeilen
  
- ▶ Voraussetzung
  - Länge des Dateikopfes ist bekannt
  - Daten: Identische Spaltenzahl für jede Reihe
  - Daten: Punkt als Dezimaltrennzeichen
  
- ▶ Parameter der Funktion
  - Dateiname
  - *Optional*: Trennzeichen für die einzelnen Datenspalten
  - *Optional*: Zahl der Kopfzeilen der Datei

## Import von Textdateien (ASCII): `importdata`

### Listing 4: Beispiel einer mit `importdata` lesbaren Textdatei

```
1 PE FL                SPECTRUM  ASCII      PEDS      1.60
2   -1
3 1A-01.SP
4 13/05/02
5 13:55:40.00
6 13/05/02
7 13:56:11.00
8
9
10 400.000000
11 1
12 #DATA
13 270.000000  7.640000
14 270.500000  7.712395
15 271.000000  7.775626
16 271.500000  7.830389
17 272.000000  7.877049
18 272.500000  7.925246
19 273.000000  7.979488
20 273.500000  8.035135
```

## Import von Textdateien (ASCII): `importdata`

### Listing 5: Aufruf der `importdata`-Funktion

```
1 % Aufruf ohne optionale Parameter
2 data = importdata('filename');
3
4 % Aufruf mit Spaltentrennzeichen (hier: Tabulator)
5 data = importdata('filename', '\t');
6
7 % Aufruf mit Spaltentrennzeichen und Anzahl Kopfzeilen
8 data = importdata('filename', '\t', 13);
```

### ► Wichtige Hinweise

- Zahl der Kopfzeilen kann nur *gemeinsam* mit dem Spaltentrennzeichen angegeben werden.
- Rückgabeparameter (`data`) ist ein `struct` Felder: `data`, `textdata`, `colheaders`

## „Low-level“-Routinen

- ▶ Einsatzgebiete
  - Textdateien mit Komma als Dezimaltrennzeichen
  - Dateien, die nicht mit anderen Matlab-Routinen lesbar sind
  
- ▶ Was bedeutet „low level“?
  - Direkte Operation auf Dateisystemebene
  - Einzelne Routinen für Öffnen, Lesen, Schließen
  - Große Verantwortung des Nutzers
  
- ▶ Routinen
  - `fopen/fclose` – Datei öffnen/schließen
  - `fgets/fgetl` – Textdatei zeilenweise lesen
  - `fread` – Binärdatei (bytestweise) lesen

## „Low-level“-Routinen: Ein einfaches Beispiel

### Listing 6: Einlesen einer Textdatei über „Low-level“-Routinen

```
1 % Open file
2 fid = fopen('textfile.txt');
3
4 % Initialise loop variable
5 k = 0;
6
7 % Read content of file line by line
8 while ~feof(fid)
9     % Increment loop variable
10    k = k+1;
11    % Read line of the textfile and store it in cell array
12    fileContents{k} = fgetl(fid);
13 end
14
15 % Close file
16 fclose(fid);
```

## „Low-level“-Routinen: Verantwortung des Nutzers

- ▶ Geöffnete Dateien immer auch schließen
  - Die Zahl der gleichzeitig geöffneten Dateien in einem Betriebssystem ist begrenzt.
  - Andere Programme können auf geöffnete Dateien nicht oder nur partiell zugreifen.
- ▶ Robusten Code schreiben
  - Mögliche Fehler abfangen (`try...catch`).
  - Dafür sorgen, dass in *jedem* Fall der Befehl `fclose` ausgeführt wird.
- ☞ Im Zweifel hilft nur noch ein Rechnerneustart...

### Ein Plädoyer für offene Datenformate

- ▶ Daten sind die Währung (experimenteller) Wissenschaft
  - Rohdaten immer aufbewahren
  - Auswertungen dokumentieren
  - Daten in zukunftssicheren Formaten abspeichern
  
- ▶ Kriterien für ein geeignetes Datenformat
  - quelloffen und lizenzfrei
  - ausreichend dokumentiert
  - verlustfrei (auch bzgl. numerischer Genauigkeit)
  - portabel
  - maschinenlesbar und parsbar
  
- ☞ Auswahl bzw. Entwicklung geeigneter Datenformate ist kein trivialer, aber wichtiger Aspekt von Wissenschaft.

## Von Matlab unterstützte Formate

- ▶ Matlab unterstützt nativ eine Reihe von Formaten.
  - (einfache) Textdateien – nur Zahlenwerte
  - Standardformate (XML, CDF, HDF, netCDF, ...)
- ▶ Selbstgeschriebene Exportroutinen für weitere Formate
  - z.B.: Textdateien mit Text (und Zahlen)
  - Matlab: „low-level“-Funktionen zum Rohexport

## Hinweis zu Textdateien (ASCII)

- ▶ Matlab kann nur Zahlenwerte als Textdateien exportieren
  - Selbstgeschriebene Exportroutine für andere Inhalte

## Von Matlab unterstützte Formate

Format	Funktion
Matlab	save
Text (ASCII)	csvwrite, dlmwrite
Spreadsheet	xlswrite
XML	xmlwrite
CDF, HDF, netCDF, ...	<b>diverse</b>
Bilder	imwrite
Audio	audiowrite
Video	VideoWriter

 [Details in der Matlab-Dokumentation](#)

## „Low-level“-Routinen

- ▶ Einsatzgebiete
  - Formate, die nicht nativ von Matlab unterstützt werden
  - Bsp.: Textdateien, die keine/nicht nur Daten enthalten
- ▶ Was bedeutet „low level“?
  - Direkte Operation auf Dateisystemebene
  - Einzelne Routinen für Öffnen, Schreiben, Schließen
  - Große Verantwortung des Nutzers
- ▶ Routinen
  - `fopen/fclose` – Datei öffnen/schließen
  - `fprintf` – Text (zeilenweise) schreiben
  - `fwrite` – Binärdaten schreiben

## „Low-level“-Routinen: Ein einfaches Beispiel

### Listing 7: Schreiben einer Textdatei über „Low-level“-Routinen

```
1 % Cell array with contents
2 toFile = {...};
3
4 % Open file for writing
5 fid = fopen('textfile.txt','w+');
6
7 % Write content of cell array "contents" line by line
8 for line = 1:length(toFile)
9     % Write line to the textfile
10    fprintf(fid,'%s\n',toFile{line});
11 end
12
13 % Close file
14 fclose(fid);
```

 Das ist kein robuster Code!

## „Low-level“-Routinen: Verantwortung des Nutzers

- ▶ Geöffnete Dateien immer auch schließen
  - Die Zahl der gleichzeitig geöffneten Dateien in einem Betriebssystem ist begrenzt.
  - Andere Programme können auf geöffnete Dateien nicht oder nur partiell zugreifen.
  
- ▶ Robusten Code schreiben
  - Mögliche Fehler abfangen (`try...catch`).
  - Dafür sorgen, dass in *jedem* Fall der Befehl `fclose` ausgeführt wird.
  
- ☞ Im Zweifel hilft nur noch ein Rechnerneustart...

## Plädoyer: Wozu eine Routine zum Textdateien schreiben?

- ▶ Dokumentation der Verarbeitungsschritte
  - Bei komplexeren (mehrschrittigen) Auswertungen
  - Parameter (z.B. für Regressionen) in Datei schreiben
  - Alles, was das Programm „kennt“, kann es mitschreiben.
- ☞ Viel weniger fehleranfällig als händisches Notieren...
- ☞ Idealerweise maschinenlesbares Format
  
- ▶ Zusätzliche Informationen zu den Daten
  - Im Dateikopf, ggf. als Kommentar
  - U.a. Spaltenbezeichnungen bei mehrspaltigen Daten
- ☞ Idealerweise Matlab-kompatibles Format

## Die Ausgangslage

- ▶ Parameter/Informationen oft elektronisch vorhanden
  - In separater Textdatei
  - Am Anfang von Datendateien
- ▶ Automatisiertes Auslesen ist Trumpf
  - Werden die Parameter vom Gerät selbst geschrieben, sind sie meist weniger fehleranfällig als das Laborbuch...
- ▶ Parameter mitunter essentiell für korrekten Import

## Was man gerne hätte...

- ▶ Automatisches Einlesen der Parameter
- ▶ „Verständnis“: Datenverarbeitung parameterabhängig

### Voraussetzungen

- ▶ Strukturierte Ablage der Parameter (Muster)
- ▶ Eineindeutigkeit (idealerweise)

### Vorgehen für Parameterdateien/-Blöcke

- ▶ Zeilenweises Einlesen
- ▶ Aufteilung des eingelesenen Strings
  - Parametername
  - Wert
- ▶ Ablage in (hierarchischer) Struktur erlaubt Zugriff
  - „Verständnis“ durch das Programm

## Beispiel für eine (einfache) Parameterdatei

### Listing 8: Ausschnitt aus einer Parameterdatei für Bruker-EPR-Daten

```
1 DOS Format
2 ANZ 1024
3 MIN -162.095703
4 MAX 194.904297
5 JSS 0
6 GST 3325.000000
7 GSI 150.000000
8 JUN G
9 JON weber
10 JDA 28.Jul.2014
11 JTM 09:36
12 JRE c:\winepr\tpu\superhq_2014_03_24.cal
13 JEX field-sweep
14 JNS 5
15 JSD 3
```

 Sofort Schlüssel-Wert-Paare erkennbar

## Bausteine für einen Parser

### Listing 9: Ausschnitt aus einer Routine zum Parsen der Parameterdatei

```
1 % Read text file contents, returning cell array
2 fileContent = readTextfile('<filename>');
3
4 % Assign empty structure for key-value pairs
5 parameters = struct();
6
7 % Parse contents line by line
8 for line = 1:length(fileContent)
9     % Split line at first whitespace character
10    [key,value] = strtok(fileContent{line});
11
12    % Add "key" as field to structure "parameters"
13    % with "value" as content of this field
14    % "strtrim" gets rid of leading/trailing whitespace
15    parameters.(strtrim(key)) = strtrim(value);
16 end
```

☞ Die Realität ist etwas komplizierter...

## Allgemeines Vorgehen

- ▶ Lineare Abarbeitung des Textes
  - Trennzeichen müssen bekannt sein (Leerzeichen etc.)
  - Aktuelle Ebene wird in Variable abgelegt.
  - Erlaubt Bearbeitung sehr großer Dateien  
(nicht durch den vorhandenen Arbeitsspeicher limitiert)
- ▶ Erster Schritt beim Übersetzen von Quellcode
- ☛ Parsen ist allgemein viel mächtiger,  
aber dann auch anspruchsvoller zu programmieren.

- ▶ Alle Daten sind (heutzutage) letztlich binär abgelegt.
  - Grundsätzlich Zugriff auf Byte-Ebene möglich
  - Erlaubt maximale Freiheit in der Art der Codierung.
  - Binärcode wesentlich kompakter als Text
  - Datentypen direkt abspeicherbar
  
- ▶ Grundsätzliches Vorgehen
  - Datei öffnen (`fopen`)
  - Datenstrom lesen/schreiben (`fread/fwrite`)
  - Datei schließen (`fclose`)
  
- ▶ Funktionen für das Bewegen im Datenstrom
  - Vorwärts springen (`fseek`)
  - Zurück zum Dateianfang (`frewind`)
  - Position in Datei (`ftell`)
  - Test auf Dateiende (`feof`)

## Schwierigkeit mit Binärdateien

- ▶ Einlesen nur möglich bei Kenntnis des Aufbaus
  - Komplexere Datentypen sind größer als ein Byte.
  - Kenntnis des Aufbaus erlaubt blockweises Einlesen und ggf. Konvertieren in entsprechende Datentypen.

## Ausnahme: Reine Datendateien

- ▶ Ausschließlich numerische Binärdaten
  - Standardformat: IEEE
  - Wird von Matlab (und den meisten Sprachen) unterstützt
- ▶ Gute Wahl für numerische Daten
  - Plattformunabhängig, universell unterstützt, kompakt
  - Nachteil: Parameter müssen anderweitig abgelegt werden



*...Zeit für eigene praktische Arbeit...*

## Vorschau: Grafiken

- ▶ Formatierung von Abbildungen
- ▶ Plot-Befehle in Matlab
- ▶ Abbildungen exportieren