

Anwendung von (Mathematica und) Matlab in der Physikalischen Chemie

8. Grafiken

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg



**UNI
FREIBURG**

Dr. Till Biskup

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

Motivation

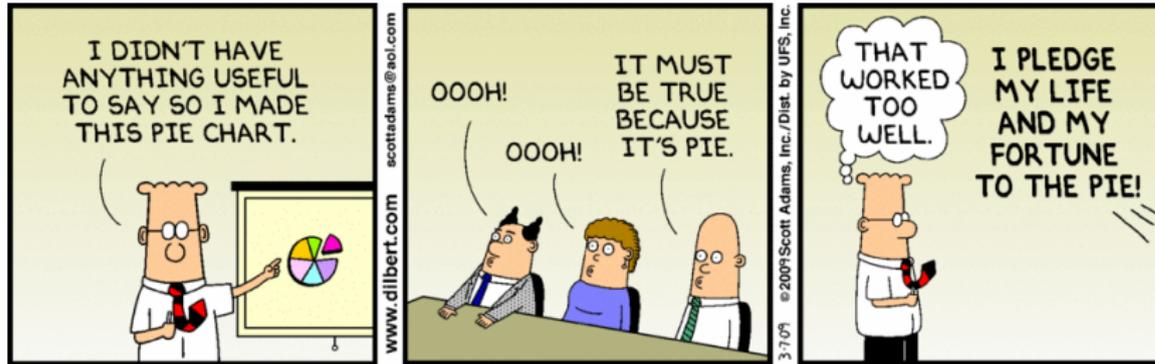
Formatierung von Abbildungen

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.

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{Text}}`“
 - tiefgestellter Text: „`_{\text{Text}}`“

- ▶ Hinweis zu Sonderzeichen
 - Matlab unterstützt (noch) kein Unicode
 - Sonderzeichen sind mitunter betriebssystemabhängig

- ▶ 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:

$$B = 1 \text{ mT}$$

Größe mit Wert

$$\{B\} = 1$$

Zahlenwert

$$[B] = \text{mT}$$

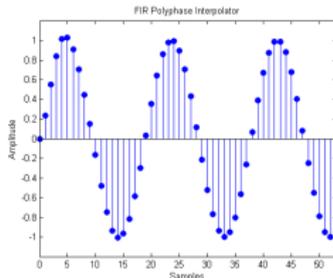
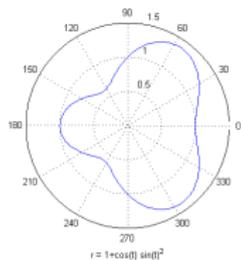
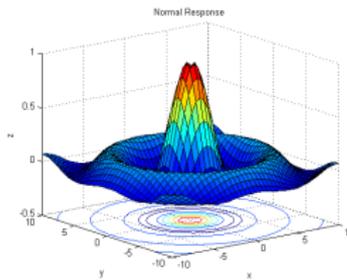
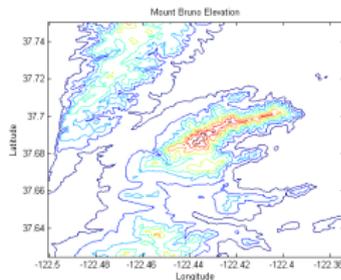
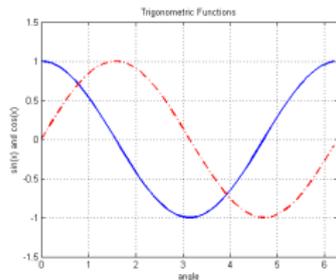
Einheit

Formatierung von Abbildungen

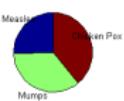
- ▶ Vorhandenen Platz sinnvoll nutzen
 - Matlab hat mitunter eigene Vorstellungen...
- ▶ Vergleich mehrerer Abbildungen
 - Achsen mit identischem Wertebereich
 - Achsenformatierungen konsistent
 - Daten ggf. (identisch) skalieren
 - Konsistentes Farbschema
- ▶ Abbildungen für Präsentationen
 - Achsenbeschriftung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

Plot-Befehle in Matlab

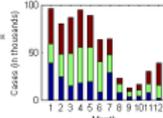
Galerie von Abbildungstypen in Matlab



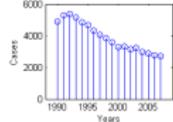
Childhood Diseases



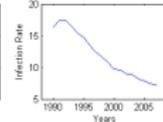
Childhood Diseases



Tuberculosis Cases



Tuberculosis Cases



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

```
1 % Define x,y vectors
2 x = 0:0.1:2*pi;
3 y = sin(x);
4
5 % Plot y = f(x)
6 plot(x,y);
7
8 % Same plot, but with different colouring
9 % "k" - black (from cmyk)
10 % "-" - solid line
11 plot(x,y,'k-');
12
13 % Same plot, but with different colouring and line style
14 % "r" - red (from rgb)
15 % "x" - crosses, no solid line connecting the data points
16 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

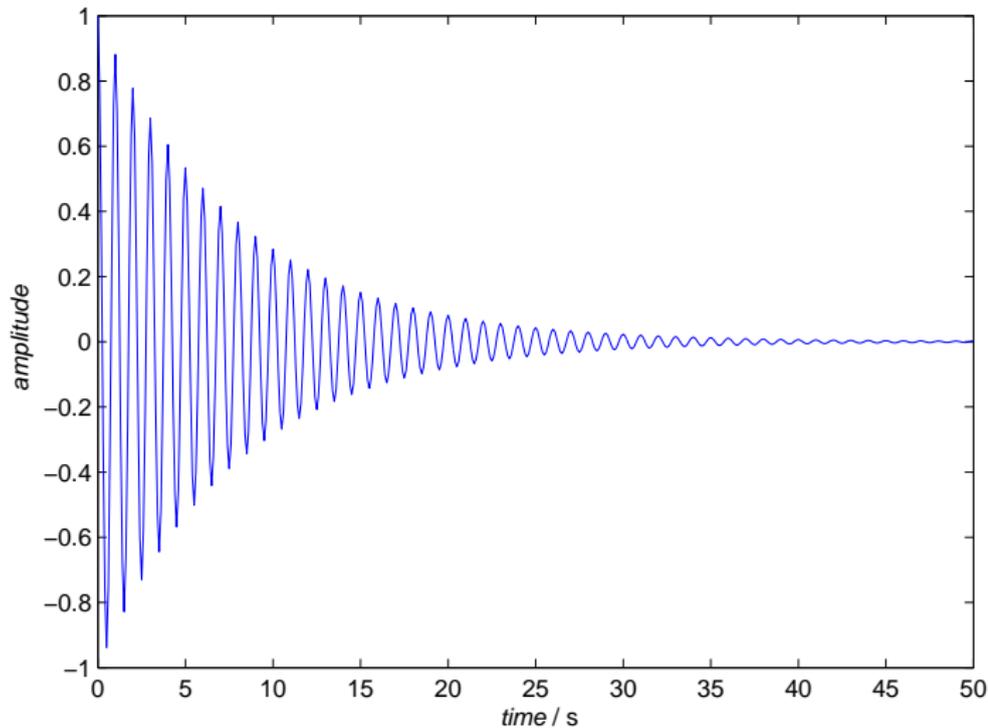
Listing 2: Beispiele für Achsenbeschriftungen (xlabel, ylabel)

```
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 L^AT_EX-Formatierung
 - kursiver Text: „{\it Text}“

Plot-Befehle in Matlab

Grundlegende Plot-Befehle in Matlab



Grundlegende Plot-Befehle in Matlab: legend

Listing 3: Beispiele für eine Legende (legend)

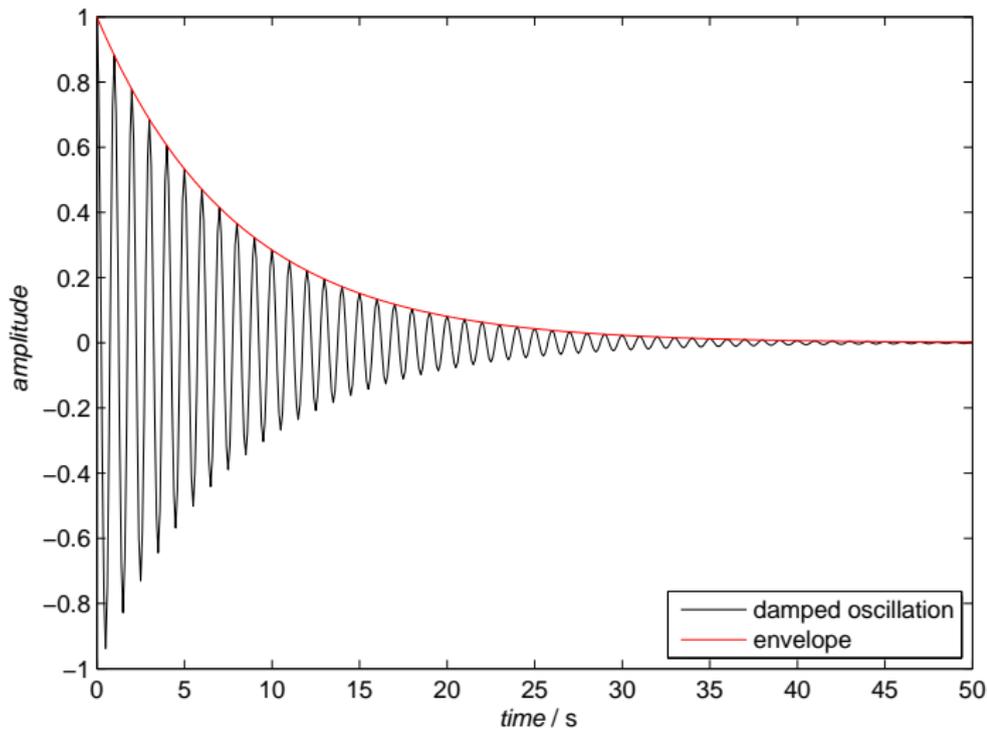
```
1 % Plot damped oscillation and envelope
2 plot(...
3     t, A, 'k-', ...
4     t, exp(-0.02*t*(2*pi)), 'r-' ...
5     );
6
7 % Plot legend
8 legend({'damped oscillation', 'envelope'});
9
10 % Plot legend at specific location
11 legend({'damped oscillation', 'envelope', 'Location', 'SouthEast'});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

► Position der Legende

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

Plot-Befehle in Matlab

Grundlegende Plot-Befehle in Matlab



Problem

- ▶ Jeder `plot`-Befehl löscht das aktuelle Grafikenfenster.

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

Warum Abbildungen automatisiert exportieren?

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

Warum Abbildungen als PDF-Dateien exportieren?

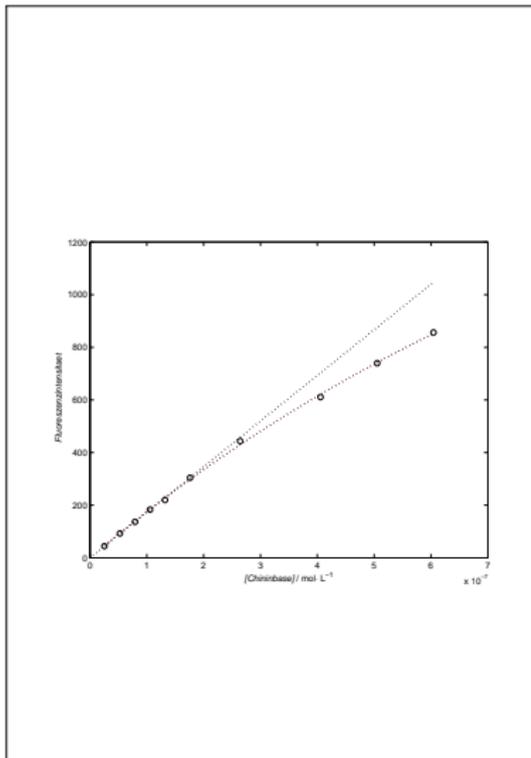
- ▶ PDF-Dateien sind (in der Regel) vektorisiert, können also beliebig skaliert und einfach nachbearbeitet werden.

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



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...



...Zeit für eigene praktische Arbeit...

Vorschau: [Lineare und nichtlineare Regression](#)

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