

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

## 12. Ausblick: Matlab im echten Leben

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

Dr. Till Biskup

Institut für Physikalische Chemie  
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg  
Wintersemester 2017/2018



**UNI  
FREIBURG**

## 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

### 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.

Automatisierung von Routineaufgaben

Toolboxen: Satz aufeinander bezogener Funktionen

Interaktive Datenauswertung (Nutzerschnittstellen)

Ausblick: Programmieren größerer Projekte

## 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

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)



### 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.

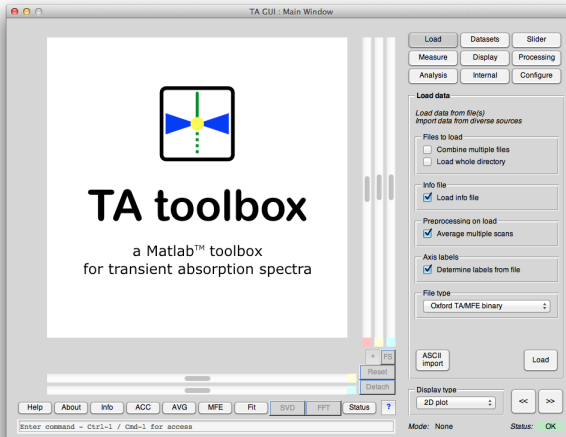
- ▶ *De-facto*-Standard für die EPR-Spektrensimulation
- ▶ Komplette kommandozeilenbasiert
- ▶ Implementiert viele verschiedene Algorithmen
- ▶ Gemeinsame Schnittstelle für alle Simulationen

# Allgemeines zu Matlab

Was man mit Matlab u.a. alles machen kann



## 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)

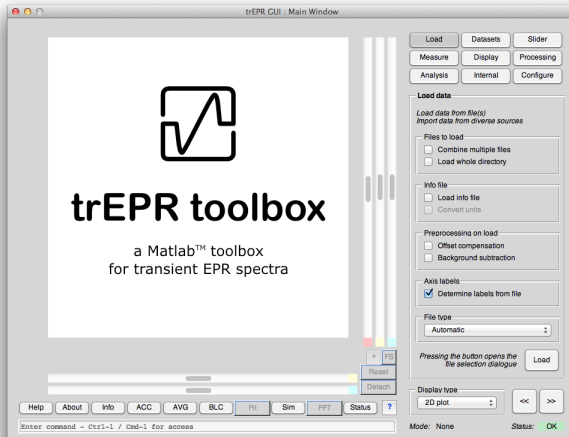
- ▶ Grafische Anordnung von Bedienelementen
- ▶ Reihenfolge der Ereignisse unvorhersehbar
- ▶ Nichtlinear: beliebige Entscheidungsmöglichkeiten
- ▶ Große Freiheit: Alles (implementierte) jederzeit möglich

## Beispiel: Textbasierte Nutzerschnittstelle (CLI)

### Listing 1: Programm zur Simulation von EPR-Spektren

```
1 Do you wish to simulate or to fit?
2 [f] Fit
3 [s] Simulate
4 [q] Quit
5 Your choice (default: [f]): s
6
7 Do you wish to load experimental data?
8 [y] Yes
9 [n] No
10 Your choice (default: [n]): n
11
12 The simulation parameters currently chosen:
13 g          2.0200    2.0200    2.0200
14 D          3900.0000
15 E          130.0000
16 mwFreq     9.7000
17 nPoints    361.0000
18 Range      260.0000    440.0000
19 Temperature 0.0000    0.4500    0.5500
20 Method     matrix
```

## Beispiel: Grafische Nutzerschnittstelle (GUI)



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

— *Anonymous*





### 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.

### Vorlesung PC V: „Programmierkonzepte in der Physikalischen Chemie“



👉 im Wintersemester 2018/19 👈

<http://www.till-biskup.de/de/lehre/programmierkonzepte/>

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