



Institut für Physikalische Chemie

**Methodenkurs „Anwendungen von Mathematica und Matlab in der Physikalischen Chemie“  
im Wintersemester 2017/2018**

Prof. Dr. Stefan Weber, Dr. Till Biskup

— Teil 1: Matlab —

---

### **Motivation und Struktur des Kursteils „Matlab“**

Der Kursteil „Matlab“ richtet sich an Studenten, die noch keinen oder nur wenig Kontakt mit Matlab im Speziellen und Programmierung im Allgemeinen hatten. Deshalb werden zunächst grundlegende Konzepte von Programmiersprachen (mit dem Fokus auf Matlab) eingeführt.

Durch den gesamten Kursteil zieht sich als Motivation die Verarbeitung und Auswertung experimenteller Daten. Zunächst werden die dafür notwendigen Grundlagen besprochen und erarbeitet, später steht die eigenständige Programmierung der Auswertung(en) im Rahmen eines kleinen Projektes im Mittelpunkt.

### **Material zum Kurs**

Weiteres Material zum Kurs – u.a. die Folien und die für die Programmierung der Auswertung notwendigen Daten – wird auf der zum Kurs gehörigen Internetseite bereitgestellt:

<https://www.till-biskup.de/de/lehre/mathematica-matlab/ws2017/>

### **Vorgesehener Ablauf**

Jeder Kurstag ist in zwei Blöcke zu je drei Stunden Dauer (Vormittag und Nachmittag) unterteilt, getrennt von einer Mittagspause, in der die Kursteilnehmer eigenständig weiter arbeiten können.

Jede Lektion besteht aus einer Vorstellung der jeweiligen Konzepte, gefolgt von der praktischen Umsetzung des Besprochenen anhand konkreter Aufgaben.

Ein großer Teil des dritten Kurstages dient der eigenständigen Erarbeitung eines konkreten kleinen Projektes zur Datenauswertung durch die Kursteilnehmer. Hier können und sollen große Teile der vorher gemeinsam erarbeiteten Konzepte angewandt werden.

**Hinweis:** Die Tage vier und fünf des Kurses widmen sich der Vorstellung von und praktischer Arbeit mit Mathematica und werden von Prof. Dr. Stefan Weber gestaltet.

Hinweis: Der folgende Ablaufplan dient lediglich der ersten Orientierung.

---

**Tag 1: Montag, 26.02.2018**

---

<b>Uhrzeit</b>	<b>Lektion</b>	<b>Inhalte</b>
09:00	1	Motivation; Inhalte und Struktur des Kurses
	2	Einleitung – Matlab
10:30		<i>Pause</i>
10:45	3	Interaktive Kommandozeile Praktische Arbeit: Übungsblatt 1
12:00		<i>Mittagspause</i>
13:00	4	Skripte und Funktionen Praktische Arbeit: Übungsblatt 2
14:30	5	Grundlegende Sprachkonzepte Praktische Arbeit: Übungsblatt 3
16:00		<i>Ende des Kurstages</i>

---

**Tag 2: Dienstag, 27.02.2018**

---

<b>Uhrzeit</b>	<b>Lektion</b>	<b>Inhalte</b>
09:00	6	Grundlegende Dokumentation Praktische Arbeit: Übungsblatt 4
11:00	7	Datenein- und -Ausgabe
12:00		<i>Mittagspause</i>
13:00		Praktische Arbeit: Übungsblatt 5
14:30	8	Grafiken Praktische Arbeit: Übungsblatt 6
16:00		<i>Ende des Kurstages</i>

---

**Tag 3: Mittwoch, 28.02.2018**

---

<b>Uhrzeit</b>	<b>Lektion</b>	<b>Inhalte</b>
09:00	9	Lineare und nichtlineare Regression Praktische Arbeit: Übungsblatt 7
10:30	10	Projekt: Vorstellung und Pflichtenheft Praktische Arbeit am Projekt: Übungsblatt 8
12:00		<i>Mittagspause</i>
13:00		Praktische Arbeit am Projekt (Fortsetzung)
14:30	11	Projekt: Diskussion der Ergebnisse und Präsentation möglicher Lösungen
15:00	12	Ausblick und Feedback
16:00		<i>Ende des Kurstages</i>

---