



MATLAB für Naturwissenschaftler

1. Motivation
Inhalte und Struktur des Kurses

Till Biskup

Lehrstuhl für Physikalische Chemie und Didaktik
Universität des Saarlandes



Motivation

- Warum dieser Kurs?
- Warum MATLAB?
- Ein reales Beispiel

Inhalte und Struktur des Kurses

- Wie läuft der Kurs ab?
- Inhalte
- Material



Physikalische Chemie

Verständnis der Grundlagen und Hintergründe

- ▶ Theoretische Konzepte
 - oftmals analytische Lösungen komplexer Gleichungen
- ▶ Analyse experimenteller Daten
 - Prozessierung und Darstellung der Daten
 - Anpassung von (numerischen) Simulationen
- 👉 Unterstützung durch entsprechende Computerprogramme ist mittlerweile Standard

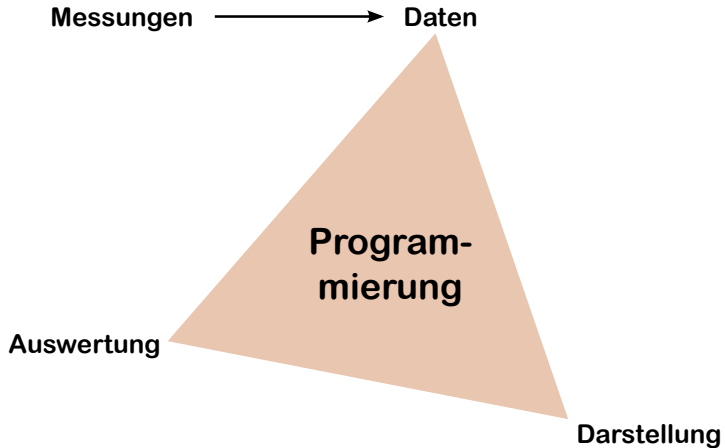


Anwendung von MATLAB in der Physikalischen Chemie

- ▶ Anwendung
 - MATLAB praktisch kennenlernen
 - Befähigung, MATLAB in Eigenregie weiter zu verwenden
- ▶ Physikalische Chemie
 - Fragestellungen der Physikalischen Chemie im Fokus
 - Letztlich auf viele Fragestellungen anwendbar

Motivation zur Verwendung von MATLAB

- ▶ Wir haben Daten gemessen und wollen diese Daten auswerten (verstehen) und (sinnvoll) darstellen.





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



Reales Beispiel: Fluoreszenz-Versuch aus einem PCG

- ▶ Ausgangslage
 - Daten wurden alle gemessen
 - Daten liegen als Textdateien (ASCII) vor

- ▶ Zielstellung
 - Vollständige Auswertung gemäß Fragestellung
 - Abbildungen, die den Assistenten zufriedenstellen (und den wissenschaftlichen Standards entsprechen)

- ▶ Vorgehen
 1. Pflichtenheft erstellen (was muss getan werden?)
 2. Notwendige Grundlagen von MATLAB aneignen
 3. Auswertung gemäß Pflichtenheft in MATLAB programmieren



Überblick: Der Fluoreszenz-Versuch aus einem PCG

1. Anregungs- und Emissionsspektren
 - Spektren darstellen
 - Maximum hervorheben
2. Konzentrationsabhängigkeit der Fluoreszenz
 - Intensität als Funktion der Konzentration darstellen
 - Lineare und nichtlineare Kurvenanpassung
3. Bestimmung des Chiningehalts von Tonic Water
 - Lineare Regression
4. Dynamische Fluoreszenzlöschung (Stern-Volmer)
 - Lineare Regression mit festem y-Achsen-Abschnitt



Anwendung ... in der Physikalischen Chemie

- ▶ Anwendung
 - MATLAB praktisch kennenlernen
 - Befähigung, das Programm eigenständig zu verwenden
- ▶ Physikalische Chemie
 - Fragestellungen der Physikalischen Chemie im Fokus
 - Letztlich auf viele Fragestellungen anwendbar

Motivation für den Kurs

- ▶ Auswertung des vorgestellten Versuchs aus dem PCG
- ▶ Übertragung auf aktuelle eigene Fragestellungen
- ▶ Hilfe zur Selbsthilfe: eigenständig weitermachen



Organisatorische Details

- ▶ **Zeiten**
 - vier Tage
 - 13–18 Uhr
 - Zwischendurch flexible Pausen

- ▶ **Anwendung im Fokus**
 - Zugang zu den Programmen kommt durch ihre Nutzung.
 - Zu jedem einzelnen Block gibt es praktische Übungen.
 - Die Dozenten sind in dieser Zeit für Rückfragen verfügbar.



Hinweis zu den praktischen Übungen

- ▶ Die Übungszettel sind tendenziell zu umfangreich.
 - Nicht frustrieren lassen, wenn man nicht fertig wird.
 - Einladung zur eigenständigen Weiterbeschäftigung
- ▶ Die Dozenten sind im Kurs für Rückfragen verfügbar.
 - Nutzen Sie die Chance...
 - Die praktische Arbeit steht im Mittelpunkt.
- ▶ Es wird (am Ende des Kurses) Lösungen geben.
 - Möglichst umfangreiche und kommentierte Lösungen
 - Wichtig: Es gibt viele mögliche Lösungen, die hier vorgestellten sind nicht notwendigerweise optimal.



Inhalte

1. Motivation ✓
2. Einleitung: MATLAB
3. Interaktive Kommandozeile
4. Skripte und Funktionen
5. Grundlegende Sprachkonzepte
6. Grundlegende Dokumentation
7. Datenein- und -Ausgabe
8. Grafiken



Inhalte

9. Schritte in die Praxis:
Vorstellung des Projekts

10. Praktische Arbeit

11. Diskussion der Ergebnisse
Präsentation möglicher Lösungen

12. Ausblick

☛ Schritte 1 bis 8 dienen der Vorbereitung von
und der Befähigung zur eigenen praktischen Arbeit.



Zusätzliches Material

- ▶ Folien
 - Zum Nachschlagen (insbesondere Teile 2 bis 8)
- ▶ Daten aus dem Fluoreszenz-Versuch
 - Grundlage für die eigene praktische Arbeit
- ▶ Weiterführende Informationen und Links
 - Hilfe zur Selbsthilfe

Homepage zur Veranstaltung

<https://www.till-biskup.de/de/lehre/matlab/ss2019/>

...und auf Moodle



...gleich geht's weiter

Vorschau: **Einleitung: MATLAB**

- ▶ Allgemeines zu MATLAB
- ▶ Stärken und Schwächen von MATLAB
- ▶ MATLAB – eine praktische Einführung
- ▶ Hilfe zur Selbsthilfe