

Programmierkonzepte in der Physikalischen Chemie

2. Allgemeines

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg



UNI
FREIBURG

Dr. Till Biskup

Institut für Physikalische Chemie
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg
Wintersemester 2013/14

„Kenne Deine Programmiersprache“

- Dokumentation zur Hand haben und nutzen
- Weitere Informationsquellen kennen

Der richtige Editor

Verzeichnisstrukturen

„Matlab in fünf Minuten“

- Bezugsquellen und Verfügbarkeit
- Das Matlab-Fenster
- Hilfe und Dokumentation
- Toolboxen

Satz

Man muss nicht alles wissen, sollte aber wissen, wo es steht.

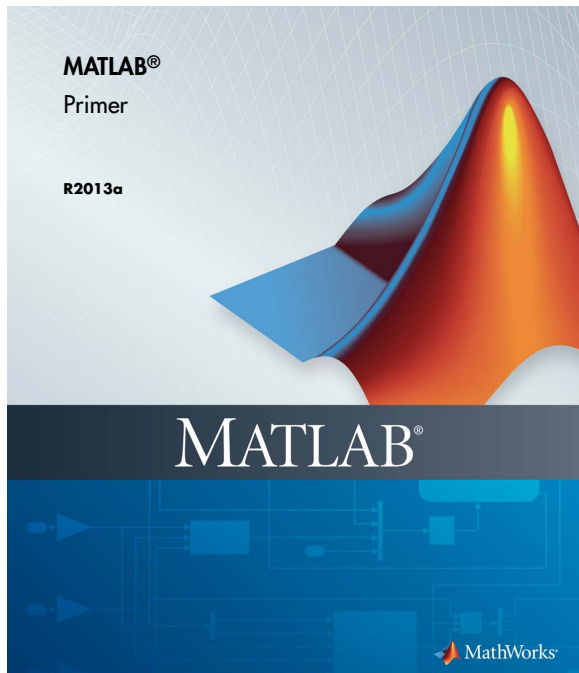
- ▶ Programmieren lernen ist wie eine Sprache lernen.
 - ▶ Grundlegende Sprachkonzepte müssen bekannt sein.
 - ▶ Details können in der Dokumentation nachgeschlagen werden.
-
- ☞ Kenntnis der vorhandenen Dokumentation und wie man sie nutzt.

„Kenne Deine Programmiersprache“

Dokumentation zur Hand haben und nutzen



UNI
FREIBURG



Inhalte

- ▶ Quick Start
- ▶ Language Fundamentals
- ▶ Mathematics
- ▶ Graphics
- ▶ Programming

Es gibt eine Vielzahl **weiterer Informationsquellen**:

- ▶ Bücher und gute Webseiten zu Programmierkonzepten
- ▶ Einführende Veranstaltungen an der Universität
- ▶ Kollegen, Betreuer, Freunde
- ▶ Matlab: Matlab Central, Matlab File Exchange

☞ Programmieren grundlegend zu erlernen geht am Besten alleine mit einem guten Buch.

☞ Eigeninitiative und Interesse sind essentiell.

Vorteile moderner Editoren

- ▶ automatische Codevervollständigung
- ▶ Codeüberprüfung während der Eingabe
- ▶ Hilfe aus dem Editor heraus erreichbar
- ▶ Syntaxhervorhebung („Syntax highlighting“)
- ▶ automatische Codeeinrückung
- ▶ Zusammenfalten von Codeteilen („Code folding“)
- ▶ Refaktorisierung („Refactoring“)

☞ Der Matlab-Editor unterstützt die meisten der genannten Kriterien mittlerweile recht gut.

Codeüberprüfung im Matlab-Editor

- ▶ Der Matlab-Editor zeigt drei Zustände an.
(alles in Ordnung, Warnungen, Fehler)
- ▶ Für Warnungen und Fehler können
zusätzliche Hinweise angezeigt werden.
- ▶ Häufig wird für Warnungen und Fehler eine
automatische Behebung angeboten („Autofix“).
- ▶ Warnungen können ignoriert/abgeschaltet werden
(im Einzelfall sinnvoll).

☞ Warnungen und Fehler sollten *in jedem Fall*
ernst genommen und deren Ursache behoben werden.

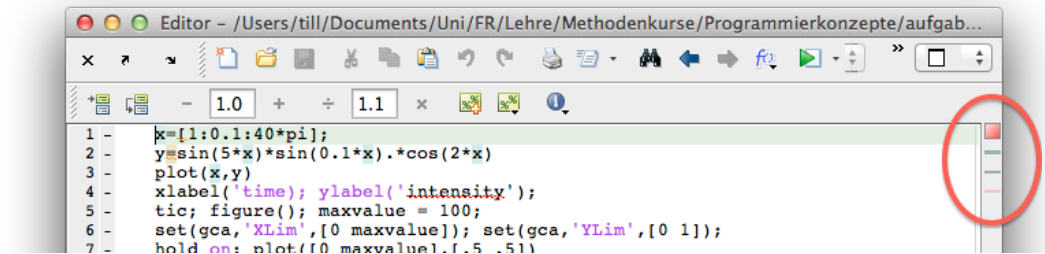
Der richtige Editor

Codeüberprüfung während der Eingabe

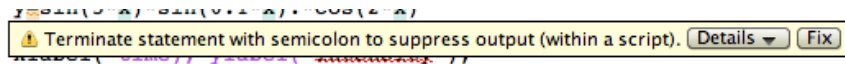


UNI
FREIBURG

Codeüberprüfung im Matlab-Editor



Autofix im Matlab-Editor



Codeeintrückung: Allgemeine Aspekte

- ▶ Automatische Codeeintrückung erhöht die Lesbarkeit.
- ▶ Beginn und Ende von Schleifen sind einfach erkennbar.
- ☞ Saubere Codeeintrückung ist nicht optional.

Codeeintrückung im Matlab-Editor

- ▶ Der Editor beherrscht automatische Codeeintrückung.
- ▶ Codebereiche können im Nachhinein automatisch eingerückt werden.



Refactoring (Refaktorisierung, Restrukturierung)

Fortentwicklung einer Programmierschnittstelle, die keine Änderungen in den Anwenderprogrammen nach sich zieht.

Beispiele

- ▶ Umbenennung von Variablen und Funktionen
- ▶ Auslagerung von Code in eigene Funktionen
- ☞ Der Matlab-Editor beherrscht momentan nur rudimentäres Refactoring (Variablenumbenennung).

- ☞ Moderne Editoren sind „Integrierte Entwicklungsumgebungen“ (IDEs)

Beispiele weiterer IDEs

- ▶ Eclipse, IntelliJ, NetBeans
 - sehr modular
 - für eine Vielzahl an Programmiersprachen verwendbar
- ▶ Kile, TeXshop, ...
 - spezifisch für die Verwendung mit \LaTeX

- ☞ Letztlich ist die Wahl des Editors bzw. der IDE eine Frage persönlicher Vorlieben.

Warum Strukturen?

- ▶ Matlab hat einen (manuell zu pflegenden) Suchpfad
 - Matlab kennt nur, was in diesen Verzeichnissen liegt.
- ▶ Struktur sorgt für Übersichtlichkeit
 - Übersicht ist wichtig für die Nachvollziehbarkeit.
 - Übersichtlichkeit kann manche Dokumentation ersetzen.
 - Übersichtlichkeit erleichtert die Übernahme der Pflege des Codes durch andere Personen.
- ☞ Nachvollziehbarkeit und Reproduzierbarkeit sind wichtiges Gebot in den Wissenschaften.
- ☞ Struktur ist letztlich **Verpflichtung, nicht Option.**

Grundprinzipien

- ▶ Trennung von Routinen und Daten
- ▶ Jede Toolbox in einem eigenen Verzeichnis
- ▶ Alle Matlab-Funktionen möglichst in einem Verzeichnisbaum

Struktur innerhalb einer Toolbox

- ▶ Zusammengehörige Funktionen in ein Verzeichnis
- ▶ Dokumentation und Beispiele

Verzeichnisstruktur einer (realen) Toolbox:

- IO allgemeine Ein- und Ausgaberoutinen
- processing Verarbeitung der Rohdaten
 - analysis Analyse der vorverarbeiteten Rohdaten
- CLI textbasierte Nutzerschnittstelle
- GUI graphische Nutzerschnittstelle
- common allgemeine Funktionen
- internal interne Funktionen (Installationsroutine, ...)
- doc Dokumentation
- examples Beispiele



Inhalte

- ▶ Bezugsquellen (Landeslizenz)
- ▶ Übersicht über das Matlab-Fenster
- ▶ Hilfe und Dokumentation
- ▶ Konzept der Toolboxes (kommerziell und frei)

- ☛ Keine Einführung in Matlab und dessen grundlegende Sprachkonzepte.
- ☛ Dafür gibt es einen eigenen Methodenkurs:
„Anwendungen von Mathematica und Matlab in der PC“



- ▶ Matlab ist in Baden-Württemberg über eine **Landeslizenz** an allen Universitäten verfügbar.
- ▶ Die Lizenz erlaubt die Installation auf **privaten Computern**.
- ▶ Zum Bezug muss auf der MathWorks-Seite ein persönliches Konto angelegt werden.
 - Dazu ist eine Uni-Email-Adresse zwingend notwendig.
- ▶ Details auf den Seiten des Rechenzentrums

Seite des Rechenzentrums

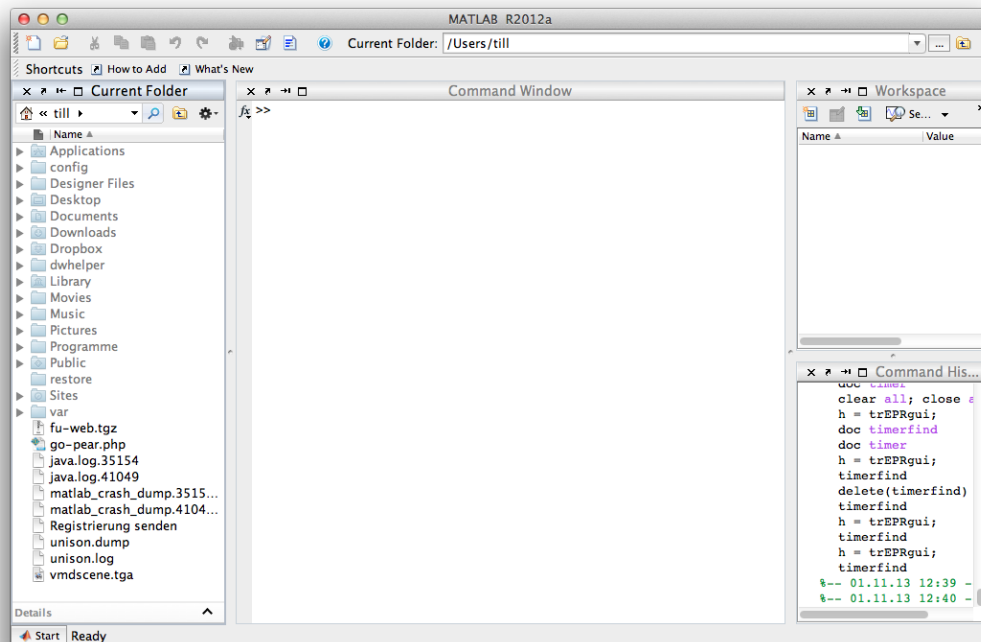
`https://www.rz.uni-freiburg.de/services/beschaffung/software/matlab-landeslizenz`

„Matlab in fünf Minuten“

Das Matlab-Fenster (2012a)



UNI
FREIBURG

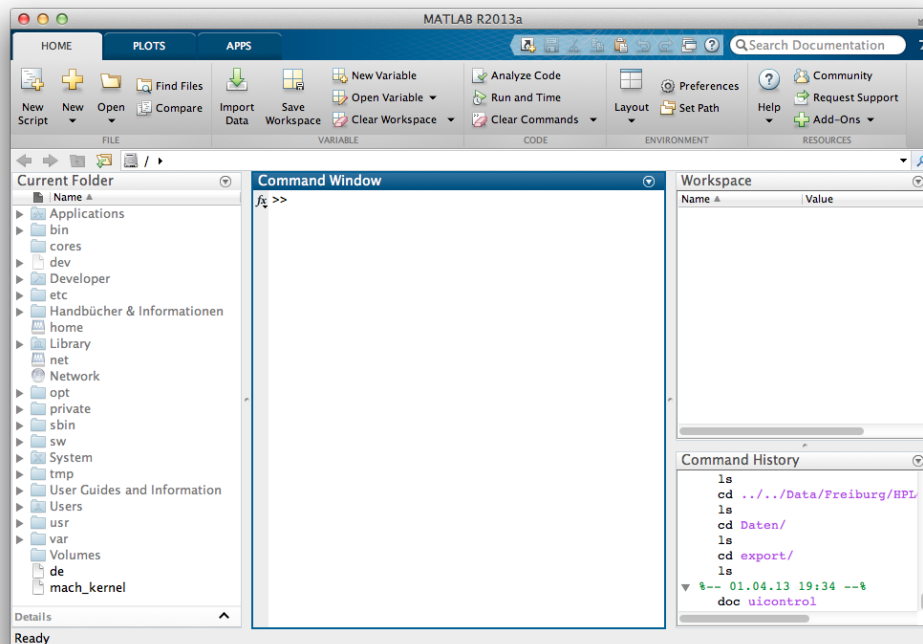


„Matlab in fünf Minuten“

Das Matlab-Fenster (2013a)



UNI
FREIBURG



Elemente des Matlab-Fensters

- ▶ Command Window
 - „Kommandozeile“
 - Das Fenster, in das Befehle direkt eingetippt werden.
- ▶ Workspace
 - Übersicht über die momentan definierten Variablen
- ▶ Current Folder
 - Anzeige des aktuellen Verzeichnisses
- ▶ Command History
 - Übersicht über die Befehlshistorie

☞ Es gibt darüber hinaus noch weitere Fenster und Elemente, z.B. den Editor, Abbildungen, ...



Offline verfügbar

- ▶ Eingebaute Hilfe in Matlab
 - `help <Befehlsname>` (auf der Kommandozeile)
 - `doc <Befehlsname>` (eigenes Fenster, ausführlicher)
- ▶ Handbücher zu Matlab und kommerziellen Toolboxes
 - mittlerweile nur noch elektronisch als PDF-Dokumente
 - Zugriff nur mit Konto bei der MathWorks-Seite
- ▶ Bücher
- ▶ Kollegen, Betreuer, Freunde



Online verfügbar

- ▶ MathWorks-Webseite
 - Webcasts (kleine Filme) zur Einführung
 - Matlab Central
 - Matlab File Exchange
- ▶ <http://undocumentedmatlab.com/>
 - Richtet sich eher an Experten
 - Sehr viele Interna zu Matlab
- ▶ (manche) Kollegen, Betreuer, Freunde
- ▶ <http://lmgtfy.com/>

„Matlab in fünf Minuten“

Hilfe und Dokumentation: Matlab Central



UNI
FREIBURG

MATLAB CENTRAL

Search: MATLAB Central

Create Account | Log In

File Exchange Answers Newsgroup Link Exchange Blogs Trendy Cody Contest MathWorks.com

Trendy
Connect the dots

Cody
Let the games begin

MathWorks Careers

Find Code Solve Problems

File Exchange
Recent Files

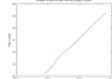
- Image Registration App *Brett Shoelson*
- Maximum Weight Independent Set Instance *Richard*
- Multidimensional path-generator *Erwin Torrao Dassen*
- MIMO a/amouti *Leila nasraoui*
- psotoolbox *Sandeep Solanki*
- CIRCLE FIT IN HEART SHAPE *Prashant Somani*

Cody
Recent Problems

- Kaggle: Reverse Game of Life - Single Move to One Cell Case *Richard Zapor*
- Grid traversal *Ziko*
- Finding neighbors of [-1:1] in a matrix.... *Chris E.*

MATLAB Answers
Recent Questions

- I need matlab code for probabilistic box counting (PBC) algorithm. *Vimal Shrivastava*
- Help plotting interpolation ploynomial. *Yuval*
- how to scan a hex file and then search for the required byte and display *Prabhav*
- Simscape - transforming a rotational motion into an oscillating transational motion *Rano*
- How to fix code? *John Foster*
- how to convert grayscale image to rgb image *tausheed jan*

Trendy
Popular Plots

Files on the File Exchange
Ned Gulley

Blogs
Recent Updates

- Guy and Seth on Simulink *Don't Engineer The Hyperloop in a Vacuum* 30 Oct 2013
[View archive](#)
- MATLAB Spoken Here *MathWorks Support Solutions in MATLAB Answers* 29 Oct 2013
[View archive](#)
- Cleve's Corner *The Intel Hypercube, part 1* 28 Oct 2013
[View archive](#)
- File Exchange Pick of the Week *Visualizing the frequency distribution of 2-Dimensional Data* 25 Oct 2013
[View archive](#)
- Doug's MATLAB Video Tutorials *Custom interactive graphics in MATLAB* 24 Oct 2013

<http://www.mathworks.com/matlabcentral/>

„Matlab in fünf Minuten“

Hilfe und Dokumentation: Matlab File Exchange



UNI
FREIBURG

MATLAB[®] CENTRAL

Search: File Exchange

Create Account | Log In

File Exchange | Answers | Newsgroup | Link Exchange | Blogs | Trendy | Cody | Contest | MathWorks.com

File Exchange

Files
Categories
Authors
Tags
Comments

Submit a File
About File Exchange

Search Files | Advanced Search

Browse

- Functions
- Apps
- Examples
- Simulink Models
- Videos
- Instrument Drivers
- Hardware Support Packages

Most Recent (see all)

Image Registration App by Brett Shoelson

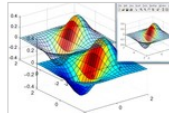


★★★★★

UI environment for registering a Moving image to a Fixed image

Most Popular (see all)

export_fig by Oliver Woodford



★★★★★

Exports figures nicely to a number of vector & bitmap formats.

<http://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/>

Ein Wort zu „Google-Lösungen“

- ▶ Code immer erst verstehen und dann einsetzen
- ▶ Schwarm-Intelligenz sorgt meist nicht für bessere Code-Qualität.
- ▶ Google verhilft zu schnellen Lösungen – aber:
Oft sind „offizielle“ oder spezifische Quellen besser.

☞ Viele Wege führen nach Rom.
Man kann von anderen viel lernen, sollte sich aber immer die Mühe machen, deren Code zu verstehen.

- ▶ 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 viel 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
- ▶ ...

Ein Wort zu kommerziellen Toolboxen

- ▶ Die Landeslizenz bietet Zugriff auf alle Matlab-Toolboxen.
 - ▶ Die Landeslizenz ist vorerst zeitlich limitiert.
 - ▶ Die Landeslizenz gilt nur für Baden-Württemberg.
 - ▶ Eine (akademische) Einzelplatzlizenz für eine Toolbox kostet ca. 300–400 EUR zzgl. jährlicher Lizenzkosten.
-
- ☞ Sparsamer Einsatz kommerzieller Toolboxen erhöht die Portabilität und Wiederverwertbarkeit von Code.
 - ☞ Für den [AK Weber](#) gilt: Nur Optimization und Global Optimization Toolbox verwenden.