

# 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.

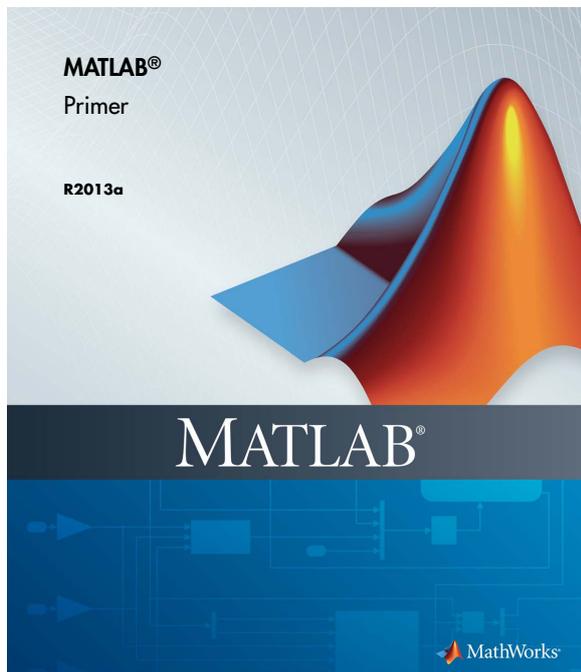
- ▶ Programmieren lernen ist wie eine Sprache lernen.
  - ▶ Grundlegende Sprachkonzepte müssen bekannt sein.
  - ▶ Details können in der Dokumentation nachgeschlagen werden.
- ☞ Kenntnis der vorhandenen Dokumentation und wie man sie nutzt.

# „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.

# Der richtige Editor

Was muss ein guter Editor können?



## 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

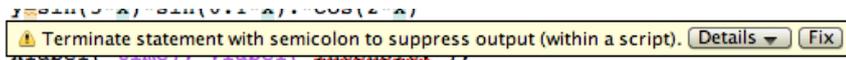


UNI  
FREIBURG

## Codeüberprüfung im Matlab-Editor

```
1 - x=[1:0.1:40*pi];  
2 - y=sin(5*x)*sin(0.1*x).*cos(2*x)  
3 - plot(x,y)  
4 - xlabel('time'); ylabel('intensity');  
5 - tic; figure(); maxvalue = 100;  
6 - set(gca,'XLim',[0 maxvalue]); set(gca,'YLim',[0 1]);  
7 - hold on; plot([0 maxvalue].f.5 .5))
```

## 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  $\text{\LaTeX}$

- 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 Toolboxen (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“



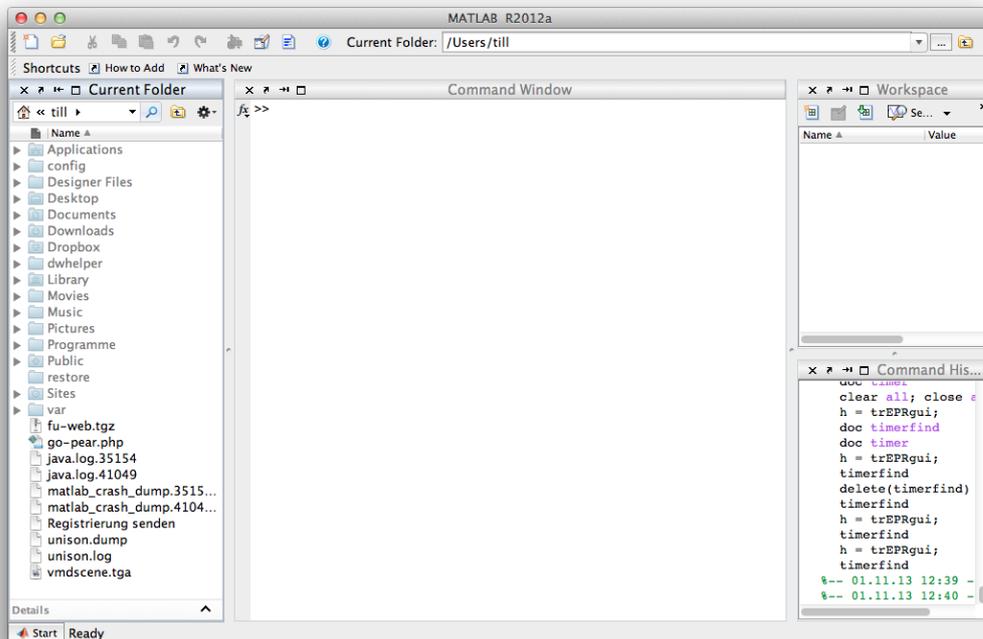
- ▶ Matlab ist in Baden-Württemberg über eine **Landeslizenz** an allen Universitäten verfügbar.
- ▶ Die Lizenz erlaubt die Installation auf **privaten Computern**.
- ▶ Zum Bezug muss auf der MathWorks-Seite ein persönliches Konto angelegt werden.
  - Dazu ist eine Uni-Email-Adresse zwingend notwendig.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

### Seite des Rechenzentrums

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

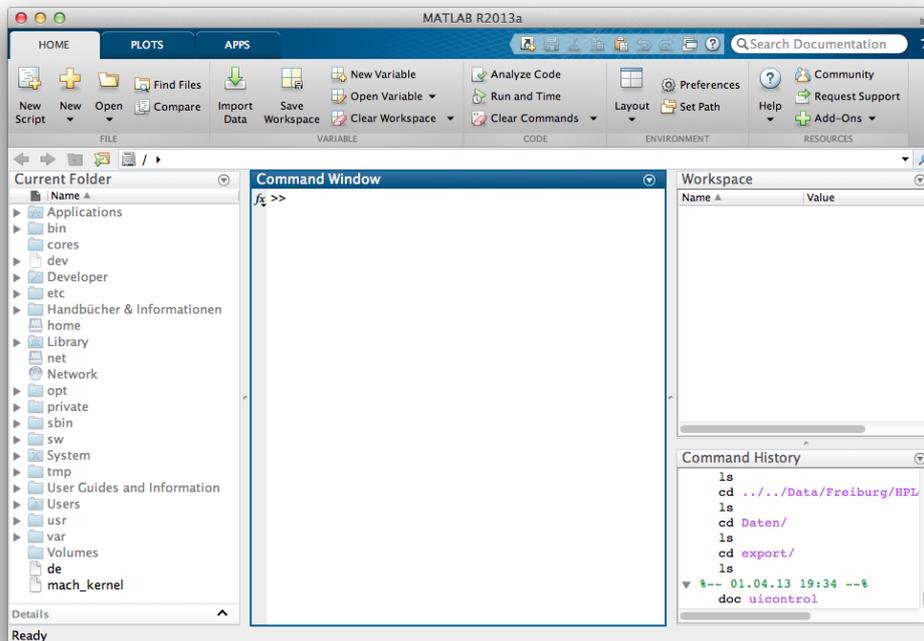
# „Matlab in fünf Minuten“

## Das Matlab-Fenster (2012a)



# „Matlab in fünf Minuten“

## Das Matlab-Fenster (2013a)





### 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 Toolboxen**
  - 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://lmgty.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 Torrea Dassen*
- MIMO alamouti *Leila nasraoui*
- psToolbox *Sandeep Solanki*
- CIRCLE FIT IN HEART SHAPE *Prashant Somani*

### MATLAB Answers

Recent Questions

- I need matlab code for probabilistic box counting (PBC) algorithm. *Vimal Shrivastava*
- Help plotting interpolation ploynomial. *Yusuf*
- 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*

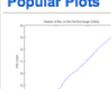
### Cody

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.*

### 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



### File Exchange

#### Files

[Categories](#)  
[Authors](#)  
[Tags](#)  
[Comments](#)

[Search Files](#)

[Advanced Search](#)

#### Browse



[Functions](#)



[Apps](#)



[Examples](#)



[Simulink Models](#)



[Videos](#)



[Instrument Drivers](#)



[Hardware Support Packages](#)

#### Most Recent [\(see all\)](#)

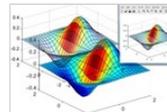
[Image Registration App](#) by Brett Shoelson



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.