

Final Assignment: Interaktive Visualisierung von NMR Spectroscopy Daten

Ziele

Das letzte Assignment dient zur Vertiefung des gesamten Stoffes aus der Vorlesung und soll Ihnen ebenfalls die Möglichkeit geben eigene Ideen in die Aufgabenstellung einzubringen.

Wie in realen Projekten ist die Aufgabenstellung dieses mal nicht genau definiert. Ein Teil der Aufgabe ist es also, gegebene Anforderungen zu analysieren und dafür eine Lösung bzw. geeignete Implementierung zu entwickeln.

Lesen Sie zuerst die Aufgabenstellung komplett durch, verstehen Sie die darin geforderten Anforderungen, planen Sie danach Ihre Vorgehensweise und machen sich danach an die Implementierung bzw. an das Design!

Materialien & Organisation

- Zusammen mit der Praktikumsaufgabe erhalten Sie ein Bild im png-Format eines Ethyl Acetate Moleküls ($C_4H_8O_2$). Dazu passend die Datei `Data.csv`, welche die Messdaten (x/y-Plot) eines NMR Spektrums des Moleküls enthält.

Diese beiden Dateien dienen Ihnen als Grundlage zur Visualisierung der Messdaten. Neben dieser Dateien gibt es im Praktikum-Downloadbereich in Moodle noch weitere Dateiformate für die Messreihe, sofern Sie nicht mit dem csv-Format arbeiten möchten.

- Für dieses Praktikum erhalten Sie 30% der Endnote der Veranstaltung. Bereiten Sie sich also rechtzeitig darauf vor und testen Sie Ihre App auf evtl. Fehler/Abstürze.
- Das Praktikum geht über zwei Termine. Nutzen Sie den ersten Termin für die grundlegenden Funktionen, z.B. das Einlesen der csv-Datei, Vorbereiten des "Plot-Views", o.ä. Bringen Sie zu diesem Termin ebenfalls Ihre eigenen Ideen zur Erweiterung der App mit. Wir werden diese Ideen während des ersten Termins besprechen, so dass Sie diese für den zweiten Termin umsetzen können.

Sollten Sie Ihre eigenen Ideen ohne eine vorherige Absprache implementieren wollen, so können Sie dies gerne tun (nicht empfohlen!). Ein Testat können Sie aber nur am zweiten Termin erhalten.

- Nach dem erfolgten Testat am zweiten Termin, laden Sie Ihr Projekt gepackt im tar.gz-Format in Moodle hoch. Halten Sie sich beim Dateinamen an folgende Konvention: `Nachname1-Nachname2-FinalAssignment.tar.gz`. Die Abgabe wird bis spätestens 01.07.2016 um 20:00 Uhr erwartet, danach schließt Moodle die Abgabemöglichkeit automatisch!
- Es steht Ihnen frei Bibliotheken/Frameworks für die Aufgabenstellung zu nutzen. Diese sollten frei erhältlich sein und bereits in Ihr Xcode-Projekt integriert sein. Ihr Projekt muss sich in jedem Fall durch das Auslösen von "Build" in Xcode bauen lassen.
- Beachten Sie die Links weiter unten, die Ihnen vielleicht ein paar Hilfreiche Ressourcen zum besseren Verständnis und Umsetzung der Aufgabe liefern.
- In jedem Fall sollten Sie den Code den Sie schreiben auch vollständig verstanden haben. **Beide Praktikumssteilnehmer kennen die Implementierung.** Es erfolgt keine pauschale Gruppentestierung

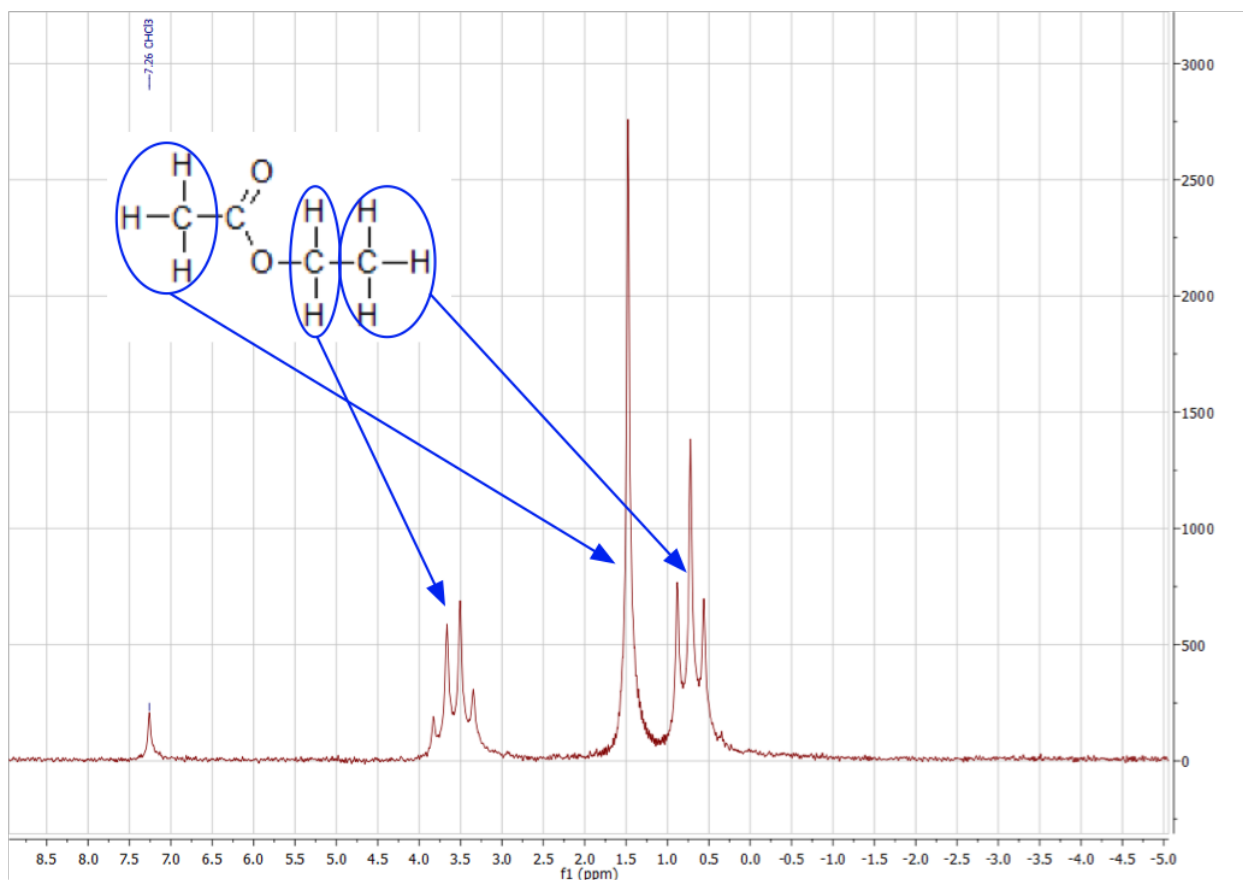
oder Benotung. Stellen Sie klar, auch im Code, wer welche Features implementiert hat. Rechnen Sie damit, dass beide Teilnehmer im Praktikum detailliert nach der Implementierung gefragt werden, auch wenn Sie als Team auftreten.

- Sollten Sie fremden Code bzw. Bibliotheken verwenden, so geben Sie die Quelle an!

Aufgaben & Anforderungen

Nuclear magnetic resonance spectroscopy (kurz NMR) ist eine Technik die es Chemikern erlaubt die Eigenschaften von Molekülen zu untersuchen. Dabei ist das Spektrum ein Graph, welcher die Menge der Energie (auch Signal) einer bestimmten Wellenlänge oder Frequenz zeigt.

Die x-Achse des Graphen zeigt dabei den sog. chemical shift in ppm, während die y-Achse die zugehörige Signalintensität zeigt. Die unterschiedlichen Typen der Wasserstoffatome und deren Kopplung zu den anderen Gruppen werden im Graph als Singlet, Triplet oder Quartet dargestellt.



Im Gegensatz zu den bisherigen Aufgaben, gibt es dieses mal keine Step-by-Step Anleitung zur Umsetzung der App. Es liegt an Ihnen wie Sie die App genau umsetzten, gestalten und welche Features Sie zur Notenaufbesserung neben der Mindestanforderung einbauen.

- Die Mindestanforderung zum bestehen des Praktikums lauten wie folgt:

- App ist lauffähig auf einem iPad Air im Landscape und Portrait Mode
 - Darstellung des Moleküls und dazugehörigen Plot ohne weitere Details (aber mit Achsen und Beschriftung). Plotdaten und Molekül werden aus Dateien eingelesen
 - Wenn eine der drei markierten Wasserstoff-Kopplungen mit dem Finger angeklickt wird, wird diese und das entsprechende Singlet, Triplet oder Quartet farblich markiert (z.B. Änderung der Plotfarbe, Hintergrundfarbe, etc.). Wenn mehrere Kopplungen ausgewählt sind, werden unterschiedliche Farben verwendet. Wird eine Kopplung erneut angeklickt, so wird die farbliche Markierung wieder entfernt.
 - App ist optisch und bzgl. Useability intuitiv gestaltet.
 - App UI reagiert zu jeder Zeit (wird also nie blockiert)
 - Keine Memory Cycles
 - Gutes, objekt-orientiertes Design. Einhalten der üblichen Konventionen (private, public, Variablenbenennung, usw.)
 - Code compiliert ohne Warnings. Ausnahme: Code aus fremden Bibliotheken
 - App stürzt zu keinem Zeitpunkt ab
- Stellen Sie weiterhin sicher, dass Ihre App pünktlich zum Praktikumsbegin gebaut werden kann. Im Praktikum steht Ihnen ein iPad Air zur Verfügung auf dem Sie Ihre App installieren können. Dieses können Sie für Ihre Vorführung verwenden. Den Code können Sie wie bisher auf einem Laborrechner oder eigenen Notebook zeigen.
- Alle weiteren Verbesserungen der App sind Ihnen überlassen. Hier ein paar wenige Vorschläge:
- App läuft auf iPads anderer Formate und auf iPhones
 - Molekül wird nicht als Bild sondern als (Vektor-?) Grafik gezeigt (es gibt Bibliotheken zum zeichnen von chemischen Strukturen)
 - Einfach Erweiterbar zum Hinzufügen von anderen Molekülen/Messungen
 - Gamification - eine Art Quizz zur Raten von Zuteilungen von Kopplungen, inkl. Punktsystem und Bewertung
 - Import der Messdaten und Molekülstruktur in eine Core-Data Datenbank
 - Zustand der App sollte gespeichert werden
 - Darstellung des Moleküls als 3D Grafik, ggf. auch Rotierbar
 - Plot kann verschoben und gezoomt werden
 - Möglichkeit zwei Messreihen übereinander zu plotten und so zu vergleichen (fiktive Messdaten sind ok für diese Funktion)
 - Berechnung des Integrals des Singlets, Triplets, Quartets
 - usw...

Generell gilt, Ihrer Kreativität sind keine Grenzen gesetzt, seien Sie kreativ und bringen Sie Ihre User dazu Ihre App so häufig wie möglich zu nutzen und dabei Spaß zu haben!

Links

- [The Swift Programming Language](#)
- [Nuclear magnetic resonance spectroscopy - Wikipedia](#)
- [ios Charts \(Generieren von Plots\)](#)
- [SwiftChart \(Generieren von Plots\)](#)
- [iMolecular Visualisation System - iMVS](#)
- [SwiftCSV](#)

Die aufgeführten Links sind nicht vollständig und dienen Ihnen nur zum Einstieg. Sollte Ihnen eine bestimmte Funktionalität fehlen und Sie möchten diese nicht selbst implementieren, machen Sie sich auf die Suche nach einer entsprechenden Bibliothek.