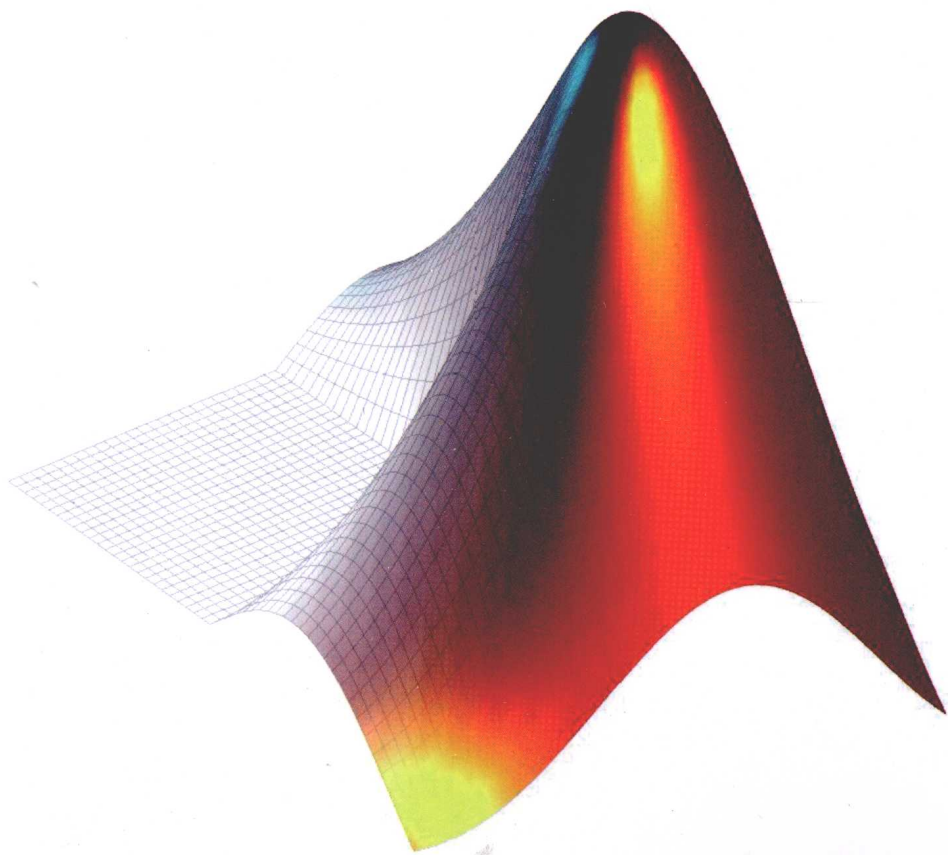


基于MATLAB的 化学及环境信息 可视化技术

许国根 编著



清华大学出版社

许国根 编著

基于MATLAB的化学及环境信息 可视化技术

清华大学出版社
北京

内 容 简 介

本书以 MATLAB 为工具讲解图形图像技术及其在化学及环境科学中的应用。

第 1 章为 MATLAB 图形技术, 主要介绍 MATLAB 中与图形技术相关的一些常用的命令; 第 2 章为 MATLAB 图像技术, 主要介绍 MATLAB 中与图像处理技术相关的命令; 第 3 章为虚拟现实, 主要介绍如何用 MATLAB 实现虚拟现实世界; 第 4 章为高维数据可视化技术, 主要介绍表示化学信息特别是高维数据的图示技术和方法; 第 5 章为环境信息可视化, 主要介绍基于 MATLAB 的环境地理信息的开发; 第 6 章为化学计算可视化, 主要介绍如何应用 MATLAB 进行化学计算可视化。

本书可作为高等院校化学、环境专业学生的计算机及软件学习的教材; 也可作为其他专业学生学习 MATLAB、程序设计等的参考书; 工程技术人员可以利用本书掌握 MATLAB 图形图像等相关方面的技术。

版权所有, 侵权必究。侵权举报电话: 010-62782989 13701121933

图书在版编目(CIP)数据

基于 MATLAB 的化学及环境信息可视化技术/许国根编著. --北京: 清华大学出版社, 2010. 8
ISBN 978-7-302-22816-5

I. ①基… II. ①许… III. ①计算机辅助计算—软件包, Matlab—应用—化学
IV. ①TP391.75 ②O6

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2010)第 097048 号

责任编辑: 柳 萍 洪 英

责任校对: 王淑云

责任印制: 李红英

出版发行: 清华大学出版社

<http://www.tup.com.cn>

社 总 机: 010-62770175

投稿与读者服务: 010-62776969, c-service@tup.tsinghua.edu.cn

质 量 反 馈: 010-62772015, zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn

地 址: 北京清华大学学研大厦 A 座

邮 编: 100084

邮 购: 010-62786544

印 刷 者: 北京富博印刷有限公司

装 订 者: 北京市密云县京文制本装订厂

经 销: 全国新华书店

开 本: 185×260 印 张: 13.5 字 数: 342 千字

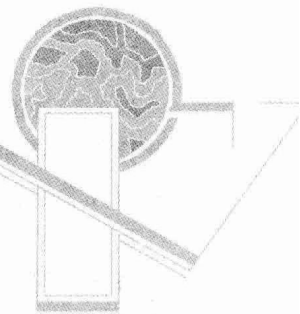
版 次: 2010 年 8 月第 1 版 印 次: 2010 年 8 月第 1 次印刷

印 数: 1~3000

定 价: 28.00 元

前言

FOREWORD



化学及环境信息可视化技术是指利用计算机图形、图像表示化学学科及环境学科中的化学物质的结构、性能与变化规律及各类性质测量值与计算结果的特征。

化学是研究化学物质结构及其性能的一门科学。为了能更形象地表示化学物质的结构、性能及其变化规律,需要大量的图形和图表。化学图形图像及可视化技术就是研究如何开发或使用现有的软件来满足图形和图表制作的要求。例如,如何用三维图像或动画形象地表示三维空间中的原子轨道、有机化合物的结构(包括立体结构与构象)、有机化合物反应机理等;如何用图表或图示表示各种测量参数特别是多维数据,以使人们更容易、更直观地观察其特征。图形图像及可视化技术可以帮助科技工作者理解及掌握较为抽象的化学概念,分析及解释多维数据结构,并从中寻找科学规律。例如,化学污染物在水等环境介质中的分布、转化及运动等特性如果以图形、曲线表达,能清楚反映出其运动规律,更能为一般的民众所了解,也更有利于环境管理者作出科学的决策。在化学及环境科学研究中这样的例子举不胜举。

专门用来进行绘图的软件很多,例如 Photoshop、CorelDRAW、AutoCAD 等。另外还有一些软件,如 Flash、3D MAX、Maya 等。它们除了能够完成绘图与建模外,还提供强大的动画制作功能。除了这些专用软件,诸多的计算机语言也都提供了画图功能及制作动画的函数。

虽然多种计算机软件可以用来进行图像的表示及科学计算可视化,但其中功能齐全、强大且使用方便的首推美国 MathWorks 公司于 1967 年推出的 MATLAB。

本书选择 MATLAB 作为绘图软件,通过大量的实例讲解如何用 MATLAB 来绘制化学各学科分支中二维、三维乃至多维的图形、图像以及动画制作,如何用 MATLAB 来模拟绘图软件的功能。

之所以选择 MATLAB 语言,是因为这种语言提供了基于矩阵的二维、三维绘制函数;在图形窗口上和语言中也提供了变换视点等功能,用户可以直观地从各个角度观察绘制出的三维物体。长期以来,在三维图形学中,算法实现是一个难点,选择其他语言,由于三维算法的复杂性而不易被人们所掌握。

MATLAB 还提供了对标量数据和矢量数据进行可视化的函数,可以绘制各类二维、三维以及一些特殊的图形,如等值线图、矢量图、等值面图、等帽盖图、剖面图、流锥图、流沙图、流带图、流管图和卷曲图等;MATLAB 也提供了四维数组函数用来存储序列图像,这些功能非常有利于处理三维图像图形学中的一些算法。

MATLAB 还具有强大的数值计算功能,并有在多个领域得到广泛应用的工具箱。利用丰富的各类函数及工具箱的功能可以对有关问题进行科学计算并直接输出计算结果和精美的

图形,并且利用图形的各种性质表征二维、三维乃至多维的数据。这些优点是一般的软件所不具备的。

MATLAB 还有一个显著的特点是它易学易用。由于 MATLAB 的编程运算与人进行科学计算的思路和表达方式完全一致,用户可在几十分钟的时间内学会 MATLAB 的基础知识,在短短几个小时的使用中就能初步掌握它。

正是基于 MATLAB 所具有的功能,本书采用 MATLAB 来进行化学相关图形图像的表达及科学计算的可视化。本书共 6 章。前 2 章为 MATLAB 图形、图像技术,主要介绍与图形图像及可视化技术相关的 MATLAB 基础知识;后 4 章为化学中各种图形图像的表达及相应的科学计算可视化,主要介绍如何利用 MATLAB 绘制各类图形图像及实现科学计算可视化。书中多用实例解释及说明问题,归纳多于演绎,以便使本书更加灵活、易读、易懂及实用。通过本书的学习,读者如果能掌握化学图形图像及科学计算可视化技术,作者将感到莫大的欣慰。

编写本书的目的:一是使学生掌握基于 MATLAB 的图形图像技术、动画生成原理和算法,对各个层次的图形图像技术有个贯通的理解;二是让学生掌握一些实用的图形图像生成技术,使其可以在化学、环境科学及其他学科的实际研究中得到应用。

书中的程序都是由作者自己设计完成的。

本书在出版过程中得到了清华大学出版社的大力支持,编辑柳萍对本书提出了许多宝贵的意见,在此一并表示衷心的感谢。

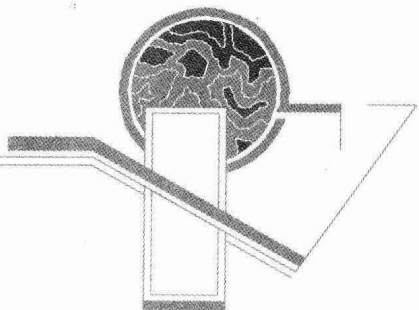
由于作者水平所限,书中难免存在错误,敬请读者批评指正。

作 者

2010 年 7 月于西安

目 录

CONTENTS



第 1 章	MATLAB 图形技术	1
1.1	图形绘制	1
1.1.1	二维绘图	1
1.1.2	三维绘图	3
1.1.3	特殊坐标轴的图形函数	4
1.1.4	绘图工具界面	4
1.2	句柄图形	7
1.2.1	图形对象	7
1.2.2	图形属性	8
1.2.3	核心图形对象	11
1.2.4	标注对象	20
1.2.5	组对象	22
1.2.6	GUI 对象	23
1.3	图形对象的操作与控制	26
1.3.1	句柄操作	26
1.3.2	图形对象的控制	27
1.4	图形的颜色和光影	31
1.4.1	MATLAB 中的颜色	31
1.4.2	光影	33
1.5	视图技术	35
1.5.1	视点设置	35
1.5.2	坐标轴方向上的显示比率	36
1.6	图形用户界面(GUIDE)	37
1.6.1	打开 GUIDE 编辑器	37
1.6.2	使用 GUIDE 创建 GUI 界面	38
1.6.3	设置对象属性	40
1.6.4	GUI 对象的分布和对齐	41
1.6.5	设计菜单	41
1.6.6	对象浏览器	43

1.6.7	回调函数	44
1.6.8	运行	45
1.7	GUI对话框	46
1.7.1	菜单对话框	46
1.7.2	信息对话框	47
1.7.3	问题对话框	48
1.7.4	输入对话框	49
1.7.5	列表选择对话框	49
1.8	动画制作技术	51
1.8.1	常用的三维变换	51
1.8.2	基于图像操作的动画制作	53
1.8.3	逐帧动画、形变动画与路径动画	53
1.8.4	添加声音	54
第2章	MATLAB 图像技术	56
2.1	常用图像格式	56
2.2	图像类型	57
2.3	图像数据	57
2.4	显示图像	58
2.5	图像运算	60
2.5.1	图像代数运算	60
2.5.2	图像的逻辑运算	60
2.5.3	图像的几何运算	61
2.6	图像的变换技术	62
2.6.1	傅里叶变换	62
2.6.2	离散余弦变换(DCT)	62
2.6.3	Radon 变换	64
2.6.4	小波变换	64
2.7	图像分析	65
2.7.1	像素值及其统计	65
2.7.2	分析图像	66
2.7.3	纹理分析	67
2.8	图像调整	68
2.8.1	灰度调整	68
2.8.2	去噪	69
2.9	图像恢复	69
2.10	特殊区域处理	70
2.10.1	区域的指定	70
2.10.2	特定区域填充	70
2.10.3	特定区域滤波	70

2.11	邻域和块处理	71
2.11.1	滑动邻域处理	71
2.11.2	分离块操作	72
2.11.3	列处理	72
2.12	二值数学形态学运算	72
2.12.1	膨胀与腐蚀	72
2.12.2	开启与闭合	73
2.12.3	指定形态运算	73
2.13	二值图像特征提取	74
2.14	数学形态学重建	74
2.15	图像处理工具箱的应用	77

第 3 章	虚拟现实	84
3.1	VRML——虚拟现实建模语言	84
3.1.1	VRML 基本概念	85
3.1.2	VRML 文件通用语法	86
3.2	V-Realm Builder2	87
3.3	简单节点.....	89
3.4	复杂节点.....	93
3.5	库操作.....	96
3.6	交互功能的实现.....	97
3.6.1	三维形体对浏览者动作的感知	97
3.6.2	传感器节点	97
3.6.3	VRML 动画	98
3.7	MATLAB 虚拟现实函数	102
3.7.1	接口函数.....	102
3.7.2	虚拟世界操作函数.....	102

第 4 章	高维数据可视化技术.....	103
4.1	可视化技术概述	103
4.1.1	数据预处理.....	104
4.1.2	高维数据降维.....	104
4.2	高维数据的图形表示方法	106
4.2.1	轮廓图.....	106
4.2.2	雷达图.....	109
4.2.3	树形图.....	110
4.2.4	三角多项式图.....	112
4.2.5	散点图.....	113
4.2.6	星座图.....	115
4.2.7	脸谱图.....	117

4.2.8	诺模图	121
4.3	可视化模式识别	128
4.4	投影寻踪	131
4.4.1	投影寻踪指标	132
4.4.2	偏离正态分布程度的确定	133
4.4.3	投影寻踪模型	134
4.5	标量数据和矢量数据的可视化函数	142
4.5.1	流图	142
4.5.2	矢量数据的流线图	142
4.5.3	流带图	143
4.5.4	流沙动画	144
4.5.5	剖面图	144
第5章	环境信息可视化	146
5.1	地理信息系统	146
5.1.1	地理信息系统的功能	146
5.1.2	环境地理信息系统	147
5.1.3	环境GIS的应用及组成	148
5.2	环境地理信息系统的开发	148
5.2.1	环境GIS功能需求分析	149
5.2.2	环境GIS系统设计	150
5.3	环境质量评价与环境监测信息管理子系统	151
5.3.1	空气质量信息管理GIS	152
5.3.2	水环境质量信息管理GIS	154
5.4	环境污染模拟与预测子系统	156
5.4.1	大气环境影响预测与模拟系统	156
5.4.2	大气环境影响预测与模拟系统的实现	159
5.4.3	水环境影响预测与模拟系统	160
5.4.4	一维水质模型预测与模拟系统的实现	162
第6章	化学计算可视化	164
6.1	分析化学计算可视化	164
6.1.1	酸碱滴定	164
6.1.2	配位滴定	172
6.1.3	氧化还原滴定	176
6.2	无机化学计算可视化	178
6.2.1	元素及化合物性质	178
6.2.2	原子结构及晶体结构	180
6.3	物理化学计算可视化	182
6.3.1	热力学计算	182

6.3.2	动力学计算.....	185
6.3.3	电化学计算.....	186
6.3.4	相图.....	189
6.3.5	其他.....	191
6.4	有机化学计算可视化	196
6.4.1	有机化合物结构可视化.....	196
6.4.2	有机化学反应机理模拟.....	197
6.5	环境科学计算可视化	197
6.5.1	污染物预测.....	197
6.5.2	模式识别.....	199
参考文献.....		204

作为一个优秀的计算机软件, MATLAB 不仅在数值计算上独占鳌头, 而且在图形图像表现方面功能也很强大。MATLAB 可以给出数据的二维、三维乃至四维的图形表现, 并且通过对图形线型、立面、色彩、渲染、光线、视角等的控制, 可把数据的特征表现得淋漓尽致。

MATLAB 提供了两个层次的图形命令来建立图形图像: 一种是通过图形句柄控制图形图像特征的低级图形命令, 另一种是建立在低级图形命令上的高级图形命令。

MATLAB 提供了很多高级图形命令, 这些命令可以绘制一般科技绘图软件所能绘制的几乎所有图形, 如曲线图、极点图、直方图、等高线图、网格图、表面图等, 用户还可控制图形的颜色、视角、坐标标注和阴影等与图形外观有关的因素。MATLAB 还提供了句柄图形命令, 用户可以利用句柄图形命令对图形的显示进行精确的控制, 也可利用句柄图形命令创建具有菜单、按钮、文本框以及其他的图形界面部件的图形用户界面(GUI), 并依此进行输入输出数据以及在程序运行中和计算机交互, 为用户的使用提供极大的方便。

1.1 图形绘制

MATLAB 可以表达出数据的二维、三维和四维的图形。通过对图形的线型、立面、色彩、光线、视角等属性的控制, 可把数据的内存特征表现得更加细腻、完善。

1.1.1 二维绘图

MATLAB 的二维绘图函数有 `plot`、`fplot` 和 `ezplot` 共 3 种基本函数及常用的特殊二维图形函数。

1. `plot`

`plot` 函数有 3 种基本调用格式: `plot(x,y)`、`plot(x1,y1,x2,y2,...)`、`plot(x)`。

第一种格式是绘制以 x 、 y 元素为横、纵坐标的连线图。若 x 、 y 是等维的矩阵, 则以 x 、 y 对应列元素为横、纵坐标分别绘制曲线, 曲线的根数等于矩阵的行数。

第二种格式是绘制多根曲线, 每个二元对 x - y 的作用与 `plot(x,y)` 相同。

第三种格式根据包含在 x 中的数据的数据的类型, 绘制不同的图形。如果 x 是一个复数向量, `plot(x)` 可以理解为 `plot(real(x), imag(x))`; 如果 x 是实数阵, 则可解释为 `plot(1:length(x), x)`, 即画出对其下标的图形; 当 x 是一个矩阵, 则以 x 元素值为纵坐标, 以相应元素的下标为横坐

标,绘制连线图。

在 plot 中加表 1-1 所示的附加参量,就可以指定图形的颜色和线型。

表 1-1 基本线型和颜色

符号	颜色	符号	线型	符号	线型
y	黄色	.	点	s	方形
m	紫红	o	圆圈	d	菱形
c	青色	x	叉号	^	下向三角形
r	红色	+	加号	v	上向三角形
g	绿色	*	星号	<	左向三角形
b	蓝色	-	实线	>	右向三角形
w	白色	:	点线	p	五角形
k	黑色	-.	点画线	h	六角形
		--	虚线		

2. fplot

fplot 函数的调用格式为:

fplot(Fcn,limits,tol,n,linspec,p1,p2,...)

式中,Fcn 为待绘制的函数的名称;limits 定义 x 轴(自变量)的取值范围,可以为[xmin xmax ymin ymax];tol 为相对误差容忍值(默认值为 $2e-3$);n 确定绘制的点数($n+1$ 点);linspec 为绘图的线型、点标和颜色;p1,p2,...为向函数传递参数值。tol,n,linspec,p1,p2,...参数均可以缺省。

3. ezplot

ezplot 函数也可以用于绘制函数在某一变量区域内的图形,其基本格式为:

ezplot(fcn,[xmin xmax ymin ymax]) fcn 可以为单变量、双变量函数

ezplot(x,y,[tmin tmax]) 绘制参数方程组 $x=x(t)$ 、 $y=y(t)$ 在[tmin tmax]内的图形

4. 二维特殊图形函数

常用的二维特殊图形函数如表 1-2 所示,这些函数的使用方法可以查阅 MATLAB 的在线帮助。下面程序是表示梯度场向量图的绘制方法。

```
>> [x,y]=meshgrid([-2:0.1:2]);
>> z=3.*x.*y*exp(-x.^2-y.^2)-1;
>> [u,v]=gradient(z,0.2,0.2);
>> quiver(x,y,u,v,2);
```

表 1-2 二维特殊图形函数

函数名	说明	函数名	说明	函数名	说明
area	面积图	fill	多边形填充图	ribbon	三维图的二维条状显示
bar	条形图	gplot	拓扑图	scatter	散射图
barh	水平条形图	compass	矢量图	stern	离散序列火柴杆状图
comet	彗星图	hist	柱状图	stairs	阶梯图
errorbar	误差带图	pareto	pareto 图	rose	极坐标下的柱状图
ezpolar	极坐标图	pie	饼状图	quiver	向量场
feather	矢量图	plotmatrix	分散矩阵图		

运行结果如图 1-1 所示。

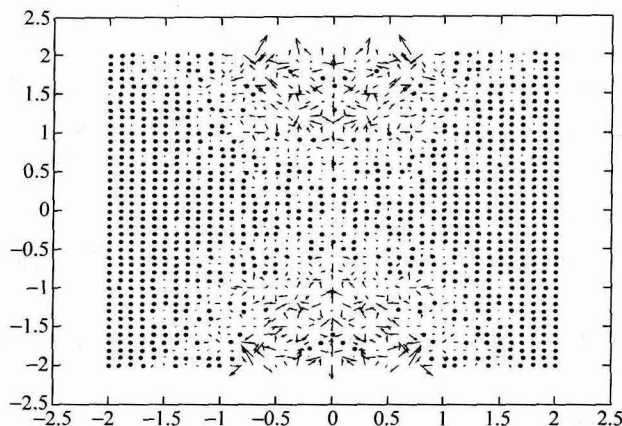


图 1-1 函数的梯度场向量图

1.1.2 三维绘图

最常用的三维绘图是通过绘制三维曲线图、三维网格图和三维曲面图 3 种基本类型函数及特殊的三维图形函数完成。

1. plot3

plot3 函数格式除了包括第三维的信息之外,与二维函数相同:

```
plot3(x1,y1,z1,s1,x2,y2,z2,s2,...)
```

式中, x_n, y_n, z_n 是向量或矩阵; s_n 是可选的字符串,用来指定颜色、标记符号或线型。

2. mesh

函数 mesh(z) 或 mesh(x,y,z) 分别以 z 矩阵元素值及其下标或 x、y、z 为网格数据点绘制网格图。mesh 有两个同类函数: meshc 和 meshz,前者用于画网格图和基本的等高线图,而后者用于画包含零平面(边界面)的网格图。

3. surf

函数 surf 绘制着色的曲面图,其线条是黑色的,线条之间的补片有颜色。调用格式与 mesh 函数一样。surf 也有两种同类函数: surfc 和 surfl,前者可画出具有基本等值线的曲面图,后者可画出一个有亮度的曲面图。

4. 特殊三维图形函数

特殊三维图形函数如表 1-3 所示,其使用方法与对应的二维绘图函数类似,可参考 MATLAB 的在线帮助。

表 1-3 特殊三维图形函数

函数名	说 明	函数名	说 明	函数名	说 明
bar3	三维条形图	trisurf	三角形曲面图	sphere	球面图
comet3	三维彗星图	trimesh	三角形网格图	counter3	三维等高图
ezgraph3	函数控制三维图	waterfall	瀑布图	stern3	三维离散数据图
pie3	三维饼状图	cyclinder	柱面图		
scatter3	三维散射图	quiver3	向量场		

1.1.3 特殊坐标轴的图形函数

1. semilogx

semilogx 函数的调用格式与 plot 类似,只是 x 轴采用对数坐标。若没有指定使用的颜色,当所画线较多时,semilogx 将自动使用当前轴的 ColorOrder 和 LineStyleOrder 属性指定的颜色顺序和线型顺序来画线。

2. semilogy

semilogy 函数的调用格式与 semilogx 一样,只是 y 轴采用对数坐标。

3. loglog

loglog 函数的调用格式与 semilogx 一样,只是 x 轴和 y 轴均采用对数坐标。

4. plotyy

plotyy 函数的调用格式为:

```
plotyy(x1,y1,x2,y2,'fun1','fun2')
```

用 fun1 方式绘制 (x1, y1), 用 fun2 方式绘制 (x2, y2)。fun 可以为 plot、semilogx、semilogy 与 loglog 等。

5. pload

pload 函数的调用格式为:

```
pload(theta,rho)
```

用极角 theta 和极径 rho 绘制极坐标图形。

6. pol2cart

pol2cart 函数用于将极坐标和柱坐标的值转换成直角坐标系的坐标值,然后使用 plot3、mesh 等函数绘图。

pol2cart 函数的调用格式为:

```
[x,y] = pol2cart(theta,rho)      极坐标转换  
[x,y,z] = pol2cart(theta,rho,z)  柱坐标转换
```

cart2pol 函数则是将直角坐标系的值转换成极坐标和柱坐标系中的值。

7. sph2cart

sph2cart 函数用于将球坐标值转换成直角坐标系的坐标值,然后使用 plot3、mesh 等函数绘图。

cart2sph 函数则是将直角坐标值转换成球坐标系中的值。

1.1.4 绘图工具界面

随着版本的升级,MATLAB 的功能不断提高,并且朝着简单、方便的方向发展,其最大的表现在于对许多功能开发了图形界面,图形绘制功能也不例外。下面结合实例介绍图形绘制界面 plottools。

在 MATLAB 工作空间输入:

```
>> t = 0:pi/50:10 * pi;  
>> x = sin(t); y = cos(t);
```

然后输入:

```
>> plottools
```

打开图形绘制工具图形界面,也可以在 Figures 窗口中单击图标  打开。绘图工具界面如图 1-2 所示。

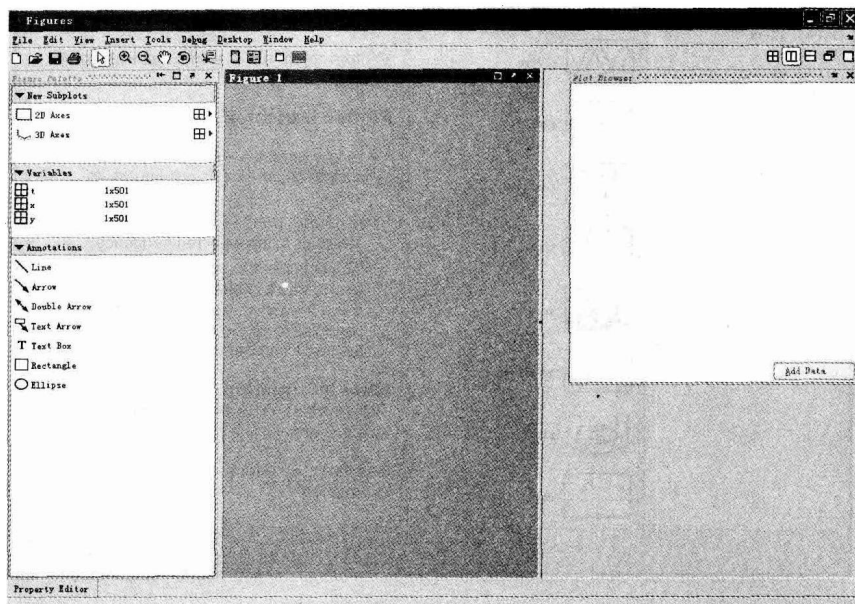


图 1-2 绘图工具界面

选中图形界面中的 Variables 中的某一个变量(如选 t),然后右击鼠标,会弹出如图 1-3 所示的界面。在这个界面中可选择各种曲线,选择 More Plots,弹出图 1-4,在 Plotted Variables 栏中输入 t, x ,在 Categories 栏中选择 Line Plots,在 Plot Types 栏中选择 plot,最后单击 Plot 按钮,便在图形界面中出现图形,如图 1-5 所示。单击图 1-5 右边 Plot Browser 栏中的 Axes 使之激活,然后单击 Add Data 按钮,便会出现图 1-6。根据图 1-6 可以选择 x 轴和 y 轴的数据来源,也可以在 y 轴数据来源栏中输入表达式,从而创建表达式的图形。

如果对图形的外形不满意,可以单击图形性质编辑器(Property Editor,见图 1-7),通过选择、改变其中的参数,可以改变图形的外形,以达到最佳的效果。如果要对图形进行标注,可以单击图 1-2 中的 Annotations。

在图 1-5 所示的作图界面中,在图形区域右击鼠标,出现图 1-8,选中某个项,便可以完成相应的操作。

通过图形工具界面,可以使作图变得非常方便和灵活。

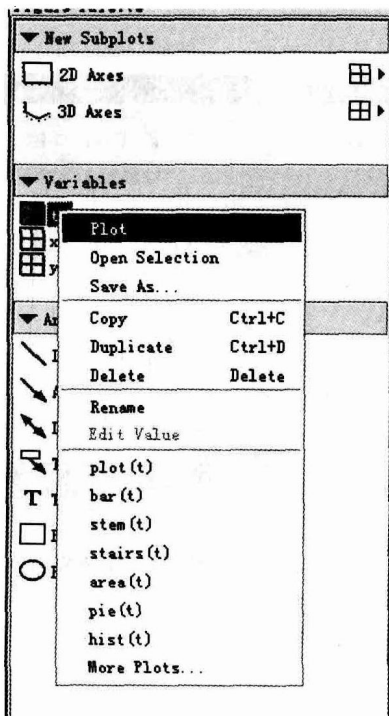


图 1-3 作图选项

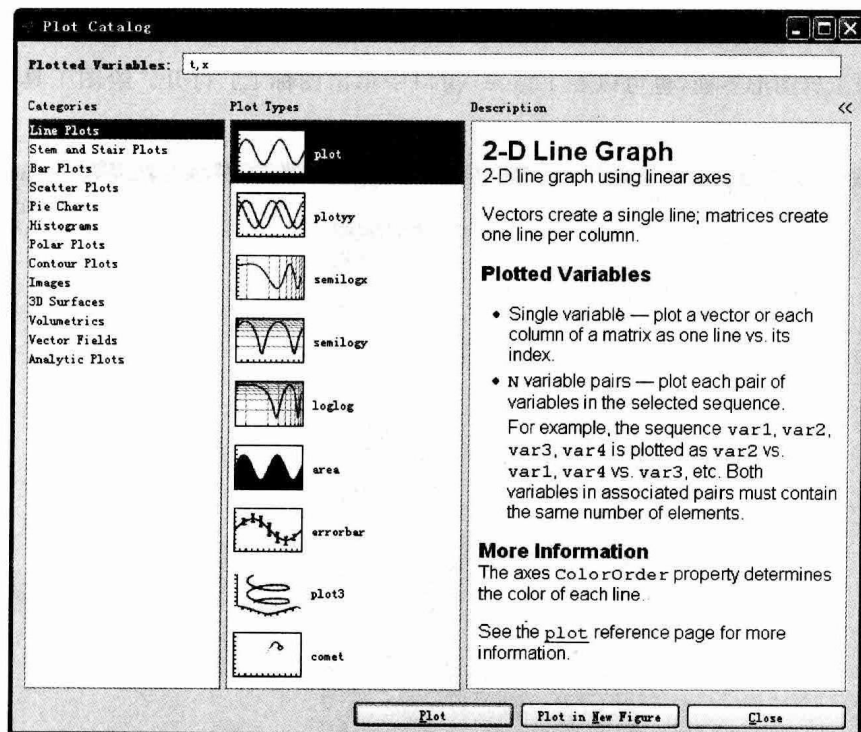


图 1-4 作图对话框

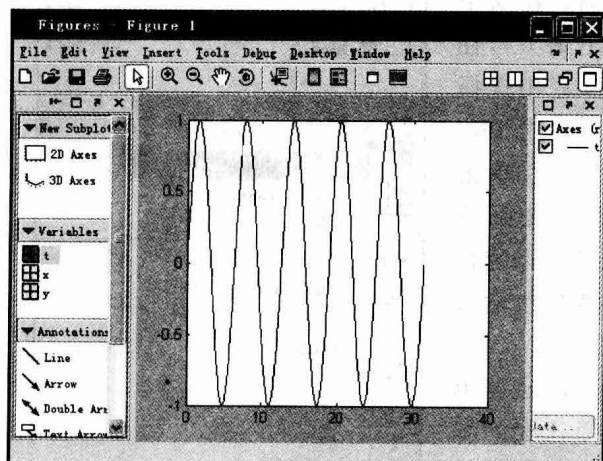


图 1-5 作图界面

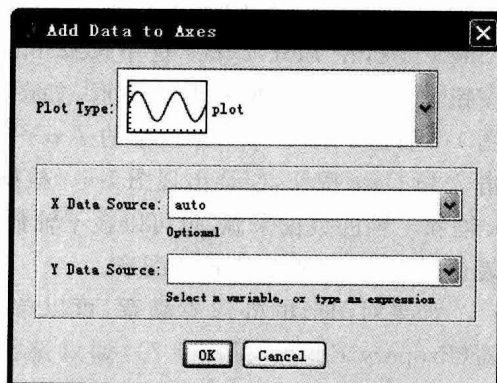


图 1-6 给图形添加数据

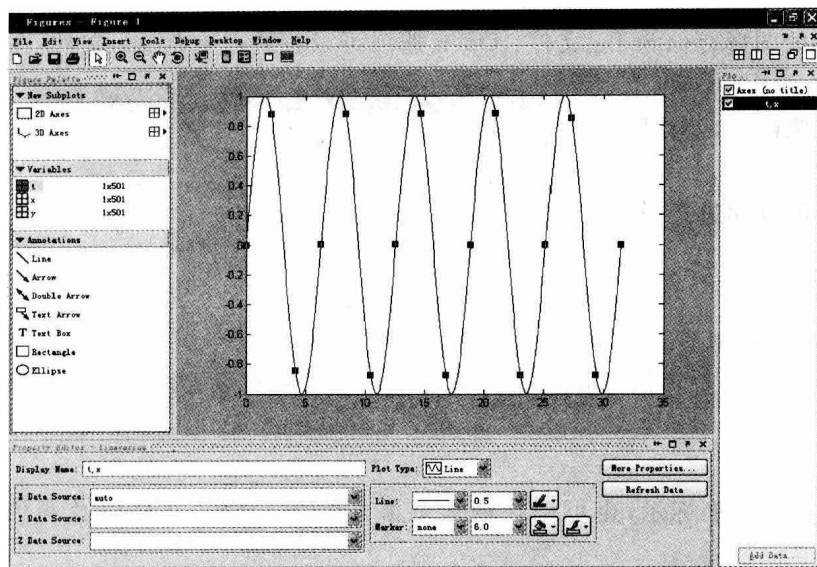


图 1-7 图形性质编辑器

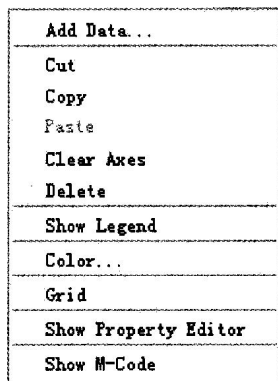


图 1-8 图形操作提示图

1.2 句柄图形

句柄图形对象是 MATLAB 绘图的基础,它的主要含义是允许用户依据句柄值来设置或获取对应图形对象的属性值。

每建立一个图形对象, MATLAB 就会自动建立该图形对象唯一的句柄值,但如果图形是由多个对象组成时,则应该通过最容易让对象显示特征的属性来逐个测试当前控制的是哪一个对象。

在句柄式图形中,各个对象之间有相对的层次关系,如图 1-9 所示。

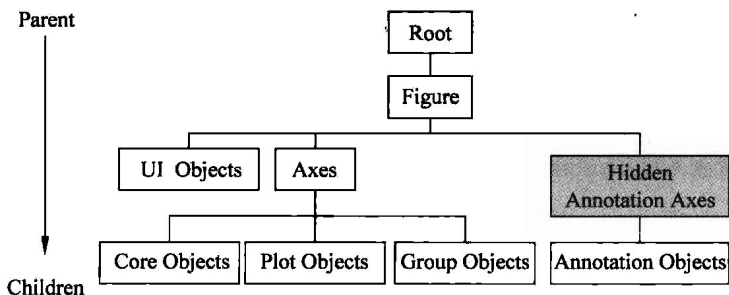


图 1-9 句柄式图形父-子阶层关系图

1.2.1 图形对象

在命令窗口中输入 figure, MATLAB 就自动地将图形画在图形窗口上,图形窗口和命令窗口是相互独立的。如果当前没有图形窗口, MATLAB 就会自动创建一个;如果已经存在一个或多个图形窗口时, MATLAB 一般指定最后一个图形窗口作为当前图形的输出窗口。Figure 窗口有很多操作图形的功能,见图 1-10。