

教 学

Matlab 在二元共聚物组成曲线绘制中的应用

迟长龙*, 王延伟, 辛长征, 杨秀琴, 张笑吟

(材料与化学工程系, 河南工程学院, 郑州 450007)

摘要: 通过 Matlab GUI 工具开发出一款专供反复使用且操作简单的绘制共聚物组成曲线的图形用户程序。其开发过程包括图形用户界面的构思、控件的绘制与调整、图形对象属性的设置、M 文件的编写和程序调试与运行。该图形用户程序可实现绘图、参数显示、坐标捕捉和曲线风格设置等功能。它的使用在分子化学教学中收到了良好的效果。通过随机输入竞聚率的数值, 可引导学生找出竞聚率的取值范围与组成曲线变化趋势之间的内在规律及产生这一规律的本质原因; 还可通过应用图形用户程序确定单体投料比, 引导学生找出控制共聚物组成的方法。

关键词: Matlab GUI; 共聚物组成曲线; 图形用户界面

引言

共聚物组成曲线是根据共聚物组成微分方程绘制而成的, 反映原料组成与共聚物组成之间关系的一组曲线, 它对控制共聚物的组成起到指导性的作用。例如, 当共聚物组成曲线是一条 F_1 与 f_1 相差较大的理想非恒比共聚曲线或非理想非恒比共聚曲线时, 可采用补加活泼单体法控制共聚物的组成, 又如当共聚物组成曲线是一条有恒比点的非理想共聚曲线, 且所需组成恰好在恒比点处时, 可采用一次性投料法控制共聚物的组成。但由于共聚合反应的竞聚率取值范围可以在很广的范围内变化^[1], 这使得在采用传统的教学手段讲授时, 很难及时准确地画出共聚物组成曲线, 竞聚率对组成曲线变化趋势的影响只能停留在定性分析的层面上, 从而使学生学习缺乏直观性, 难于理解。曾有报道采用 VB、VC++ 等编程语言开发出能够动态输入参数绘制曲线软件的文章, 但由于这些语言专业性强, 不易学习。本文采用 Matlab 的图形用户环境 (GUI) 开发出一款能够随机绘制曲线的图形用户程序, Matlab 是矩阵实验室 (Matrix Laboratory) 的简称, 是美国 MathWorks 公司出品的商业数学软件, 用于算法开发、数据可视化、数据分析以及数值计算的高级技术计算语言和交互式环境, 其优点在于与上述编程语言相比, Matlab 具有强大的数值计算功能, 且语法更简单, 通俗易懂, 易于掌握, 适应科技专业人员的思维方式和书写习惯, 从而使得编程和调试效率大大提高^[2]。

1 图形用户程序的开发过程

1.1 图形用户界面的构思

本系统曲线的绘制过程是以共聚物组成微分方程 $F_1 = (r_1 f_1^2 + f_1 f_2) / (r_1 f_1^2 + 2f_1 f_2 + r_2 f_2^2)$ 为根据, 通过在 0~1 之间给定若干个 f_1 值, 然后通过共聚物组成微分方程计算出对应的 F_1 , 最后以得到的若干个坐标点 (f_1, F_1) 取点绘制而成。方程中的参数 r_1 、 r_2 利用 Edit Text 控件动态随机输入, 曲线的竞聚率和恒比点的显示利用 Table 控件来完成, 其图形界面如图 1 所示^[3]。

基金项目: 河南省教育科学“十一五”规划课题, 2009-JKGHAG-0182;

作者简介: 迟长龙(1978—), 男, 硕士生, 讲师, 主要研究方向为高分子材料教学研究和高分子合成研究;

*通讯联系人: E-mail: chichanglong123@163.com.

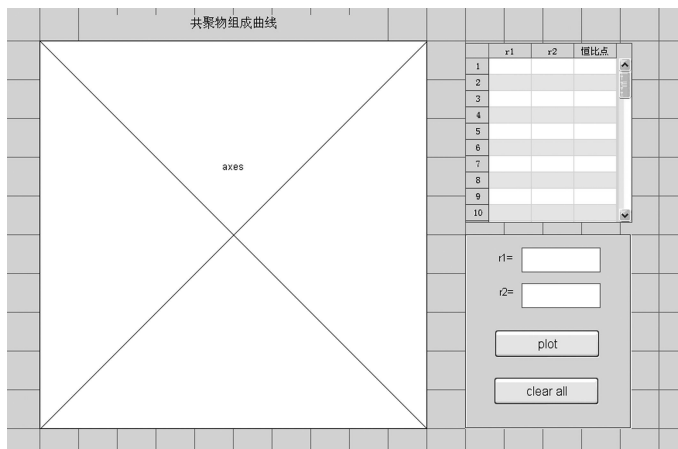


图 1 图形用户界面的草图

Figure 1 Draft of graphical user interface

1.2 控件的绘制与调整

启动 Matlab GUI 设计工具, 分别选择左侧面板中的 Axes、Table、Panel、Edit Text、Push Button 及 Static Text 控件, 拖拽到设计区域的相应位置, 如图 2 所示。

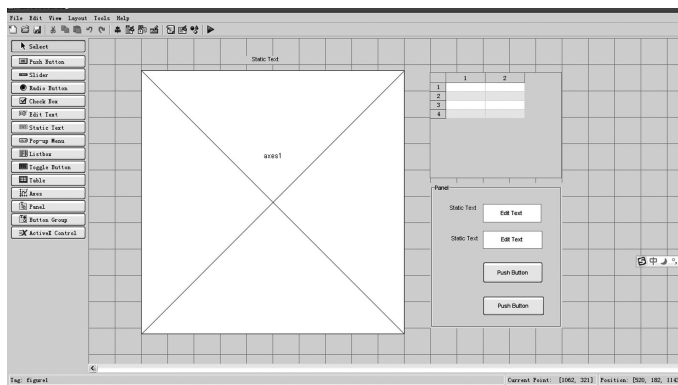


图 2 GUI 设计界面

Figure 2 GUI design surface

控件的大小可通过鼠标拖拽控件边缘的小方块调整, 而控件间的对齐关系可通过 GUI 工具栏的 Align Objects 工具来调整。

1.3 图形对象属性的设置

当创建好 GUI 界面需要的各个交互控件并调整好大概的位置后, 下一步工作就是设置这些控件的属性。

(1) Axes 控件属性的设置

双击 Axes 控件, 出现 Axes 控件属性设置对话框, 将其 Box 属性值设置为 on, 即将坐标轴设置成封闭坐标轴。

(2) Table 控件属性的设置

双击 Table 控件, 出现 Table 控件属性设置对话框, 将其 DATA 属性值设置为一个 50 行 3 列的单元矩阵, 并将行名分别设置成 1 到 50 的数字, 列名设置成“r1”、“r2”和“恒比点”。

(3) Edit Text 控件属性的设置

双击 Edit Text 控件, 出现 Edit Text 控件属性设置对话框, 将其 String 属性值设置为空格, 即可将编辑文本框(Edit Text)的初始值设置为空。

(4) Push Button 控件属性的设置

双击 Push Button 控件, 出现 Push Button 控件属性设置对话框, 将其 String 属性值设置分别为“plot”和“clear all”。

(5) Static Text 控件属性的设置

双击 Static Text 控件, 出现 Static Text 控件属性设置对话框, 将其 String 属性值设置分别为“共聚物组成曲线”、“ $r_1=$ ”和“ $r_2=$ ”。

(6) 图形窗口对象属性的设置

双击设计区域, 出现图形窗口对象属性设置对话框, 分别将其 Name、Menubar、Toolbar 属性值设置为“共聚物组成曲线”、“figure”、“figure”, 即将图形界面的标题栏显示设置成共聚物组成曲线, 同时调出 Matlab GUI 自带的菜单栏和工具栏^[4]。

1.4 M 文件的编写

当上述工作完成后, 为了能够实现绘图程序的人机交互, 还必须使图形界面的某些控件具有回应, 即当用户用鼠标单击或用键盘输入一些信息, 绘图界面要有相应的动作。这些动作的执行是通过编写 M 文件中的回调函数来完成的。

打开 M 文件编辑器, 在 untitled_OpeningFcn 函数中编写如下代码:

```
handles.table={};
handles.i=1;
handles.text={};
xlabel('f1');
ylabel('F1');
```

上述代码的含义是图形界面初始化时, 清空前次操作保存的相关数据, 并设置坐标轴的标题。

在 pushbutton1_Callback 函数中编写如下代码:

```
r1=str2double(get(handles.edit1,'string'));
r2=str2double(get(handles.edit2,'string'));
```

上述代码表示获取 Edit Text 中输入的数据, 其中 handles.edit1 和 handles.edit2 是两个可编辑文本控件的句柄, 字符串 edit1 和 edit2 是其控件的 Tag 属性值。

```
f1=[];
F1=[];
for fi=linspace(0,1,100);
f1=[f1,fi];
Fi=(r1*fi.^2+fi.*(1-fi))./(r1*fi.^2+2*fi.*(1-fi)+r2*(1-fi).^2);
F1=[F1,Fi];
end
line(f1,F1);
```

上述代码表示通过在 0 到 1 等距赋给 f_1 若干值, 根据共聚物组成方程对应算出 F_1 值, 然后取点作图。

```
A=[(1-r2)/(2-r1-r2)], 恒比共聚,'-';
if (r1<1 && r2<1)|(r1>1 && r2>1)
a=A(1);
elseif (r1==1) && (r2==1)
a=A(2);
else
a=A(3);
end
```

上述代码表示根据 r_1 和 r_2 的取值情况, 赋给变量 a 不同的数据。

```
handles.table=[ handles.table1;r1 r2 a];
set(handles.uitable1,'data',handles.table);
```

上述代码表示将 r_1 、 r_2 和 a 的值在表格相应列出显示出来。handles.uitable1 是 Table 控件的句柄, uitable1 是其 Tag 属性的属性值。

```
x=0.5;
y=(r1*x.^2+x.*(1-x))./(r1*x.^2+2*x.*(1-x)+r2*(1-x).^2)+0.01;
handles.text=text(x,y,num2str(handles.i));
handles.i=handles.i+1;
guidata(hObject,handles);
```

上述代码表示在绘制共聚物组成曲线的同时, 按照曲线绘出的先后顺序, 在曲线旁标注其为第几条曲线。

在 pushbutton2_Callback 函数中编写如下代码:

```
axes(handles.axes1);
cla;
handles.i=1;
handles.table={};
set(handles.uitable1,'data',[]);
guidata(hObject,handles);
```

上述代码的含义是清空坐标轴窗口中的所有对象, 并恢复 handles.i 和 handles.table 的初始值^[5]。

1.5 程序调试与运行

最后一步工作就是程序的调试与运行, 找出设计中的缺陷和错误, 进行完善和修正。运行界面如图 3 所示。

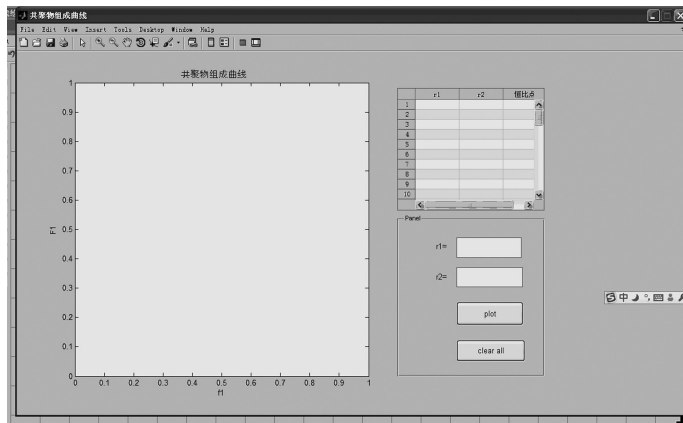


图 3 共聚物组成曲线绘图界面

Figure 3 Graphics interface of copolymer composition curve

2 图形用户界面的主要功能

2.1 绘图功能

通过在可编辑文本框中输入 r_1 和 r_2 数值, 单击 plot 按钮可实现共聚物组成曲线的反复绘制工作, 通过单击 clear all 按钮可实现曲线的清除工作。

2.2 参数显示功能

在绘制曲线的同时, 界面右侧的表格中可实现与曲线对应序号、 r_1 和 r_2 值、恒比点显示工作。

2.3 坐标捕捉功能

通过选择工具栏中的 Data Cursor 命令,在相应曲线上单击,可实现曲线上坐标点的实时捕捉。

2.4 曲线风格设置功能

通过选择工具栏中的 Edit Plot 命令,在相应曲线上双击,可实现曲线线型、线宽和曲线标记点的相关设置。^[9]

3 图形用户程序在分子化学教学中的应用

3.1 揭示竞聚率的取值范围与共聚物组成曲线变化趋势之间的规律

应用共聚物组成曲线绘制程序很容易揭示出竞聚率的数值与共聚物组成曲线变化趋势之间的规律。在课程教学中,我们有目的的选取几组竞聚率的数值,例如第一组数据 $r_1 = 1, r_2 = 1$; 第二组数据选取 $r_1 = 1.68, r_2 = 0.23$; 第三组数据选取 $r_1 = 55, r_2 = 0.01$; 第四组数据选取 $r_1 = 1.35, r_2 = 0.58$; 第五组数据选取 $r_1 = 0.4, r_2 = 0.04$; 第六组数据选取 $r_1 = 0.44, r_2 = 0.75$, 第七组数据选取 $r_1 = 0.23, r_2 = 0.64$, 然后应用图形用户程序作图,如图4所示。

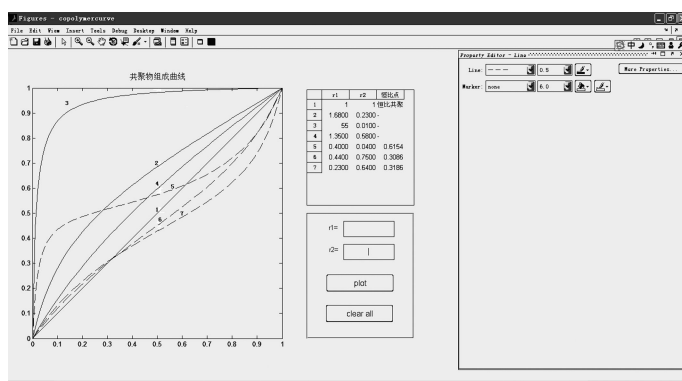


图4 不同竞聚率取值的共聚物组成曲线

Figure 4 Copolymer composition curve of different reactivity ratio value

通过对图4的观察,可以使学生很容易发现竞聚率的取值与组成曲线变化趋势之间的规律,即当 $r_1 > 1, r_2 < 1$ (图4曲线2、3、4,虚线部分)时,组成曲线位于恒比对角线(图4曲线1)的上方,并且 r_1 与 r_2 相差越大,曲线越偏离恒比对角线;当 $r_1 < 1, r_2 < 1$ (图4曲线5、6、7,实线部分)时,组成曲线相对于恒比对角线呈反S型曲线,并且 r_1 与 r_2 相差越近,恒比点越靠近恒比对角线的中点。另外,还可以进一步启发学生对比分析曲线2、3、4与曲线5、6、7,从而从本质上找出上述两组曲线变化趋势不同的根本原因,加深对竞聚率涵义的理解。对于竞聚率的其他取值情况,教学思路同上,在这里就不再一一赘述。

3.2 确定单体的起始投料比,探求控制共聚物组成的方法

应用共聚物组成曲线绘制程序还可以方便地找出控制共聚物组成的方法。一般来说,共聚物组成与单体投料比相差越大, F_1-C 曲线越陡峭;共聚物组成与单体投料比相差越小, F_1-C 曲线越平缓;当共聚物组成与单体投料比相同时, F_1-C 曲线是一条水平直线,所以单体投料比的确定就显得非常重要,应用共聚物组成曲线绘制程序很容易确定出所需组成的投料比。例如苯乙烯($r_1 = 0.30$)与反丁烯二酸二乙酯($r_2 = 0.07$)发生共聚,其共聚物组成曲线如图5所示。

从图中可以看出,此类共聚行为属于有恒比点的非理想共聚,其恒比点为 $F_1 = f_1 = 0.5706$ 。若想得到共聚物组成 $F_1 = 0.55$ 的共聚物,可通过选择工具栏中的 Data Cursor 命令,在组成曲线上找到纵坐标为 0.55 的点,对应的横坐标即为单体的起始投料比,从图中可看出单体的起始投料比为 0.5051。由于共聚物组成与单体投料比相差较小,根据 F_1-C 的关系可知共聚物组成与转化率的关系曲线较平坦,所以可采用控制转化率的方法,控制反应转化率到 F_1-C 曲线平坦段的尽头,加入链终止剂终止反应即可。

本软件在分子化学教学中收到了良好的效果,通过随机输入竞聚率的数值,引导学生发现竞聚率

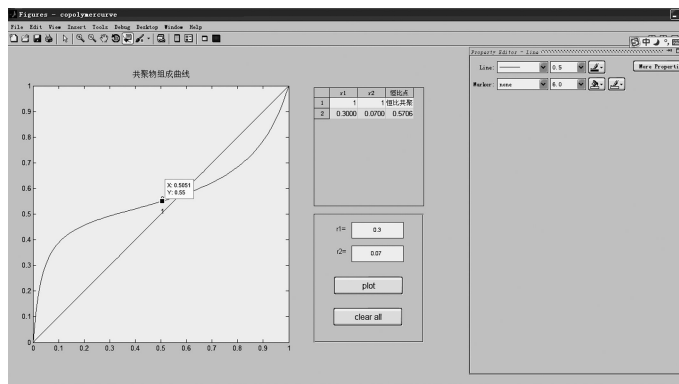


图 5 苯乙烯-反丁烯二酸二乙酯共聚物组成曲线

Figure 5 Copolymer composition curve of styrene and diethyl fumarate

的取值范围与组成曲线变化趋势之间的内在规律及产生这一规律的本质原因;通过应用图形用户程序确定单体投料比,引导学生找出控制共聚物组成的方法。这样一来,不仅增强了学生学习的主观能动性,加深了对知识点的理解,而且提高了教学效果,达到了启发式教学的教学目的。

参考文献:

- [1] 余木火. 高分子化学. 第二版. 北京: 中国纺织出版社, 1999, 154~168.
- [2] 丁玉洁, 赵转哲, 刘荣梅, 高建纲. 怀化学院学报 2009, 28(2): 114~116.
- [3] 谷亚新, 徐自文, 刘运学, 范兆荣. 计算机与应用化学, 2007, 24(4): 557~560.
- [4] 张秋红, 李玉忍. 电脑开发与应用, 2003, 16(3): 10~14.
- [5] 陈奎光. 北京: 电子工业出版社, 2008, 268~284.
- [6] 罗华飞. MATLAB GUI设计学习手记. 北京: 北京航空航天大学出版社, 2009.

Application of Matlab in Copolymer Composition Curve Drawing

CHI Chang-long, WANG Yan-wei, XIN Chang-zheng, YANG Xiu-qin, ZHANG Xiao-yin

(Department of Material and Chemical Engineering, Henan Institute of Engineering, Zhengzhou 450007, China)

Abstract: In this paper, one specially reusable and easy-operated graphical user program for plotting copolymer composition curve is developed with Matlab GUI tools. Its development process includes conceiving graphical user interface, the drawing and adjustment of control, setting the graphic object properties, the compilation and debugging of M-file. The graphical user program can achieve functions of plotting, parameter display, snapping coordinates and setting curve style ect.. Good results has been received in the teaching of polymer chemistry by using it, the internal relations between the trend of composition curve and the value range of reactivity ratio, and the fundamental reasons of this relation can be obtained through randomly inputting values of reactivity ratio; The method of control copolymer composition also can be found by monomer feed ratio which was confirmed according to using the graphical user program.

Key words: Matlab GUI; Copolymer composition curve; Graphical user interface