

Projekt 1B, problemlösning i tillämpad matematik

Niclas Börnin

ht-00

Uppgift

En uppgift man kan få som datavetare är att utreda användbarheten hos ett verktyg för en viss uppgift. Er uppgift i detta projekt är att utreda hur användbart MATLAB är för vetenskaplig visualisering.

Som arbetsexempel ska ni visualisera molekyler enligt "ball-and-stick"-modellen, där varje atom visualiseras som en sfär med given färg och radie och varje bindning visualiseras som en cylinder med given färg och radie. Molekylerna är specificerade i .bs-filer. En beskrivning av filformatet finner ni på

<http://www.cs.umu.se/kurser/TDBD13/VT00/ass2/index.html>.

Jag har skrivit en rutin `loadmolecule` som läser in .bs-filer och en rutin `plotmolecule` som plottar en enkel trådmodell av en molekyl. Ni kan utgå från denna kod om ni vill. Koden samt molekylerna finner ni på min kurshemsida

<http://www.cs.umu.se/niclas/probtm00>.

Ni ska implementera kod för att visualisera molekyler beskriva hur det går till; vilka kommandon i MATLAB som är användbara, vilka grafikattribut som man kan påverka. Ni kommer också att behöva beskriva strukturen på MATLABs grafiska element; figurer, axlar, ytor, etc.

Er kod ska visa upp molekylerna färgsatta enligt specifikationerna i .bs-filerna. Det finns inga krav på interaktivitet. Däremot ska ni på något sätt, t.ex. genom demonstrationsexempel illustrera flera av MATLABs grafikmöjligheter, bl.a.

- Färgsättning, ljuskällor, skuggning.
- Kamerarörelser och vypositioner.
- Texturmapning.
- Animeringar. ("Filmer".)
- Olika renderingstekniker, OpenGL, Z-buffer, double buffering, etc.

Redovisning

Redovisningen ska ske dels genom en skriftlig rapport som beskriver MATLABs grafiksystem med inriktning på visualisering av vetenskapliga data inkl. era egna erfarenheter av användbarhet, hastighet, etc. Dessutom ska ni demonstrera era exempel på en dator.

Den muntliga redovisningen ska de den 15/11 och den slutliga rapporten ska vara inne den 20/11.

Rekommenderad referenslitteratur

- *Using MATLAB Graphics* för MATLAB 5. The MathWorks, 1996. Finns också online via 'helpdesk'/*Documentation roadmap/Online Manuals/Using MATLAB Graphics*.
- *Handle Graphics Properties* via 'helpdesk'/*Handle Graphics Properties*.
- *Computer Graphics*, Foley, van Dam, Feiner, and Hughes. Addison-Wesley, 1990.

Några användbara MATLAB-funktioner

- helpdesk
- lookfor
- shading
- light
- surface
- patch
- line
- cylinder
- sphere
- view
- set
- get
- material