

# 模拟实验系统的可视化研究

詹金兰, 李翠华

(厦门大学 信息科学与技术学院, 福建 厦门 361005)

**摘要:** 本课题是计算机技术在化学上的应用, 属于交叉型课题。它是针对某些特定化学实验以及现有模拟实验系统的缺陷提出来的。研究且实现了这些特定化学实验的网上模拟系统, 并且可以与处在不同空间的人进行协作完成实验, 实现远程合作功能, 弥补了传统模拟实验的空间限制性。主要创新点是: 在模拟化学实验的同时还要做到远程通信, 使操作者不用局限在同一个空间内同样也能完成实验操作。开发过程用到几个关键技术: 远程连接; 数据通信及其同步处理; 消息设定; 图片的组合及其显示。

**关键词:** 客户/服务器结构; 套接字; 计算机支持的协同工作; 多线程; 图像处理

中图分类号: TP391.41

文献标识码: A

文章编号: 1673-629X(2009)05-0228-03

## Visualization Research on Simulation Experiment System

ZHAN Jinlan, LI Cuihua

(Coll. of Information Sci. and Techn., Xiamen Univ., Xiamen 361005, China)

**Abstract:** It's an interdisciplinary subject between chemistry and computer technologies. It's raised for some special chemistry experiments and the drawback of existing simulation experiment systems. Here is a research on the simulation system of some special chemistry experiments in the internet, in which moreover people in different place can team up with each other to complete these experiments. That is, effecting this system with remote collaboration function too, which makes up the drawback of existing simulation experiment systems. It's main creative idea is: using computer to simulate chemistry experiments and more important to achieve long-distance communication. Some key technologies in the whole developing process are: remote linking; data communication and synchronization processing; message setting; image combining and showing.

**Key words:** c/s structure; socket; CSCW; multithreading; image processing

## 0 引言

本课题研究内容一方面是探索利用计算机对一些特定的化学反应(易燃易爆、有毒物质、成本昂贵等)进行模拟, 即应用数据可视化技术对化学反应进行动态演示; 另一方面研究通过网络技术进行远程(协作)实验, 即利用计算机协同工作技术(CSCW)<sup>[1, 2]</sup>进行远程化学实验, 实现远距离操作。

当然, 后者是本课题的重点。也是现有模拟实验系统存在的一个共同缺陷。

## 1 开发过程中用到的几个关键技术

### 1.1 系统连接方式

本系统的远程连接是基于 TCP/IP 的连接。采用 C/S 模式, 在遵守 TCP/IP 协议下采用 Socket 方式进行两台计算机之间的通信, 该通信方式同样适用于基于 Internet 的远程计算机之间的通讯<sup>[3~5]</sup>。

### 1.2 数据通信及其同步处理

协作的应用必须分别设立消息监听线程去获取和处理数据。服务器在 4042 端口设立 Socket 监听口。通过 4042 发送和接收数据。客户端使用 4042 口发送和接收数据。在单独实验时, 运行服务器方的应用程序, 这时这个服务器并不是真正意义上的服务器, 因为没有实现连接。当有远程连接时, 客户端运行客户端应用程序, 与服务器建立连接。在这里, 系统在 Socket 通道的使用上做了一些特殊处理。

在实验操作平台界面的设计中, 窗口(Window)中的 Socket 负责一直读输入流中数据, 并将读来的数据反映在本地界面上, 若没有数据则一直处于等待状态。

收稿日期: 2008-08-10

基金项目: 国家 863 计划项目(2006AA01Z129); 国家重点基础研究发展计划(973 计划)(2007CB311005); 厦门大学 985 二期信息创新平台项目

作者简介: 詹金兰(1982-), 女, 福建莆田人, 硕士研究生, 研究方向为视觉与图像处理; 李翠华, 博士, 教授, 主要从事计算机视觉(CV)、视频与图像处理(VIP)、小波变换(WT)理论及其应用、神经网络(NNs)、数字水印处理(DWP)等方面的研究工作。

而置于 Window 之上的面板(Panel)中的 Socket 则是负责将实验者的操作反映在本地界面上,并且及时地将数据写入输出流中。所以,Window 与 Panel 共享一个 Socket 通道,看起来就好像是逻辑上两个 Socket,一个负责读,一个负责写。实现了 Socket 通道的逻辑独立性。

### 1.3 消息设定

整个系统是建立在消息的基础上的,服务器端和客户端都承担有消息处理工作。实验者的动作信息是被封装在一个类中的。以银镜反应为例,当实验者点击“烧杯”按钮时,将会产生一个字符串“1”,在将烧杯显示在本地界面的同时,也将这个字符串“1”写入输出流中。同理,当实验者点击“铁架台”按钮时,产生的字符串是“2”;以此类推。因此当对方的应用程序接到字符串时,便可以根据字符串调用类中的方法,将相应的图显示出来<sup>[5,6]</sup>。

### 1.4 图片的组合及其显示

当实验者第一次点击按钮时,对应该按钮的图片就会显示出来,相关的信息也会写入输出流,但当实验者继续点击其他的按钮时,则必须根据点击的相应图片与之前的图片组合之后才能显示出来。还是以银镜反应为例来说明,该实验中用到 4 种实验仪器:烧杯、铁架台、酒精灯、试管。这 4 仪器有 15 种组合(不包括这 4 种仪器都没选的情况)。所以,把烧杯、铁架台、酒精灯分别表示成二进制的第四位(最高位)、第三位、第二位、第一位(最低位)。当实验者点击“烧杯”时,第四位(最高位)为 1。则这 4 位二进制的和  $SUM = 8 \times 1 + 4 \times 0 + 2 \times 0 + 1 \times 0 = 8$ ,显示烧杯图片。当实验者再点击“酒精灯”时,第二位为 1,而第四位(最高位)已经为 1,所以  $SUM = 8 \times 1 + 4 \times 0 + 2 \times 1 + 1 \times 0 = 10$ ,显示烧杯和酒精灯的组合图片。依此类推。所以,烧杯的权为 8,铁架台的权为 4,酒精灯的权为 2,试管的权为 1。图片的命名为:烧杯图片为 1,铁架台图片为 2,酒精灯图片为 3,试管图片为 4,烧杯与酒精灯的组合图片为 1\_3,铁架台与酒精灯和试管的组合图片为 2\_3\_4,这四个的组合图片为 1\_2\_3\_4,依此类推。

## 2 Socket 机制

Socket 是建立在传输层协议(主要是 TCP 和 UDP)上的一种套接字规范,最初由美国加州 Berkley 大学提出,为 UNIX 操作系统开发的网络通信接口,它定义了两台计算机间的通信规范(也是一种编程规范)。如果两台计算机是利用一个“通道”进行通信,那么这个“通道”的两端就是套接字。Socket 屏蔽了底层通信软件和具体操作系统的差异,使得任何两台安装

了 TCP 协议软件和实现了 Socket 规范的计算机之间的通信成为可能。Socket 接口是 TCP/IP 网络最为通用的 API,也是在 Internet 上进行应用开发最通用的 API<sup>[7,8]</sup>。

Socket 可以看成在两个程序进行通讯连接中的一个端点,一个程序将一段信息写入 Socket 中,该 Socket 将这段信息发送给另外一个 Socket 中,使这段信息能传送到其他程序中。如图 1 所示。

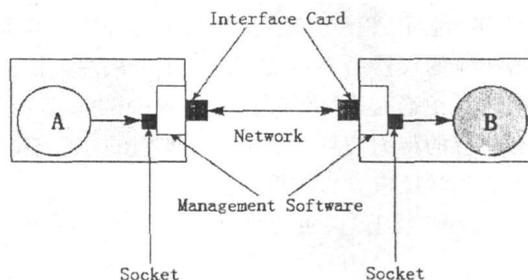


图 1 Socket 通信

## 3 流套接字(Stream Socket)

要通过 Internet 进行通信,至少需要一对 Socket,其中一个运行于客户端,称之为 ClientSocket;另一个运行于服务器端,称之为 ServerSocket。

根据连接启动的方式以及本地 Socket 要连接的目标,Socket 之间的连接过程可以分为 3 个步骤:服务器监听、客户端请求、连接确认<sup>[8]</sup>。

(1) 服务器监听。它是服务器端 Socket 并不定位具体的客户端 Socket,而是处于等待连接的状态,实时监控网络状态。

(2) 客户端请求。它是指由客户端的 Socket 提出连接请求,要连接的目标是服务器端的 Socket。为此,客户端的 Socket 必须首先描述它要连接的服务器的 Socket,指出服务器端 Socket 的地址和端口号,然后向服务器 Socket 提出连接请求。

(3) 连接确认。它是指当服务器端的 Socket 监听到或者接收到客户端 Socket 的连接请求,它就响应客户端 Socket 的请求,建立一个新的线程,把服务器端 Socket 描述发给客户端,一旦客户端确认了此描述,连接就建立好了。而服务器端 Socket 继续处于监听状态,继续接收其他客户端 Socket 的连接请求。

运行过程,在服务器的指定端口被绑定一个 Socket,此时服务器只是处于等待状态,监听客户的连接请求。服务器一旦接收到客户端的连接请求,服务器选择一个新的端口并绑定一个新的 Socket 与客户的 Socket 建立 Socket 对。由于 Server 端的输出流是客户端的输入流,Server 端的输入流是客户端的输出流,反

之亦然,所以,Client 与 Server 可以通过读写各自 Socket 进行交流<sup>[2,9]</sup>。

### 4 系统功能要求

系统必须实现如下几个功能:

\* 登陆管理: 这个是欢迎界面, 提供化学实验目录管理并且单击后能够直观地给出反应的总结果图以及双击后能够进入相应的实验操作平台。

\* 实验操作平台管理: 提供实验仪器栏, 当实验者点击相应的仪器后要能及时地显示出来并且根据点击顺序进行组合显示, 反映实验过程中的每个步骤。还要有相应的帮助信息以及关于该实验的一些信息和实验中的化学反应方程式等等。

\* 远程连接管理: 负责对要求合作实验的应用进行连接。

\* 通信和同步管理: 负责远程协作间的各个应用的通信以及动作间的同步问题。

### 5 总体设计

通过分析, 该系统至少要有三个模块: 登陆页面管理、实验操作管理、网络连接和通信同步管理。如图 2 所示。

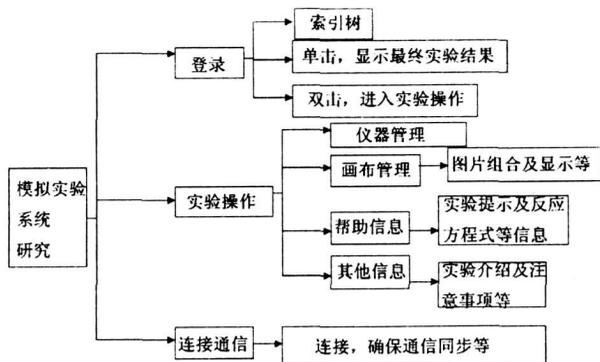


图 2 系统模块结构图

### 6 网络通信及同步

这部分主要完成要进行协同合作的应用间的网络连接、消息的传递, 以及动作的同步等功能。如图 3 所示。

### 7 实验结果

该系统主要是应用计算机手段来实现一些特定化学实验的模拟, 以弥补在现实中无法操作的缺陷。系统的功能很多。由于篇幅的缘故无法一一列举。这里就介绍几个主要的功能。

实验的中间状态截图。

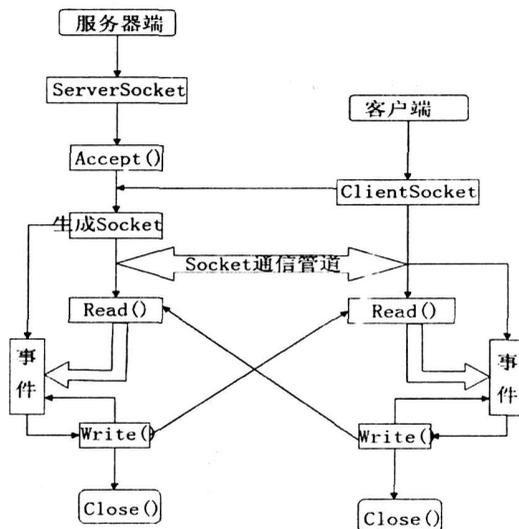


图 3 系统网络通信及同步图

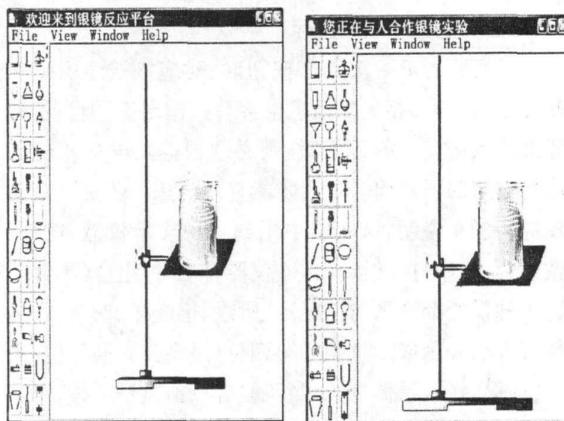


图 4 双人远程协作完成一个银镜实验的中间状态

### 8 结束语

本系统实现了用计算机对一些特定化学实验的模拟, 并且还可以进行远程协作完成实验。主要创新点就是实现了远程协作。研究过程中, 充分学习了一些化学实验的原理及相应的实验操作, 并对之建模。画图及图像处理采用 ScienceWord 和 photoshop。系统的实现用 Java 语言。在实现多人合作时, 系统采用了多线程的技术: 应用服务器会为每个请求连接的客户端应用分配一个 Socket 进行通信。使用线程实现了并行操作也就保证了同步。系统在 Socket 的使用上作了特殊处理: 外围的窗口的 Socket 负责读, 而位于窗口内的面板的 Socket 则负责写, 从而实现了 Socket 通道的逻辑独立性。总的说来, 该系统基本上达到预期的要求, 但一些地方还有深入研究的必要: 图片的制作方面、界面的优化、网络通信的速度及效率等方面。

(下转第 234 页)

图 4 反应的是双人远程协作共同完成一个银镜实

从图中显示的结果看,此系列图表示的是 3 个输入变量( $X_1 - X_3$ ) 在训练机制中的成分分析。分别显示了单个变量的维的分布情况以及值的大小分布。其中,网络下部靠近原点的深色区域代表神经元模式稀疏;网络上部深色区域则代表神经元模式稠密。而且从图中还可以判断出变量之间的相关性,比如  $X_2$  与  $X_3$  自相关。而且从图中的颜色分布可以看出,当  $X_1$  的值保持在 0.5 到 0.7 或 0.8 到 1.0 之间时,诊断结果为恶性,其余情况为良性。根据此方法也可以对其余变量做出诊断分析。最后通过测试数据集诊断结果的有效性验证,进行预测判断的精度达到 91.333%。

### 3 结束语

通过大量测试参数的分析,可以看出 GCS 网络操作过程简便易行,只要将有关数据提供给网络,网络就会通过自身训练、学习,最后根据人的意愿输出相应的结果,根据这些结果并结合实际情况做出更准确的判断。但是 GCS 方法也具有一定的局限性,由于其采用非规范的动态图结构,GCS 执行起来比预定规则结构网络更为困难。另外在参数选取、样本数量等方面也要求更深入地进行研究。在测试过程中,应该注意收集更多更全面的病例数据。GCS 网络在医疗诊断中的各个病例的应用还有待于进一步的深入研究,在

以后的科研工作中还要重点研究参数选取,以及拓扑的改进问题。

#### 参考文献:

- [1] 周国亮,刘希玉.一种基于进化算法的 BP 神经网络优化方法及应用[J].计算机技术与发展,2007,17(8):58-60.
- [2] 杜华英,赵跃龙.人工神经网络典型模型比较研究[J].计算机技术与发展,2006,16(5):97-99.
- [3] 郭海强.肺癌诊断模型的研究[J].中国卫生统计,1997,14(5):238-245.
- [4] 吴拥军,吴逸明,屈凌波,等.人工神经网络在肺癌诊断中的应用研究[J].中国微生物和免疫学杂志,2003,23(8):135-139.
- [5] 陈新平.临床医学中的神经网络技术[J].中国现代医学杂志,2003,13(9):85-90.
- [6] 樊晓干,彭展,杨胜跃.基于多层前馈型人工神经网络的抑郁症分类系统研究[J].计算机工程与应用,2004,40(13):205-215.
- [7] Cheng Guojian, Zell A. Externally Growing Cell Structures for Data Evaluation of Chemical Gas Sensors, Neural Computing, Applications[J]. Neural Computing & Applications, 2001, 10(1):35-43.
- [8] Fritze B. Growing cell structures - a self-organizing network for unsupervised and supervised learning[J]. Neural Networks, 1994, 7: 1441-1460.

(上接第 227 页)

- [2] Carter S. The New Language of Business SOA & Web2.0[M].北京:清华大学出版社,2007.
- [3] 彭政,聂瑞华.数字校园中基于 SOA 的数据交换平台设计[J].科技广场,2008(3):72-74.
- [4] 方蔚涛,杨丹,李珩,等.数字化校园信息门户的设计研究[J].计算机科学,2007(3):9-11.
- [5] Luo Min, Goldshlager B, Zhang Liang-Jie. Designing and Implementing Enterprise Service Bus (ESB) and SOA Solutions

[M]. Washington, DC, USA: IEEE Computer Society, 2005.

- [6] 刘迎春,兰雨晴,于乐乐.ESB 中的数据交换技术[J].计算机系统应用,2005,10:42-45.
- [7] 许鑫,苏新宁,吴乃刚.高校共享数据中心平台的设计与实现[J].现代图书情报技术,2005(6):48-53.
- [8] 张泽文,聂瑞华,刘海星,等.基于.NET 的协同工作模式研究与实现[J].华南师范大学学报:自然科学版,2007(1):43-47.

(上接第 230 页)

改进建议:采用多代理技术(Multi-agent)。目前已经尝试利用多代理技术对系统进行改进,还在调试当中,今后将继续努力把这一工作完成。

#### 参考文献:

- [1] 姚志强,陈文博,沈媛.基于 Web Service 架构的 CSCW 应用研究[J].计算机工程与应用,2005(3):132-136.
- [2] Riboulet V, Marin P, Leon J. Towards a New Set of Tools for a Collaborative Design Environment[J]. Computer Supported Cooperative Work in Design, 2002, 9(25-27):128-133.
- [3] 孙卫琴,李洪成.Tomcat 与 Java Web 开发技术详解[M].

北京:电子工业出版社,2005.

- [4] 王恩涛,李祥.基于 Socket 的手机与数据库服务器通信的研究[J].计算机技术与发展,2007,17(2):81-84.
- [5] 刘邦桂,李正凡.用 Java 实现流式 Socket[J].华东交通大学学报,2007(5):110-112.
- [6] Ayers D, Bell J, Calvertbetts C. Professional Java Data[M]. [s.l.]: Publishing House of Electronics Industry, 2002.
- [7] 马喜春,张曾科.基于 Socket 进行通用的网络通信程序设计[J].实验技术与管理,2005(3):58-61.
- [8] 范云芝,陈树平.利用 Socket 实现基于 Web 的远程监测系统[J].陕西工学院学报,2005(1):53-55.
- [9] Microsoft Corporation. Developing Client/Server Applications with Visual Basic[M]. USA: Microsoft Press, 1996.