

高等学校教材

计算机 在化工中的应用

欧阳曙光 主编

王光辉 吴晓琴 副主编

JISUANJI ZAI HUAGONG ZHONG DE YINGYONG



化学工业出版社

高等学校教材

计算机在化工中的应用

欧阳曙光 主 编

王光辉 吴晓琴 副主编



化学工业出版社

· 北京 ·

本书首先对如何应用 MATLAB 进行数值计算和绘图的基本知识进行了较详细的介绍,并简单介绍了如何用 MATLAB 语言进行程序设计。然后介绍如何用 MATLAB 进行实验数据的回归分析和化工工艺参数计算与优化。本书最后一章对常用数据处理软件 Origin、化学化工科技工作者常用的 ChemWindow 和 ChemOffice 也进行了介绍。

本书可作为高等院校化工类专业的课教材,也可作为化学、化工和材料领域的工程技术人员、研究人员和生产管理人员的参考用书。

中国化工出版社

主 编 宋林青

副 编 李 涛 边 涛

图书在版编目 (CIP) 数据

计算机在化工中的应用/欧阳曙光主编. —北京:化学工业出版社, 2015.12
高等学校教材
ISBN 978-7-122-25867-0

I. ①计… II. ①欧… III. ①计算机应用-化学工业-高等学校-教材 IV. ①TQ-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 296894 号

责任编辑:宋林青
责任校对:边 涛

文字编辑:林 丹
装帧设计:王晓宇

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)

印 刷:北京永鑫印刷有限责任公司

装 订:三河市宇新装订厂

787mm×1092mm 1/16 印张 9 1/4 字数 232 千字 2016 年 3 月北京第 1 版第 1 次印刷

购书咨询:010-64518888 (传真:010-64519686)

售后服务:010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

定 价: 25.00 元

版权所有 违者必究



前言

FOREWORD

随着计算机硬件与软件的飞速发展,计算机在各个专业领域都得到了广泛应用,其在化工领域也发挥着越来越重要的作用。计算机在化工中的应用领域主要有:实验数据的分析与处理、化学理论计算、分子设计、波谱模拟、谱图解析、化工过程分析与开发(计算机仿真)、化工过程设计(工艺计算,计算辅助绘图)、化工过程控制、化工信息管理和化工文献检索与管理。不会利用计算机来完成化工领域中的各项工作,不仅工作效率低,工作质量也可能会打折扣。

让化工类学生具有利用计算机解决专业技术问题的能力已成为许多化工类专业的培养目标之一,许多学校的化工类专业都开设了《计算机在化工中的应用》这门课程,只是课程性质及内容没有统一,尤其是课程内容差别很大。现在化工类专业都采取宽口径的培养方式,每门专业或专业基础课的学时都比较少,因此有必要对《计算机在化工中的应用》这门课程的教学内容进行精选和优化。

笔者从事《计算机在化工中的应用》这门课程的教学工作已有十多年,查阅了许多参考书籍,但一直未能找到一本内容比较全面和通俗易懂的教材。因此笔者于2013年向武汉科技大学提出《计算机在化工中的应用》教材立项申请并获得批准。

立项以来,笔者对以前在教学中使用的讲义进行了较全面的修订和必要的补充,力求做到内容全面、详略得当和通俗易懂。本书以化学科学研究、化工技术开发、化工过程设计和化工过程控制为主线,从化学化工信息资源获取、实验数据处理、化工过程分析(优化)、化工过程设计,到化工生产过程中的数据采集处理与过程控制,简明而系统地介绍了计算机在各个实践环节中的应用,有极强的实用性,摒弃了以往教材过度强调理论而忽视实际应用的的做法。

《计算机在化工中的应用》是一门实践性很强的课程。本书首先对如何应用MATLAB进行数值计算和绘图的基本知识进行了较详细地介绍,并简单介绍了如何用MATLAB语言进行程序设计。然后介绍如何用MATLAB进行实验数据的回归分析和化工工艺参数计算与优化。本书最后一章还对常用数据处理软件Origin

的基本应用进行了较详细地介绍,对化学化工科技工作者常用的 ChemWindow 和 ChemOffice 也进行了简单介绍。本书可作为化工类专业本科生的教材,也可供化学、化工和材料领域的工程技术人员、研究人员和生产管理人员参考。

本书由武汉科技大学欧阳曙光教授任主编,王光辉教授、吴晓琴教授任副主编。第1章、第2章、第4章、第5章、第6章、第7章的7.2和7.3由欧阳曙光编写,第3章由吴晓琴编写,第7章的7.1由王光辉编写。在本书编写过程中,研究生吕青青参与了部分章节的资料收集和文字整理工作,感谢他对本书编写所做的贡献!

在编写过程中,参阅了许多国内外公开发表或出版的文献资料,也有部分原始资料来自互联网,在此向各位作(译)者表示诚挚的感谢。由于本书成稿于笔者所使用的讲义,而讲义在过去十多年中又经过多次修改,书末仅列出主要参考文献,敬请未能详尽列出的文献作者见谅!

感谢武汉科技大学化学工程与技术学院及武汉科技大学教务处为本书的出版提供经费支持!

由于编者水平有限和成稿仓促,书中如有不妥之处,敬请同行和读者批评指正!

欧阳曙光

2015年10月



第1章 绪论.....1

- 1.1 计算机应用概述.....1
- 1.2 计算机在化学化工中的应用.....2

第2章 计算机在数据分析与处理中的应用.....4

- 2.1 MATLAB 语言.....4
 - 2.1.1 MATLAB 语言简介.....4
 - 2.1.2 MATLAB 基本操作命令.....5
 - 2.1.3 控制流语句.....22
 - 2.1.4 绘图功能.....24
 - 2.1.5 M 文件.....31
- 2.2 回归分析.....33
 - 2.2.1 线性回归.....34
 - 2.2.2 多项式回归.....34
 - 2.2.3 应用实例.....35

第3章 计算机在化工过程分析中的应用.....40

- 3.1 计算机在化工过程分析中的应用概述.....40
- 3.2 计算机仿真简介.....43
 - 3.2.1 仿真的定义.....43
 - 3.2.2 仿真遵循的原则.....43
 - 3.2.3 仿真的分类.....43
 - 3.2.4 仿真研究步骤.....45
- 3.3 过程系统仿真.....46
 - 3.3.1 过程系统仿真的分类.....46
 - 3.3.2 过程系统仿真方法.....47
 - 3.3.3 典型过程流程仿真系统介绍.....49

第4章 计算机在化工过程设计中的应用.....51

- 4.1 解线性方程(组).....51

4.1.1 直接求解法 (矩阵除法)	51
4.1.2 利用符号求解函数	52
4.1.3 几个函数的功能与用法	53
4.2. 解非线性方程 (组)	55
4.2.1 利用现有函数	55
4.2.2 编程	57
4.3 积分	58
4.3.1 一元函数的数值积分	58
4.3.2 符号函数的积分	59
4.4 微分	60
4.4.1 求导数 (包括偏导数)	60
4.4.2 求 jacobian 矩阵	61
4.5 常微分方程求解	61
4.5.1 求数值解	61
4.5.2 求解析解	64
4.6 规划求解	65
4.6.1 线性规划	65
4.6.2 无约束非线性规划	67
4.6.3 有约束非线性规划	68

第 5 章 计算机在化工过程控制中的应用 72

5.1 计算机控制系统概述	72
5.1.1 过程控制系统	72
5.1.2 自动控制系统	73
5.1.3 计算机控制系统	73
5.2 计算机控制系统的组成	77
5.2.1 硬件组成	78
5.2.2 软件组成	81

第 6 章 网络上的化学化工资源 82

6.1 网络检索工具的工作原理	82
6.2 网络化学化工资源的检索步骤和方法	83
6.2.1 进行课题分析确定查找范围	83
6.2.2 选择检索工具	83

6.2.3	选择检索方法	84
6.2.4	确定检索途径	86
6.2.5	构造检索式	86
6.3	查阅化学文献的技巧	86
6.3.1	准确选定关键词语逻辑关系	86
6.3.2	直接输入 Web 站点的网址	87
6.3.3	注意收集常用化学化工数据库网址	87
6.3.4	认识到化学物质登记号的重要性	87
6.3.5	熟悉基本的化学物质命名方法	87
6.3.6	了解中文关键词的英文翻译	87
6.4	查阅文献注意事项	88
6.4.1	记录要完全	88
6.4.2	交叉补充	88
6.4.3	原文转换	88
6.4.4	合理利用检索方法	88
6.5	网络上重要的化学资源简介	88
6.5.1	美国化学文摘(CA)	88
6.5.2	ChIN 化学信息网	89
6.5.3	Chemweb	89
6.5.4	万方数据资源系统——中国数字化期刊群	89
6.5.5	中国知网	89
6.5.6	专利	90
6.5.7	化学软件	92
6.5.8	BBS 论坛	92
6.5.9	化学信息资源导航系统	93
6.5.10	其它化学化工网络资源	94

第 7 章 常用化学化工软件简介 95

7.1	Origin	95
7.1.1	Origin 功能简介	95
7.1.2	Origin 的主要结构体系	96
7.1.3	Origin7.5 界面	97
7.1.4	菜单及菜单命令	98
7.1.5	工具条	106

7.1.6	Project 管理器	107
7.1.7	Origin7.5 的子窗口及文件管理	109
7.1.8	Origin 工作表格 (Worksheet) 的使用	110
7.1.9	Worksheet 数据分析	115
7.1.10	数据绘图	118
7.1.11	线性拟合	124
7.2	ChemWindow	130
7.2.1	ChemWindow 简介	130
7.2.2	ChemWindow 6.0 菜单命令	131
7.2.3	ChemWindows6.0 工具栏类型	132
7.2.4	ChemWindow 应用举例	133
7.3	ChemOffice	136
7.3.1	ChemDraw 的使用	136
7.3.2	Chem3D 的使用	141
7.3.3	ChemInfo 的特点与使用技巧	144

主要参考文献	145
---------------------	------------



第1章

绪 论

1.1 计算机应用概述

计算机的应用已渗透到人类社会的各个方面，在以下几个领域表现集中。

(1) 数值计算

计算机具有对科学研究和工程技术中所提出的数学问题进行准确和高速计算的能力。在理论研究、生产建设中，经常有大量的计算任务（如求解微分方程或进行积分计算等），利用计算机的数值计算功能，不仅速度快，精度高，而且大大节省了人力和物力。

(2) 信息处理

计算机具有对信息及时记录、整理、分类、统计和加工成所需形式的能力。在科学研究和工程技术中，常常会有大量的信息，为了利用这些信息，需要对它们进行加工处理，如数据处理、事务管理和资料加工等。利用计算机的信息处理功能进行这些工作，既及时又准确（表 1-1）。

表 1-1 电子计算机应用举例

应用领域	说 明
天气预报	天气预报需要解复杂数学方程式，若没有计算机快速运算，就不可能如期提供计算结果进行预报
银行业务	在处理中心设有大型的中央处理机，与各营业所的终端设备联系，组成计算机处理系统，可以完成结账、分类、记账、平衡等各种业务，大大提高了效率，顾客可以在该系统任一营业所存取，十分方便
发售客票	对火车、轮船、飞机等交通工具，计算机可以自动发售客票，并且还可自动咨询
企业管理	包括城市交通管理。例如，可用计算机调节市内交通，自动检测车辆运行密度数据。发出车辆行驶信号，避免交通阻塞，提高车辆通行能力
工业生产	例如造船，过去船体线型放样依靠人工，要花很多人力和时间，质量还难以保证，计算机用于造船之后，可以数学放样，大大提高了放样速度和精度，并为造船生产自动化打下了基础。
数学研究	1976 年，美国数学家借助于计算机，进行了上百亿次的逻辑判断，证明了一千九百多个定理，解决了“四色问题”。计算机解决这个难题，为数学研究开辟了新的途径
辅助教学	计算机可模拟某个实验过程，同时对一批学生进行不同内容的个别教学，并有自我测验、自动评分等功能。这类辅助教学，可以提高学生的学习兴趣，可以模拟一些难以实际进行的实验过程，使学生深入认识事物变化的本质，对提高教学质量有很大的帮助



(3) 实时控制

计算机具有及时收集检测数据,并按最大值对对象进行自动控制或自动调节的能力。实时控制是实现工业生产过程自动化的重要手段。利用计算机的实时控制功能,采集和处理有关数据,指导有关操作,不仅可以降低消耗,而且可以提高产品质量与产量,收到显著的经济效益。

(4) 计算机辅助工程

CAD, CAI, CIMS, CITS。

(5) 智能模拟

计算机具有“推理”、“学习”和自身“积累经验”等模拟人的智力的能力。现在,具有一定“思维能力”机器人大量出现。

1.2 计算机在化学化工中的应用

计算机已广泛应用于实验数据的分析与处理,化学理论计算,分子设计,波谱模拟,谱图解析,化工过程分析与开发(计算机仿真),化工过程设计(工艺计算,计算辅助绘图),化工过程控制,化工信息管理,化工文献检索及管理等领域。

随着计算机在化学化工领域的深入应用,派生了计算机化学、化学计量学和化学信息学等新兴学科。

(1) 计算机化学

计算机在化学中的应用,又称计算机化学(Computational Chemistry),包括以下5个主要研究领域。

① 化学中的数值计算。即利用计算数学方法,对化学各专业的数学模型进行数值计算或方程求解。例如,量子化学和结构化学中的演绎计算、分析化学中的条件预测、化工过程中的各种应用计算等。

② 化学模拟。包括:数值模拟,如用曲线拟合法模拟实测工作曲线;过程模拟,根据某一复杂过程的测试数据,建立数学模型,预测反应效果;实验模拟,通过数学模型研究各种参数(如反应物浓度、温度、压力)对产量的影响,在屏幕上显示反应设备和反应现象的立体图形,或反应条件与反应结果的坐标图形。

③ 模式识别在化学中的应用。最常用的方法是统计模式识别法,这是一种统计处理数据、按专业要求进行分类判别的方法,适于处理多因素的综合影响。例如,根据二元化合物的键参数(离子半径、元素电负性、原子的价径比等)对化合物进行分类,预报化合物的性质。模式识别广泛用于最优化设计,根据物性数据设计新的功能材料。

④ 化学数据库及检索。在化学数据库中,数据、常数、谱图、文摘、操作规程、有机合成路线、应用程序……都是数据。数据库能存储大量信息,并可根据不同需要进行检索。根据谱图数据库进行谱图检索,已成为有机分析的重要手段,首先将大量的谱图(红外、核磁、质谱等)存入数据库,作为标准谱图,然后由实验测出未知物的各种谱图,把它们和标准谱图进行对照,就可求得未知物的组成和结构。

⑤ 化学专家系统。专家系统是数据库与人工智能结合的产物,它把知识规则作为程序,让机器模拟专家的分析、推理过程,达到用机器代替专家的效果。如酸碱平衡专家系统,内

容包括知识库和检索系统,当你向它提出问题时,它能自动查出数据,找到程序,进行计算、绘图、推理判断等处理,并用专业语言回答你的问题,如溶液 pH 值的计算、任意溶液用酸碱进行滴定时操作规程的设计。

(2) 化学计量学

化学计量学(Chemometrics)是研究化学测量的基础理论与方法学的新兴化学分支学科,其基本任务是研究应用数学、统计学和计算机科学的方法,设计或选择最优的化学实验方法,并通过解析化学实验数据,最大限度地获取有关分析对象的化学信息及其它相关信息。

(3) 化学信息学

化学信息学(Chemoinformatics)是近几年发展起来的一个新的化学分支,它利用计算机技术和计算机网络技术,对化学信息进行表示、管理、分析、模拟和传播,以实现化学信息的提取、转化与共享,揭示化学信息的实质与内在联系,促进化学学科的知识创新。

化学信息学的研究内容主要包括:①计算化学;②分子模拟;③化学计量学;④数据库及其应用;⑤Internet 的利用。



第2章

计算机在数据分析与处理中的应用

2.1 MATLAB 语言

2.1.1 MATLAB 语言简介

随着计算机硬件和软件的发展,计算机对科学技术的各个领域,特别是对数值计算、数据处理、统计分析、人工智能以及自动控制等方面产生了极其深远的影响。熟练掌握利用计算机进行科学研究和工程应用的技术,已经成为广大科研设计人员必须具备的基本能力之一。

大部分从事科学研究和工程应用的人员可能都有这种体会,当我们的计算涉及矩阵运算或画图时,利用 FORTRAN 和 C 语言等计算机语言进行程序设计是一项很麻烦的工作。不仅需要对所利用的有关算法有深刻的了解,还需要熟练掌握所用语言的语法和编程技巧。例如对矩阵求逆这样的一个运算,首先要选择一个较好的求逆算法,然后利用 FORTRAN 或 C 语言等高级语言编程来逐步实现此算法,且不说键入程序的枯燥和费事,等经过了艰苦烦琐的调试工作终于实现算法达到目的后,我们会发现,所编制的百余条甚至几百条语句仅仅是完成了一个矩阵的求逆工作。此时,我们常常会为自己的工作效率大发感叹。并不复杂的计算任务,用计算机来实现竟是如此的烦琐!

MATLAB 正是为免除无数类似上述的尴尬局面而产生的。在 1980 年前后,美国的 Cleve Moler 博士在 New Mexico 大学讲授线性代数课程时,发现应用其它高级语言编程极为不便,便构思并开发了 MATLAB (MATrix LABoratory, 即矩阵实验室),它是集命令翻译、科学计算于一身的一套交互式软件系统,经过在该大学进行了几年的试用之后,于 1984 年推出了该软件的正式版本。在 MATLAB 下,矩阵的运算变得异常容易,后来的版本中又增添了丰富多彩的图形图像处理及多媒体功能,使得 MATLAB 的应用范围越来越广泛。Moler 博士等一批数学家与软件专家组建了一个名为 MathWorks (<http://www.mathworks.com/>) 的软件开发公司,专门扩展并改进 MATLAB,并于 1999 年推出了 5.3 版本。至 2015 年 10 月,最新版本为 2015b (8.6 版本)。

MATLAB 是一种高性能数值计算语言,它有计算、可视化和程序设计三大功能,使用时,用户可以用自己熟悉的数学符号来表达要求解的问题及答案。

目前的 MATLAB 已经成为国际上最为流行的软件之一。在大学中,它已成为数学、工学和理学等专业各类课程的标准教学工具。在工业领域,它是高效率地进行科研、开发和分析的首选工具。除了传统的交互式编程之外, MATLAB 还提供了丰富可靠的矩阵运算、图形绘制、数据处理、图像处理、方便的 Windows 编程等便利工具,出现了各种以 MATLAB 为基础的实用工具箱(包含有许多 MATLAB 函数,利用这些函数能对某专门领域的各类问题进行求解),这些工具箱涉及自动控制、图像信号处理、神经网络、模糊逻辑、小波分析、仿真、数理统计、工艺计算和优化设计等领域。总之, MATLAB 具有一般高级语言难以比拟的优势。

2.1.2 MATLAB 基本操作命令

MATLAB 语言可以认为是一种解释性语言,用户可以在 MATLAB 的命令(行)窗口(窗口标题为“MATLAB Command Window”)中键入一个命令或一个用 MATLAB 语言编写的可执行文件(M 文件, MATLAB 应用程序)名,这样 MATLAB 软件对此命令或程序中的各条语句进行翻译,然后在 MATLAB 环境中对它进行处理,最后返回运算结果。MATLAB 主工作界面如图 2-1 所示。

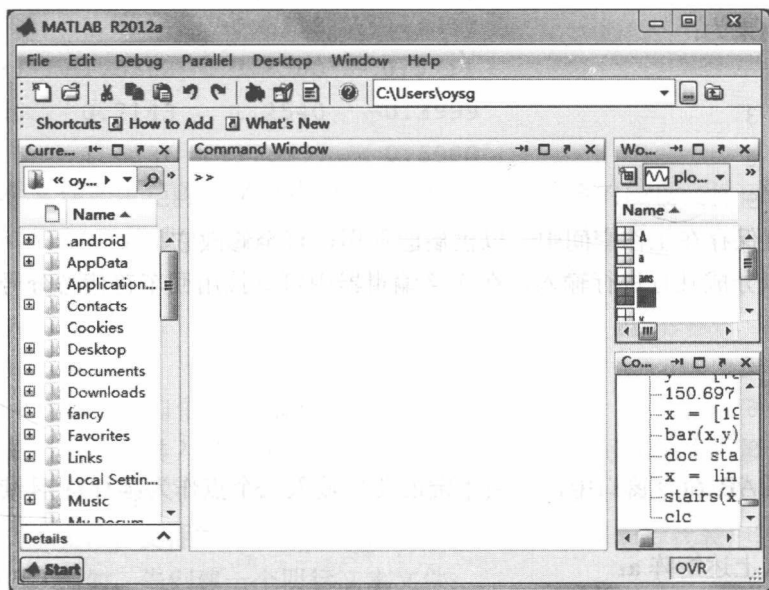


图 2-1 MATLAB 主工作界面

MATLAB 语言由早期专门用于矩阵运算的计算机语言发展而来,这正如其名称——“矩阵实验室”(Matrix Laboratory)的含义一样。它最基本、也是最重要的功能就是“进行实数矩阵或复数矩阵运算”。因向量可作为矩阵的一列或一行,标量(一个数)有时则作为只含一个元素的矩阵,故向量和标量都可以作为特殊矩阵来处理。MATLAB 的操作和命令对于矩阵来说,并不完全等同于我们平时使用的形式,而是有着它自己的规定。

MATLAB 除了矩阵运算(Matrix Operations)之外,还有另外一种重要的运算功能,即所谓的数组运算(Array Operations)。在非正式场合,数组和矩阵这两个术语可以互换使用。更精



确地讲, 矩阵是表示线性变换的二维数值数组。以矩阵为对象定义的数学操作就构成了线性代数学科。离开线性代数领域, 矩阵就变成了二维数组。对数组的任何算术运算是元素对元素的运算。

2.1.2.1 基本知识

(1) 简单矩阵的输入

MATLAB 的操作对象为矩阵。标量可看作 1×1 的矩阵, 向量可看作 $n \times 1$ 或 $1 \times n$ 的矩阵。

在 MATLAB 下输入矩阵有 4 种方式: 直接输入矩阵的元素; 利用内部语句或函数产生矩阵; 利用 M 文件产生矩阵; 利用外部数据文件装入到指定矩阵。下面分别介绍。

① 直接输入矩阵的元素 MATLAB 语言对矩阵的维数及类型没有限制, 即用户无需定义变量的类型和维数, MATLAB 会自动获取所需的存储空间。

输入矩阵最便捷的方式为直接输入矩阵的元素, 其约定如下:

- i. 元素之间用空格或逗号间隔;
- ii. 用中括号([])把所有元素括起来;
- iii. 用分号(;)指定行结束(即行与行之间用分号隔开)。

例如, 在 MATLAB 的工作空间中输入:

```
a=[1 2 3; 4 5 6; 7 8 9]
```

则其输出结果为:

```
a=
```

```
1 2 3
4 5 6
7 8 9
```

矩阵 a 一直保存在工作空间中, 以供后面使用, 直至修改它。

大矩阵可以分成几行进行输入, 在文字编辑器中可直接用回车符代替分号。例如, 输入上述矩阵 a:

```
a=[1 2 3
    4 5 6
    7 8 9]
```

但在 MATLAB 命令窗口中, 按回车键前要先输入三个点作为续行符, 且续行符前要有一个空格。

例如, 输入上述矩阵 a:

```
a=[1 2 3; ...
    4 5 6; ...
    7 8 9]
```

② 利用内部语句或函数产生矩阵 利用内部语句和函数可以快速产生矩阵, 可获得一些特别有用的矩阵, 如全零阵、单位阵、随机阵等。

zeros All zeros (元素全为 0)

ones All ones (元素全为 1)

rand Uniformly distributed random elements (元素为服从均匀分布的随机数)

randn Normally distributed random elements (元素为服从正态分布的随机数)

举例如下:

```
Z = zeros(2,4)
```

```
Z =
```

```
0    0    0    0
0    0    0    0
```

```
F = 5*ones(3,3)
```

```
F =
```

```
5    5    5
5    5    5
5    5    5
```

```
N = fix(10*rand(1,10))
```

```
N =
```

```
4    9    4    4    8    5    2    6    8    0
```

```
R = randn(4,4)
```

```
R =
```

```
1.0668    0.2944   -0.6918   -1.4410
0.0593   -1.3362    0.8580    0.5711
-0.0956    0.7143    1.2540   -0.3999
-0.8323    1.6236   -1.5937    0.6900
```

③ 利用 M 文件产生矩阵 可以由 M 文件(以.m 为后缀的磁盘文件)产生矩阵, 假设 gena.m 存放在 MATLAB 能搜索到的一个子目录下, 其文件的内容为:

```
a=[1    2    3
    4    5    6
    7    8    9]
```

则在 MATLAB 命令窗口中输入 gena 也可产生矩阵 a。

④ 利用外部数据文件装入到指定矩阵 利用 load 命令或 fread 命令可以读取 MATLAB 在早期会话中所产生的矩阵(二进制文件, 扩展名通常为“.mat”), 也可读取由其它应用程序产生的数据(文本文件, 文件的内容为一矩形数值表, 其中的每一行代表矩阵的一行, 各个数值用空格隔开)。例如, 先创建一个四行文本文件:

```
16.0    3.0    2.0    13.0
5.0    10.0    11.0    8.0
9.0    6.0    7.0    12.0
4.0    15.0    14.0    1.0
```

用“magik.dat”为文件名把这个文件存放到一 MATLAB 能搜索到的目录下。然后键入如下命令:

```
load magik.dat
```

MATLAB 将读取这个文件并创建一个含有上述矩阵的变量“magik”。



(2) 矩阵元素

在 MATLAB 中, 矩阵元素可以采用任意形式的表达式, 例如:

```
x=[-1.3 sqrt(3) (1+2+3)*4/5]
```

其结果为:

```
x=-1.3000 1.7321 4.8000
```

可以由小矩阵构成大矩阵, 如:

```
r=[10 11 12]
```

```
a=[a; r]
```

其结果为:

```
a=
```

```
1         2         3
```

```
4         5         6
```

```
7         8         9
```

```
10        11        12
```

也可以从大矩阵中抽取一小矩阵, 例如:

```
b=a(1:3,:)
```

则结果为:

```
b=
```

```
1         2         3
```

```
4         5         6
```

```
7         8         9
```

命令中第 2 个冒号(:)表示所有的列, 即从 a 中抽取 1~3 行的所有列, 以构成新的矩阵 b。

又如:

```
c=a(:, 1:2)
```

则其结果为:

```
c= 1         2
```

```
4         5
```

```
7         8
```

```
10        11
```

命令中的第 1 个冒号(:)表示所有的行。

在 MATLAB 中, “:” 是一个重要的字符, 如 $x=1:4$ 即产生一个 1~4 单位增量的行向量, 即

```
x=1 2 3 4
```

也可以产生单位增量小于 1 的行向量, 方法是把增量放在起始和结尾量的中间, 并用冒号分割开来。如:

$y=0:\pi/4:\pi$ 即产生一个从 0 到 π 的行向量, 单位增量是 $\pi/4=0.7854$, 所以得

```
y=[0 0.7854 1.5708 2.3562 3.1416]
```

也可以产生单位增量为负数的行向量, 如 $z=7:-1:2$, 即得

```
z=[7 6 5 4 3 2]
```

符号 “:” 也可以用来产生简易的表格。为了产生纵向表格形式, 首先要用它产生行向量,