

MATLAB与化学

——作图、计算与数据处理

郑冀鲁 编著

06-39



化学工业出版社

MATLAB与化学

——作图、计算与数据处理

郑冀鲁 编著



化学工业出版社
·北京·

本书讲述了如何利用 MATLAB 解决化学工作者遇到的作图、计算与数据处理问题。内容包括 MATLAB 简介与简单计算、MATLAB 作图、非线性方程求解、线性方程组求解、常微分方程与方程组的求解、插值、数值积分与数值微分、最优化、非线性方程组求解、曲线拟合、统计分析十一个专题。本书一方面讲述了解决上述问题的基本原理,使得读者做到知其然亦知其所以然,另一方面讲述如何使用 MATLAB 中的各种函数来解决上述问题而不需要读者自行编写程序代码。此外在每个专题中均附带若干实例,实例中的问题长期困扰着广大化学工作者,而本书给出了这些问题较为圆满的解决方案。

本书可作为化学专业教学、科研人员进行作图、化学计算和数据处理的参考书,也可作为化学及相关专业学生的参考材料。

图书在版编目 (CIP) 数据

MATLAB 与化学——作图、计算与数据处理/郑冀鲁编著.

北京:化学工业出版社,2009.2

ISBN 978-7-122-04132-6

I. M… II. 郑… III. 化学-计算机辅助计算-软件包, MATLAB IV. 06-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2008) 第 178523 号

责任编辑:傅聪智

装帧设计:张 辉

责任校对:徐贞珍

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 装:三河市延风印装厂

720mm×1000mm 1/16 印张 11 $\frac{3}{4}$ 字数 231 千字 2009 年 1 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:36.00 元

版权所有 违者必究

前 言

化学工作者在科研与教学过程中常常会遇到许多作图、科学计算和数据处理问题，这些问题遍及化学的各个分支，如做出某种多元酸的各种存在形式的分布曲线，根据实验数据做出折线图，以反映了一个变量随另外一个变量的变化趋势或关系，计算反应的焓变、计算复杂反应体系的化学平衡、计算酸碱溶液的 pH 值、间歇反应器中反应物浓度随时间的变化，根据离散的反应物浓度-时间关系数据求解任意时刻的反应速率等。这些问题从数学角度可以归结为函数作图（离散的或连续的），数学四则运算、非线性方程与方程组的求解、插值、数值积分与数值微分、求解微分方程等科学计算问题。简单的作图、科学计算和数据处理一般以使用 Excel 完成（学习 Excel 在这方面的功能也需要花费不少时间），但其它较为复杂的函数作图、科学计算和数据处理问题如求解非线性方程与方程组等则需要使用 Fortran, C, Basic 等高级语言编制计算机程序来解决。但化学工作者由于专业关系，没有系统学习和实践过利用计算机高级语言编制程序解决科学计算问题的课程，数学基础也比较薄弱，因此造成广大化学工作者无法有效解决在各化学分支遇到的各种复杂的作图、科学计算和数据处理。

MATLAB 的出现使得广大化学工作者能够轻易地解决在各化学分支遇到的各种复杂的作图、科学计算和数据处理问题。

MATLAB 是美国 Mathworks 公司开发的科学计算与作图软件。MATLAB 包含了大量的函数，通过调用一个或几个函数再加上一些流程控制语句，化学工作者就能够解决各种各样的复杂数学计算和作图问题，而在以前，求解这些复杂的数学计算和作图问题需要编写包含数十行甚至数百行代码的高级语言程序。

就科学计算而言，依作者看来，MATLAB 不仅是一种方便的科学计算软件，更是一种优秀的计算机语言。作为一种高级计算机语言，MATLAB 与其它语言显著不同的特点在于：①MATLAB 能够直接对矩阵操作；②MATLAB 中能够直接使用复数。瑞典数学家 Lars Garding 在其名著“Encounter with Mathematics”中说：“如果不熟悉线性代数的概念，要去学习自然科学，现在看来就和文盲差不多。”确实，线性代数不仅在数学理论和各个自然科学领域中起着巨大的作用，而且在科学计算中占有重要地位，许多科学计算问题最后往往转化为线性代数问题。矩阵是线性代数的核心概念，线性代数的问题其实就是矩阵分析问题。因此不难理解，MATLAB 能够直接对矩阵操作，将会为解决科学计算问题带来多么巨大的便利。作者相信读者在使用 MATLAB 的过程中，将会越来越强烈地感受到 MATLAB 能够直接对矩阵操作这一特点具有多么大的优越性，利用这一特点，编写程

序是多么方便与自然。虽然大部分数学分支仅仅使用实数，但复数才是数学发展的完善阶段，复数体现了数学的统一与完备之美。但目前几乎所有的高级语言都不支持复数，对负实数开偶次方根或对负实数取对数被很多高级语言认为是非法的，而在 MATLAB 中，对负实数开偶次方根或对负实数取对数被认为是合理的，MATLAB 将给出正确的运算结果，结果自然是复数。由此可见，MATLAB 确实是为科学计算而诞生的语言，它充分考虑到了科学计算的需要，处处为从事科学计算的科研人员提供方便。

除了科学计算问题外，化学工作者还会遇到数据处理问题和作图问题。如将若干数据点拟合为直线，计算样本的均值和标准差，求置信度与平均值的置信区间，对两组样本的某些数字特征进行比较并进行假设检验；画出某个函数的图形，将离散数据点根据需要表达为折线图、柱形图、饼图或直方图。MATLAB 提供了丰富的数据处理和作图函数以解决化学工作者遇到的上述各种问题。

相信读者在使用 MATLAB 的过程中，一定会体会到它不同于其它计算软件或高级计算机语言的优越性，会逐渐喜欢上它。

本书以在化学科研与教学遇到的各种科学计算、作图、数据处理问题为核心，将这些问题分成若干专题来叙述。因为只有这样，才能抓住遍布于化学中出现的大量计算、作图、数据处理问题的本质，起到纲举目张的效果。因此，本书在形式上由 MATLAB 简介与简单计算、MATLAB 作图、非线性方程求解、线性方程组求解、常微分方程与方程组的求解、插值、数值积分与数值微分、最优化、非线性方程组求解、曲线拟合、数据分析十一个专题构成，在内容上一方面讲述解决上述问题的基本原理，使得读者做到知其然亦知其所以然，另一方面讲述如何使用 MATLAB 中的各种函数来解决上述问题而不需要读者自行编写程序代码。此外在每个专题中均附带若干实例，如根据离散的反应物浓度-时间关系数据求解任意时刻的反应速率、利用已有的实验数据估计出未知的实验数据、复杂反应体系的化学动力学计算、复杂体系化学平衡的计算、溶液的 pH 值的计算和确定电位滴定终点等。这些问题长期困扰着广大化学工作者，而本书给出了这些问题较为圆满的解决方案。从创新性角度看，本书提出了采用山丘样条插值算法进行数值积分和微分，而数值积分和数值微分在化学实验数据处理方面具有特别重要的用处。本书还提出了采用遗传算法+局部优化方法求解最优化问题，这就为求解非线性方程组和非线性最小二乘法奠定了坚实基础，复杂反应体系的平衡计算实际就是求解非线性方程组，将实验数据拟合为非线性方程则要使用非线性最小二乘法。

作者在使用 MATLAB 的过程中，根据实践的需要，也编制许多 MATLAB 函数来解决科学计算问题，作者认为在某些科学计算问题中，作者自己根据实际编写的函数能更有效、更方便地解决这些科学计算问题。因此在这些专题中，作者给出了自编的函数及程序代码，供读者在实践中使用。虽然使用 MATLAB 和作者提供的各种函数，能够基本解决读者在化学实践中遇到的各种化学计算、作图与数据分

析问题而不需要读者亲自去编程，但作者仍然竭力建议读者学习利用 MATLAB 编制程序来解决各种问题的知识与方法。因为现实问题千变万化，如果仅仅会使用一些固有函数，那么势必造成读者在面对新的问题时束手无策。只有学会编制 MATLAB 程序，利用流程控制语句和其它语句将 MATLAB 的固有函数和自编函数组合起来，才能充分发挥 MATLAB 的能力，从而极大地拓展读者使用 MATLAB 解决在化学实践中遇到的各种问题的能力。

欢迎广大读者来函，与作者就 MATLAB 在化学中的应用进行广泛、深入的交流！作者 E-mail: triace@163.com。

由于作者水平有限，本书必然存在种种不足之处，恳请读者批评指正！

郑冀鲁

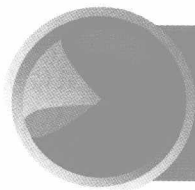
2008 年 10 月于郑州大学

目 录

第 1 章 MATLAB 简介与简单计算	1
1.1 MATLAB 的安装	1
1.2 一个简单的计算实例	3
1.3 矩阵与向量的定义	5
1.4 矩阵合并	8
1.5 引用矩阵中的元素与矩阵块	9
1.6 矩阵元素与矩阵块的赋值	10
1.7 矩阵运算与函数	13
1.8 MATLAB 的结构化程序设计方法与流程控制语句	20
1.9 MATLAB 的函数文件与脚本文件	29
1.10 MATLAB 的函数句柄	32
1.11 MATLAB 的复数、数据精度与常数	33
1.12 使用 MATLAB 进行计算的一些注意事项	35
1.13 利用 MATLAB 进行简单计算	38
1.13.1 反应的标准摩尔焓变	38
1.13.2 求解反应平衡常数	39
第 2 章 MATLAB 作图	41
2.1 曲线图	41
2.1.1 基态氢原子径向分布函数图	41
2.1.2 草酸各种存在形式的分布曲线	43
2.2 折线图	45
2.2.1 热解产品的产率与温度关系	46
2.2.2 滴定曲线	47
2.3 二元函数曲面图	49
2.3.1 中压条件下氮气的 $P=f(v, T)$ 曲面图	52
2.3.2 水烃比和总压对乙苯转化率的影响	52
2.4 隐函数作图	54
2.4.1 中压条件下氮气的 $v=f(P, T)$ 曲面图	56
2.4.2 不同过程膨胀功的比较	57

2.5	饼图和柱形图	60
2.5.1	我国 2002 年常规能源构成	60
2.5.2	地壳中分布最广的 5 种元素的原子含量	61
2.6	MATLAB 的图形格式	62
第 3 章	计算——非线性方程与微分方程	64
3.1	非线性方程的求解	64
3.1.1	不动点迭代法与维格斯坦 (Wegstein) 加速	64
3.1.2	对分法	69
3.1.3	roots 函数	75
3.2	常微分方程的初值问题	77
3.2.1	乙炔加氢	81
3.2.2	生产乙酸乙酯	83
3.3	一阶常微分方程组的初值问题	86
3.3.1	平行反应各物质浓度与时间的关系曲线	87
3.3.2	串联反应各物质浓度与时间的关系曲线	88
第 4 章	计算——代数方程组	91
4.1	线性方程组的求解	91
4.1.1	Gauss 主元消去法	91
4.1.2	LU 分解	98
4.1.3	病态现象	100
4.1.4	矛盾线性方程组	101
4.1.5	齐次线性方程组的通解	104
4.2	最优化	106
4.2.1	闭区间内单峰连续函数的最小值点	106
4.2.2	函数在 n 维矩形闭区域内的最大值点	111
4.2.3	平方和形式的函数的最小值点	126
4.3	非线性方程组的求解	129
4.3.1	复杂反应体系的化学平衡计算	134
4.3.2	H_3PO_4 溶液中各种离子浓度的大小	136
第 5 章	数据处理	140
5.1	插值问题的提法	140
5.1.1	拉格朗日插值	140
5.1.2	分段低次插值	142
5.1.3	山丘基样条插值	144

5.2 数值微分与数值积分	149
5.2.1 具有明确解析式的函数的微分与积分	149
5.2.2 由离散数据点表达的函数的微分或积分	155
5.3 最小二乘法	167
5.3.1 线性最小二乘法	167
5.3.2 非线性最小二乘问题	171
5.4 基于统计学的数据处理方法	175
5.4.1 数据点的平均值、标准差与置信区间	175
5.4.2 假设检验	177
参考文献	179



第1章

MATLAB 简介与简单计算

MATLAB 是 Mathworks 公司开发的专门面向科学计算的软件和语言。目前 MATLAB 的最新版本是 MATLABR2008a, 国内较为流行的版本是 MATLAB6.5 和 MATLAB7.0。MATLAB6.5 和 MATLAB7.0 均是功能较完善的版本, 但 MATLAB7.0 具有更强和更完善的科学计算功能。因此, 本书介绍的各种函数和代码以 MATLAB7.0 为基础, 它们均能在 MATLAB7.0 环境下顺利运行。

MATLAB 科学计算、作图、数据处理功能非常全面, 内容丰富而庞杂。如果读者一开始就去全面而详细的了解 MATLAB 的各种功能, 会使得读者只见树木、不见森林, 迷失在庞杂的 MATLAB 函数里, 并不能使读者熟练掌握 MATLAB 的使用方法和技巧。因此本章将介绍 MATLAB 中最基本、最重要的内容, 读者掌握了这些最基本的东西后, 再结合后面的各章节所讲的内容, 就能够使用 MATLAB 解决日常化学实践中遇到的各种科学计算、作图和数据处理问题。如果遇到新的问题, 也能以本书所讲的内容为基础, 通过查阅其它 MATLAB 的资料或通过 MATLAB 的在线帮助, 独立地解决遇到的新问题。

1.1 MATLAB 的安装

由于现在计算机极其普及, 读者对应用软件的安装都比较熟悉, 因此, 本部分仅提及安装 MATLAB 时读者最需要注意的部分。

MATLAB 由 MATLAB 本体和数十个 MATLAB 工具箱组成。MATLAB 本体包括各种语句、命令、运算符和基本函数, 可以毫不夸张地说, 仅仅使用 MATLAB 本体, 就能完成绝大部分作图、科学计算和数据处理任务。每个 MATLAB 工具箱是一组具有特定功能的 MATLAB 函数的集合, 均能完成某个特定领域的任务, 如 MATLAB 的统计学工具箱包含一组专门处理数理统计问题的函数。MATLAB 工具箱是 MATLAB 功能的扩展, 它们需要在 MATLAB 本体的支持下发挥自身的作用。

对于 MATLAB7.0 而言, 如果把 MATLAB 本体和数十个工具箱全部安装, 需要 2GB 以上的硬盘空间。自然, MATLAB 本体是非装不可的, 但我们不必将 MATLAB 的几十个工具箱全部安装, 事实上, 我们只需要安装最常用的 MATLAB 工具箱, 一般包括统计学工具箱 (Statistics Toolbox)、最优化工具箱 (Optimization Toolbox)、偏微分方程工具箱 (Partial Differential Equation Toolbox)、曲线拟合工具箱 (Curve Fitting Toolbox)、遗传算法工具箱 (Genetic Algorithm

Direct Search Toolbox)、样条函数工具箱 (Spline Toolbox)。

选择安装这些工具箱的步骤如下。

在执行 MATLAB 安装程序，输入安装序列号后，按照安装程序的提示依次执行，将会出现“安装类型”窗口，见图 1-1，在此处，应该用鼠标点击“Custom”前面的单选框 (○)，进行自定义安装。

用鼠标点击“Custom”前面的单选框后，点击 next，就进入了“产品和文件夹”选择窗口，见图 1-2，在这个窗口，可以指定将 MATLAB 安装在哪个目录下，

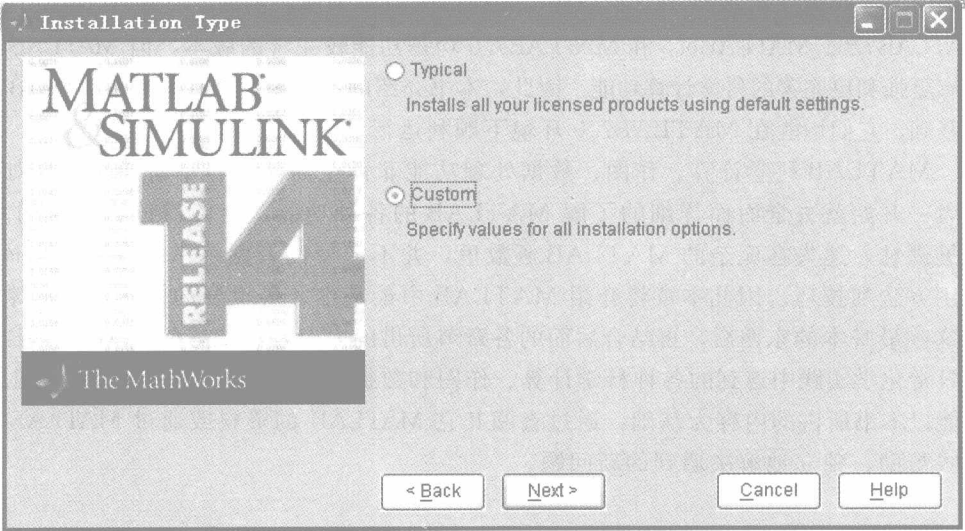


图 1-1 “安装类型”窗口

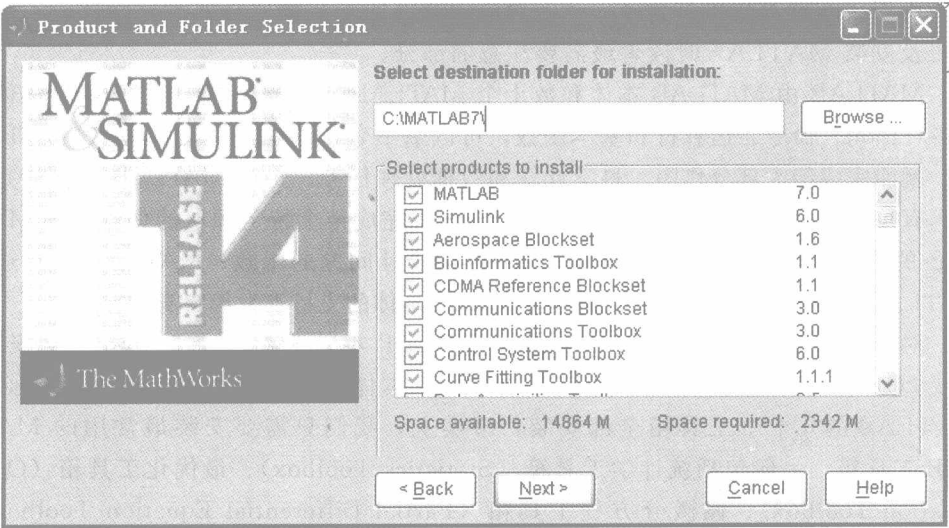


图 1-2 “产品和文件夹”选择窗口

安装哪些工具箱。在该窗口的最上方的长矩形框内，可以输入 MATLAB 的安装文件夹，也可以点击旁边的“Browse”按钮，选择希望的 MATLAB 安装文件夹。在该窗口下方的大矩形框内，可以选择需要安装的工具箱，方法是用鼠标点击每个产品（包括 MATLAB 本体和数十个 MATLAB 工具箱）前面的复选框（☐），在复选框（☐）里打上对勾（☒），如此，该复选框（☐）对应的产品将被选择，会安装到硬盘，如果不希望某工具箱被安装，而此工具对应的复选框里已经打上对勾，这时只需用鼠标点击该复选框，则该复选框里的对勾将被去掉，该工具箱将不会被安装。

1.2 一个简单的计算实例

运行 MATLAB 后，将看到 MATLAB 的界面，见图 1-3。

在这个界面里，最重要的是右面的“Command Window”窗口，在右面的“Command Window”窗口可以输入各种函数和语句，进行化学计算、作图和数据处理。

假如我们需要计算：欲配制 0.02000mol/L 的 $K_2Cr_2O_7$ 标准溶液 250mL，应称取 $K_2Cr_2O_7$ 多少克？

为了完成计算，需要在 MATLAB 的“Command Window”窗口依次输入图 1-4 所示语句。

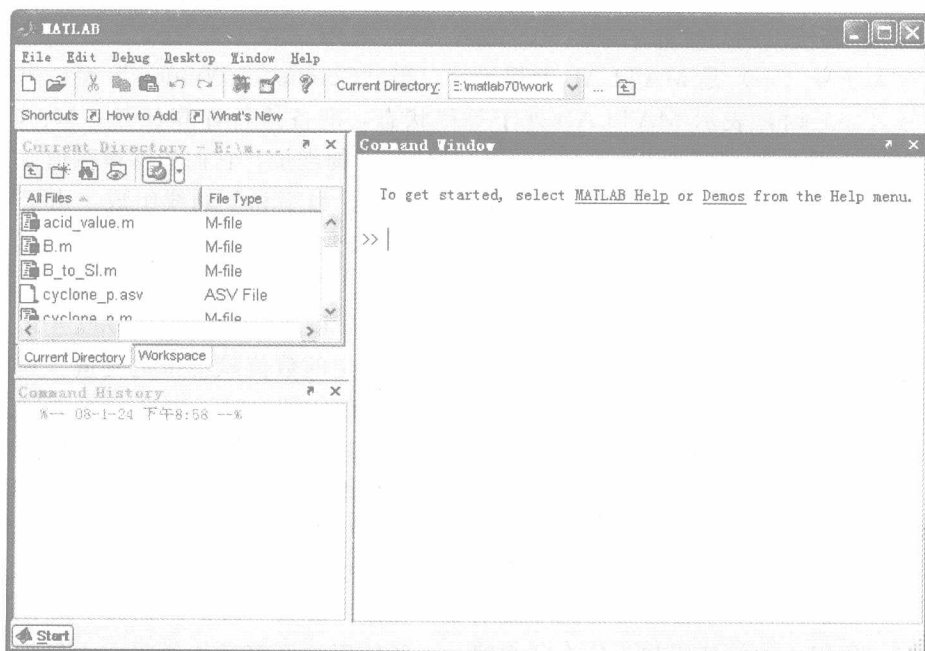


图 1-3 MATLAB 的运行界面

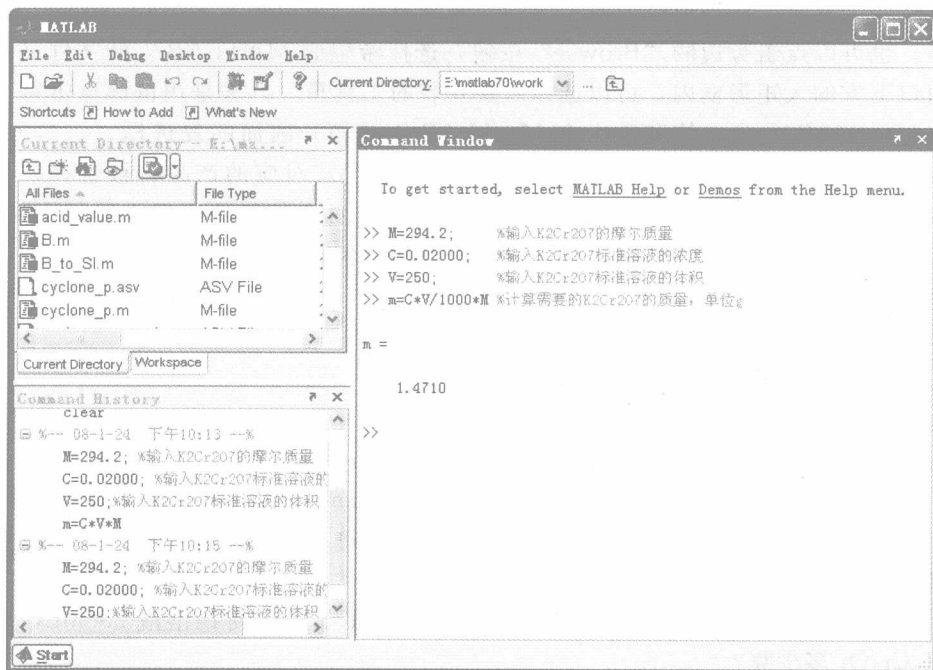


图 1-4 MATLAB 的计算结果

每输入一行，敲回车，然后输入下一行。依次输入完上述语句，最后敲回车，MATLAB 将给出最后计算结果，见图 1-4。

双大于号（>>）是 MATLAB 的提示符，当“Command Window”窗口出现双大于号（>>）时，表示 MATLAB 处于等待状态，准备执行计算任务。 M 、 C 、 V 和 m 既是变量，又是变量名，代表实际问题中某个物理量，它们能够被赋值，赋值后可以参加各种运算。MATLAB 的变量名由字母、数字和下划线组成，由字母打头。如 $m1$ 、 ab 、 A_1 、 $acid_value$ 等都是合法变量名。等号（=）是赋值号，其作用是将一定数值赋给变量。星号（*）在 MATLAB 中代表乘号，斜杠（/）在 MATLAB 中代表除号。请注意语句“ $M=294.2;$ ”和“ $m=C * V/1000 * M$ ”的区别，这两个语句在本质上是一样的，作用是把一定的数值赋给指定变量。其区别就是前一个语句后面有分号（;）后面一个语句没有分号，对于加有分号的赋值语句，MATLAB 仅仅将数值赋给指定变量而不执行其它操作，对于没有分号的赋值语句，MATLAB 不仅执行赋值操作，而且还会输出被赋值变量的数值。% 是 MATLAB 的注释符号，在注释符号后面可以输入各种说明性文本。% 连同说明性文字通常用在 MATLAB 的一条语句后面或某一函数的开头，说明语句或函数的作用。因为人总有遗忘性，对于自己编的程序或函数，在过了较长一段时间后就会忘记函数或程序的作用、如何使用和为什么这么编。因此使用注释符号加说明文本是个良好的习惯。

1.3 矩阵与向量的定义

MATLAB 的特点之一就是能够直接操作矩阵，这是 MATLAB 在科学计算方面具有极大优势的原因之一。矩阵是一种二维数据结构，具有行和列的维度。向量（包括行向量和列向量）以及数，可以看做矩阵的特殊情形或退化情形。

我们首先需要知道的是，在 MATLAB 中如何定义一个矩阵

$$\begin{matrix} 1 & 2 & 6 & 4 \end{matrix}$$

考虑一个 3 行 4 列的矩阵 $a = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 6 & 4 \\ 5 & 9 & 7 & 8 \\ 9 & 4 & 1 & 2 \end{bmatrix}$

$$\begin{matrix} 9 & 4 & 1 & 2 \end{matrix}$$

MATLAB 中，用分号“;”来分开矩阵的各行，用空格或逗号（,）来区分矩阵的各列，不管是任何矩阵，我们可以直接按行方式输入每个元素：同一行中的元素用逗号（,）或者用空格符来分隔，且空格个数不限；不同的行用分号（;）分隔。所有元素处于一方括号（[]）内。因此 3 行 4 列的矩阵 a 在 MATLAB 中定义：

$a = [1\ 2\ 6\ 4; 5\ 9\ 7\ 8; 9\ 4\ 1\ 2]$ 或 $a = [1, 2, 6, 4; 5, 9, 7, 8; 9, 4, 1, 2]$

在 MATLAB 中定义矩阵 a 及运行结果如下：

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

$$\begin{matrix} 1 & 2 & 6 & 4 \end{matrix}$$

$$a = \begin{matrix} 5 & 9 & 7 & 8 \\ 9 & 4 & 1 & 2 \end{matrix}$$

$$\begin{matrix} 9 & 4 & 1 & 2 \end{matrix}$$

或：

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

$$\begin{matrix} 1 & 2 & 6 & 4 \end{matrix}$$

$$a = \begin{matrix} 5 & 9 & 7 & 8 \\ 9 & 4 & 1 & 2 \end{matrix}$$

$$\begin{matrix} 9 & 4 & 1 & 2 \end{matrix}$$

向量是只有一行或只有一列的矩阵，因此向量在 MATLAB 中的定义完全遵照矩阵定义的规则来定义。如行向量 $a = (1\ 3\ 9\ 5)$ 在 MATLAB 中定义为 $a = [1\ 3\ 9\ 5]$ 或 $a = [1, 3, 9, 5]$ 。

$$3$$

列向量 $b = \begin{bmatrix} 7 \\ 1 \\ 9 \end{bmatrix}$ 在 MATLAB 中定义为 $b = [3; 7; 1; 9]$ 。

$$9$$

在 MATLAB 中定义行向量 a 和列向量 b 及运行结果如下：

```
>>a=[1 3 9 5]
```

$$a = 1\ 3\ 9\ 5$$

```
>>b=[3; 7; 1;9]
```

```

3
7
b= 1
9

```

接下来我们要谈一谈如何快速定义一类特殊的向量，这些向量的各个分量依次构成了一个等差数列。如行向量 p (1 3 5 7 9 11) 如何快速定义？这个行向量的各分量依次构成了首项为 1，公差为 2，末项为 11 的等差数列。MATLAB 采用冒号算符 (:) 来定义这类特殊行向量。在 MATLAB 环境输入如下语句：

```
>>p=1:2:11
```

敲回车，运行该语句，得到

```
p=1 3 5 7 9 11
```

因此，我们看出，在 MATLAB 中快速定义这类行向量，要知道向量的第一个分量，分量公差，向量的最后一个分量，然后通过冒号算符 (:)，将要定义的向量写作：

向量的第一个分量:分量的公差:向量的最后一个分量

如果分量的公差为 1，在冒号算符 (:) 连接的向量书写格式中，公差 1 可以省略，那么要定义的向量写作：

向量的第一个分量:向量的最后一个分量

如在 MATLAB 中输入语句：

```
>>p=2:6
```

回车，得到

```
p=2 3 4 5 6
```

那么对于各分量构成了一个等差数列的列向量，该如何定义呢？可以先用冒号算符 (:) 获得一个各分量构成一个等差数列的行向量，然后利用 MATLAB 的矩阵转置算符 (') 将行向量转换为列向量。

如打算定义如下列向量：

```

1
b= 4
7
10

```

可在 MATLAB 中输入如下语句：

```
>>b=1:3:10;
```

```
>>b=b'
```

敲回车，得：

```

1
b= 4
7
10

```

从另外一个角度看, 形如 $a:d:b$ 格式的行向量实际是由下面分量依次构成的行向量:

$$a, a+d, a+2d, \dots, a+(n-1)d, a+nd, \dots$$

当 $d>0$ 时, 如果 $a+nd>b$, $a:d:b$ 格式的行向量实际是 $[a \ a+d \ a+2d \ \dots \ a+(n-1)d]$, 如果 $a+nd=b$, $a:d:b$ 格式的行向量才是 $(a \ a+d \ a+2d \ \dots \ b)$ 。同样, 当 $d<0$ 时, 如果 $a+nd<b$, $a:d:b$ 格式的行向量实际是 $[a \ a+d \ a+2d \ \dots \ a+(n-1)d]$, 如果 $a+nd=b$, $a:d:b$ 格式的行向量才是 $(a \ a+d \ a+2d \ \dots \ b)$ 。

考察语句:

```
>>m=1:2:10
```

敲回车, 得到:

```
m=1   3   5   7   9
```

考察语句:

```
>>n=10:-2:1
```

敲回车, 得到:

```
n=10   8   6   4   2
```

我们来看一种有趣的情形, 比如在 MATLAB 中输入:

```
>>p=2:3:1
```

向量 p 会等于什么。根据我们上面提到的规则, 甚至向量 p 的第一个分量 2 也不应该包括在向量 p 中, 似乎向量 p 不应该包含任何一个分量。这样的向量存在吗? 存在, 在 MATLAB 中这种特殊不包含任何分量的向量称为空向量。那么上述的向量 p 是空向量吗? 我们不妨亲自在 MATLAB 中验证一下。输入上述语句后, 敲回车, 得到

```
p=Empty matrix: 1-by-0
```

MATLAB 显示 p 是一个 1 行 0 列的空矩阵, 实际就是个空行向量。

同样, 对于语句:

```
>>q=5:-2:9
```

敲回车, 得到:

```
q=Empty matrix: 1-by-0
```

q 也是一个 1 行 0 列的空矩阵, 实际上也就是空行向量。

因此, 对于形如 $a:d:b$ 格式的行向量, 当 $d>0$ 时, 如果 $a>b$, 那么该向量实际是个空向量。当 $d<0$ 时, 如果 $a<b$, 那么该向量实际也是个空向量。

下面介绍几种特殊矩阵的生成方法。

空矩阵: 不包含任何元素的矩阵

空矩阵在 MATLAB 中用 $[\]$ 表示, 如下的语句可以让变量 a 代表空矩阵:

```
>>a=[ ]
```

敲回车, 得到:

$a = []$

零矩阵：所有元素都是整数 0 的矩阵。

零矩阵使用 MATLAB 的 `zeros` 函数生成，比如希望生成一个 2 行 3 列的零矩阵 b ，则输入如下 MATLAB 语句：

```
>>b=zeros(2,3)
```

敲回车，得到：

```
b=
    0    0    0
    0    0    0
```

全 1 矩阵：所有元素都是 1 的矩阵。

全 1 矩阵使用 MATLAB 的 `ones` 函数生成，比如希望生成一个 2 行 3 列的全 1 矩阵 b ，则输入如下 MATLAB 语句：

```
>>b=ones(2,3)
```

敲回车，结果如下

```
b=
    1    1    1
    1    1    1
```

单位矩阵：对角线元素是 1，其余元素是 0 的矩阵。

单位矩阵都是方阵。MATLAB 中生成单位矩阵的函数是 `eye`，如希望生成一个 3 行 3 列的单位矩阵 b ，则输入如下 MATLAB 语句：

```
>>b=eye(3)
```

敲回车，得到

```
b=
    1    0    0
    0    1    0
    0    0    1
```

1.4 矩阵合并

MATLAB 允许将若干小矩阵合并为一个更大的矩阵，这些小矩阵从表观上就像普通的矩阵元素一样，通过空格或逗号（,）来区分列，通过分号（;）来区分行，这些小矩阵通过空格或逗号和分号连接为一个大矩阵。能够合并为一个大矩阵的各个小矩阵，它们的行数和列数必须符合一定的数量关系。

假设小矩阵 A , B , C , D 可以合并成一个大矩阵 M ，如下：

$$M = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}$$

那么，矩阵 A 的行数必须和矩阵 B 的行数相等，矩阵 C 的行数必须和矩阵 D 的行数相等；矩阵 A 的列数必须和矩阵 C 的列数相等，矩阵 B 的列数必须和矩阵 D 的列数相等。