

© 许国根 许萍萍 编著

化学化工中的 数学方法 及 MATLAB 实现



化学工业出版社



化学化工中的数学方法 及 MATLAB 实现

许国根 许萍萍 编著



化学工业出版社

· 北京 ·

MATLAB是一个功能强大的计算机软件。本书以 MATLAB6. X 版本为对象, 从实际应用的角度对化学化工中常用的数学方法及 MATLAB 实现作了浅显易懂的介绍。书中通过各种实例介绍了数值计算、优化、数理统计、人工神经网络和模糊逻辑工具、偏微分方程数值解、遗传算法、化学模式识别、化学因子分析、化学量测信号的处理方法、化学校正理论、小波分析等各种数学方法的基本原理, 重点阐述了各种算法的 MATLAB 实现并由此来解决实际问题, 使读者能够熟练掌握 MATLAB 语言并改进各种算法。

本书可作为高等学校化学、化工、环境保护及材料、医药、卫生等一些相关专业师生的参考教材, 对从事上述领域研究工作的广大科技工作者和开发应用人员也具有重要的参考价值。对于其它学科领域的读者, 本书也不失为一本有用的参考书。

图书在版编目 (CIP) 数据

化学化工中的数学方法及 MATLAB 实现/许国根, 许萍萍编著. —北京: 化学工业出版社, 2008. 1
ISBN 978-7-122-01598-3

I. 化… II. ①许…②许… III. ①化学-计算机辅助计算-软件包, MATLAB②化学工业-计算机辅助计算-软件包, MATLAB IV. 06-39 TQ-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2007) 第 182882 号

责任编辑: 傅聪智

文字编辑: 云 雷

责任校对: 陈 静

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 装: 北京市彩桥印刷有限责任公司

720mm×1000mm 1/16 印张 20 字数 404 千字 2008 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: 40.00 元

版权所有 违者必究

前言

数学是一切数量科学和工程学的基础。20 世纪 80 年代以后，化学及化学工程得到了迅速发展，其中数学无疑是以各种形式起了重要作用。随着数学、计算机技术的发展，特别是自 20 世纪 70 年代以来计算机技术的普及，数学在化学中的地位和作用日益突出和重要，其应用也日益广泛，以至形成了一门新的学科，即化学计量学。经过广大化学工作者和数学工作者的努力，各种信息处理的数学方法已成为化学、生物化学、医学化学、环境化学及药物化学等学科科学研究中的强有力手段，其重要性已被广大化学工作者所认识，各种数学方法和内容也得到了极大的充实和扩展。

现代化学化工中涉及较多的数学知识，但是化学工作者一般只经历了高等数学、概率和数理统计等课程的学习。在这些课程的教学过程中，也仅仅提供微积分、微分方程、概率和数理统计等必要的基本知识，对实际问题中复杂的、海量的信息的处理、数值计算、模型分析等过程需要的数学知识介绍很少。化学工作者一般都缺乏系统的数学知识，更谈不上对它们的熟练掌握和应用。数学知识的普遍欠缺直接影响化学科学研究向深度和广度的发展，制约着化学从实验科学向理论科学的转变。

值得庆幸的是随着计算机技术的发展，科学研究和工程应用中大量的数学计算可以借助于计算机完成，出现了许多有名的计算机语言及用这些语言编制的数学软件。目前流行的 Basic、Fortran、Pascal 和 C 等语言就是其中较为典型的几种计算机语言。但在用这些计算机语言编制计算程序时，既需要对有关算法有深刻的了解，还需要熟练掌握所用语言的语法及编程技巧，这对多数科学工作者而言，同时具备这两方面才能有一定困难，同时繁杂程序的编写，不仅消耗人力与物力，而且还影响工作进程和效率。

为了克服上述困难，美国 Mathwork 公司于 1967 年推出了“Matrix Laboratory”（MATLAB）软件包，并不断更新和扩充。MATLAB 软件是一种功能强、效率高、便于进行科学和工程计算的交互式软件包。它包括了一般数值计算、矩阵运算、数字信号处理、建模和系统控制与优化等实际研究中经常使用的应用程序，并集应用程序和用户图形界面于一个使用方便的集成环境中，在此环境下所解问题的 MATLAB 语言表述方式和其数学表达形式相同，不需要按传统的方法编程。这使得 MATLAB 特别容易学习和使用，而且可以根据自己的实际需要扩充其功能。虽然 MATLAB 语言也需要学习，但由于 MATLAB 编程运算与人进行科学计算的思路 and 表达方式完全一致，用 MATLAB 编写程序犹如在演算纸上排列出公式与求解

问题,所以编程效率高,易学易用,不像学习其它高级语言如 Basic、Fortran、Pascal 和 C 等语言那样难以掌握。实践证明,你可在几十分钟的时间内学会 MATLAB 的基础知识,在短短几个小时的使用中就能初步掌握它,从而使你能够进行高效率 and 富有创造力的计算。MATLAB 大大降低了对使用者的数学基础和计算机语言知识的要求,而且编程效率和计算效率极高,还可在计算机上直接输出结果和精美的图形,所以它成了高效的科研助手。自推出后,即风行美国、流传全世界。正是 MATLAB 具有如此强大的功能,使我们深深体会到撰写一本关于化学化工常用的数学方法及 MATLAB 实现的书籍,帮助广大的化学工作者掌握相关的数学知识以解决实际问题,以适应化学学科发展的需要是很有意义的。

本书总结了我们在化学研究中应用 MATLAB 的经验,以 MATLAB6.X 版本为计算平台,编排了 MATLAB 基础、MATLAB 在化学计算中的应用、优化及统计工具箱、人工神经网络和模糊逻辑工具、偏微分方程数值解、遗传算法、化学模式识别、化学因子分析、化学量测信号的处理方法、化学校正理论、小波分析等章节,力求使本书的内容全面、广泛,真正做到“一书在手,数学不愁”。可以说,本书几乎囊括了化学化工研究中常用的数学方法。希望这样的编写安排,能使化学工作者更加全面地了解 and 掌握各种数学方法,“择己所需”,选择与自己研究有关的数学方法,解决各自研究领域中的实际问题。

书中实例虽然主要涉及的是化学、化工及环境学科,但数学方法是通用的,读者经过适当的修改,数学计算的程序完全可以用于其它学科,所以对从事其它学科研究的研究人员,本书也有重要的参考价值。

需要说明的是由于 MATLAB 版本的不同,有些 MATLAB 函数的 GUI 界面、调用格式等会有所不同,但这并不影响本书的实用性。

在本书编写过程中,得到了化学工业出版社极大的支持和帮助,研究生殷俊为本书制作了光盘,在此一并表示衷心的感谢!

由于作者水平及篇幅所限,书中难免存在疏漏,敬请读者批评指正。

作 者
2008 年 1 月于西安

目 录

第 1 章 MATLAB 基础	1
1.1 MATLAB 主要功能	1
1.1.1 MATLAB 简介	1
1.1.2 MATLAB 数值计算	2
1.1.3 符号计算	5
1.1.4 MATLAB 绘图	7
1.1.5 数据类型及输出和输入	10
1.2 MATLAB 程序设计	12
1.2.1 M 文件	12
1.2.2 变量类型	13
1.2.3 程序结构	13
1.2.4 程序流控制语句	15
1.2.5 程序的调试	16
1.2.6 编程要点	16
第 2 章 MATLAB 在化学计算中的应用	18
2.1 数值计算	18
2.1.1 溶液 pH 值计算	18
2.1.2 浓度计算	19
2.1.3 其它	20
2.2 绘图及数据图示	27
2.2.1 酸碱的对数浓度图	27
2.2.2 滴定曲线绘制	27
2.2.3 原子轨道	28
2.2.4 绘制相图	29
2.3 曲线拟合及插值	33
2.3.1 曲线拟合	33
2.3.2 数据插值计算	38
2.4 其它应用	42
2.4.1 投入产出分析法概述	42
2.4.2 投入产出分析的数学模型	43

2.4.3 层次分析法 (AHP) 法	46
第 3 章 优化及统计工具箱在化学中的应用	51
3.1 优化工具箱	51
3.1.1 优化工具箱中的函数	51
3.1.2 应用时需要注意的问题	52
3.1.3 应用	52
3.2 统计工具箱	58
3.2.1 统计工具箱函数	58
3.2.2 统计工具箱函数应用	63
3.2.3 方差分析	66
3.2.4 回归分析	71
3.2.5 聚类分析	76
3.2.6 判别分析	78
3.2.7 主成分分析	80
3.2.8 试验设计	81
3.2.9 正交实验设计	85
第 4 章 神经网络和模糊系统工具箱在化学中的应用	90
4.1 神经网络工具箱	90
4.1.1 神经网络基础	90
4.1.2 基于 MATLAB 工具箱的神经网络概述	96
4.1.3 神经网络工具函数	97
4.2 模糊系统工具箱	113
4.2.1 模糊系统理论基础	113
4.2.2 模糊系统工具箱函数	115
4.2.3 应用举例	119
第 5 章 遗传算法	136
5.1 遗传算法的基本概念和原理	136
5.1.1 遗传算法的基本概念	136
5.1.2 遗传算法的基本原理	137
5.2 MATLAB 遗传算法工具箱	138
5.2.1 MATLAB 遗传算法工具箱概述	139
5.2.2 MATLAB 遗传算法和搜索工具箱的使用	147
5.3 MATLAB 直接搜索工具箱	154
5.3.1 直接搜索工具的使用	154
5.3.2 模式搜索参数	156

5.4 遗传算法在化学中的应用	158
第 6 章 偏微分方程的数值解	168
6.1 偏微分方程工具箱的基本功能	168
6.1.1 偏微分方程可解类型	168
6.1.2 边界条件	169
6.2 偏微分方程工具箱的图形用户界面 (GUI) 的使用	169
6.2.1 偏微分方程的图形用户界面 (GUI)	169
6.2.2 用工具箱解偏微分方程的步骤	170
6.2.3 GUI 解方程的方法	172
6.3 使用 PDE 工具箱的命令行求解偏微分方程	175
6.4 偏微分方程的有限差分法	176
6.5 偏微分方程在化学化工中的应用	177
第 7 章 化学因子分析	187
7.1 因子分析概述	187
7.1.1 因子分析的一般数学模型	187
7.1.2 化学因子分析的基本步骤	188
7.2 常见的化学因子分析	189
7.2.1 主成分分析	189
7.2.2 因子分析	193
第 8 章 化学校正分析	211
8.1 数据矩阵的构成	211
8.2 常见的化学校正方法	212
8.2.1 单变量校正	212
8.2.2 多元校正方法	217
8.2.3 非线性校正方法	230
8.3 回归模型的诊断	233
第 9 章 化学模式识别	237
9.1 数据的预处理	238
9.1.1 丢失数据的弥补	238
9.1.2 数据的预处理	239
9.1.3 特征的提取和压缩	241
9.1.4 相似系数和距离	243
9.2 模式识别方法	244
9.2.1 有管理的方法	244

9.2.2 无管理方法	264
9.2.3 显示方法	266
第 10 章 分析信号处理方法	268
10.1 分析信号基本处理方法	268
10.1.1 数字平滑和滤波	268
10.1.2 信号求导	270
10.1.3 曲线拟合	271
10.1.4 曲线面积的估计	271
10.1.5 信号的相关性	272
10.2 信号的 Fourier 变换	274
10.3 时间序列信号分析	276
10.3.1 平稳随机信号的描述	277
10.3.2 随机信号的谱估计	277
10.3.3 平稳时间序列建模	279
10.3.4 时间序列均生函数建模方法	281
第 11 章 小波分析	292
11.1 小波分析的数学基础	292
11.1.1 小波的定义	293
11.1.2 小波变换	295
11.1.3 小波函数的选择	295
11.2 小波变换在 MATLAB 中的实现	296
11.2.1 一维连续小波变换 (CWT)	296
11.2.2 离散小波变换 (DWT)	296
11.2.3 一维离散小波的重建算法	297
11.2.4 二维离散小波变换	298
11.2.5 二维离散小波变换的重建算法	298
11.2.6 小波包分析	298
11.2.7 小波树的操作	299
11.2.8 小波工具箱的 GUI 用法简介	300
11.3 MATLAB 的小波分析	300
11.3.1 小波变换用于信号降噪	301
11.3.2 信号压缩	303
11.3.3 小波分析用于图像增强	304
11.3.4 小波分析用于样本估计	304
11.4 小波分析在化学中的应用	305
参考文献	312

第 1 章 MATLAB 基础

MATLAB 代表 Matrix Laboratory, 是一个高性能的科学计算平台, 集成了数值计算、矩阵计算和图形绘制等众多功能。在 MATLAB 中问题的提出和解答只需按一般的数学方式表达和描述, 不需要大量原始而传统的编程过程, 因此它特别适用于研究、解决工程和数学问题。MATLAB 还具有易扩展性, 每个使用者都可创造自己的应用程序, 并可能成为促进其发展有贡献的作者之一。

1.1 MATLAB 主要功能

1.1.1 MATLAB 简介

MATLAB 启动后, 将自动打开命令窗口, 如图 1-1 所示。

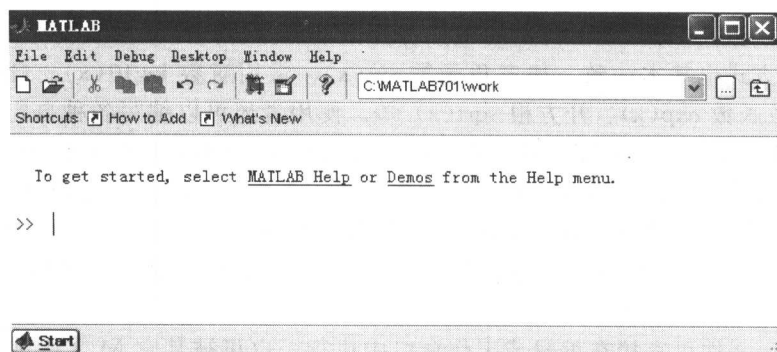


图 1-1 MATLAB 命令窗口

MATLAB 按默认的路径启动, 可以通过 pathtool 改变路径, 将目录加到 MATLAB 的默认路径中。图中 “>>” 为 MATLAB 命令的提示符, 显示正在等待执行命令。此时如果输入相应的命令, MATLAB 就会运行, 并得到运行结果。可以使用光标键 ← ↑ ↓ → 调用前面的命令及在命令行中移动光标位置以修改命令。

从 File 菜单的 New 子菜单中选择执行 M-file, 或单击菜单工具栏中的  按钮, 则弹出程序编辑窗口, 如图 1-2 所示。

使用者可以在此窗口输入 MATLAB 程序代码, 并可进行编辑、保存、运行和调试等操作。运行程序时, 计算结果将在命令窗口中显示。

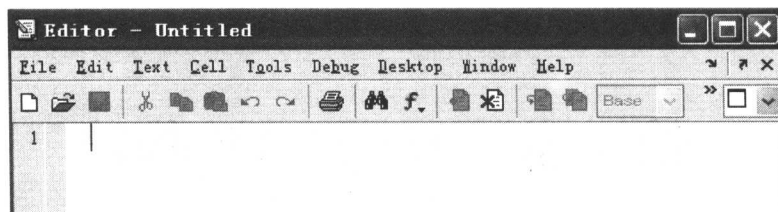


图 1-2 MATLAB 程序编辑窗口

MATLAB 的变量、函数及 Script 文件介绍如下。

(1) 变量 MATLAB 变量的命名应遵守一定的规则：变量以字母打头（区分大小写），之后可以是任意字母、数字或下划线，但最长不能超过 36 个字符，也不能与 MATLAB 中的特殊变量如 ans、pi、eps、inf、NaN、i、j、nargin、nargout 等同名。

(2) 注释与标点 命令行中“%”符号后的所有文字为注释，计算机不会执行。多条命令可以放在同一行，但要用逗号或分号隔开。命令后的逗号表示显示结果，分号则禁止显示。

符号“...”表示语句的余下部分将出现在下行，但它不能出现在变量名或运算符之间。

(3) 函数 MATLAB 自带的函数称为内部函数。内部函数支持常用的数学函数，书写方式也基本一致，如三角函数 $\sin(x)$ 、常用对数 $\log_{10}(x)$ 、自然对数 $\log(x)$ 、指数函数 $\exp(x)$ 、开方根 $\sqrt{x}$ 等。使用者还可以编写各种自定义的函数，然后像 MATLAB 内部函数一样，在工作环境、Script 文件和其他函数中调用。

(4) Script 文件 将 MATLAB 命令放在一个文件中，然后告诉 MATLAB 打开文件并顺次执行其中的命令，这个文件被称为 Script 文件，它可从 files 菜单中选择 new 及 M-file 子菜单创建。Script 文件具有全局性，文件中的所有变量将在整个工作环境中有效。

Script 文件可直接在编辑或工作窗口中执行，也可被其它 M 文件和函数调用。在工作窗口直接输入 Script 文件名便可运行，而在编辑窗口中运行 Script 文件需打开 Debug 菜单中的 Run 命令，然后切换到工作窗口观察运行结果。

1.1.2 MATLAB 数值计算

1.1.2.1 矩阵与数组运算

(1) 数组和矩阵创立 数组是 MATLAB 所有类型变量，包括标量、向量、矩阵字符串、单元数组、结构体和对象的存储形式，矩阵是二维的数组。

数组或矩阵的创立以左括号开始，以空格（或逗号）为间隔输入元素值，最后以右括号结尾。一行中的元素用空格或逗号隔开，而行之间用分号（;）或硬回车（换行）分开。命令后的逗号表示不在屏幕上显示结果。

对于数目较多数组的输入,则采用下述命令比较适合:

$x = \text{first} : \text{increment} : \text{last}$ first 开始, last 结束, 步长为 increment (默认为 1)

$x = \text{linspace}(\text{first}, \text{last}, n)$ first 开始, last 结束, 有 n 个元素

$x = \text{logspace}(\text{first}, \text{last}, n)$ 10^{first} 开始, 10^{last} 结束, 有 n 个元素

对于一些特殊的矩阵如稀疏矩阵, MATLAB 用特殊的符号表示, 如:

$[]$ 空矩阵 compan 伴随矩阵 eye 单位矩阵

ones 元素全为 1 的矩阵 zeros 元素全为 0 的矩阵 magic 魔方矩阵

rand 元素服从 0、1 之间均匀分布的随机矩阵 pascal 三角矩阵

randn 元素服从零均值单位方差正态分布的随机矩阵

(2) 运算 矩阵和数组的意义相同, 但运算有所区别。数组的运算是对应元素的运算, 用“.”运算符表示, 如 $A.*B$ 表示 A 和 B 两数组对应的元素相乘, 而矩阵的运算是指矩阵间的运算, 用“运算符”表示, 如 $A*B$ 表示的是 A 和 B 两矩阵的相乘。矩阵和数组运算时遵守各自的运算规律。

(3) 编址 在进行数组和矩阵的有关操作时, 应了解数组和矩阵的编址规律。

$A(r,c)$ 对由 r 定义的行和由 c 定义的列所构成的 A 中的子数组进行编址

$A(r,:)$ 对 r 定义的行和全部列所构成的 A 中的子数组进行编址

$A(:,c)$ 对由全部行和 c 定义的列所构成的 A 中的子数组进行编址

$A(:)$ 逐列对 A 中的所有元素作为一个列向量进行编址

$A(i)$ 对由单独的序号向量 i 定义的 A 中元素进行编址

$A(x)$ 对由逻辑数组 x 定义的 A 中的子数组进行编址, x 只含 0 和 1 其大小与 A 相同。

(4) 大小寻找 通过下列函数查找矩阵或数组的大小。

whos 显示工作空间存在的变量及其大小

$[r,c] = \text{size}(A)$ 返回的两个变量 r 和 c 分别表示 A 的行数和列数

$r = \text{size}(A,1)$ 在变量 r 中返回 A 的行数

$c = \text{size}(A,2)$ 在变量 c 中返回 A 的列数

$n = \text{length}(A)$ 在变量 n 中返回 $\max(\text{size}(A))$

$n = \text{ndims}(A)$ 在变量 n 中返回 A 的维数

$i = \text{find}(\text{关系式})$ 返回矩阵或数组中使关系式为真的元素的下标

$[r,c] = \text{find}(\text{关系式})$ 返回矩阵或数组中使关系式为真的元素的行和列下标

(5) 矩阵函数 矩阵是 MATLAB 的基础。线性代数中有关矩阵的运算都可以在 MATLAB 中找到相应的函数, 如:

$\text{det}(A)$ 求矩阵 A 的行列式 $\text{inv}(A)$ 求矩阵 A 的逆矩阵

$\text{rank}(A)$ 求矩阵 A 的秩 A' 求矩阵 A 的转置

$\text{eig}(A)$ 求矩阵的特征值 $[U,S,V] = \text{svd}(A)$ 对矩阵 A 作奇异值分解

具体的矩阵运算函数名及调用格式可通过 MATLAB 的帮助功能查到, 或参见 MATLAB 的参考书。

1.1.2.2 数据分析

MATLAB 在作数据分析时,如果输入的是向量,运算是对整个向量进行的;若输入的是数组(矩阵),则运算按列进行。

利用 MATLAB 可进行数据的基本统计计算,如下列各种函数所示。运算时如果调用格式中有 dim 则指明运算按指定维数进行。

max(x,dim)	求最大元素	min(x,dim)	求最小元素
median(x,dim)	求中位值	mean(x,dim)	求平均值
std(x,flag)	求标准差,flag 指明标准差的不同计算方式		
prod(x,dim)	求积	sum(x,dim)	求和
cumsum(x,dim)	求累计和	cumprod(x,dim)	求累计积
cov(x)	求协方差阵	cov(x,y)	求相关阵
corrcoef(x)	两随机变量的协方差	corrcoef(x,y)	两随机变量的相
sort(x)	以升序排列元素		关系数

1.1.2.3 数值分析

有关数值分析的函数见表 1-1。

表 1-1 数值分析函数

函 数		意 义
数值积分	quad('fun',a,b,Tol,trace)	Simpson 法求 'fun' 在 $[a,b]$ 区间积分,Tol 为控制精度,trace=1 用图形展示积分过程,缺省时(0)不显示
	quad8('fun',a,b,Tol,trace)	Newton-Cotes 法,精度较高
	trapz(x,y)	梯形积分法,依据 x 计算 y 的积分
	cumsum(x)	欧拉积分法,精度较差
多项式	r=roots(p)	求多项式 p 的根
	polyder(p)	多项式微分
	polyder(a,b)	多项式 a 和 b 乘积的微分
极值分析	x=fminbnd('fun',a,b)	寻找 $[a,b]$ 区间 'fun' 的最小值
	x=fminbnd('fun',a,b,options,P1,P2,...)	使用 options 参数 P1、P2、...,寻找 $[a,b]$ 区间 'fun' 的最小值
零点分析	z=fzero('fun',x)	寻找 $[a,b]$ 区间 'fun' 的零点
	z=fzero('fun',x,Tol,trace,P1,P2,...)	显示每次迭代结果,Tol 控制精度,使用 options 参数 P1、P2、...,寻找零点
插值分析	z=interp1(x,y,x0,'method')	插值求 $y=f(x)$ 曲线 x_0 处的 y 值,可以用样条(spline)方法,'method' 缺省为线性插值
	a=interp2(x,y,z,x0,y0,'method')	插值求 $z=f(x,y)$ 曲线 x_0,y_0 处的 z 值,'method' 可以是 'linear','cubic','nearest'
曲线拟合	pp=polyfit(x,y,n)	由 (x_i,y_i) 数据对拟合 n 次多项式 pp
	y=polyval(pp,xi)	在 xi 处求拟合曲线的 y 值
	pp=spline(x,y,xi)	由 (x_i,y_i) 数据对拟合三次样条 pp
	y=ppval(pp,xi)	在 xi 处求拟合曲线的 y 值
微分方程解	[t,x]=ode23('f',tspan,x0)	龙格-库塔法解一阶微分方程,
	[t,x]=ode45('f',tspan,x0)	tspan=[t0,tn](积分的起始和终止值)

1.1.2.4 关系运算和逻辑运算

(1) 关系操作符 关系操作符见表 1-2。当两个量间的关系存在，则关系运算的结果为真，其值等于 1；反之值为 0。

表 1-2 关系操作符

关系操作符	说明	关系操作符	说明
<	小于	>=	大于或等于
>	大于	==	等于
<=	小于或等于	~=	不等于

(2) 逻辑运算 逻辑操作符见表 1-3。

表 1-3 逻辑操作符

逻辑操作符	说 明
&	与
	或
~	非

逻辑操作符同样用于两个同样大小的数组，或用来比较一个数组和一个标量。运算中规定非零元素的逻辑量为“真”，其值为 1，零元素的逻辑量为假，其值为 0。

1.1.3 符号计算

符号运算是 MATLAB “符号数学工具箱”具有的功能，它是指运算对象允许是非数值的符号变量。

(1) 符号表达式 符号表达式是代表数字、函数、算子和变量的 MATLAB 字符串，或字符串数组，不要求变量有预先的值。

符号表达式可以直接用单引号括起来表示，也可以用 sym、syms 或 inline 命令来创建。

```
>>'1/(2 * x^n)'           %单引号表示是字符串
>>'a * x^2 + b * x + c = 0' %表示为代数方程
>>f=inline('x^2+5')       %定义函数
>>f=sym('a * x^2 + b * x + c = 0') %表示 f 为符号方程式
>>a=sym('[2 * x, sin(x); sqrt(x), cos(x)]') %创建 2×2 的符号矩阵
>>syms x y                %表示 x,y 为自变量,下列 f 是符号表达式,但这个方法不能
                           %创建符号方程

>>f=sin(x)+cos(y)
```

在符号表达式中，MATLAB 约定 D 表示一次微分，D2 表示二次微分，…，符号 Dy 相当于 Dy/Dt ，因此下式表示微分方程：

```
>>f='(Dy)^2+y^2=1'
```

在符号表达式中，如果变量数多于一个，除非特别声明，否则只有一个是独立

变量。一般 x 永远是独立变量，可以使用函数 `symvar` 询问自由变量。符号变量不一样，运算结果是不同的。

(2) 符号表达式运算

① 符号与数值间的转换

`digits(d)` 设置有效数字个数为 d 的近似精度
`vap(s)` 返回表达式 s 在 `digits` 函数设置下的精度的数值解
`vap(s,d)` 返回表达式 s 在 `digits(d)` 精度下的数值解
`subs(s,old,new)` 以 `new` 代替表达式 s 中 `old`, 其中 `old` 为表达式中的符号变量, `new` 为符号或数值变量或数值表达式

② 数值矩阵转换为符号矩阵 常数(数值)也可以表示为符号表达式。因此符号矩阵运算过程中如有数值矩阵，必须将其转换成符号矩阵。

```
>>a=[10.5 12;8.9 5.6];            %矩阵
>>f=sym(a)                        %说明 a 是符号矩阵或将其转换成了符号矩阵
f=[21/2,12]
[89/10,28/5]
```

(3) 运算 函数符号的运算可以通过 `funtoolGUI` 界面进行，各种运算的意义可通过界面上的 `help` 键获得。其中符号的微分、差分计算可以用与数值微分、差分相同的符号 `diff`：

`diff(s,'x',n)` 对符号表达式 s 中的自变量 x 进行 n 次求导(n 缺省值为 1)
`int(f,'a','b')` 对符号表达式 s 中的自变量 x 在 $[a,b]$ 区间进行积分
 符号矩阵的运算则与数值矩阵的运算完全相同，如：

```
>>a=sym(' [x+2;3 * x+3] ');b=sym(' [x^2;3 * sin(x)+3] ');
>>a+b
ans = x+2+x^2
      3 * x+6+3 * sin(x)
```

代数方程(组)的符号求解函数为 `solve()`：

```
r=solve(eq1,eq2,...,eqn,var1,var2,...,varn)
```

式中，`eq1`, `eq2`, ..., `eqn` 为方程(组)，`var1`, `var2`, ..., `varn` 为指定变量(缺省为 x)。如果对单个方程或方程组不能得到符号解，则返回数值解。

对于线性方程，可以用右除“\”进行符号求解。

常微分方程(组)的符号求解函数为 `dsolve`：

```
r=dsolve('eq1,eq2,...,eqn','cond1,cond2',...,'v')
```

式中，`eq1`, `eq2`, ..., `eqn` 为常微分方程，`cond1`, `cond2` 为方程的初始条件， v 为自变量，一般是微分符号 D 后面的字母。

初始条件的定义：' $y(a)=b$ ' 及 ' $Dy(a)=b$ '

在 MATLAB 中，还可以根据以下两种格式调用加拿大滑铁卢大学的 `maple` 软件中的命令进行符号计算。

>>maple(statement) statement 是字符串,表示 maple 的命令。

>>maple('function',arg1,arg2,...) 调用 maple 库中的函数,计算 arg1,arg2,...
参数定义的函数'function'。

(4) 符号表达式绘图函数 MATLAB 提供了函数 `ezplot` 或 `fplot` 来完成该任务:

```
ezplot('fun',[xmin xmax])
```

在 [xmin xmax] 区间，绘制函数 'fun'。一旦该曲线处于图形窗口，它可以像其它图像一样作修改。'fun' 可以是自定义函数。

1.1.4 MATLAB 绘图

仿真数据的图形化是科学研究中不可缺少的手段。MATLAB 能够给数据以二维、三维乃至四维的图形表现。MATLAB 的绘图是建立在一组“图形对象”(graphics objects)基础上,核心是“图形句柄”(graphics handle)操作。

1.1.4.1 二维绘图

(1) 绘图函数 plot、figure 和 subplot

① plot 命令 plot 函数有三种基本调用格式：`plot(x,y)`；`plot(x1,y1,x2,y2,...)`；`plot(x)`。

第一种格式是绘制以 x 、 y 元素为横、纵坐标的连线图。若 x 、 y 是等维的矩阵，则以 x 、 y 对应列元素为横、纵坐标分别绘制曲线，曲线的根数等于矩阵的行数。

第二种格式是绘制多根曲线，每个二元对 $x-y$ 的作用与 `plot(x,y)` 中的相同。

第三种格式根据包含在 x 中的数据类型的不同，绘制不同的图形。如果 x 是一个复数向量，`plot(x)` 可以理解为 `plot(real(x), imag(x))`；如果 x 是实数阵，则可解释为 `plot(1:length(x), x)`，即画出对其下标的图形；当 x 是一个矩阵，则以 x 元素值为纵坐标，以相应元素的下标为横坐标，绘制连线图。

② figure 命令 figure 可以创建多图形窗口。每发一次命令，就创建一个图形窗口。

当创建一个多图形窗口时，每个新的窗口将会覆盖所有以前的窗口。可以用鼠标或用 `figure(h)`、`shg` 命令激活该图形窗口；用鼠标或 `close(h)` 或 `close all` 命令关闭，这里 `h` 是图形的句柄。如果仅仅想清除一个图形窗口中的内容而不关闭图形窗口，可用命令 `clf`；如果想清除当前图形窗口并重新设置图形的所有特征，可用命令 `clf reset`。

③ subplot 命令 subplot 命令是图形显示时分割窗口的命令，可以实现在同一窗口中显示多个图形，如 subplot (m, n, p)，此命令把当前图形窗口分割成 $m \times n$ 个绘图区域，并选择第 p 个区域为激活区域。子图沿头一行从左到右编号，接着排第 2 行，依此类推。

当激活某一特定的子图时，仅这个子图或坐标轴响应 `axis`、`hold`、`xlabel`、`ylabel`、`title` 和 `grid` 命令，其它子图不受影响。

(2) 线型、标记和颜色 在 plot 加如表 1-4 所示的附加参量, 就可以指定图形所要的颜色和线型。

表 1-4 基本线型和颜色

符号	颜色	符号	线型	符号	线型
y	黄色	•	点	s	方形
m	紫红	。	圆圈	d	菱形
c	青色	x	x-标记	^	下向三角形
r	红色	+	加号	v	上向三角形
g	绿色	*	星号	<	左向三角形
b	蓝色	-	实线	>	右向三角形
w	白色	:	点线	p	五边形
k	黑色	-.	点划线	h	六边形
		--	虚线		

(3) 加格栅和标志

grid on/off 在当前图形的单位处加或取消格栅
xlabel('string') 用'string' 标记横坐标轴
ylabel('string') 用'string' 标记纵坐标轴
title('string') 图形的顶部添加文本'string'
text(x,y,'string') 按图形坐标轴单位在坐标(x,y)处标记文本
gtext('string') 使用鼠标在图形的任意位置放置文本

(4) 加图例 Legend 用文本确认每一个数据集，把图例放置在图形的空白处。

(5) 定制图形坐标轴

axis 命令可以对横、纵坐标轴的刻度和外观进行控制，其最常用的是：
axis 显示当前坐标轴的刻度范围
axis off/on 关闭或开启坐标轴的显示
axis('square') 在方形框内作图
axis('normal') 坐标恢复到正常比例
axis([xmin xmax ymin ymax]) 设置坐标的上下边界

要注意 axis 命令仅对当前的图形起作用。

(6) 图形保持 hold on/off 在已存在的图形中添加或取消曲线，如新的数据不符合当前坐标轴的界限，则自动调节坐标轴标尺。

(7) zoom 命令

zoom on/off 用鼠标左键为当前图形打开或取消缩放模式，每次放大一次
zoom out 返回图形的起始状态

(8) 函数 ginput

[x,y]=ginput(n) 在当前图形窗口的图形中选择坐标点 (x,y)

(9) 图形参数的设置 利用下列语句可以重新设置图形的某些参数值，例

set(gcf,'color','blue') 将当前图的背景设置为蓝色

set(gcf,'color','white','menubar','none','numbertitle','off','name','hello') 将绘图窗口的背景颜色由默认的灰色改为白色，并为窗口设定一个定制的文字标题。