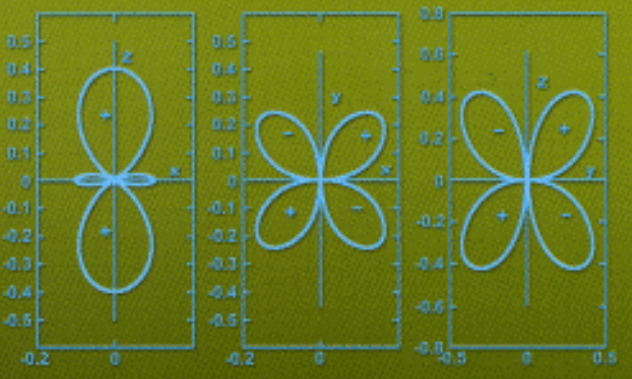
21世纪工程应用计算机技术丛书

MATLAB
在化学中的应用

许国根　许萍萍　谭宪林　编著



西安交通大学出版社
XI'AN JIAOTONG UNIVERSITY PRESS

21 世纪工程应用计算机技术丛书

MATLAB 在化学中的应用

许国根　许萍萍　谭宪林　编著

西安交通大学出版社

内 容 简 介

MATLAB 语言是一种简单、高效、功能极强的高级语言，在科学与工程计算领域中有着其他语言无法比拟的优势。本书以 MATLAB 5.X 和 6.X 版本为对象，从实际应用的角度对 MATLAB 在化学研究中的应用作了浅显易懂的介绍。书中通过列举各种实际例子，既介绍了 MATLAB 的一般用法，包括常用命令、语法规则、矩阵运算、数学函数及二、三维图形的绘制，又介绍了比较复杂的数值计算、图形用户界面和工具箱函数回调的编写方法。

本书重点阐述了如何利用 MATLAB 解决化学研究中的实际问题，介绍了数值计算、绘图及优化、统计、神经网络和模糊逻辑等工具箱函数的应用；通过介绍实例和实际编写 MATLAB 程序，使读者能够熟练应用 MATLAB 语言实现并改进各种算法。

本书可作为高等学校化学、化工及环境保护各专业及材料、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。对于其他学科领域的读者，本书也不失为一本极好的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

MATLAB 在化学中的应用/许国根，许萍萍，谭宪林编著. —西安：西安交通大学出版社，2005.7
(21 世纪工程应用计算机技术丛书)
ISBN 7-5605-1955-5

Ⅰ.M… Ⅱ.①许… ②许… ③谭… 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(2005)第 022354 号

书　　名	MATLAB 在化学中的应用
编　　著	许国根　许萍萍　谭宪林
责任编辑	屈晓燕　贺峰涛
文字编辑	葛赵青
出版发行	西安交通大学出版社
地　　址	西安市兴庆南路 25 号(邮编：710049)
电　　话	(029)82668315　82669096(总编办) (029)82668357　82667874(发行部)
电子邮件	eibooks@163.com
印　　刷	陕西向阳印务有限公司
版　　次	2005 年 7 月第 1 版　2005 年 7 月第 1 次印刷
开　　本	787 mm×1 092 mm　1/16
印　　张	13.125
字　　数	314 千字
书　　号	ISBN 7-5605-1955-5/TP·395
定　　价	18.00 元

版权所有　侵权必究

前　言

化学是一门实验性较强的学科，其数据积累居于各门学科的前列。化学工作者在实际工作中首先遇到的问题是如何从繁多的信息中总结出经验或半经验规律，以指导实验或提供线索，达到事半功倍的效果。在化学信息的分析、处理中，必然要应用到复杂数据的数学处理、数值计算、模型分析等知识，同时，化学学科本身也逐步从经验科学向理论科学迈进，这些都对化学工作者提出了较高的数学知识要求。但由于种种原因，一般的化学工作者都缺乏系统的数学知识。

数学知识的缺乏，不利于化学工作者提高研究工作的效率和理论水平，并且从现代化学科学的发展趋势看，化学工作者更加需要具备相当的数学知识和理论，但要他们从头系统学习和掌握这些知识，困难较大。值得庆幸的是随着计算机技术的发展，出现了许多有名的数学软件，可以帮助人们在较短的时间内了解、掌握并应用数学知识，其中 MathWorks 公司推出的 MATLAB 软件，是国际上公认的最优秀的数值计算和仿真分析软件。

MATLAB 是一套高性能的数值计算和可视化软件，它集数值分析、矩阵运算、信号处理和图形显示于一体，构成了一个方便的、界面友好的用户环境。MATLAB 于 1985 年推出第一版后，1993 年以来又相继推出了 4. X，5. X，6. X 等基于 Windows 系统的版本，充分利用各种系统资源，并且针对不同的应用科学，开发出了三十多个应用工具箱。这些工具箱给各个领域的研究和工程应用提供了有力的工具，借助于这些工具箱，各个学科和层次的研究人员可直观、方便地进行分析、计算及设计工作，从而提高工作效率。由于 MATLAB 所具有的特点，它一经推出，就得到了各个领域专家学者的广泛注意，并在多门类的学科如信号分析、计算机技术、控制、生物医学工程和数学中都得到了广泛的应用。本书就是在总结我们在化学研究中应用 MATLAB 的经验基础上编写而成的。

本书内容分为 6 章：前 3 章基于 MATLAB 5. X 和 6. X 版本，介绍了 MATLAB 软件的基本知识，通过对功能、指令函数、MATLAB 程序语言设计等的描述，使读者能基本掌握和应用 MATLAB 语言；后 3 章主要通过化学研究中的各种实例介绍了 MATLAB 语言在化学中的具体应用方法，重点是基本概念的阐述和基本方法的讲解，并不过多地纠缠于理论问题的推导，因此讲解内容以实例为主线，包括问题描述、分析求解等。由于受篇幅的影响，没有全面介绍 MATLAB 函数的各种调用格式；在讲解某些问题时所涉及实例的数据有时显得少了一些，影响了求解的精度。需要说明的是，实例中的数据纯粹是讲解方法的道具，作者的目的并不是让读者检验数据的准确性，而是通过例子的讲解，使读者能基本掌握各种方法的应用技巧。读者如需进一步详细了解和掌握 MATLAB 的有关内容，借助本书的引导及 MATLAB 的“Help”功能，可很快达到目的。希望通过这样的介绍，使读者特别是化学工作者能举一反三，在工作中能熟练地应用 MATLAB 软件解决各自研究领域中的实际问题。这也是作者编写本书的目的。由于作者水平有限，书中难免存在一些不足和错误之处，欢迎读者特别是化学工作者不吝赐教。

作　者

2005 年 1 月于西安

目　录

第 1 章　MATLAB 基础 …… (1)
1.1　MATLAB 简介 …… (1)
1.1.1　MATLAB 环境 …… (1)
1.1.2　MATLAB 工作空间 …… (2)
1.1.3　MATLAB 通用命令 …… (2)
1.1.4　变量、函数及 M 文件 …… (3)
1.2　MATLAB 的主要功能 …… (6)
1.2.1　MATLAB 的数值计算 …… (6)
1.2.1.1　矩阵与数组运算 …… (6)
1.2.1.2　矩阵函数 …… (13)
1.2.1.3　数据分析 …… (16)
1.2.1.4　数值分析 …… (19)
1.2.1.5　关系运算和逻辑运算 …… (20)
1.2.2　符号计算 …… (22)
1.2.3　MATLAB 绘图 …… (26)
1.2.3.1　二维绘图 …… (26)
1.2.3.2　三维图形 …… (30)

第 2 章　MATLAB 程序设计 …… (34)
2.1　文本 …… (34)
2.1.1　字符串 …… (34)
2.1.2　字符串转换 …… (34)
2.1.3　字符串函数 …… (36)
2.2　M 文件 …… (37)
2.2.1　M 文件的形式 …… (37)
2.2.2　规则和属性 …… (37)
2.2.3　变量类型 …… (39)
2.2.4　M 文件调试 …… (39)
2.3　数据结构 …… (40)
2.4　程序结构 …… (40)
2.4.1　顺序结构 …… (41)
2.4.2　循环结构 …… (41)
2.4.3　分支结构 …… (42)
2.5　程序流控制语句 …… (44)

2.5.1 echo 命令 …… (44)
2.5.2 input 命令 …… (45)
2.5.3 pause 命令 …… (45)
2.5.4 keyboard 指令 …… (45)
2.5.5 break 命令 …… (45)

第 3 章 图形用户界面的创建 …… (46)
3.1 句柄图形对象 …… (46)
3.1.1 句柄图形对象的结构 …… (46)
3.1.2 句柄对象的创建 …… (46)
3.1.3 缺省属性的设置 …… (49)
3.2 句柄操作 …… (50)
3.2.1 查找对象 …… (50)
3.2.2 函数 copyobj …… (51)
3.2.3 函数 reset 和 delete …… (51)
3.3 图形窗口的设置 …… (52)
3.4 菜单的创建 …… (52)
3.5 控制框的创建 …… (55)
3.6 对话框的创建 …… (58)
3.6.1 帮助窗口 …… (58)
3.6.2 错误对话窗 …… (58)
3.6.3 警告对话窗 …… (58)
3.6.4 问题对话窗 …… (59)
3.6.5 文件名处理对话窗 …… (59)
3.6.6 颜色设置对话窗 …… (59)
3.6.7 字体设置对话窗 …… (60)

第 4 章 MATLAB 在化学计算中的应用 …… (61)
4.1 数值计算 …… (61)
4.1.1 溶液 pH 值计算 …… (61)
4.1.2 浓度计算 …… (63)
4.1.3 其他 …… (64)
4.2 绘图及数据图示 …… (73)
4.2.1 酸碱的对数浓度图 …… (73)
4.2.2 滴定曲线绘制 …… (73)
4.2.3 原子轨道 …… (74)
4.2.4 绘制相图 …… (77)
4.3 曲线拟合及插值 …… (82)
4.3.1 曲线拟合 …… (82)

4.3.2 数据插值计算 …… (89)

第 5 章 优化及统计工具箱在化学中的应用 …… (94)
5.1 优化工具箱 …… (94)
5.1.1 优化工具箱中的函数 …… (94)
5.1.2 应用时需要注意的问题 …… (95)
5.1.3 应用举例 …… (96)
5.2 统计工具箱 …… (103)
5.2.1 统计工具箱函数 …… (103)
5.2.2 统计工具箱函数应用 …… (111)
5.2.3 方差分析 …… (115)
5.2.3.1 单因子方差分析 …… (115)
5.2.3.2 双因子方差分析 …… (116)
5.2.3.3 多因子方差分析 …… (118)
5.2.3.4 单因子多元方差分析 …… (120)
5.2.4 回归分析 …… (123)
5.2.4.1 线性回归 …… (123)
5.2.4.2 非线性回归 …… (128)
5.2.5 聚类分析 …… (130)
5.2.6 判别分析 …… (134)
5.2.7 主成分分析 …… (136)
5.2.8 实验设计 …… (138)

第 6 章 神经网络和模糊系统工具箱在化学中的应用 …… (145)
6.1 神经网络工具箱 …… (145)
6.1.1 人工神经网络基础 …… (145)
6.1.2 基于 MATLAB 工具箱的神经网络概述 …… (152)
6.1.3 神经网络工具函数 …… (153)
6.1.3.1 各个神经网络的工具函数 …… (153)
6.1.3.2 应用举例 …… (161)
6.2 模糊系统工具箱 …… (175)
6.2.1 模糊系统理论基础 …… (175)
6.2.2 模糊系统工具箱函数 …… (178)
6.2.3 应用举例 …… (184)

第1章 MATLAB 基础

MATLAB 代表 Matrix Laboratory，它最早是 Cleve Moler 博士于 1980 年在新墨西哥大学讲授线性代数课程时为学生编写的使用 LINPACK 和 EISPACK 软件包的接口程序，主要是为了方便矩阵的存取。经过多年的开发和完善，MATLAB 已成为一个具有高性能数值计算和可视化功能的科学计算平台。它集成了数值计算、矩阵计算和图形绘制等众多功能，具有简单易用的环境，问题的提出和解答只需以数学方式表达和描述，不需要大量原始而传统的编程过程，这样可花费较少的时间来解决众多的数值问题，因此它特别适用于研究、解决工程中的各种数学问题。

MATLAB 最重要的特点是它的易扩展性。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的有贡献的作者之一。MATLAB 的众多工具箱就是由许多科学家、数学家和工程师开发的。

1.1 MATLAB 简介

1.1.1 MATLAB 环境

1. 系统要求

(1) 586 以上的 CPU；

(2) 内存至少 8 MB 以上，建议采用 16 MB 以上的内存配置；

(3) 硬盘可用空间最少为 100 MB；

(4) 操作系统为 Windows95/98 以上、Windows NT 等；

(5) 当使用 Notebooks 时，还需要 MS－Word6.0 以上的中英文版。

2. 安装

MATLAB 的安装比较容易，不需要另外设定其他参数。同其他软件一样，可以根据“安装向导”来完成其安装。

在版本升级时，最好不要用高版本覆盖以前安装的低版本，应该选择新的安装目录。当用高版本覆盖低版本时，最好在开始安装前备份你所编写的所有 M 文件。

安装成功后，可进入“Help”查看帮助文件，各种函数、工具箱等的使用方式、格式、具体例子演示等都在其中。

1.1.2 MATLAB 工作空间

运行 MATLAB 会在屏幕上创建一个或多个窗口，其中命令窗口(command window)是用户与 MATLAB 进行交互的主要场所。提示符“》”显示在命令窗口中，当命令窗口是活动窗口时，光标会出现在提示符右边，显示正在等待执行数学运算。

当工作在命令窗口时，窗口存储着输入的命令和创建的所有变量值。这些命令和变量驻留在工作空间中，可以在任何需要的时刻被调用。如果忘记了变量名，可以使用“who”命令来查询变量列表。

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。例如按一次↑键，就可在提示符处调出上一次的命令。

MATLAB 显示数值结果时遵循一定的规则。在缺省的情况下，当结果是整数时，就作为整数显示；当结果是实数时，则以小数点后 4 位的精度近似显示；如果结果中的有效数字超出了这一范围，则以类似于计算器的科学计数法显示。用户可以另定数值格式以取代缺省格式。

1.1.3 MATLAB 通用命令

1. 管理命令与函数

MATLAB 提供了几条文件管理命令，可以列文件名、显示和删除 M 文件、显示和改变当前目录或文件夹及显示和修改 MATLAB 的搜索路径。表 1-1 简要给出了这些命令。

表 1-1 文件管理功能

命 令	功 能
cd	显示当前工作目录或文件夹
p=cd	返回当前工作目录到 p
cd path	改变目录或文件夹为 path
chdir	同 cd
chdir path	同 cd path
delete files	删除 M 文件
dir	列出当前目录或文件夹的所有文件
ls	同 dir
mathlaroot	返回到 MATLAB 根目录
path('newdir')	将搜索路径改变为字符串'newdir'指定的路径
pwd	同 cd
type files	在命令窗口显示 M 文件
what	列出当前目录或文件夹下的所有 M 文件和 mat 格式文件
which files	显示 files(文件名)所在目录

2. 命令窗口控制命令

根据所配置的硬件，命令窗口可能没有菜单条或滚动条。为此，MATLAB 提供了表 1-2 所示的几条命令，可用来管理命令窗口。

表 1－2　命令窗口控制命令

命 令	功　能
clc	清除命令窗
diary	将命令窗保存到文件
home	移动光标到左上角
more	命令窗分页输出
clear	删除工作空间中的所有变量，且不能再恢复
clear name	清除工作空间中的 M 文件、MEX 文件或变量 name
dis()	显示文本或数组

1.1.4　变量、函数及 M 文件

1. 变量

MATLAB 像其他计算机语言一样，有自己的变量命名规则，如表 1－3 所示

表 1－3　变量命名原则

变量命名规则	说明/举例
变量名区分大小写 变量名最多不超过 18 个字符 变量名必须以字母打头，之后可以是任意字母、数字或下划线。许多标点符号由于在 MATLAB 中具有特殊意义，所以变量中不允许使用	myname、Myname 和 myName 是不同的变量 my_data、myname、myname_aaa、x3215、name_aa_year_old 等

除了这些命名原则，MATLAB 还有几个特殊的变量，见表 1－4。

表 1－4　特殊变量表

特殊变量	取 值	特殊变量	取 值
ans	用于结果的缺省变量名	NaN	不定量，如 0/0
pi	圆周率	i，j	复数
eps	计算机的最小数，当和 1 相加就产生一个比 1 大的数	nargin	所用函数的输入变量数目
		nargout	所用函数的输出变量数目
flops	浮点运算数	realmin	最小可用正实数
inf	无穷大	realmax	最大可用正实数

2. 注释与标点

程序中％符号后的所有文字为注释，计算机不执行。注释主要为 M 文件中的命令做文

档,以免今后阅读时忘记其功用。

程序中多条命令可以放在同一行,但要用逗号或分号隔开。逗号表示显示结果,分号则禁止显示。

连续3个点表示该语句的余下部分将在下一行出现,如果相连的3个点在变量名或运算符之间出现,则变量名或运算符无效。同样地,注释语句不能续行。

3. 函数

MATLAB所支持的部分常用函数见表1-5,其中大部分函数可以以数学方式书写。

表1-5 常用函数

函 数	意 义	函 数	意 义
abs(x)	绝对值或复数的幅值	acos(x)	反余弦
sin(x)	正弦	atan(x)	反正切
cos(x)	余弦	acosh(x)	反双曲余弦
tan(x)	正切	asinh(x)	反双曲正弦
exp(x)	指数	atanh(x)	反双曲正切
cosh(x)	双曲余弦	ceil(x)	对$+\infty$方向取整数
sinh(x)	双曲正弦	floor(x)	对$-\infty$方向取整数
tanh(x)	双曲正切	fix(x)	对零方向取整
log10(x)	常用对数	gcd(x,y)	整数x和y的最大公约数
log(x)	自然对数	lcm(x,y)	整数x和y的最小公倍数
sqrt(x)	平方根	real(x)	复数实部
sign(x)	符号函数:返回自变量的符号。如 sign(15.6)=1	imag(x)	复数虚部
		round(x)	四舍五入到最接近的整数
asin(x)	反正弦	conj(x)	复数共轭

4. M文件

将MATLAB命令放在一个简单的文件中,然后告诉MATLAB打开文件并执行命令,如同在MATLAB提示符处键入命令一样,这些文件被称为M文件。

创建文件可以从files菜单选择new及M-file项,此时打开一个文本编辑器以输入MATLAB命令。在其他平台也很容易打开一个独立的终端窗口,选择你最熟悉的文本编辑器来生成M文件。下面给出了一个简单的M文件的例子:

```
% example M文件举例
t = linspace(0,2 * pi,30);
y = sin(t);
plot(t,y,'r');
```

当这个文件以M文件名myfile.m存盘后,调用时只需在提示符下键入myfile就可执行文件中的内容,即计算正弦函数值并用红线画出其曲线。

M文件中的命令可以访问工作空间中的所有变量,而且M文件中创建的所有变量也成为工作空间的一部分。通常,从M文件中读入命令在执行时并不显示在屏幕上。echo on命

令可以将命令显示或回响到命令窗口上，相反，echo off 则关闭显示。

M 文件给用户带来了极大的方便，使用户可以根据需要编写 M 文件来解决实际问题。对于输入大的数组，利用 M 文件也很方便。例如对于来自实验室的大批量的测试数据，通过使用 M 文件可以很容易地修改输入时发生的小差错，而不必重新键入整个数据组，同时可以保存在磁盘上以便今后调用。

由于 M 文件的使用，MATLAB 提供了几个特别有用的文件函数，见表 1－6。

表 1－6　M 文件函数

函 数	意 义
disp(ans)	显示结果，而不显示变量名
echo	控制命令窗口对 M 文件命令的回响
input	提示用户输入
keyboard	暂时把控制权交给键盘(按回车退出)
pause	暂停，直到用户按任意键
pause(n)	暂停 n 秒
waitforbuttonpress	暂停，直到用户按鼠标或键盘键

5. 在线帮助

MATLAB 功能强大，命令也很多，用户不可能对所有的命令都很清楚。为了帮助用户找到命令并掌握其功能、调用格式等，MATLAB 通过在线帮助功能提供帮助。这些功能主要有 3 种形式：help 命令、lookfor 命令及交互使用 help 菜单条。

(1) help 命令

如果确切知道要寻求帮助的标题，且在 MATLAB 中存在，则键入标题就能显示关于该标题的帮助信息，如：

```
》help sin
   SIN    Sine.
     SIN(X) is the sine of the elements of X.
Overloaded methods
   help sym/sin.m
```

在这里得到了有关正弦函数的帮助，并且提示如需要更详细的帮助，可通过键入 help files.m 命令调阅 sin.m 文件。

(2) lookfor 命令

lookfor 命令提供所指定关键词(不一定是 MATLAB 命令)的有关项。它是通过搜寻所有 MATLAB 标题，以及搜寻途径中 M 文件的第一行，返回包含所指定关键词的有关项。如通过键入下列命令，可以搜寻到有关“complex”的信息，虽然它不属于 MATLAB 命令：

```
》lookfor complex
```

(3) 菜单驱动的帮助

与从命令窗口获取帮助不同的另一种方式是从菜单条获取菜单驱动的帮助。MATLAB

帮助窗口采用标准 MS 窗口标准格式，允许用户搜寻主题、设置书签、注释主题以及打印帮助屏幕。

1.2 MATLAB 的主要功能

MATLAB 的主要功能有数学计算、绘图等。数学计算功能有数值计算和符号计算两种形式。在数值计算中表达式、矩阵变量不允许包含未定义的自由变量，而在符号计算则被允许。

MATLAB 的绘图功能可以具有二维、三维乃至四维的图形表现。通过对图形线型、色彩、视角等特性的处理，可以充分体现数据的特征性质。

1.2.1 MATLAB 的数值计算

1.2.1.1 矩阵与数组运算

1. 矩阵创立

通常矩阵与数组的意义相同，都是指 $m \times n$ 维（m 行、n 列）的矩形结构，矩阵中的元素可以是实数或者复数。

数组的创立很容易，以左括号开始，各元素之间以空格（或逗号）为间隔，直接在变量后输入元素值，最后以右括号结尾。

例 1.1

```
》x = [1 2 3 4 5];    % 分号表示不显示结果
》x
  x =
     1   2   3   4   5
》x1 = [1 2 3 4 5]
 x1 =
     1   2   3   4   5
》x2 = [1 2;3 4]     % 分号是矩阵行间的分隔符
 x2 =
       1   2
       3   4
```

对于数目较多数组的输入，则采用下述命令（见表 1-7）比较简便。

表 1-7 处理数组输入的命令及其意义

命 令	意 义
x=first:last	从第一（first）开始，加 1 计数，到最后（last）结束
x=first:increment:last	first 开始，加增量 increment，到 last 结束的行向量
x=linspace(first,last,n)	first 开始，到 last 结束，有 n 个元素
x=logspace(first,last,n)	从 10^{first} 开始，到 10^{last} 结束，有 n 个元素

例 1.2

```
》x = 1:5
    x =
      1     2     3     4     5
》x = 1:0.5:3
    x =
    1.0000    1.5000    2.0000    2.5000    3.0000
》x = x'          % 改为列向量
  x =
    1.0000
    1.5000
    2.0000
    2.5000
    3.0000
》x = linspace(1,3,5)
    x =
    1.0000    1.5000    2.0000    2.5000    3.0000
》x = logspace(1,3,5)
    x =
    1.0e+003 *
    0.0100    0.0316    0.1000    0.3162    1.0000
```

而对于一些特殊的矩阵,则可利用表 1-8 中的函数创立。

表 1-8　特殊矩阵函数及其意义

矩　阵	意　　义	矩　阵	意　　义
[ ]	空矩阵	gally	几个小的实验矩阵
compan	伴随矩阵	pascal	Pascal 三角矩阵
eye	单位矩阵	hankel	Hankel 矩阵
ones	全部元素为 1 的矩阵	rosser	对称特征值试验矩阵
zeros	全部元素为 0 的矩阵	toeplitz	Toeplitz 矩阵
rand	元素服从 0、1 之间均匀分布的随机矩阵	vander	Vandermonde 矩阵
		wilkinson	Wilkinson 矩阵
randn	元素服从零均值单位方差正态分布的随机矩阵	hadamard	Hadamard 矩阵
		hilb	Hilbert 矩阵
magic	魔方矩阵		

例 1.3

```
》ones(2,2)
  ans =
```

```
     1     1
     1     1
》disp(eye(2,2))
     1     0
     0     1
》disp(zeros(2,2))
     0     0
     0     0
》disp(rand(2,3))
    0.9501    0.6068    0.8913
    0.2311    0.4860    0.7621
》disp(randn(2,3))
   -0.4326    0.1253   -1.1465
   -1.6656    0.2877    1.1909
```

2. 矩阵运算

通常矩阵和数组的意义相同，但其运算有所区别。表 1－9 列出了这两种运算指令及其实质内涵。

表 1－9　两种运算指令形式及其实质内涵

矩阵运算指令	意　义	数组运算指令	意　义
A′	矩阵共轭转置	A.′	数组元素转置，但不共轭
A＋B	矩阵相加	A＋B	两数组中的对应元素相加
A－B	矩阵相减	A－B	两数组中的对应元素相减
x＋A	标量 x 与矩阵相加	x＋A	A 中每个元素加 x
x－A，A－x	标量 x 与矩阵相减	A. ＊B	两数组对应元素相乘
A＊B	内维相同矩阵的乘	A. ＊x，x. ＊A	A 中每个元素 x 次幂
x＊A	A 的每个元素乘 x	A. /B	两数组对应元素左除
A/B	A 右除 B	B. \A	两数组对应元素右除
B\A	A 左除 B	x. /A，A. \x	x 分别被 A 的每个元素除
inv(A)	求 A 的逆	A. ^n	A 每个元素的 N 次幂
A^n	A 阵的 n 次幂	A. ^p	A 每个元素非整数乘方
A^p	A 阵的非整数乘方	x. ^A	x 被 A 每个元素求幂
p^A	标量的矩阵乘方	A. ^B	对应元素求幂

例 1.4

```
》A=[1 2 3;4 5 6]; B=[1 2 3;1 1 1]; x=2;
》A * B                    % 矩阵相乘，由于内维数不同，不能相乘
```

```
??? Error using ==> *
Inner matrix dimensions must agree.
》A.*B                    %两数组对应元素相乘
  ans =
       1     4     9
       4     5     6
》A*x
  ans =
       2     4     6
       8    10    12
》A.*x
   ans =
       2     4     6
       8    10    12
》A.^B                    %两数组对应元素求幂
   ans =
       1     4    27
       4     5     6
》A.^x                    %A 的每个元素求 x 次幂
   ans =
       1     4     9
      16    25    36
》x.^A                    %x 被 A 的每个元素求幂
   ans =
       2     4     8
      16    32    64
```

3. 数组操作

(1)数组的插入、提取和重排

由于数组和矩阵是 MATLAB 的基础,在 MATLAB 中提供了许多方式对它们进行操作。矩阵一旦形成,就可以通过确认有关下标,对矩阵进行插入子块、提取子块和重排子块的操作。掌握这些性能是有效使用 MATLAB 的关键。

例 1.5

```
》A=[1 2 3;4 5 6]         %  建立矩阵
   A =
      1     2     3
      4     5     6
》A(2,3)=0          %将 A 的第 2 行、第 3 列元素置为 0
   A =
```

```
     1     2     3
     4     5     0
》% 将 A 的第 1 行、第 5 列元素置为 0,因 A 不足 5 列,用 0 补充
》A(1,5)=0
   A =
     1     2     3     0     0
     4     5     0     0     0
》% 按逆序提取 A 的各行,列提取到第 2 列元素形成矩阵
》B=A(2:-1:1,1:2)
   B =
     4     5
     1     2
》% 以整个 A 及 B 中所有行第一列元素构成 C
》C=[A B(:,1)]   % 冒号代表所有的行(列)
   C =
     1     2     3     0     0     4
     4     5     0     0     0     1
》% 依次提取 B 所有行的第 1 列、第 2 列、第 1 列元素建立 C
》C=B(:,[1 2 1])
   C =
     4     5     4
     1     2     1
```

(2)数组大小和子数组查找

对于数组,知道其大小是很重要的。在 MATLAB 中 whos 命令提供了这些附加信息。

例 1.6

```
》whos       % 上例中有关数组(变量)的大小
  Name       Size              Bytes  Class
    A        2x5                  80  double array
    B        2x2                  32  double array
    C        2x3                  48  double array
    ans      2x3                  48  double array
    x1       1x5                  40  double array
Grand total is 38 elements using 304 bytes
```

如果不清楚矩阵或向量的大小,但某些操作需要其大小信息,这时可利用 size 和 length 这两个函数查找,见表 1-10。