上讲内容



掌握化工专业需要数值计算技能

数值计算即利用计算机进行科学计算

数值计算的误差不可避免

误差的基本概念:绝对、相对误差和有效数字

了解误差的传递

浮点数

机器只能表示有限个非连 续实数

算法

重点:浮点数的规定与特性 特殊浮点数及其运算

MATLAB

1.798*10³⁰⁸ NaN, nan

Inf,inf

2.22*10⁻¹⁶ eps





第1章 MATLAB程序设计语言与 初等数学运算

- 变量
- 数据类型
- MATLAB基本数学运算
- 数据输入与输出



变量



MATLAB程序的组成



- · 变量是MATLAB程序的基本组成;
- MATLAB变量不需要预先声明,也不需要指定变量类型;
- 变量在使用时必须首先赋值。

变量赋值



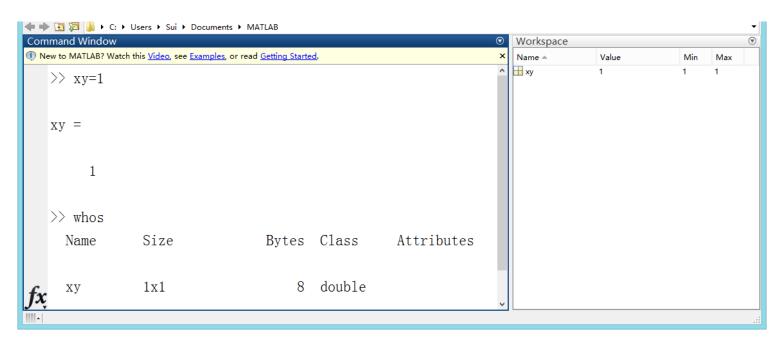
格式:变量名=赋值

在命令窗口输入:

>> xy=1



定义变量xy,并给其赋值为1, 此在变量空间中,xy变量可见



在命令窗口输入:

>> clear

>> XY



??? Undefined function or variable 'xy'.

函数或变量'xy'无法识别。 (新版)



变量的命名方式



- -变量名由字母、数字和下划线组成;
- 变量名中的英文字母大小写是有区别的;
- 变量名只有前63位为MATLAB所认可,其余将被 忽略
- MATLAB保留了一些固定字符用于特别的用途, 变量名不应与这些MATLAB关键字相同,自定义 变量中含有大写字母可以避免这一问题;



变量的命名方式



好的变量名可以使程序更加易懂。

```
>> a=101325;

>> b=0.01;

>> c=0.1;

>> d=8.314;

>> f=a*b/(c*d);
```

```
>> P=101325;
>> V=0.01;
>> n=0.1;
>> R=8.314;
>> T=P*V/(n*R);
```

变量名具有较明显的意义,程序的可读性大大增加



MATLAB的特殊变量和常数



特殊等	定量
-----	----

意义

ans

如果未定义变量名,用于计算结果存储的默认变量名

pi inf或Inf 圆周率π(=3.1415926...)

eps

无穷大∞值

NaN或nan

非数

i或j

虚数单位

机器精度,浮点运算的相对精度

MATLAB数据类型



- 变量赋值的数据类型(变量可以赋值的种类)
 - 数值(标量,向量,数组)
 - -字符串
 - 单元数组(cell array)
 - 结构体 (structure)
 - 表格
 - 函数句柄

数值型数据-数字



以下表达方式均合法:

标量

345 -99 0.01 .01 1.3e-3 4.5e3 61.2E5

复数

3+3i 6-8j 5j 6+3*i



- 1) 直接输入向量
 - □ 格式上要求向量元素需要用"[]"括起来
 - □ 元素之间可以用空格、逗号或分号分隔
 - □ 空格和逗号分隔生成行向量,用分号生成列向量。

在命令窗口输入:

$$>> a=[1 8 9]$$



定义变量a, 这是一个行向量, 含有三个元素

$$>> b=[1; 8; 9]$$



定义变量b, 这是一个列向量, 含有三个元素



- 2) 利用冒号生成向量
 - ✓ 冒号表达式的基本形式为: x=x0:step:xn; 当xn-x0为step的整数倍时, xn才为最后一个 元素的值。
 - ✓ 若step=1,则此项输入可以忽略。

在命令窗口输入:

$$>> a=1:2:7$$

$$a=1,3,5,7$$



$$a=1,2,3,4,5,6,7$$





Empty matrix: 1-by-0



3) linspace函数

可以使用linspace函数生成线性等分向量

y=linspace(x1,x2)	生成(1*100)维行向量, y(1)=x1,
	y(100)=x2
y=linspace(x1,x2, n)	生成(1*n)维行向量,y(1)=x1,
	y(n)=x2.

在命令窗口输入:





4) logspace函数

logspace用于生成对数等分向量,格式如下:

y=logspace(x1,x2)	生成(1*50)维行向量,
	$y(1)=10^x1, y(n)=10^x2$
y=logspace(x1,x2,n)	生成(1*n)维对数等分向量,
	$y(1)=10^x1, y(n)=10^x2$

在命令窗口输入:

>> a=logspace(0 2 4)



a=1.0000 4.6416 21.5443 100.0000



数值型数据-矩阵



从键盘上直接输入是最方便、最常用的创建数值矩阵的方法,尤其适合简单矩阵的创建。

- 1. 输入矩阵时要以"[]"为其标识,即矩阵的元素应 在"[]"内部,此时MATLAB才将其识别为矩阵。
- 2. 矩阵的同行元素之间可由空格或","分隔,行 与行之间要用";"或回车符分隔。
- 3. 矩阵大小可不预先定义。
- 4. 矩阵元素可为运算表达式。
- X(1)、X(3)分别表示矩阵的第1个和第3个元素(顺序按先列 后行)
- X(1,2)表示矩阵的第1行第2列的元素



数值型数据-矩阵



在命令窗口输入:

生成了一个名为X的变量,它是一个2行2列的矩阵

$$>> A=X(2)+X(1,2)$$

$$A=7.80$$



生成变量Y, 它是一个2行3 列的矩阵

$$\begin{bmatrix} 15 & 2 & 3 \\ 2+i & 0.3 & 4 \end{bmatrix}$$

字符串类型



• 字符串: 包含在一对单引号中的字符集合

在命令窗口输入:



生成了一个名为b的变量,它是一 个字符



100

>>a='This is an example.'

>>whos a



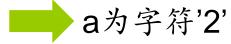
Name	Size	Bytes	Class
а	1x19	38	char

MATLAB字符函数

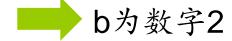


x=num2str(number)	将数字number转换成字符格式
x=str2num('string')	将字符'string'转换为数字格式,如果该字符不能转换则返回一个空阵。
x=strcat('string1','string2',)	将字符'string1', 'string2'等连接成一个新的字符串。

>> a=num2str(2)

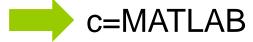


>> b=str2num('2')



>> c=strcat('MAT','LAB') == c=MATLAB

>> c=['MAT','LAB']





单元数组



单元数组是MATLAB数组的一种特殊数据类型,它用于保存不同类型和/或不同大小的数据。单元数组的每一个元素称为一个单元(cell)。

在变量赋值出现{}时,表明该变量为单元数组

单元数组有两种创建方式,一种是对单元数组的各个单元直接赋值,另一种是先用cell函数为单元数组分配空间,然后再进行赋值。



单元数组的直接赋值



1. 直接使用{}

2. 单元下标用括号"()" 括起来, 而单元的 内容用"{}"括起来

3. 单元下标用"{}"括起来,而赋值语句等式右边的单元内容用"[]"括起来:

单元数组的赋值与操作



					-7 (
第一次实验结果					
反应时间(min)	1.2	3.5	5	9	
反应物浓度(mol/L)	10	8.5	7	5	
		第二次实验组	吉果		
反应时间(min)	2.6	5.5	10		
反应物浓度(mol/L)	9	6.8	4.5		

采用单元数组表示上表数据

```
>>Experiment={'Run 1', [1.2 3.5 5 9], [10 8.5 7 5];'Run 2', [2.6 5.5 10], [9 6.8 4.5]};
```

```
>>Experiment(1,1)={ 'Run 1' };

>>Experiment(1,2)={[1.2 3.5 5 9]};

>>Experiment(1,3)={[10 8.5 7 5]};

>>Experiment(2,1)={ 'Run 2' };

>>Experiment(2,2)={[2.6 5.5 10]};

>>Experiment(2,3)={[9 6.8 4.5]};
```

```
>>Experiment{1,1}='Run 1';

>>Experiment{1,2}=[1.2 3.5 5 9];

>>Experiment{1,3}=[10 8.5 7 5];

>>Experiment{2,1}='Run 2';

>>Experiment{2,2}=[2.6 5.5 10];

>>Experiment{2,3}=[9 6.8 4.5];
```



单元数组的操作



>>a

>>celldisp(a)

显示单元数组a的信息 显示单元数组a的完整内容

 $>>c=a\{1,2\}$

注意是"{}",而不是"()"

>> c=a(1,2)

引用单元数组元素:将单元数组a的{1,2}元素赋给变量C 提取单元数组元素:将单元数组a的{1,2}元素取出,作为新单元数组c的元素

结构体



- MATLAB结构体用于存取相关的数据
- ·它由一组称为域(fields)的成员变量构成
- · 每一个域可以为不同的MATLAB数据类型。

```
>>student.name='Zhang Jun';
>>student.major='Chemical Engineering';
>>student.subject=['英语','政治','数学 ','化工原理','物理化学 '];
>>student.entrance_exam=[62 68 72 82 90];
>>student(2).name='Li Xia';
>>student(2).major='Chemical Engineering';
>>student(2).subject=['英语','政治','数学','化工原理 ','物理化学 '];
>>student(2).entrance_exam=[60 72 68 85 88];
```

>>A=name



Undefined function or variable 'name'.



结构体的赋值



第一次实验结果					
反应时间(min)	1.2	3.5	5	9	
反应物浓度(mol/L)	10	8.5	7	5	
第二次实验结果					
反应时间(min)	2.6	5.5	10		
反应物浓度(mol/L)	9	6.8	4.5		

```
>>Experiment.Sequence='Run 1';
>>Experiment.Time=[1.2 3.5 5 9];
>>Experiment.Concentration=[10 8.5 7 5]
>>Experiment(2).Sequence='Run 2';
>>Experiment(2).Time=[2.6 5.5 10];
>>Experiment(2).Concentration=[9 6.8 4.5]
```

```
>>Experiment=struct('Sequence','Run 1','Time', [1.2 3.5 5 9],'Concentration', [10 8.5 7 5])
```



基本算术运算符



MATLAB算术运算符可用于数字与矩阵或矩阵与矩阵之间的运算。

运算符	运算	运算符	运算
+	加法	_	减法
*	矩阵乘法	*	数组乘法
^	矩阵乘方	.^	数组乘方
/(\)	矩阵的右除(左	./(.\)	数组的右除(左
	除)		除)



基本数学运算符的使用



在MATLAB的命令窗口中输入:

7

以上命令完成了一次基本的加法运算,结果为7, MATLAB自动把它赋值给变量ans 在MATLAB的命令窗口中输入:

回车后, 无显示

以上命令同样完成了加法运算, 只是由于; 的存在不显示运算结果, 但C变量在变量空间中可见



基本数学运算符的使用



已知A=[1,1;1,1],B=[1,2;3,4];C=2;以下命令的计算结 果为多少?

1) A*B

2) A.*B

3) A.*C

4) A*C

1 2

2 2

2 2

3 4

2 2

2 2

5) C*A

6) C.*A

7) A/B

8) A./B

2 2

2 2

- -0.50
- 0.50
 - 1.00 0.50

3 4

- -0.50 0.50
- 0.33 0.25



基本算术运算符



运算式	情况	规则
A.^B; A.*B; A./B;A.\B	A和B为大小相同的矩阵	对应元素运算
A*B	A的列数等于B的行数	正常的矩阵乘法
A*B	A和B其中一个为标量	与数组乘法相同
A^B	A为方阵, B为整数标量	A自乘B次
A^B	A为方阵, B为非整数标量	与特征值相关
A^B	A为标量, B为方阵	与特征值相关
A^B	A, B为方阵	无法运算
A\B	A和B为具有相同行数的矩阵	求解AX=B
A\B	B为矩阵, A为标量	与数组除法运算相同
A/B	A和B为具有相同列数的矩阵	求解XA=B
A/B	A为矩阵, B为标量	与数组除法运算相同



基本算术运算符



- 1)在同一语句中出现不同运算符,其运算优先级为先 乘方,再乘除,最后加减;相同优先级的运算顺序 按从左到右顺序计算。
- 2)可以采用()提高括号内的运算式的优先级
- 3)MATLAB的运算符、标点符号必须是英文字符!



基本数学运算符的使用



- a) [10,9;8 7]-6
- b) [1 2; 3 4]-[0 1; 1 0]
- c) [1 2 3]*[3 2 1]
- d) 3*(1:3)
- e) 4/5
- f) 5\4

- a) [4 3; 2 1]
- b) [1 1; 2 4]
- c) "??? Error using ==> mtimes, Inner matrix dimensions must agree."
- d) [3 6 9]
- e) 0.8
- f) 0.8

基本数学运算符的使用



$$(3+2)*5^2$$

k)
$$(-8)^{1/3}$$

$$(-8)^{(1/3)}$$

m) ??? Undefined function or variable 'NAN'.

MATLAB的标点符号



数学运算符属于特殊操作符的一类,键入>> help ops可见所有的特殊操作符

标点	定义	标点	定义
:	向量和矩阵的多种功	-	小数点及结构体域的
	台上		访问
• •	区分行及取消行显示		续行符
,	区分列及函数参数分	%	注释符, 百分号
	隔符		
()	指定运算过程的次序	!	调用dos操作命令
	等		
[]	矩阵定义	=	赋值标记
{}	构成单元数组	4	字符串标示符



MATLAB的标点符号



- 1)MATLAB的标点符号必须在英文状态下输入!
- 2)计算结果的显示会影响计算速度,可以在语句最后加分号,则该语句的运行结果不显示;
- 3)当一行语句很长时,可在语句中间加省略号, MATLAB将自动将上下两行语句视为同一语句;
- 4)百分号%以后的语句被MATLAB视为注释性语句, 不会被执行。





键入>> help elfun可见MATLAB所有的初等数学函数

三角函数

sin	正弦 (弧度)	sind	正弦 (角度)	asin	反正弦 (弧度)
cos	余弦(弧度)	cosd	余弦 (角度)	acos	反余弦(弧度)
tan	正切(弧度)	tand	正切(角度)	atan	反正切(弧度)
cot	余切(弧度)	cotd	余切(角度)	acot	反余切(弧度)
sec	正割(弧度)	secd	正割(角度)	asec	反正割(弧度)
CSC	余割(弧度)	cscd	余割(角度)	acsc	反余割(弧度)
asind	反正弦(弧度)	acosd	反余弦 (角度)	atand	反正切 (角度)
acotd	反余切(角度)	asecd	反正割 (角度)	acscd	反余割 (角度)

- 1) asin(0.5)
- 2) asind(0.5)



- 1) 0.5236
- 2) 30





指数函数

exp	指数运算	log	自然对数	log10	10为底的对
					数
nthroot	n阶实根	sqrt	平方根		

计算以下表达式的值:

1) exp([1 2 3])

1) 2.71 7.38 20.08

2) log10([1 10; 100 1000])



2) [0 1; 2 3]

3) nthroot(4,2)

3) 2

当以矩阵作为输入变量进行初等数学函数运算时结果为矩阵每一个元素计算结果组成的矩阵





复数函数

abs	绝对值或复	imag	取复数的虚	real	取复数的实
	数的模		部		部
angle	复数的相平	isreal	是否是实数	conj	复数共轭
	面角				

计算以下表达式的值:

1) abs(3+4i)

1) 5

2) abs(-5)

2) 5

3) imag(3+4j)

3) 4

4) angle(1+i)

4) 0.7854



数论函数

fix	向零	floor	向负无	ceil	向正无穷	round	向最近整
	圆整		穷圆整		圆整		数圆整
mod	求余	rem	无符号	sign	实数的正		
			求余		负		

计算以下表达式的值:

1) fix(0.7)

1) 0

) mod(-3,2)

1) -1

2) floor(0.7)



- 2) 0
- 2) rem(-3,2)



3) ceil(0.7)

3) 1

3) sign(-3)

3) -1

4) round(0.7)

4) ′



牛顿流体在不锈钢管中的流动压降可由下式估算:

$$\Delta P = \frac{M^{1.8} \mu^{0.2}}{20000 D^{4.8} \rho}$$

流体密度可由下式描述:

$$\rho = A \cdot B^{-(1-T/T_C)^n}$$

对于水, A=0.34710; B=0.2740;

Tc = 647.13K; n = 0.28571

流体粘度由下式描述:

$$\log_{10}^{\mu} = A + B/T + CT + DT^{2}$$

对于水, A=-10.2158; B=1.7925E3;

C=1.7730E-2; D=-1.2631E-05

计算在1/2英寸不锈钢管中,以2000lb/hr流量输送水, 当水的温度为10、20、30、40、50℃时,压降分别 为多少?





$$\Delta P = \frac{M^{1.8} \mu^{0.2}}{20000D^{4.8} \rho}$$

$$\rho = A \cdot B^{-(1-T/T_C)^n}$$

$$\log_{10}^{\mu} = A + B/T + CT + DT^2$$

A = 21.668; B = 0.2740; Tc = 647.13K; n = 0.28571

A=-10.2158; B=1.7925E3; C = 1.7730E-2; D=-1.2631E-05

在命令窗口输入以下内容:

- >> M=2000;
- >> D=0.5;
- >> T=283:10:323;
- >> miu=10.^(-10.2158+1.7925e3./T+1.7730e-2*T-1.2634e-05*T.^2);
- >> rhou=21.6688*0.2740.^(-(1-T/647.13).^0.28571);
- >> deltP=M^1.8*miu.^0.2./(20000*D^4.8*rhou)

回车后得到结果如下:

19.8446 19.0149 18.3219 17.7420 17.2566



程序的组成



变量 变量 数据输出 运算 数据输入 数学运算 键盘输入 屏幕输出 关系运算 文件输出 文件输入 逻辑运算

流程控制



图形输出

数据输入



- 在定义变量时人工输入(在数据较少时采用)
- 用load命令从MAT文件或文本文件读取数据
- 用fscanf函数
- 用提示输入函数input
- dlmread, importdata, xlsread函数或利用菜单栏 从文件中读取数据



数据输出



- ▶ 用save命令,将结果保存至文件
- ▶ 用fprintf函数将结果以固定格式输出至屏幕 或文件
- ➤ 用函数disp()将结果输出至屏幕
- ➤ dlmwirte,xlswrite函数将结果写入txt或 Excel文件
- > 图形输出



数据输出函数



disp函数

- -disp(x)将在命令窗口显示x的内容
- -X可以为矩阵、字符等

例:执行以下语句

disp(' Corn disp(rand(5,3))

Oats Hay')

Corn Oats Hay 0.4898 0.7094 0.6797

0.4456 0.7547 0.6551

0.6463 0.2760 0.1626

disp是一种无格式显示函数,显示的内容与括号中的内容 一致



数据输出函数



采用disp输出的数据包括数值、字符等不同数据类型时,可以将其类型统一,并拼接为一个字符矩阵输出。

在MATLAB中计算一种物质的密度,结果被赋值给变量Dens?试写出一条命令将结果输出至屏幕。

输出示例

The calculated density is 854.3245 kg/m3

- >> disp(['The calculated density is ', num2str(Dens),' kg/m3'])
 或
- >> disp(strcat('The calculated density is ', num2str(Dens), ' kg/m3'))



数据输出函数fprintf



fprintf函数的作用按格式输出数据

例:执行以下语句

>>x=35;y=68.3579;string='Results:';

 $>> fprintf('\t%s\tx=\%5d,\ty=\%8.2f\n',string,x,y)$



Results:

 $fprintf('\t%s\tx=\%5d,\ty=\%8.2f\n',\string,x,y)$

控制字符

变量表





%格式转换字符

\后为控制输出格式字符



fprintf的反斜线控制字符



字符	功能	字符	功能
\b	按回格一次	\f	按空格一次
\r	回车	\n	新生成一行
\\	反斜线	\t	下一制表符
%%	输出%	\"或"	输出'或'

>>x=35;y=68.3579;string='Results:';

 $>> fprintf('\t%s\tx=\%5d,\ty=\%8.2f\n',string,x,y)$



fprintf的转换字符



字符	功能	字符	功能
%c	单个字符	%d	十进制
%e	指数,如 3.1415e+000	%E	指数,如 3.1415E+00
%f	固定位数小数	%g	%e, %f紧凑格 式, 无意义零不 显示
%0	八进制	%s	字符或字符串



fprintf的转换字符



- •以%e输出数字时,以默认格式输出,此时底数的小数默认为6位,指数总是3位。
- •%.n1e将指定底数的小数位数为n1位,如%.3e表示底数有三位小数。
- ▶以%f输出数字时,以默认格式输出:小数默认为6位,整数位数根据需要不固定。
- ▶%n1.n2f将指定数字总位数为n1位,其中的小数为n2位,如%6.2f表示输出6位数字,其中小数2位;
- ▶n1缺省时表示不指定输出数字位数。





已知MATLAB变量空间中已经存在变量a=31.54, 运行以下语句屏幕显示是什么?

- 1) fprintf('%3.1f\n',a)
- 2) fprintf('%8.2f\n',a)
- 3) fprintf('%.0f\n',a)
- 4) fprintf('%.2e\n',a)
- 5) fprintf('%s\t%.2f%%\n','The percentage is:',a)

- 31.5
- 31.54
- 32
- 3.15e + 001

The percentage is:31.54%





在MATLAB中计算一种物质的密度,结果被赋值给变量Dens?试写出一条命令将结果输出至屏幕。

输出示例

The calculated density is 854.3245 kg/m3

采用fprintf命令

>> fprintf('The calculated density is %.4f kg/m3\n',Dens)



作业



在下载文档: work02.pdf, 可直接打印或抄写完成后上交, 本次作业上交日期为: 9.26日

