

开发面向分析化学的复杂方程绘图求解软件

邵利民*

(中国科学技术大学化学系, 合肥 230026)

摘要: 化学平衡的精确解析会涉及复杂方程的求解, 而分析化学专业人员通常不完全具备相关算法和编程知识。所以, 尽管当前硬件发达、编程语言丰富, 精确解析仍然难以在分析化学课程中大规模推广。为此, 基于 **Matlab** 语言, 开发了具有针对性的方程求解软件。该软件以简洁的界面、直观的图像和自然的人机交互, 实现方程的高效求解; 对用户的编程要求非常低。期望通过这种方式, 显著降低化学平衡精确解析中的软件使用成本, 从而为大规模推广提供进一步的支持。本文介绍了该软件的基本原理和主要特点; 通过 3 个复杂化学平衡实例, 详细说明软件的使用方法以及注意事项。另外提供 **Android** 系统版本, 免费使用。

关键词: 化学平衡; 精确求解; 软件开发; **Matlab** 语言; 安卓系统

中图分类号: G64; O6

Developing a Software Package to Plot and Solve Complex Equations in Chemical Analysis

SHAO Li-Min*

(Department of Chemistry, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, P. R. China)

Abstract: Accurate analysis of chemical equilibria involves solving complex equations, which requires adequate knowledge on algorithms and programming languages. People who major in analytical chemistry often lack such knowledge. As a result, it is difficult to adopt accurate analysis in analytical chemistry on a large scale. To overcome such difficulty, we developed a software package with Matlab. The software solves complex equations efficiently through an intuitive interface, a graph, and natural interactions, whilst requires little programming on users. This paper introduced theory and features of the software package, and explained its usage in detail with 3 examples of complex chemical equilibria. An Android version was also developed and provided free of charge.

Key Words: Chemical equilibrium; Rigorous solution; Software development; Matlab language; Android system

分析化学作为“四大化学”之一, 是国内外高校相关专业的基础课。分析化学的核心内容是化学平衡的定量解析, 其中涉及到较为复杂的数学处理, 例如高次代数方程的求解。在计算工具欠发达的年代, 复杂数值运算是难以逾越的障碍。所以, 研究者们通过近似处理, 推导出一系列运算简单的近似公式; 以“公式化”为特征的经典课程体系由此建立, 并沿用至今^[1-3]。

近似求解是特定历史条件下的权宜之计。当计算机技术高度发展、数值运算不再困难时, 人们自

*通讯作者, Email: lshao@ustc.edu.cn

基金资助: 安徽省重大教学研究项目(2015zdjy006)

然转向精确解析。“去公式化”课程体系为化学平衡的精确解析提供了理论框架^[4]；技术层面的实施也不困难。然而，在分析化学课程中大规模推广精确解析，还需要硬件和软件的进一步支持。

当前，计算机硬件不仅具有强大的运算能力，更重要的是高度普及和便携，如笔记本电脑、平板电脑和智能手机，从而为精确解析的大规模推广提供了足够支持。软件，尤其是高效易用的软件，发展相对滞后，是大规模推广的瓶颈。

编程可以实现精确解析，一些研究者通过不同语言求解化学平衡问题，如 Matlab 语言、C# 语言^[5,6]。但是，这种方式涉及到较为专业的算法和编程知识，期望大多数分析化学师生系统掌握这些专业知识并应用于具体问题，并不现实。另外一种方式是借助应用软件，如 Excel、Matlab^[7,8]。这种方式相对简单，但是应用软件在功能、易用性和使用许可等方面存在较大差异；对化学平衡问题没有针对性，用户体验较差。还有研究者针对具体化学平衡问题自行开发了应用软件^[9]。

精确解析的大规模推广需要这样一种方程求解软件：功能足够强大，又如计算器般直观易用。看似矛盾，然而，当前硬件和软件发展水平已经允许我们设计出界面友好，直观易用的软件。这也是开发本软件的主导思想：为分析化学师生提供直观、高效、免费的方程求解软件，尽可能降低化学平衡精确解析中的软件使用成本。

1 软件设计要点

本软件在 Matlab 环境下开发和使用。Matlab 是 Mathworks 公司出品的数据分析和数值计算的专业平台，兼有编程语言和应用软件的特点。作为编程语言，Matlab 语法简单高效；作为应用软件，Matlab 提供各种专业的算法程序。对于非计算机专业人员，Matlab 是解决数值计算问题的有力工具。另外，越来越多的国内高校为非计算机专业学生开设 Matlab 课程；有些高校购买“正版全校授权”(Total Academic Headcount, TAH)，供在校师生免费使用。这些措施进一步提高了 Matlab 在高校的普及程度。

本软件采用“二分法”求解方程。其他方程求根算法包括不动点迭代法(Picard 迭代)、切线法(Newton-Raphson 迭代)、割线迭代法等。与各种迭代法相比，二分法无须建立迭代公式，不必考虑迭代初值，也不必考虑迭代收敛问题，所以在易用性方面具有显著优势，对于非计算机专业用户来说尤其如此。二分法要求函数在求根区间上连续，且与 x 轴只有一个交点，这通过函数图像很容易判断。

本软件绘制方程对应的函数的图像，直观反映函数与 x 轴的相交情况。通过图像缩放或者平移，用户能够快速确定满足二分法要求的求根区间，既提高效率，又避免漏根。此外，图像便于用户查看函数特征和细节，进而判断是否存在因绘图数据点不足而未能显示的交点，文中例 3 介绍了这种情况。

本软件的开发重点是界面。对于非专业人员而言，界面体验直接决定了求解效率。根据人们求解方程的自然思路，规划界面布局；遵循求解过程的内在逻辑，设置软件功能以及各功能之间的逻辑关系。界面设计完全服务于功能，在满足功能性的同时，尽量简洁，所有功能均在界面上提供，没有设置菜单。

本软件从底层设计，仅使用 Matlab 基本运行环境，不需要任何工具箱(Toolbox)中的函数。用户不必为此另外购买任何 Matlab 工具箱。

2 软件安装和首次运行

用户从 <http://staff.ustc.edu.cn/~lshao/misc.html> 下载 iroots2 安装程序。软件尽管可以安装在任意文件夹，但是其文件操作权限可能受限(如果权限不够，软件给出提示和解决方法)。为了避免权限方面的麻烦，建议将安装程序下载到桌面，然后默认安装。

上述文件操作权限是指软件 iroots2 求解方程时在自身文件夹中创建和删除数据文件，不会对其

他文件进行操作。

iroots2 要求 Matlab 的最低版本是 7.10.0.499 (R2010a)。如果 Matlab 版本太低, 软件给出相应提示。

软件安装成功后, 需要在 Matlab 中输入相应命令来运行, 运行方法在软件文件夹中的 The First Running.pdf 有详细介绍。这种略显繁琐的手动运行方式仅需一次。首次运行时, iroots2 在用户许可后, 会自动创建一个快捷方式, 以后通过点击快捷方式按钮, 即可方便地运行该软件。

3 软件使用

软件的主界面如图 1 所示。上面的工具栏包含 5 个按钮, 分别是“放大”“缩小”“平移”“帮助”和“检查更新”; 前 3 个按钮用于函数图像的操作。主界面划分为 Function 和 Action 两个功能区, 分别用于输入方程表达式, 绘制对应函数图像并求解方程。

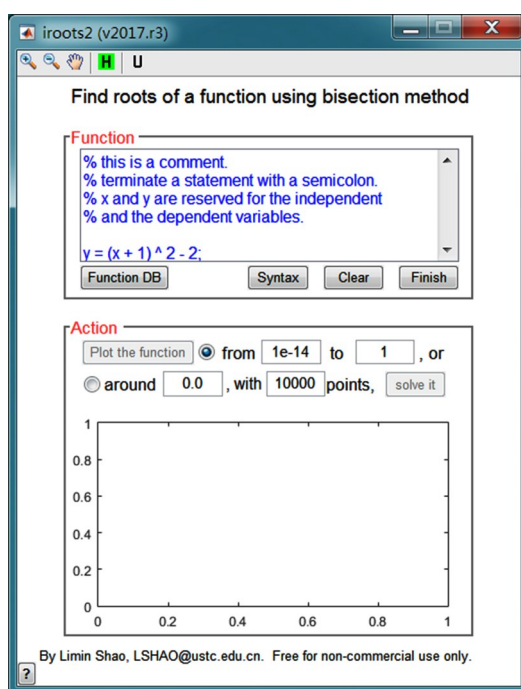


图 1 软件主界面
电子版为彩图

3.1 输入方程

在 Function 功能区, 用户按照 Matlab 语法输入待解方程的表达式。为了简要说明语法规则, 软件启动后即显示一个实例, 见图 1 中的蓝色文本。用户点击“Syntax”按钮, 可以查看另外一个复杂实例, 是 CaF_2 在 $0.010 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 盐酸溶液中溶解平衡时关于 $[\text{H}^+]$ 的高次方程。

软件自带两个实例, 是为了方便不熟悉 Matlab 语法的用户。事实上, Matlab 语法接近自然语言, 而化学平衡中的方程相对简单, 所以方程输入所涉及的 Matlab 语法容易掌握, 概况为以下要点:

- 1) 变量区分大小写。
- 2) 字母 x 和 y 是指定的自变量和因变量, 不能他用。
- 3) 以 % 开始的行是注释。建议进行必要的注释, 以备参考, 因为所有用户输入的方程都被自动保存在一个数据库中。
- 4) 如果方程表达式比较复杂, 可以使用一些临时变量, 参见“Syntax”按钮提供的实例。
- 5) 每条语句应该以分号结束(用户如果忽略, 软件会智能添加)。

6) 运算符+、-、*、/、^分别代表加、减、乘、除、和乘方。对于开 n 次方, 可以使用 $^(1/n)$ 。负数开奇数次方 Matlab 给出复数结果, 如 $(-8)^{(1/3)} = 1.0000 + 1.7321i$, 为了避免这一点, 建议使用 nthroot, 如 $\text{nthroot}(-8, 3) = -2$ 。

(7) 如果表达式较长, 输入时会自动折行。用户也可以自己断行, 断行处添加省略号…。

方程输入完成后, 用户需要点击“Finish”按钮, 进行下一步。“Clear”按钮清除所有输入。“Function DB”按钮进入方程库, 在 3.3 节详细介绍。

3.2 图像绘制和方程求解

函数图像的绘制和方程求解在 Action 功能区完成。如图 1 所示, 功能区下方是显示函数图像的坐标系。功能区上方是按钮、文本和编辑框等控件, 这些控件组成一句完整表述: Plot the function from $1e-14$ to 1, or around 0.0, with 10000 points, solve it。期望以这种扁平化方式既解释方程求解的过程, 又完成相应功能, 同时保持界面的简洁清晰。

区间端点的缺省值为 10^{-14} 和 1, 是为了方便化学平衡中组分浓度的求解, 因为浓度通常处于这个区间。区间端点的具体数值并不重要, 只需满足“函数在区间内与 x 轴只有一个交点”的要求即可。用户如果知道方程的近似解, 还可以选择在这个近似解附近绘图, 软件会自动搜索一个满足要求的求根区间。当区间端点的数量级相差太大时, 软件自动选择对数坐标。

用户单击“Plot the function”按钮来绘制函数图像。如果坐标系背景为绿色, 说明函数与 x 轴只有一个交点——满足“二分法”要求, 然后单击“solve it”按钮, 即显示求根结果, 结果同时也复制到剪贴板。如果坐标系背景为红色, 表明“二分法”的求根条件不满足(没有交点或者有多个交点), “solve it”按钮为不可点击状态。如果存在多个交点, 通过工具栏上的按钮对图像进行缩放或者平移, 改变横坐标的范围, 直到坐标系重新变为绿色(“solve it”按钮同时变为可点击状态), 然后进行求解。通过这种方式, 可以求出所有交点。

3.3 方程库

用户输入的方程如果正确, 会自动保存在一个数据库中。单击“Function DB”按钮进入数据库。数据库缺省界面如图 2(a)所示。按钮“Previous”和“Next”用于浏览数据库中的方程, 方程的位置和创建时间显示为图中的蓝色文本。鼠标右键单击蓝色文本, 文本消失, 取而代之的是一个滑动条, 见图 2(b)。滑动条的功能与按钮“Previous”和“Next”相同, 但是操作更加快捷, 适用于方程较多时浏览和定位; 滑动条的提示信息是方程位置和创建时间。鼠标右键单击滑动条, 滑动条消失, 蓝色文本复原。

用户如果想再次求解数据库中的某个方程, 定位到该方程后单击“Choose”。软件将返回方程求解界面, 并自动完成方程的输入(“Finish”按钮处于不可点击状态), 用户直接在 Action 功能区实施求解。

单击按钮“Delete”或者“Purge”, 可以删除当前方程或者数据库中所有方程。按钮“Undo”用于撤销“Purge”或者一次“Delete”操作。如果用户删除了多个方程, 那么按钮“Undo”无法复原数据库, 此时单击窗口右上角的X退出软件(而不是“Close”按钮退出数据库), 那么原数据库不受影响。

数据库以二进制格式保存。可以通过按钮“Export”将数据库中方程导出到一个文本文件。

3.4 软件其他功能

软件提供一定的界面定制: 用户可以修改窗口大小, 文本和按钮的字体大小。这样, 在不同屏幕分辨率下, 特别是高分屏, 也能获得较好的界面体验。

界面定制与 Matlab 版本相关。一台计算机上如果安装了多个版本的 Matlab, 可以在不同版本下对软件界面进行分别定制, 互不干扰。不同版本 Matlab 对图形窗口的设置以及字体渲染有时略有差异, 而针对 Matlab 版本的界面定制可以克服这种差异对于界面体验的影响。

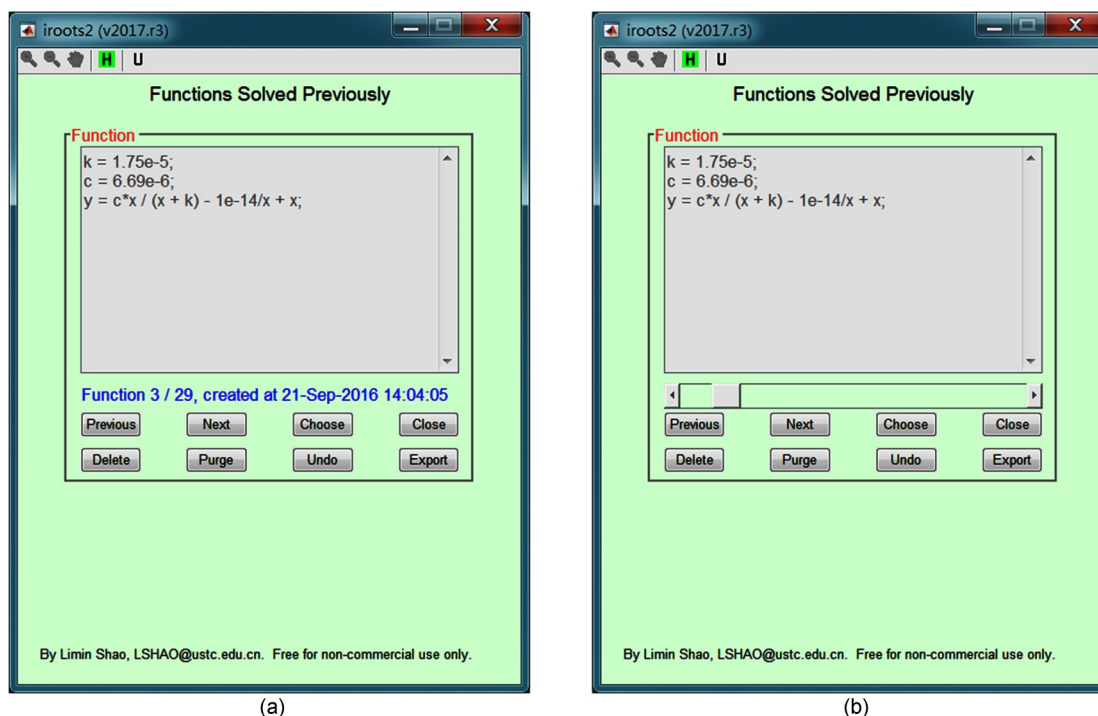


图2 方程库界面

(a) 缺省界面; (b) 鼠标右键单击蓝色文本后的界面
电子版为彩图

软件提供新版本查询功能。用户点击工具栏上的“U”按钮，可以手动查询新版本；软件会定期自动查询新版本(不会上传任何用户信息)。如果有新版本，在得到用户允许后，软件会自动完成更新，用户数据(界面定制和方程库)不受影响。

3.5 进一步说明

在方程输入面板，用户通过右键菜单或者常规快捷键进行文本的复制、粘贴、剪切和全选。但是，面板不支持撤销操作以及相应快捷键 $\text{ctrl}+\text{z}$ ，这是Matlab的限制。

本软件有意降低对用户Matlab编程知识的要求，以突出易用性，代价是无法利用Matlab在矩阵运算方面的优势。

限于条件，本软件没有在Mac系统和Linux系统下进行检测，尤其是文件创建、删除等操作。

针对具有一定Matlab编程知识的用户，还开发了另一个功能基本相同的求解软件，名为iroots，这也是文献[4]附录4中的版本，下载地址是<http://staff.ustc.edu.cn/~lshao/misc.html>。iroots的易用性不如iroots2，但是更加灵活，并且不依赖于操作系统和屏幕分辨率。

软件保留版权。对于非商业用户，软件免费使用，免费升级。iroots同样是免费软件，并且提供源代码。

还开发了Android版本，用户可以在“小米应用商店”通过搜索equation solver安装使用，也可以从上述地址下载apk文件。

4 软件应用

分析化学中的方程一般不太复杂，而且多是求解浓度，例如常见的求pH问题。所以，只要方程输入正确，使用软件默认的求根区间 $[10^{-14}, 1]$ ，通常可以顺利求解，而且只需两步：单击“Plot the function”绘图，图像背景绿色时单击“solve it”。

如果涉及多个化学平衡, 方程求解可能存在某些困难, 包括: ① 方程比较复杂, 有时甚至难以得到 $y=f(x)$ 这样的显式方程, 因此输入繁琐、易错; ② 难以确定求根区间; ③ 存在多个解。对于第1个困难, 输入表达式时适当使用辅助变量。对于第2和第3个困难, 要充分利用图像, 并结合具体问题中的信息, 综合判断。下面通过3个例题进行说明, 例题全部选自文献[4], 解题过程突出软件的使用, 省略方程推导。

例1 $0.050 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 的 I_2 溶液作为滴定剂(含 $1.0 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ KI), 滴定 $0.10 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 的 $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ 溶液。以淀粉为指示剂, 当溶液中 I_2 的浓度为 $5.0 \times 10^{-6} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 时, 溶液由无色变为蓝色, 计算终点误差。(电对 I_3/I^- 和 $\text{S}_4\text{O}_6^{2-}/\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$ 的条件电势 E_1^\ominus 和 E_2^\ominus 分别为 0.545 V 和 0.080 V)

解: 解题关键在于 R , $R = V_{\text{ep}}/V_{\text{sp}}$, 其中 V_{ep} 和 V_{sp} 分别表示滴定终点和化学计量点时加入 I_2 溶液的体积。通过推导, 得到以下方程:

$$10^{\frac{2(E_2^\ominus - E_1^\ominus)}{0.059} + 6} = \frac{5(R+1)^2(0.10001 - 0.09999R)^2}{(1.09999R - 1.0 \times 10^{-5})^3(0.049995R - 5 \times 10^{-6})}$$

方程形式复杂, 编程时将其中的某些项表示为辅助变量, 这样可以使表达式简洁可靠。下面是参考代码, 在 Function 功能区输入后单击“Finish”按钮。

```
const = 10 ^ (2 * (0.08 - 0.545)/0.059 + 6);
aux1 = 5 * (x + 1)^2 * (0.10001 - 0.09999 * x)^2;
aux2 = (1.09999 * x - 1e-5)^3;
aux3 = (0.049995 * x - 5e-6);
y = const * aux2 * aux3 - aux1;
```

对于该问题, $R \approx 1$, 所以选择在 1.0 附近绘图。图像背景红色, 说明求根区间内函数与 x 轴没有交点或者有多个交点——不满足“二分法”求解要求。放大图像进行查看, 见图 3(a)。从图 3(a) 中没有看到明显的交点, 显然是因为数据点数不够。解决这个问题的有效办法是缩小求根区间。

将区间端点设为 0.999 和 1.001, 重新绘制函数图像, 并再次放大, 见图 3(b)。从图 3(b) 中可以清楚地看到两个交点。明确交点后, 求解就比较简单。通过工具栏的平移按钮, 将一个交点移出坐标系后(图像背景变为绿色, 按钮“solve it”变为可点击状态), 即可求解。由此得到两个根, 分别是 1.000208 和 1.000192。根据具体问题的分析^[4], R 应该取值 1.000192, 由此计算出终点误差 $E_t = (R - 1) \times 100\% = 0.019\%$ 。

例2 将 CdS 置于 $c_{\text{NaCN}} = 0.10 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 的碱性溶液中, 沉淀溶解平衡后 $\text{pH} = 10.0$ 。需要考虑沉淀溶解对溶液原有 $[\text{CN}^-]$ 的影响, 计算 CdS 的溶解度。(CdS: $K_{\text{sp}} = 1.0 \times 10^{-27}$; H_2S : $K_{\text{a1}} = 1.3 \times 10^{-7}$, $K_{\text{a2}} = 7.1 \times 10^{-15}$; HCN : $K_{\text{a}} = 6.2 \times 10^{-10}$; Cd^{2+} - CN^- 配离子: $\beta_1 = 3.0 \times 10^5$, $\beta_2 = 4.0 \times 10^{10}$, $\beta_3 = 1.7 \times 10^{15}$, $\beta_4 = 6.0 \times 10^{18}$)

解: 解题关键在于 $[\text{CN}^-]$ 。通过推导, 得到以下方程, 其中 x 表示 $[\text{CN}^-]$ 。

$$\frac{K_{\text{sp}}(\beta_1 x + 2\beta_2 x^2 + 3\beta_3 x^3 + 4\beta_4 x^4)}{(0.10 - x/\delta_{\text{CN}^-})\delta_{\text{S}^{2-}}} = \frac{(0.10 - x/\delta_{\text{CN}^-})(1 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \beta_3 x^3 + \beta_4 x^4)}{(\beta_1 x + 2\beta_2 x^2 + 3\beta_3 x^3 + 4\beta_4 x^4)}$$

类似于例1, 输入方程表达式时使用辅助变量。下面是参考代码, 在 Function 功能区输入后单击“Finish”按钮。

```
k1 = 1.3e-7; k2 = 7.1e-15; k = 6.2e-10; h = 1e-10; ksp = 1e-27;
b1 = 3e5; b2 = 4e10; b3 = 1.7e15; b4 = 6e18;
aux1 = 1 + b1 * x + b2 * x^2 + b3 * x^3 + b4 * x^4;
aux2 = b1 * x + 2 * b2 * x^2 + 3 * b3 * x^3 + 4 * b4 * x^4;
aux3 = k1 * k2 / (h^2 + k1 * h + k1 * k2);
```

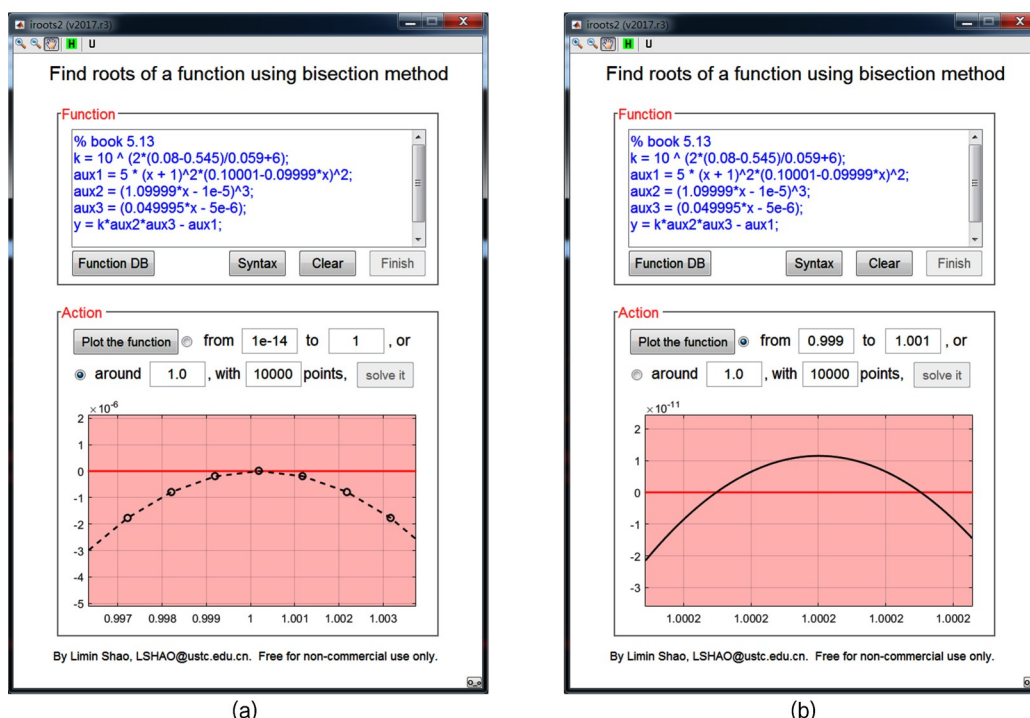


图3 例1方程的图像
(a) 在1.0附近的图像; (b) 0.999–1.001上的图像
电子版为彩图

$$\text{aux4} = k / (h + k);$$

$$y = \text{ksp} * \text{aux2} / (0.1 - x / \text{aux4}) / \text{aux3} - (0.1 - x / \text{aux4}) * \text{aux1} / \text{aux2};$$

Cd^{2+} - CN^- 配合物的生成致使 $[\text{CN}^-] < 0.10$; 但是 CdS 非常难溶, 释放出的 Cd^{2+} 很少, 故 $[\text{CN}^-]$ 也不会太小。这样, 未知数 $[\text{CN}^-]$ 很有可能处于软件默认的求根区间 $10^{-14} - 1$ 之中, 于是直接点击“Plot the function”进行绘图。

图像背景为红色, 放大后查看函数与 x 轴似乎只有一个交点, 如图4(a)所示。连续放大数次后发现其实不只一个交点, 如图4(b)所示。明确了交点后, 通过工具栏的平移按钮, 分别将其他交点移出坐标系(图像背景变为绿色, 按钮“solve it”变为可点击状态), 然后求解得到两个根 8.5877×10^{-2} 和 8.6347×10^{-2} 。两个根很接近, 所以图4(a)中看起来只有一个交点。

方程中的项 $0.10 - x/\delta_{\text{CN}^-}$ 应该大于零, 将相应数值代入, 得到 $x < 0.08611$ 。所以, 符合题意的根是 $8.5877 \times 10^{-2} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 。

值得指出的是, 图4(b)中并没有3个交点, 中间的其实是函数在0.08611附近的一个间断点。如果整理原方程, 在等号两侧同时乘以 $(0.10 - x/\delta_{\text{CN}^-})$, 再进行求解, 那么图像中就只有两个交点。当然, 这种整理对于本软件来说并非必要, 而且还增加了求解时间。

例3 配制 $0.050 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 的 $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$ 溶液用于酸碱滴定, 由于失误使用了自来水。自来水的硬度较大, 其中 Ca^{2+} 的浓度约为 $0.0070 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 。计算该溶液的pH。(CaC₂O₄: $K_{\text{sp}} = 2.3 \times 10^{-9}$; $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$: $K_1 = 5.9 \times 10^{-2}$, $K_2 = 6.4 \times 10^{-5}$)

解: 通过推导, 得到以下两个方程:

$$[\text{H}^+] + 2 \frac{K_{\text{sp}}}{[\text{C}_2\text{O}_4^{2-}]} = \frac{K_1[\text{H}^+] + 2K_1K_2}{[\text{H}^+]^2 + K_1[\text{H}^+] + K_1K_2} \left(0.043 + \frac{K_{\text{sp}}}{[\text{C}_2\text{O}_4^{2-}]} \right) + 0.014 + \frac{K_w}{[\text{H}^+]} \quad (1)$$

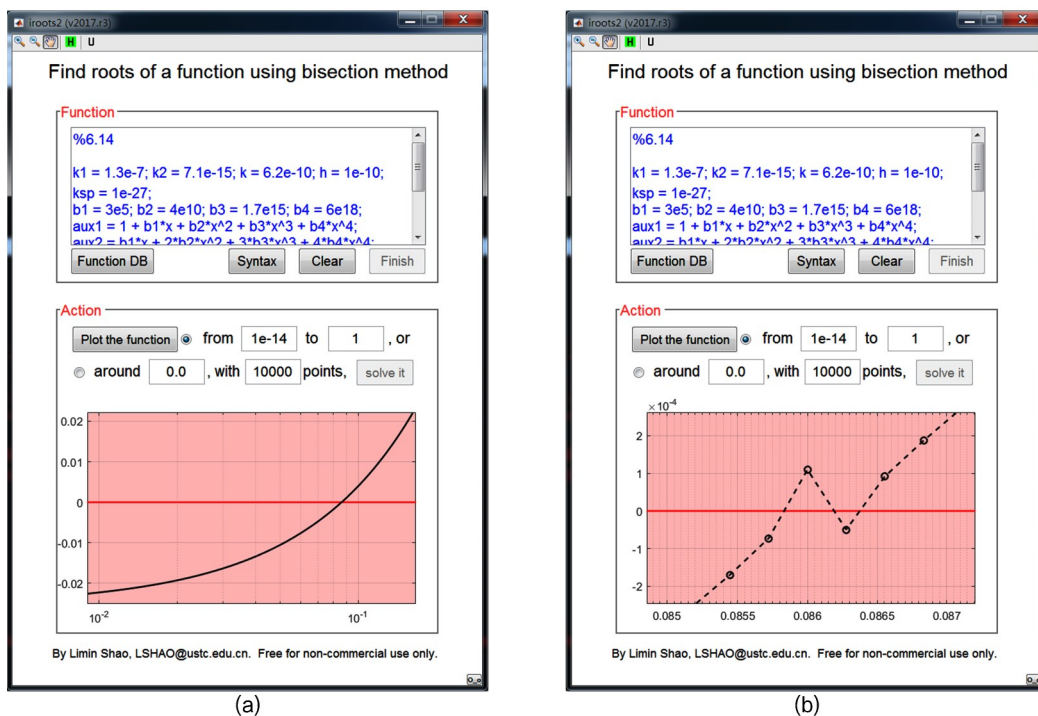


图4 例2方程的图像
(a) 放大图像; (b) 交点附近的放大图像
电子版为彩图

$$[\text{C}_2\text{O}_4^{2-}] = \frac{K_1 K_2}{[\text{H}^+]^2 + K_1 [\text{H}^+] + K_1 K_2} \left(0.043 + \frac{K_{\text{sp}}}{[\text{C}_2\text{O}_4^{2-}]} \right) \quad (2)$$

方程组中的未知数是 $[\text{H}^+]$ 和 $[\text{C}_2\text{O}_4^{2-}]$ 。将式(1)代入式(2)以消去 $[\text{C}_2\text{O}_4^{2-}]$, 即可得到关于 $[\text{H}^+]$ 的方程。使用本软件时, 其实没有必要推导出方程的显式形式, 通过辅助变量即可。下面是参考代码, 其中辅助变量aux3是通过式(1)得到的 $[\text{C}_2\text{O}_4^{2-}]$ 。在Function功能区输入后单击“Finish”按钮。

```
ksp = 2.3e-9; k1 = 5.9e-2; k2 = 6.4e-5;
aux1 = x^2 + k1 * x + k1 * k2;
aux2 = (k1 * x + 2 * k1 * k2) * 0.043 / aux1 + 0.014 + 1e-14 / x - x;
aux3 = (2 * ksp - ksp * (k1 * x + 2 * k1 * k2) / aux1) / aux2;
y = aux3 - k1 * k2 / aux1 * (0.043 + ksp / aux3);
```

在软件默认的求根区间 10^{-14} –1内绘图, 见图5(a)。图像背景为绿色, 单击“solve it”按钮, 得到 $x = 0.1004$ 。但是, 这个结果与实际情况不符, 因为 $0.050 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 的 $\text{H}_2\text{C}_2\text{O}_4$ 即使完全离解, $[\text{H}^+]$ 才是0.10。

放大图像仔细检查函数与 x 轴的相交情况, 结果见图5(b)。从中可以发现, 在0.04附近函数值趋向正值, 但是由于默认求根区间端点的数量级相差太大, 致使0.04附近的数据点分配不足, 正函数值最终没有能够出现。

基于上述分析, 缩小求根区间, 如0.03–0.04, 重新绘图, 即可求得 $[\text{H}^+] = 3.97 \times 10^{-2}$, 这才是符合题意的解, 所以 $\text{pH} = 1.40$ 。

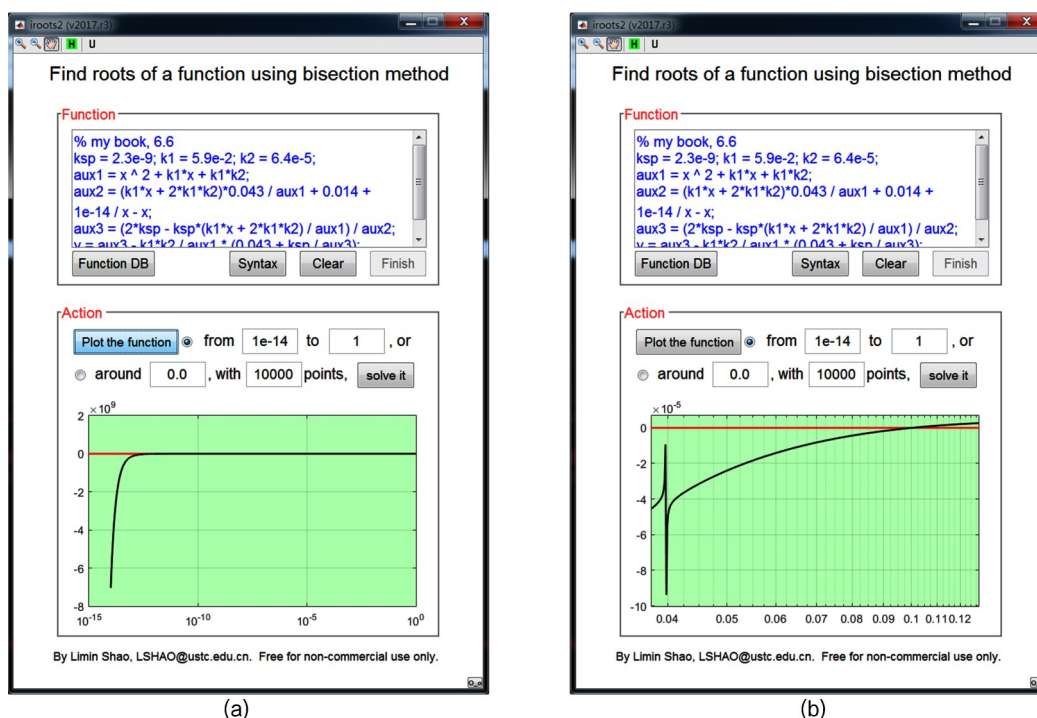


图5 例3方程的图像
(a) 原图像; (b) 放大图像
电子版为彩图

5 结 语

在分析化学课程中大规模推广精确解析已经可行。“去公式化”课程体系提供了理论框架; 计算设备的高性能和高度普及提供了硬件支持。为了提高效率, 基于 Matlab 语言开发了一款方程求解软件。该软件突出易用性, 对用户的编程要求非常低; 针对化学平衡特点设计, 提供简洁的界面、直观的图像和自然的人机交互, 从而实现复杂方程的高效求解。还开发了 Android 系统版本, 同样免费使用。该方案能够显著降低方程求解的软件使用成本, 为化学平衡精确解析的大规模推广提供进一步支持。

参 考 文 献

- [1] 武汉大学. 分析化学. 第5版. 北京: 高等教育出版社, 2006.
- [2] 华中师范大学等6校合编. 分析化学. 第4版. 北京: 高等教育出版社, 2011.
- [3] 李龙泉, 朱玉瑞, 金 谷, 江万权, 邵利民. 定量化学分析. 第2版. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2005.
- [4] 邵利民. 分析化学. 北京: 科学出版社, 2016.
- [5] 薛泽春, 程晓东, 李连之, 张宪玺, 李大成. 大学化学, **2015**, *30* (3), 80.
- [6] 赵 鑫, 王殿书, 丛培盛, 朱仲良. 计算机与应用化学, **2010**, *27* (2), 257.
- [7] 黄千姿, 唐美华, 张之翼, 边 敏, 卜洪忠, 孙尔康, 陈国松. 大学化学, **2016**, *31* (3), 78.
- [8] 岳宣峰, 张智娟, 张延妮. 大学化学, **2016**, *31* (8), 89.
- [9] 甘 峰, 李攻科. 大学化学, **2005**, *20* (3), 51.