

复杂代数方程的求根软件 iroots

绝大多数化学平衡计算涉及到复杂代数方程的求解。在计算机硬件普及、软件丰富的时代，困难不在于求解方程，而是不具备专业编程知识的普通用户如何方便快速地求解。为了解决这一问题，开发方程求解软件 iroots。

iroots 在 Matlab 或者 Octave 平台下运行，所以需要预先安装这两个软件之一（Matlab 收费，Octave 免费，都可以在 Windows 和 MacOS 系统下运行）。Octave 的主页是 www.gnu.org/software/octave/。

求解软件包括 iroots.m 和 myfunction.m 两个文件，用户将待解方程的表达式写入 myfunction.m 文件，然后运行 iroots.m 进行求解。

软件安装比较简单，解开 zip 压缩包即可。建议解压到当前用户的桌面，既方便使用又可以避免权限方面的问题。

Matlab 和 Octave 的语法非常相似，只是软件界面稍有不同。下面分别介绍 iroots 在这两个平台的使用。

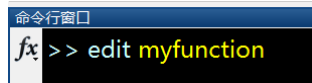
在 Matlab 上使用 iroots

以 Matlab 2015a 版为例，说明如何在 Matlab 平台下通过 iroots 求解方程。

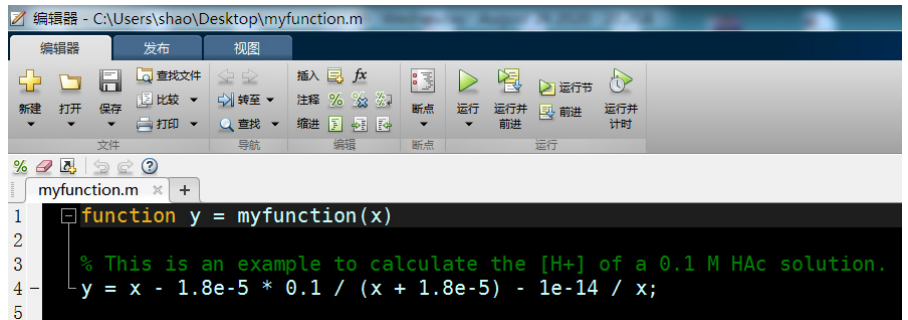
① 单击箭头所指的图标，将 Matlab 的**当前路径**变为软件所在的文件夹。



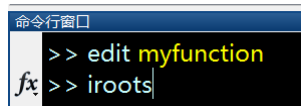
② 在**命令行窗口**输入 edit myfunction 以编辑 myfunction.m 文件。



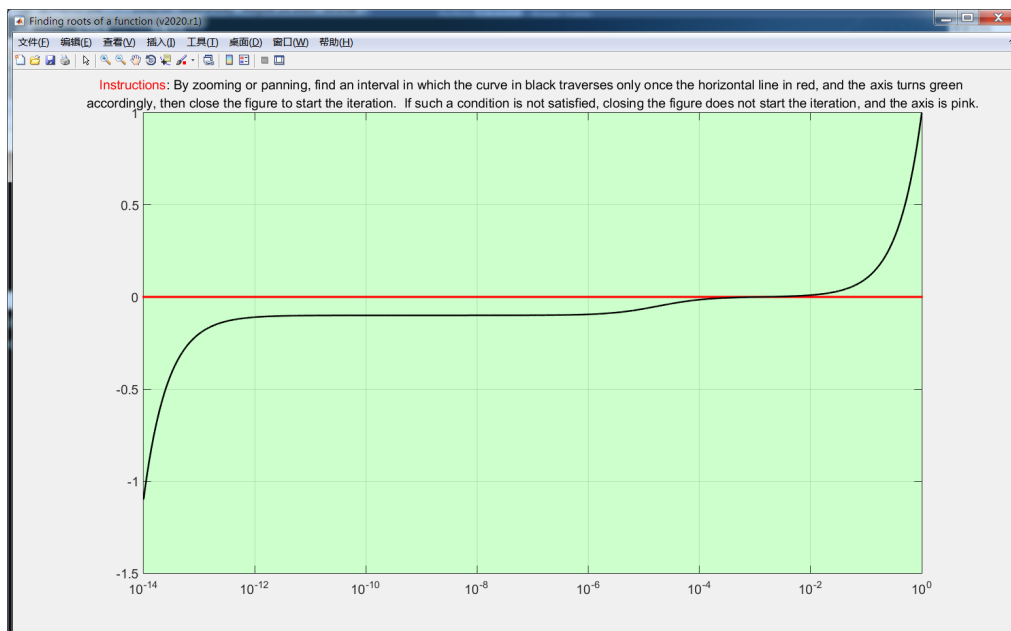
③ myfunction.m 文件被**编辑器**打开，用户写入待解方程的表达式，注意 x 和 y 为自变量和因变量专用。完成后保存。



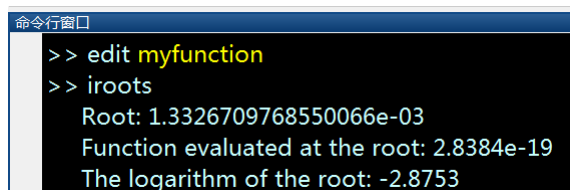
④ 在**命令行窗口**输入 iroots, 开始方程求解。



⑤ 软件绘制方程在 $[10^{-14}, 1]$ 上的图像，以黑色表示，红色直线表示 $y = 0$ 。当函数在求根区间端点处异号，且与红线只有一个交点时，坐标系背景为绿色，表示根存在，关闭**图形窗口**即开始求根。



⑥ 求解结果显示在**命令行窗口**，包括**根**、根对应的**函数值**（越接近零越好）和根为正时的**对数值**。



在 Octave 上使用 iroots

以 Octave 5.2.0 版为例，说明如何在 Octave 平台下通过 iroots 求解方程。

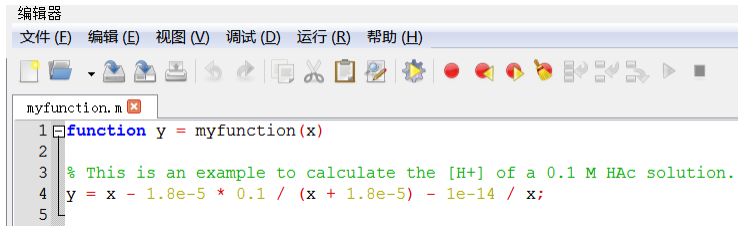
① 单击箭头所指的图标，将 Octave 的**当前目录**变为软件所在的文件夹。



② 在**命令窗口**输入 edit myfunction 以编辑 myfunction.m 文件。

```
命令窗口
>> edit myfunction
```

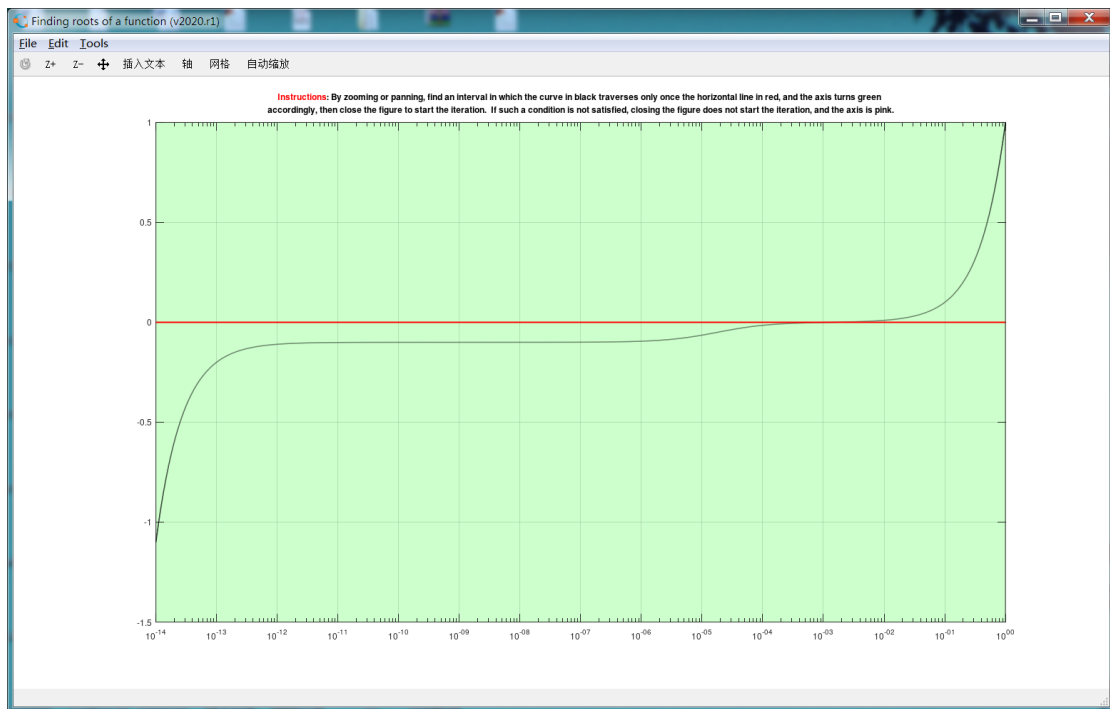
③ myfunction.m 文件被**编辑器**打开，用户写入待解方程的表达式，注意 x 和 y 为自变量和因变量专用。完成后保存。



④ 在**命令窗口**输入 iroots，开始方程求解。

```
命令窗口
>> edit myfunction
>> iroots
```

⑤ 软件绘制方程在 $[10^{-14}, 1]$ 上的图像，以黑色表示，红色直线表示 $y = 0$ 。当函数在求根区间端点处异号，且与红线只有一个交点时，坐标系背景为绿色，表示根存在，关闭**图形窗口**即开始求根。



⑥ 求解结果显示在**命令窗口**，包括**根**、根对应的**函数值**（越接近零越好）和根为正时的**对数值**。



```
命令窗口
>> edit myfunction
>> iroots
Root: 1.3326709768546950e-03
Function evaluated at the root: -6.188e-16
The logarithm of the root: -2.8753
```

进一步说明

步骤④中，直接输入 `iroots` 只是软件的 1 种运行方式。`iroots` 共有以下 4 种运行方式：

- `roots(a, b, n)` 在区间 $[a, b]$ 内求根，并以 n 个数据点绘制函数图像
- `iroots(a, b)` 在区间 $[a, b]$ 内求根，并以 10,000 个数据点绘制函数图像
- `iroots(x)` 在 x 附近求根， x 是根的估计值
- `iroots` 在区间 $[10^{-14}, 1]$ 内求根，并以 10,000 个数据点绘制函数图像

用户可以根据实际情况选择其中一种方式进行求根。

步骤⑤中，如果黑色曲线与红线没有交点或者有多个交点，那么坐标系背景变为红色以示警告。如果有多个交点，那么通过图形窗口上的**缩放**或者**平移**按钮  (Matlab)  (Octave)，使图像中只有一个交点，坐标系背景同时变为绿色，然后关闭窗口启动求解。如果没有交点，那么关闭图形窗口，再尝试其他求根区间。

从 2021r1 版本开始，`iroots` 支持**模板**。用户可将常见方程的表达式和相关参数作为**模版**写到一个文本文件。之后求解这类方程时，只需要调用相应模板、输入参数数值即可。这样不仅提高效率，而且降低方程推导和代码输入中出错的几率。模板调用方式为 `iroots('t')` 或者 `iroots("T")`，详细信息参见程序给出的提示。