

УДК 51.73

Студ. М.Е. Машкин

Науч. рук. доц. Л.Д. Яроцкая  
(кафедра высшей математики, БГТУ)

## АЛГОРИТМ ДЛЯ РАСЧЕТА СМЕСЕЙ СЛОЖНОГО СОСТАВА

Одна из задач химии – поиск новых веществ, обладающих полезными свойствами, лекарственных средств, строительных материалов, в том числе растворов и смесей сложного состава.

Целью работы является построение алгоритма расчета смеси заданного сложного состава с помощью методов линейной алгебры и выбора оптимального варианта среди теоретически возможных. Смесь сложного состава – система, состоящая из трех или более веществ.

*Постановка задачи.* Имеем  $n$  компонентов, каждый из которых может содержать  $m$  таких-то веществ. Причем  $j$ -ый компонент содержит  $a_{ij}$  единиц (массовых, объемных)  $i$ -го вещества ( $j = 1, \dots, n$ ,  $i = 1, \dots, m$ ). Требуется приготовить смесь из заданных компонентов, содержащую  $b_i$  единиц  $i$ -го вещества.

*Математическая модель.* Обозначим через  $x_j$  количество  $j$ -компонента, которое необходимо взять для приготовления данной смеси. Тогда сумма  $a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \dots + a_{in}x_n$  требуемое в смеси количество  $b_i$  вещества. Таким образом, система линейных  $m$  уравнений с  $n$  неизвестными

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \dots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases}$$

описывает процедуру приготовления смеси.

Как известно, система линейных алгебраических уравнений может иметь единственное решение или множество решений или не иметь решения. В общем случае она может быть решена методом Гаусса, реализуемом во многих пакетах прикладных программ. В случае, когда число уравнений  $m$  совпадает с числом неизвестных  $n$ , для решения системы может быть применен метод Крамера или матричный. Следует отметить, что на коэффициенты системы наложены некоторые условия, чтобы полученное решение имело практический смысл. Например, если  $a_{ij}$  – концентрация (%)  $i$ -го вещества в  $j$ -ом компоненте, то  $\sum_{i=1}^m a_{ij} = 100$ . Рассмотренная модель лежит в основе нашей программы, которая позволяет составлять смеси заданного состава из различных комбинаций, имеющихся в наличии веществ, и выбирать оптимальные варианты по определенным критериям.