

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

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.

[illegible]

Как известно, система линейных алгебраических уравнений может иметь единственное решение или множество решений или не иметь решение. 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, имеющих в наличии веществ, и выбирать оптимальные варианты по определенным критериям.