### 基于矩阵的化学方程式配平的编程实现（中期汇报）

一、论题提出背景、现实意义

21世纪，人类步入了互联网时代，大数据、人工智能的广泛应用，极大丰富和便利了人们的生活。在科学领域，计算机技术正日新月异地助推研究活动。有人说，“二十一世纪是化学的世纪”，还有的人说，“二十一世纪是计算机的世界”。化学是科学的重要组成部分，利用计算机技术来研究化学，成为一种妙不可言的方法。

现在的化学发展日益进步，在一些特定领域，化学方程式的表达与相关操作将会极度复杂。而利用计算机这一有力工具，在构建起相关的算法基础与合理的数据结构的基础上，完全可以利用计算机的优势，减小化学方程式相关操作的压力。这也正是我们组课题提出的背景。

我们认为，利用计算机解决这一问题，有如下优点：

①省时省力，减少了配平时所不必浪费的时间，能够极大减轻化学研究人员的压力。

②速度快，效率高，计算机具有人类无法比拟的算力，且配平化学方程式无需高等思维，适合计算机计算。

二、实现方案

初步设想为，借助数学工具，设计相关算法，设计相关数据结构，采用编程，利用计算机实现。在老师与成员们的综合论证下，我们已经初步确定一些事实。

这里的数学工具，是线性代数中的矩阵相关知识。

这里的相关算法，是矩阵中的高斯消元法（也可能扩展到高斯-约旦消元法）。

这里的数据结构，我们认为需要使用特殊的分数类来实现。

这里的编程，采用的是C++语言，在Windows系统上基于cmd命令行操作进行编写。

这里的实现过程，是将输入的化学方程式，建立起一个矩阵，利用算法进行计算处理出答案。

三、目前进展

已经完成数学工具的选择，并且完成相关算法数学理论基础的学习。各个子任务的代码编写接近完成，但仍未整合。对于资料的收集与处理已着手进行，但对于过程性材料还未良好处理。

但我们仍遇到一定困难。

四、遇到困难

①程序代码的可读性存在一定问题。这是因为编写者不同的代码习惯所导致。

②程序存在很大优化空间。初步完成的代码只是简单实现了功能，未在效率上寻求进一步的突破。这是因为成员的技巧与时间的有限导致。

③对实际工业生产的结合不够。这是基于我们暂未采用工业示例进行单元测试的现实，即在程序的扩展性上我们缺少探索。

④跨平台的使用。

⑤缺少可视化界面，使用不简便。这是因为成员的编程知识有限的情况，与我们仍在程序核心上做功夫。

五、下步工作展望

1. 研究在不同反应条件、不同反应物比例下化学方程式的配平。
2. 研究对计算程序的优化，提高计算效率。
3. 研究在此方面的先例。

六、总结

我们介绍了我们的课题，指出了课题提出背景、现实意义，实现方案，目前进展，遇到的困难与下步工作展望等。我们将以更大的热情，推进研究进一步深入。谢谢诸位老师的聆听！