

Химический калькулятор

Есть идея создать химический калькулятор для неорганической химии.

Интересно мнение специалистов в предметной области - неорганической химии.

Отличительной стороной калькулятора — это командный интерфейс, по сути специфичный язык программирования для поиска решений.

Пока идеи следующие, решение:

1. Системы уравнений — Уравнивание химических реакций.
2. Поиск реакций (последовательности) для получения готового вещества из исходного набора.

Пользовательский интерфейс

Предполагается что интерфейс будет командный, взаимодействие пользователя условно говоря будет таким:

Пользователь > **Уровнять $\text{H}_2 + \text{O}_2 = \text{H}_2\text{O}$**

Ответ > **$2\text{H}_2 + \text{O}_2 = 2\text{H}_2\text{O}$**

Пользователь в командной строке Windows/Linux/Mac ... или на специфичном сайте набирает соответ. Команды и получает ответ.

Уравнивание химических реакций

Задача уравнивания химических реакций — сводится к решению системы уравнений, предполагается использовать метод Гаусса и другие метода, в частности использовать библиотеку `apache commons math`.

Поиск реакций

В данном случае имеется виду, что есть например несколько веществ: вода, кислота А, щелочь Б и т. е. некое ограниченное (по химическому составу) кол-во различных веществ.

И необходимо найти как получить вещество Х. Программа должна отыскать последовательность реакций для получения вещества. Пример:

Пользователь > **Есть вещество А**

Пользователь > **Есть вещество Б**

Пользователь > **Есть вещество В**

Пользователь > **Поиск вещества Х**

Ответ > **$\text{A} + \text{B} \rightarrow \text{Г}, \text{Г} + \text{В} \rightarrow \text{Х}$**