Math. für Chemie II

Zürich FS 2016

MI	G 55	Y21
FR	G 85	Y03

§1. Lineare Gleichungssysteme

Ein lineares Gleichungssystem (S) mit n Unbekannten und m Gleichungen

hat die Form

$$
(S)\quad \left\{
\begin{array}{ll}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 & (S_1)\\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 & \\
\vdots & \\
a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = b_m & (S_m)
\end{array}
\right.
$$

$a_{11}, a_{\dots}, \dots\ a_{mn}$ sind die Koeffizienten

Das System heisst <u>reell</u>, wenn alle a_{ij} und $b_1 \dots b_m$ reell.

Eine Lösung von (S) ist eine Menge von n reellen Zahlen $x_1, \dots, x_n$, so das $(S_1) \dots (S_m)$ gleichzeitig erfüllt sind.

Bezüglich eines Systems (S) gibt es drei grundlegende Fragen:

(1) Hat (S) eine Lösung? (Existenz)

(2) Hat (S) höchstens eine Lösung? (Eindeutigkeit)

(3) Was sind die Eigenschaften der Menge der Lösungen

$$L := \{(x_1,\dots,x_n) \mid x_1 \in \mathbb{R},\dots, x_n \in \mathbb{R},\ (x_1,\dots,x_n) \text{ erfüllt } (S_1) - (S_m)\}$$

1.1 Spezialfälle

Spezialfall (A)

Eine Gleichung mit einer Unbekannten

(S) $a_{11} x_1 = b$

Wir schreiben in diesem Fall $x = x_1$

(S) $ax = b$

Lösbarkeit hängt von $a, b \in \mathbb{R}$ ab

1tes Fall: $a \neq 0$ Dann gibt es genau eine Lösung

$$x = \frac{b}{a} \in \mathbb{R}, \qquad L = \left\{ \frac{b}{a} \right\}$$

2tes Fall: $a = 0,\ b \neq 0$

Dann hat (S) keine Lösung $L = \emptyset$

3tes Fall, $a = 0,\ b = 0$

Dann ist jede Zahl $x \in \mathbb{R}$ Lösung

$0 \cdot x = 0$, $L = \mathbb{R}$

(B) Eine Gleichung mit zwei Unbekannten

(S) $a_{11} x_1 + a_{12} x_2 = b_1$

Wir schreiben

(S) $ax + by = c$

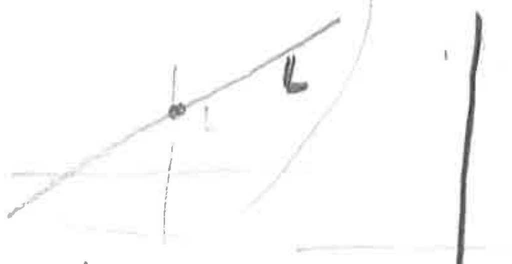
$$L = \{ (x,y) \in \mathbb{R}^2 \mid ax + by = c \}$$

3 Fall: $a = 0,\ b = 0,\ c = 0$ $L = \mathbb{R}$

2 Fall: $a = 0,\ b = 0,\ c \neq 0$ $L = \emptyset$

1 Fall: $(a,b) \neq (0,0)$ In diesem Fall ist L eine Gerade in $\mathbb{R}^2$, Wenn $b \neq 0$, dann

$$y = -\frac{a}{b} x + \frac{c}{b}$$



$b = 0,\ a \neq 0$,

$$L = \left\{ \left(\frac{c}{a}, y \right) \mid y \in \mathbb{R} \right\}$$

Ⓒ Zwei Gleichungen mit zwei Unbekannten

$$(S)\begin{cases} ax + by = e & (S1) \\ cx + dy = f & (S2) \end{cases}$$

Die Lösungsmenge L von (S) ist der Durchschnitt der Lösungsmengen von (S1) und (S2)

$L_1 = \{ (x,y) \in \mathbb{R}^2 \mid ax + by = e \}$

$L_2 = \{ (x,y) \in \mathbb{R}^2 \mid cx + dy = f \}$

$L = L_1 \cap L_2$

Im Falle dass $(a,b) \neq (0,0)$ und $(c,d) \neq (0,0)$ sind L_1, L_2 Geraden in $\mathbb{R}^2$, können wieder 3-Fälle auftreten:

(i) $L_1 = L_2 \Rightarrow L = L_1 = L_2$

(ii) L_1 und L_2 parallel, aber nicht gleich $\Rightarrow L = \emptyset$

(iii) L_1, L_2 nicht parallel $\Rightarrow L_1 \cap L_2$ ist ein Punkt. (Schnittpunkt).

Wir wollen nun einen Algorithmus beschreiben, wie man die Lösung erhält.
Wir nehmen der Einfachheit halber an, dass $a \neq 0$

<u>Schritt 1</u>: Eliminiere x aus (S2) indem man (S2) durch $(S2) - \frac{c}{a}(S1)$

$$cx + dy - \frac{c}{a}(ax + by) = f - \frac{c}{a}e$$

Das neue System sieht so aus:

$$(S^*)\begin{cases} ax + by = e & (S^*1) \\ \left(d - \frac{c}{a}b\right)y = f - \frac{c}{a}e & (S^*2) \end{cases}$$

Man kann leicht einsehen, dass (unter der Annahme $a \neq 0$) (S) genau die gleichen Lösungen hat wie (S^*)

<u>Man sagt</u>: die Systeme sind äquivalent.

<u>Schritt 2</u>: Wir lösen zuerst (S^*2) nach y auf und benutzen dann (S^*1) um x zu bestimmen:

<u>Fall (i)</u> $d - \frac{c}{a}b \neq 0 \Rightarrow$

$$y = \frac{f - \frac{c}{a}e}{d - \frac{c}{a}b} = \frac{af - ce}{ad - bc}$$

Substitution in (S^*1) ergibt

$$a x = e - b\left(\frac{af - ce}{ad - bc}\right)$$

$$x = \frac{de - bf}{ad - bc}$$

$$L = \left\{ \left(\frac{de - bf}{ad - bc}, \frac{af - ce}{ad - bc} \right) \right\}$$

Fall (ii) $d - \frac{c}{a} b = 0$, $f - \frac{c}{a} e \neq 0$

(S^*1) hat keine Lösung $L = \emptyset$

Fall (iii) $d - \frac{c}{a} b = 0$, $f - \frac{c}{a} e = 0$ (Übung!)

L ist eine Gerade

$$L = \left\{ \left(\frac{e}{a} - \frac{b}{a} y, y \right) \mid y \in \mathbb{R} \right\}$$

<u>Def.</u>: (i) Eine (2×2) <u>Matrix</u> ist ein System A von reellen Zahlen in der Form $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$, $a, b, c, d \in \mathbb{R}$

(ii) Die <u>Determinante</u> einer 2×2 Matrix A ist definiert als

$$\det(A) := ad - bc$$

(ohne Beweis)

<u>Satz 1</u> (i) Ein System $S = \begin{cases} ax + by = e \\ cx + dy = f \end{cases}$

hat eine eindeutige Lösung genau dann

wenn $\det\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \neq 0.$

(ii) Ist $\det\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \neq 0$, dann ~~ist~~ die eindeutige Lösung von der Form

$$x = \frac{\det\begin{pmatrix} e & b \\ f & d \end{pmatrix}}{\det\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}}, \quad y = \frac{\det\begin{pmatrix} a & e \\ c & f \end{pmatrix}}{\det\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}}$$

<u>Cramer - Regel</u>.

1.2 Gauss Elimination

Die Gauss Elimination ist ein Verfahren, um die Menge der Lösungen eines Gleichungssystems systematisch zu berechnen

$$(S) \quad \begin{cases} a_{11} x_1 + \cdots + a_{1n} x_n = b_1 \\ \quad \vdots \\ a_{m1} x_1 + \cdots + a_{mn} x_n = b_m \end{cases}$$

wir schreiben kompakter

$$(S) \quad \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i \quad \text{für } 1 \le i \le n$$

$$L = \{ (x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n \mid \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i \text{ für } 1 \le i \le n \}$$

$$L = \bigcap_{i=1}^{n} L_i \,, \quad L_i = \{ (x_1, \ldots, x_n) \mid \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i \}$$

<u>Def.</u>: Zwei Systeme

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i \text{ für } 1 \le i \le m$$

und

$$\sum_{j=1}^{n} c_{kj} x_j = d_k \text{ für } 1 \le k \le p$$

heissen <u>equivalent</u>, wenn sie die gleichen Lösungen haben.

Beispiel:

$$\begin{cases} 4x_1 + 3x_2 + x_3 = 1 \\ x_1 + x_2 + x_3 = 4 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 4x_1 + 3x_2 + x_3 = 1 \\ x_1 + x_2 + x_3 = 4 \\ 2x_1 + 2x_2 + 2x_3 = 8 \end{cases}$$

sind equivalent, da die dritte Gleichung im zweiten System aus den 2-ten folgt.

Die Idee der Gauss-Elimination ist es, ein System durch systematische Operationen in ein äquivalentes zu verwandeln, dass einfacher lösbar ist.

Die Methode benützt die folgenden drei <u>Zeilenoperationen</u> (row-operations)

(R1) vertauschen von zwei Zeilen

$$\begin{cases} 10x_1 + 5x_2 = 3 \\ 2x_1 - 6x_2 = -1 \end{cases} \rightsquigarrow \Big\{$$

(R2) Multiplikation einer Zeile mit einer Zahl $\neq 0$.

$$\left.\begin{aligned} 4x_1 + 3x_2 + x_3 &= 1 \\ 5x_1 + 15x_2 &= 10 \end{aligned}\right\} \longrightarrow \begin{aligned} 4x_1 + 3x_2 + x_3 &= 1 \\ x_1 + 3x_2 &= 2 \end{aligned}$$

Wir haben zweite Zeile mit $1/5$ multipliziert

(R3) Zu einer Zeile wird ein vielfaches einer anderen Zeile addiert.

Beispiel

$$(S) \left\{\begin{aligned} x_1 + x_2 &= 5 \quad (S1) \\ 4x_1 + 2x_2 &= 3 \quad (S2) \end{aligned}\right. \xrightarrow[(S2) \rightsquigarrow (S2) - (4\,S1)]{} \left\{\begin{aligned} x_1 + x_2 &= 5 \\ -2x_2 &= -17 \end{aligned}\right.$$

<u>Satz</u>: Durch anwenden von Operation (R1), (R2), (R3) erhält man ein äquivalentes System.

Gauss - Elimination

Vorbemerkung:

$$(S)\quad \begin{cases} a_{11}x_1 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ \vdots \\ a_{m1}x_1 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases}$$

zu (S) betrachten wir die

Koeffizientenmatrix

1te Zeile

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & \boxed{a_{1k}} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & & & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & \boxed{a_{mk}} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

$k$te Spalte

$(m \times n)$ Matrix mit m Zeilen und n Spalten

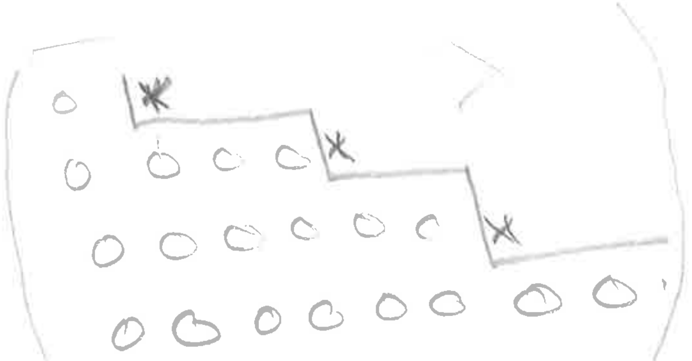
$$A = (a_{ij})_{\substack{1 \le i \le m \\ 1 \le j \le n}}$$

Die erweiterte Koeffizientenmatrix ist

$$\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} & b_m \end{pmatrix}, \qquad (A|b)$$

Eine Matrix A ist in **Zeilenstufenform**, wenn in einer tieferen Zeile das erste nicht-Null Element steht rechts von dem ersten nicht-Null Element einer höheren Zeile steht.

D.h.: eine Matrix in Zeilenstufenform hat die Gestalt



hierbei sind * Elemente die nicht null sind.

Beispiel:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} * & 5 & 5 \\ 0 & 2 & 5 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 2 & 4 & 6 & 7 \\ 0 & 0 & 0 & 8 & 0 \end{pmatrix}$$ alle in Zeilenstufenform

Die Matrix $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ ist nicht in Zeilenstufenform

Bemerkung: (1) alle Nullzeilen einer Matrix in Zeilenstufenform stehen unten.

(2) Unter dem ersten nicht-Null Eintrag einer Zeile stehen auch nur die Null.

$$\begin{array}{cccc} 0 & 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & & 0 \\ & & & 0 \\ & & & 0 \end{array}$$

Schritt 1 (der Gauss-Elimination)

Durch Operation vom Typ R_1, R_2, R_3 lässt sich ein Gleichungssystem mit Koeffizienten Matrix $(A|b)$ in ein äquivalentes Gleichungssystem mit Matrix $(\bar{A}|\bar{b})$ umformen, so dass $\bar{A}$ in Zeilenstufenform ist.

Bezeichnungen der drei row-operations:

$R_{i} \leftrightarrow R_k$ Vertauschen von i-ter und k-ter Zeile

$R_i \rightsquigarrow \alpha R_i$ Multiplizieren von i-ter Zeile mit $\alpha \neq 0$

$R_k \rightsquigarrow R_k + \alpha R_l$ add. von $\alpha \cdot$ l-ter Zeile zu k-ter Zeile

Beispiel: (1)

$$\left(\begin{array}{cc|c} 0 & 3 & 6 \\ 2 & 1 & 2 \end{array}\right)$$

$R_{1 \leftrightarrow 2}$
$$\left(\begin{array}{cc|c} 2 & 1 & 2 \\ 0 & 3 & 6 \end{array}\right)$$ Zeilenstufenform

(2)

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 1 & 2 & 0 \end{array}\right)$$

$R_2 \rightsquigarrow R_2 - 2R_1$ und $R_3 \rightsquigarrow R_3 - 4R_1$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & -1 & -2 \\ 0 & -3 & -2 & -4 \end{array}\right)$$

$R_3 \longrightarrow R_3 - 3R_2$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{array}\right)$$

$$\left(\begin{array}{cc|c} 0\cdots 0 & & \\ & * & b \\ 0\cdots 0 & & \end{array}\right)$$
$$k$$

(a) Sei k die erste Spalte von A die nicht nur Nullen enthält. Durch Vertauschung von zwei Zeilen kann man erreichen dass oben keine Null steht, d.h. $\alpha_1 \neq 0$

$$\begin{array}{c} \left(\begin{array}{ccc|c} 0 & 0 & \alpha_1 \ \cdots & \\ \vdots & & \alpha_2 & b \\ & & \vdots & \\ 0 & 0 & \alpha_m \ \cdots & \end{array}\right) \\ k \end{array}$$

(b) Nun führe die Operationen

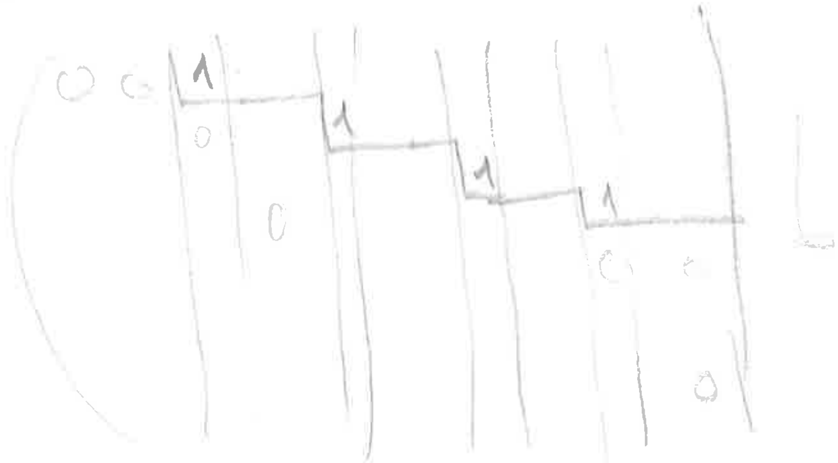
$$R_2 \rightsquigarrow R_2 - \frac{\alpha_2}{\alpha_1} R_1, \dots, R_m \rightsquigarrow R_m - \frac{\alpha_m}{\alpha_1} R_1$$

aus. Ergebnis ist dann

$$\left(\begin{array}{cccc|c|c} 0 & 0 \cdots & 0 & \alpha_1 & \cdots & \\ \vdots & & 0 & 0 & & b \\ & & \vdots & \vdots & \times & \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & & \end{array}\right)$$

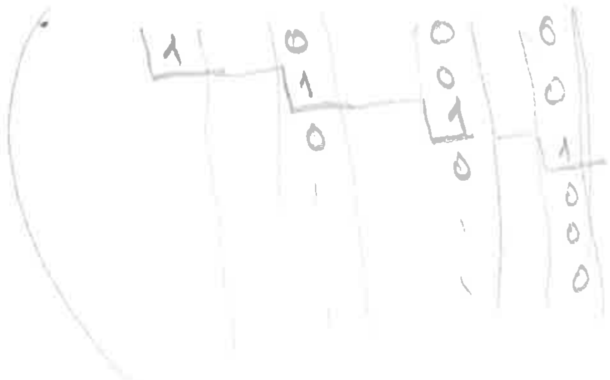
Nun lasse Zeile 1 im folgenden vollkommen gleich und führe (a), (b) für die Rest Matrix durch.

Schritt 2: Durch Operationen $R_i \to \alpha R_i$, $\alpha \neq 0$ kann man erreichen, dass in der Zeilenstufenform die ersten nicht-Null Einträge $= 1$ sind



Schritt 3: Man kann erreichen dass in den Spalten mit diesen Einträgen 1 alle anderen Einträge $= 0$ sind

(d.h.



Beispiel:

$$\left(\begin{array}{ccccc|c} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{array}\right)$$

ist in Zeilenstufenform mit 1.

Nun führe aus

$R_1 \rightsquigarrow R_1 - 3R_2$

$$\left(\begin{array}{ccccc|c} 1 & 2 & 0 & -2 & -4 & -5 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{array}\right)$$

o.k. o.k.

$R_1 + 4R_3, \quad R_2 - 3R_3$

$$\left(\begin{array}{ccccc|c} 1 & 2 & 0 & -2 & 0 & 7 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 0 & -7 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{array}\right)$$

Dann hat man die Vektoren

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, * \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Nun kann man die Lösungen dieses Gleichungssystems einfach diskutieren.

Wir nehmen zunächst der Einfachheit halber an, dass diese Einheitsvektoren am Anfang stehen

$$
m\left\{\begin{array}{l} k\left\{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & & \bigg| & \bar{b}_1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & & \bigg| & \vdots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & & \bigg| & \\ 0 & 0 & 0 & 1 & & \bigg| & \bar{b}_k \\ & & & & 0 \quad 0 & \bigg| & \bar{b}_{k+1} \\ & & 0 & & & \bigg| & \bar{b}_m \end{pmatrix}\right. \end{array}\right.
$$

Fall i: $m = k$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & & 0 & \bar{b}_1 \\ & \ddots & & \vdots \\ 0 & & 1 & \bar{b}_m \end{array}\right)$$

Lösung ist $x_1 = \bar{b}_1, \dots, x_m = \bar{b}_m$ eine Lösung

Fall ii) $m > k$: und

~~Falls~~ eines der Zahlen $\bar{b}_{k+1}, \dots, \bar{b}_m \neq 0$ ist,

dann hat das System keine Lösung,

Fall iii $m > k$ und $\bar{b}_{k+1}, \dots, \bar{b}_m = 0$

$$\left(\begin{array}{ccc|ccc|c} 1 & & 0 & \bar{a}_{1\,k+1} & \cdots & \bar{a}_{1m} & \bar{b}_1 \\ & \ddots & & & & & \vdots \\ 0 & & 1 & \bar{a}_{k\,k+1} & \cdots & \bar{a}_{km} & \bar{b}_m \end{array}\right)$$

Wähle nun $x_{k+1}, \dots, x_m$ beliebig

Es muss dann die Gleichung für $i = 1, \dots, m$

$$x_i + \bar{a}_{i\,k+1} x_{k+1} + \dots \bar{a}_{im} x_m = \bar{b}_i$$

hieraus kann ich x_i ausrechnen

$$x_i = \bar{b}_i - \sum_{j=k+1}^{m} \bar{a}_{ij} x_j$$

Parameterdarstellung der Lösung

$x_{k+1}, \dots, x_m$ sind freie Parameter.

Für den Fall dass diese Spalten nicht hintereinander auftreten

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

numerieren wir die Koordinaten um.

Beispiele: (1) Eine Gleichung in 2 Unbekannten

$$2x - 4y = 3 \qquad \left(\begin{array}{cc|c} 2 & -4 & 3 \end{array}\right)$$

Ist in Zeilen.

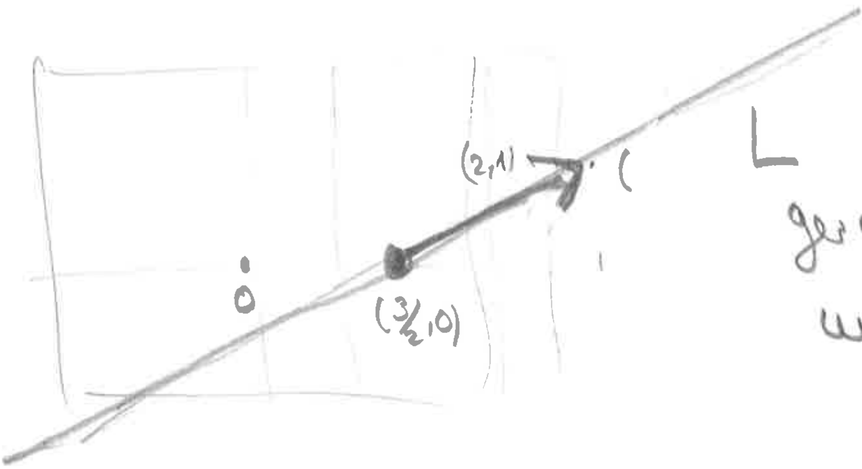
$$\tfrac{1}{2}R_1 \quad x - 2y = 3/2 \qquad \left(\begin{array}{cc|c} 1 & -2 & 3/2 \end{array}\right)$$

Wähle y freien Parameter

$$x = 2y + 3/2$$

$$\Rightarrow L = \left\{ \left(2y + \tfrac{3}{2}, y\right) \mid y \in \mathbb{R} \right\}$$

$$= \left\{ \left(\tfrac{3}{2}, 0\right) + y\,(2,1) \mid y \in \mathbb{R} \right.$$



gerade durch $(\frac{3}{2}, 0)$ mit Richtung $(2,1)$

(2) Zwei Gleichungen mit 3 Unbekannten LCO

$$\begin{cases} x + y + z = 4 \\ x - y - 2z = 0 \end{cases} \qquad \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 4 \\ 1 & -1 & -2 & 0 \end{array}\right)$$

$R_2 - R_1$
$$\begin{cases} x + y + z = 4 \\ \quad -2y - 3z = -4 \end{cases} \qquad \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 4 \\ 0 & -2 & -3 & -4 \end{array}\right)$$

$-\frac{1}{2} R_2$
$$\begin{cases} x + y + z = 4 \\ \quad y + \frac{3}{2} z = 2 \end{cases} \qquad \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 4 \\ 0 & 1 & \frac{3}{2} & 2 \end{array}\right)$$

$R_1 - R_2$
$$\begin{cases} x \quad - \frac{1}{2} z = 2 \\ \quad y + \frac{3}{2} z = 2 \end{cases} \qquad \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & -\frac{1}{2} & 2 \\ 0 & 1 & \frac{3}{2} & 2 \end{array}\right)$$

nun wähle z als "freien Parameter"

$$y = 2 - \frac{3}{2} z$$
$$x = 2 + \frac{1}{2} z$$

$$L = \left\{ \left(2 + \frac{1}{2} z,\ 2 - \frac{3}{2} z,\ z\right) \;\middle|\; z \in \mathbb{R} \right\}$$
$$= \left\{ (2, 2, 0) + z\left(\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, 1\right) \;\middle|\; z \in \mathbb{R} \right\}$$

d.h. Gerade durch den Punkt $(2,2,0)$ mit Richtung $\left(\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}, 1\right)$