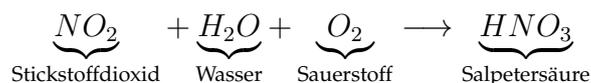




Name: _____

Thema: Der Gauß-Algorithmus

Die Herstellung von Salpetersäure geschieht nach folgender chemischer Reaktionsgleichung:



Wir wollen nun mit dem Gauß-Algorithmus das richtige Mischungsverhältnis bestimmen. Dazu berechnen wir die Koeffizienten x_1, x_2, x_3, x_4 der folgenden Gleichung:

$$x_1 \cdot NO_2 + x_2 \cdot H_2O + x_3 \cdot O_2 = x_4 \cdot HNO_3$$

Vor und nach der Reaktion müssen gleich viele Atome desselben Elements vorhanden sein, da die Gesamtmasse unverändert bleibt. Betrachten wir dazu die beteiligten Elemente:

$$\begin{array}{l|l} \text{N (Stickstoff):} & 1x_1 = 1x_4 \\ \text{O (Sauerstoff):} & 2x_1 + 1x_2 + 2x_3 = 3x_4 \\ \text{H (Wasserstoff):} & 2x_2 = 1x_4 \end{array}$$

Bringen wir das Gleichungssystem auf Normalform erhalten wir:

$$\left| \begin{array}{cccc|c} 1x_1 & & & -1x_4 & = 0 \\ 2x_1 & +1x_2 & +2x_3 & -3x_4 & = 0 \\ & +2x_2 & & -1x_4 & = 0 \end{array} \right|$$

Nun ziehen wir das Doppelte der ersten Gleichung von der zweiten Gleichung ab ($II - 2 \cdot I$) und erhalten:

$$\left| \begin{array}{cccc|c} 1x_1 & & & -1x_4 & = 0 \\ & +1x_2 & +2x_3 & -1x_4 & = 0 \\ & +2x_2 & & -1x_4 & = 0 \end{array} \right|$$

Jetzt ziehen wir das Doppelte der zweiten Gleichung von der dritten Gleichung ab ($III - 2 \cdot II$) und erhalten die gewünschte Dreiecksform:

$$\left| \begin{array}{cccc|c} 1x_1 & & & -1x_4 & = 0 \\ & +1x_2 & +2x_3 & -1x_4 & = 0 \\ & & -4x_3 & +1x_4 & = 0 \end{array} \right|$$

Spätestens hier sehen wir, dass das Gleichungssystem *unterbestimmt* ist. Wir haben vier Unbekannte, aber nur drei Gleichungen!

Da während der Rechnung kein Widerspruch aufgetaucht ist, gibt es unendlich viele Lösungen. Wir können also eine Unbekannte frei wählen und in Abhängigkeit von dieser die anderen drei Unbekannten berechnen. Dazu wählen wir beispielsweise $x_4 = c$ (c sei irgendeine reelle Zahl). Setzen wir in die dritte Gleichung ein, erhalten wir: $-4x_3 + c = 0$ und damit für $x_3 = \frac{1}{4}c$.

Einsetzen in die zweite Gleichung ergibt: $1x_2 + 2 \cdot \frac{1}{4}c - c = 0$. Auflösen nach x_2 ergibt: $x_2 = \frac{1}{2}c$.

Für x_1 aus der ersten Gleichung folgt: $x_1 = c \Rightarrow \mathbb{L} = \left\{ \left(c; \frac{1}{2}c; \frac{1}{4}c; c \right) \right\}$

Für die Chemiker ist jedoch nur die kleinste, positive und ganzzahlige Lösung interessant. Diese erhält man für $c = 4$ und damit $\mathbb{L} = \{(4; 2; 1; 4)\}$.

