POLYGON
VII. kötet2. szám1997.

Lineáris algebra, sztochiometria és kombinatorika

SZALKAI ISTVÁN

0. Bevezetés. A szokásos egyetemi és középiskolai oktatásban a lineáris algebrát a matematika több ágában (analízisben, funkcionálanalízisben, az analitikus és a differenciálgeometriában) is használjuk, de szinte lényegében csak lineáris egyenletrendszerek, elemi bázistranszformációk vagy lineáris programozási feladatok megoldására, újabban számítógépes grafikák készítésére. (A mátrixok invertálása is lényegében lineáris egyenletrendszerek szimultán megoldása, stb.)

Jelen dolgozatunkban két nem standard alkalmazást mutatunk be a kémia (sztochiometria), illetve a számelmélet elemi fogalmai segítségével. Gondolataink középiskolai ismeretek alapján is követhetők, így a cikk középiskolai szakkörön, egyetemi fakultatív előadáson is feldolgozható. Segítségével talán jobban megérthetjük mind a kémiát, mind a lineáris algebrát, mind a számelméletet.

Az első alkalmazás adott vegyületek közötti minimális reakciókat és reakciómechanizmusokat keres, és ennek kapcsán egy kombinatorikai probléma is felmerül: *Hány szimplex van* (*lehet*) *vektorok adott rendszerében?* A szimplexek generálására egy gyors számítási eljárást is javaslunk. Ezután azt is röviden érintjük, hogy mindezeket hogyan lehet például plazmareakciók modellezéséhez felhasználni.

A lineáris algebra további kémiai alkalmazásait találhatjuk még Goldstein és Levy [GL] cikkében.

Dolgozatunk végén, az 5. fejezetben egy más természetű (számelméleti) problémát ismertetünk: valós számok adott véges halmazában keresünk olyan lehető legnagyobb részhalmazt, melynek elemeiből képezhető részösszegek mindegyike racionális.

Mivel az Olvasók zöme valószínűleg nem járatos a lineáris algebrában, ezért a 4. fejezetben egy nagyon rövid bevezető keretében ismertetjük a lineáris algebra főbb, általunk felhasznált fogalmait. Így az Olvasónak javasoljuk, hogy lapozzon a 4. fejezethez, ha nehézsége támadna e téren, vagy akár most azonnal!

1. A sztochiometriai probléma. Tegyük fel, hogy néhány adott elem vagy vegyület (pl. C, O_2, CO_2, H_2O, SO_2, ...) között szertnénk az összes *minimális reakcióegyenletet* felírni. (Bár a kémiában élesen megkülönböztetik az *elemeket* és a *vegyületeket*, de mivel a további vizsgálatok szempontjából ez nem lényeges megkülönböztetés, ezért a továbbiakban mindig csak vegyületet mondunk.)

Egy kémiai reakció (ha minden vegyületet az egyenlet egyik oldalára rendezünk) matematikai fogalmakkal nem más, mint a vegyületek egy olyan lineáris kombinációja, mely az 0 vektort (elem nélküli vegyület) adja eredményül. Így számunkra most egy kémiai reakció nem más, mint egy olyan egyenlőség, melynek mindkét oldalán minden előforduló elemből ugyanannyi darab van. Azonban a reakciókat most csak matematikai szempontból tekintjük, fizikai- kémiai tulajdonságukat, a reakció kémiai realitását nem vesszük figyelembe. Vagyis módszerünk például megengedi a

$$2\mathrm{Au} + 6\mathrm{HCl} = 2\mathrm{AuCl_3} + 3\mathrm{H_2}$$

reakciót, ami a valóságban normál körülmények között nem játszódik le.

Egy kémiai reakcióegyenletet *minimálisnak* nevezünk, ha bármelyik benne szereplő vegyületet elhagyva reakció már nem jöhet létre a többi vegyület között. Például a

$$\mathrm{C} + 2\mathrm{CO} + 2\mathrm{O_2} = 2\mathrm{CO_2}$$

reakció nem minimális, hiszen a CO vegyületet elhagyva még felírhatjuk a

$$\mathrm{C} + \mathrm{O_2} = \mathrm{CO_2}$$

reakciót, ami azonban már minimális.

A probléma a lineáris algebra fogalmaival könnyen megfogalmazható. Tegyük fel, hogy az $\mathrm{A}_1, \ldots, \mathrm{A}_m$ vegyületek az $\mathrm{E}_1, \ldots, \mathrm{E}_m$ elemekből állnak, azaz

$$\mathrm{A}_j = \sum_{i=1}^{n} a_{i,j} \cdot \mathrm{E}_i,$$

ahol $a_{i,j} \in \mathbb{N}$ természetes számok minden $i = 1, 2, \ldots, n$, $j = 1, 2, \ldots, m$ index esetén (most a 0 is természetes szám). Vagyis az A_j vegyületet azonosíthatjuk az

$$\mathrm{A}_j = [a_{1,j}, a_{2,j}, \ldots, a_{n,j}]^T \in \mathbb{R}^n$$

n-dimenziós vektorral. (Pontosabban: $\mathrm{A}_j \in \mathbb{N}^n$, hiszen komponensei egész számok, de mivel $\mathbb{N}^n$ nem vektortér, ezért írunk mindenütt $\mathbb{R}^n$-et.)

Kémiai reakció pontosan akkor *létezik* (*létezhet*) a vegyületek általunk kijelölt $\{\mathrm{A}_j : j \in S\}$ részhalmaza között, ahol persze $S \subseteq \{1, 2, \ldots, m\}$ tetszőleges részhalmaz, ha a

$$(*) \qquad \sum_{j \in S} x_j \cdot \mathrm{A}_j = 0$$

homogén lineáris egyenletrendszernek van nemtriviális megoldása az $x_j \in \mathbb{R}$ ($j \in S$) ismeretlenekre. Nyilvánvalóan egy ilyen megoldásrendszer egyértelműen meghatároz egy *lehetséges* reakcióegyenletet a szóban forgó vegyületek között: az x_j, $j \in S$ megoldások nyilvánvalóan racionális számok, vagyis a közös nevezővel bővítve az is feltehető, hogy egész számok, majd a pozitív és negatív megoldásokat szétválasztva kapjuk a reakcióegyenlet két oldalát.

Vagyis az $\{\mathrm{A}_j : j \in S\}$ vektorhalmaz lineárisan *összefüggő*.

A fenti reakció pedig akkor *minimális*, ha egyetlen vegyületet sem hagyhatunk el úgy, hogy a megmaradottak között reakció jöhetne létre, azaz *bármilyen* $T \in S$, $T \neq S$ esetén az $\{\mathrm{A}_j : j \in T\}$ vektorhalmaz elemei *lineárisan függetlenek*.

A fenti észrevételek alapján született az alábbi definíció:

Definíció. (pl. [P2]) Vektorok egy $B = \{\mathrm{b}_j : j \in S\} \subset \mathbb{R}^n$ halmazát *algebrai szimplexnek* nevezzük, ha B elemei lineárisan összefüggőek, de bármely $T \subset S$, $T \neq S$ indexhalmaz esetén a $\{\mathrm{b}_j : j \in T\}$ vektorok lineárisan függetlenek.

A fenti fogalom nem teljesen fedi a szokásos (geometriai) szimplex fogalmát, bár rokon vele. Az n-dimenziós (teljes dimenziós) *geometriai szimplex*, mint a háromszög és a tetraéder (akárhány dimenziós) általánosítása, $\mathbb{R}^n$-ben $n+1$ olyan pont burka, amely n-dimenziós (azaz nem kisebb dimenziójú), és közülük bármely n pont $n-1$ dimenziós (geometriai) szimplexet határoz meg. Azonban könnyen belátható, hogy $\mathbb{R}^n$-ben e két definíció ekvivalens. A továbbiakban mi egyszerűen csak „szimplex"-et írunk, és az algebrai szimplexek fogalmát használjuk.

Nyilvánvalóan minden B szimplex egyértelműen meghatároz egy (és csakis egy) minimális reakciót B elemei között (hiszen a $(*)$ egyenletrendszert megoldjuk, majd a negatív együtthatójú tagokat az egyenlet jobb oldalára csoportosítjuk).

Például tekintsük a következő vegyületeket: $\mathrm{A}_1 = \mathrm{C}$, $\mathrm{A}_2 = O$, $\mathrm{A}_3 = \mathrm{CO}$ és $\mathrm{A}_4 = \mathrm{CO}_2$, azaz két elemről van szó: $\mathrm{E}_1 = \mathrm{C}$ és $\mathrm{E}_2 = \mathrm{O}$. Vagyis $m = 4$ és $n = 2$. A megfelelő $\mathrm{A}_1 - \mathrm{A}_4$ vektorok az alábbi táblázat oszlopaiban láthatók:

	A_1	A_2	A_3	A_4
C	1	0	1	1
O	0	1	1	2
	C	O	CO	CO_2

Az $\{\mathrm{A}_1, \mathrm{A}_2, \mathrm{A}_3, \mathrm{A}_4\}$ vektorok közül négy szimplex választható ki (csak a vektorok indexeit írjuk ki): $S_1 = \{1,2,3\}$, $S_2 = \{1,2,4\}$, $S_3 = \{2,3,4\}$ és $S_4 = \{1,3,4\}$. A nekik megfelelő $(*)$ egyenletrendszert megoldva a következő minimális reakciókat nyerjük (és nincs is más):

$$\mathrm{C} + \mathrm{O} = \mathrm{CO}, \qquad \mathrm{C} + 2\mathrm{O} = \mathrm{CO}_2, \qquad \mathrm{O} + \mathrm{CO} = \mathrm{CO}_2, \qquad \mathrm{C} + \mathrm{CO}_2 = 2\mathrm{CO}.$$

Sőt, még egy lépéssel tovább is léphetünk. Minimális *reakció-mechanizmusokat* is felépíthetünk a fent kapott minimális reakciókból, vagy akár bármilyen reakciók tetszőleges adott rendszeréből, éppen az előző részben ismertetett módon!

(Ne feledjük, hogy a kémiai folyamatok valójában reakciók sorozatából állnak, ezek az ún. *reakció-mechanizmusok.*)

Röviden: Minden O-ra ($\in \mathbb{R}^n$) redukált reakcióegyenlet egy $\mathbb{R}^n$-beli vektornak tekinthető, és ha ezen vektorok lineáris kombinációjával sikerül az $\mathbb{R}^m$-beli 0-t előállítanunk, akkor egy reakció-mechanizmust találtunk. Ezen mechanizmusok pontosan akkor minimálisak, ha a kiválasztott $\mathbb{R}^m$-beli vektorok szimplexet alkotnak. Vegyész körökben ezt a *„hierarchia első három lépcsője"*-ként is szokták emlegetni: vegyületek, reakciók és mechanizmusok.

Ha pedig adott vegyületek között a létrejöhető minimális reakciók *számát* kérdezzük, akkor egy lineáris algebrai — kombinatorikai *probléma* merül fel:

Probléma. *Ha adott vektorok egy* $\{A_j : j \leq m\} \subseteq \mathbb{N}^n$ *halmaza (a vektorok komponensei természetes számok), akkor hány szimplex található (min., illetve max.) az adott halmaz részhalmazai között?*

A „hány" kérdésre a (majdnem) pontos választ [LSZ1] és [DLSZ]-ben találhatjuk, az erdményeket és egy érdekes bizonyítást jelen cikk 3. fejezetében ismertetjük. [P1]-ben a (*) homogén lienáris egyenletrendszerek néhány más, a témához is kapcsolódó tulajdonságát tárgyalja a szerző.

Az elméleti vizsgálat előtt a következő fejezetben egy aránylag gyors algoritmust ajánlunk, amely tetszőleges $H = \{A_j : j \leq m\} \subseteq \mathbb{N}^n$ vektorhalmazban megtalálja az összes szimplexet. Gondoljuk csak meg: H összes részhalmazát nem érdemes „végigmustrálgatnunk", hiszen az 2^m számú részhalmazt jelentene, és az exponenciálisan sok időt kívánó algoritmusok már kis adathalmaz esetén is rettentő lassúak! H szimplexeinek a méretei is nagyon különbözőek lehetnek (ld. a cikk végén bemutatott output listát).

A témakör most bemutatott lineáris algebrai megközelítése [PO] és [P2]-ben is megtalálható, [HOS]-ban kissé más módon világítja meg a problémát. Mint [P2]-ben Pethő Árpád megmutatta, a jelen lineáris algebrai modellt fizikai dimenziómentes mennyiségek előállítására is fel lehet használni. (Itt kémiai reakciók helyett $s = v \cdot t$, azaz km $= \frac{\text{km}}{\text{h}}$ h típusú egyenletekről van szó.)

2. Az algoritmikus megoldás. Mint az előző részben is említettük, a program egyetlen érzékeny pontja: milyen módon választjuk ki az adott $H \subset \mathbb{R}^n$ vektorhalmaz $R \subseteq H$ részhalmazait, amelyek esetleg szimplexek lehetnek? (R és részhalmazainak lineáris összefüggőségét, ill. függetlenségét pl. a jól ismert elemi bázistranszformációval könnyen ellenőrizhetjük, melynek leírását pl. [H,2.5] vagy [S,2,3,4]-ben megtalálhatjuk.)

Sajnos minden $R \subseteq H$ szimplex-jelölt k-elemű részhalmaz *minden* $k-1$ elemű részhalmazát tesztelnünk kell ahhoz, hogy biztosan állíthassuk: R valóban szimplex. (Esetleg e tesztelt részhalmazokról a teszteredményeket nyilvántarthatnánk, ekkor az ismételt teszteléseket elkerülhetnénk, és valamivel gyorsabb programfutást kapnánk.)

Algoritmusunk tehát induláskor kap egy $H \subseteq \mathbb{R}^n$ véges vektorhalmazt. Bizonyos sorrendben megvizsgálja néhány $R \subseteq H$ részhalmazát: szimplex-e , vagy éppen miért nem az. Kizáró ok, ha R lineárisan független, vagy valamely részhalmaza összefüggő. A további feldolgozás érdekében (azaz H mely következő részhalmazát vizsgáljuk legközelebb) R végére egy információs karaktert fűzünk: 'i' vagy 'd'. Ha esetleg R szimplex volt, vagy még nem teszteltük R-et, akkor pedig a 's', ill. ' ' jeleket írjuk a végére. (Részletesebben ld. alább a 2. ötlet után.)

Az alapötlet: Ha a tesztelt $R \subseteq H$ vektorhalmaz elemei lineárisan függetlenek, akkor csak bővítenünk lehet, míg lineárisan összefüggő részhalmazt tartalmazó halmazból nyilvánvalóan elemeket kell elhagynunk, hogy esetleg szimplexet kapjunk. Pontosabban: vagyük H egy éppen tesztelt szimplex-jelölt részhalmazát. A teszt eredményétől függően módosítanunk kell (szűkíteni, bővíteni, mondjuk „utolsó" vektorát kicserélni másra) úgy, hogy lehetőleg kevés, de az összes lehetséges részhalmazt megvizsgáljuk, és az összes szimplexet ismétlődés nélkül felsoroljuk.

2. ötlet: H elemeit az $\mathtt{a}, \mathtt{b}, \ldots, \mathtt{1}, \mathtt{2}, \ldots, \mathtt{0}, \ldots,$■ ASCII larakterekkel indexeljük, így H egy R részhalmazát, melyet éppen tesztelünk vagy módosítunk, egy stringben (karakterfüzérben) tároljuk: a string elemei megadják H azon elemeinek ASCII kódját, melyek éppen a kérdéses R részhalmazt alkotják. (*Programunkban* mi ezt az S stringet *szimplex*[ ]-nek neveztük.)

A tesztelés végeredményét egészen egyszerűen az S string végére írjuk, egy plusz információ-karakter formájában, mely az alábbiak egyike lehet:

' ' (=space) — még nem teszteltük a részhalmazt,
i — az egész R részhalmaz lineárisan független (independent),
d — R valamely *részhalmaza* lineárisan összefüggő (dependent),
s — R szimplex.

A módosítást az ún. „back-and-forth" (hátra és előre) módszerhez hasonlóan végezzük. Az ASCII karakterek helyett most egyszerűbb, ha az $1, 2, \ldots, m$ számokkal jelöljük V elemeit, vagyis

$$S \subset \{1, 2, \ldots, m, '\ ', 'i', 'd', 's'\}$$

string (matematikai nyelven sorozat). Az alábbi pszeudokódban leírjuk a módosító szubrutint, mely S utolsó, információs karaktere alapján módosítja S-et (azaz R-et). A rutinban $\mathtt{c}$ tetszőleges karaktert jelöl, $\mathtt{k}, \mathtt{t} < \mathtt{m}$ és $T \subseteq \{1, 2, \ldots, t-1\}$ tetszőleges részhalmaz.

```
S := {1}
do while .not. end
begin
  if S = {k, k+1, ..., m; c} and c ≠ d then end;
  if S = {k, k+1, ..., m; 'd'} then S := {k, k+1, ..., m-2, m; ' '} ;
  if S = {T, t, m; c} and t < m then S := {T, t+1; ' '} ;
  if S = {T, t; 'i'} and t < m then S := {T, t, t+1; ' '} ;
  if S = {T, t; 'd'} and t < m then S := {T, t+1; ' '} ;
  if S = {T, t; 's'} and t < m then S := {T, t+1; ' '} ;
  if S = {T; ' '} then teszteljük T-t, és a teszt eredményét írjuk
     S végére;
end;
```

A fenti rutint tartalmazó programot Turbo Pascalban írtuk meg. Pl. a CO, CO_2, O_2, H_2, CH_2O, CH_3OH, C_2H_5OH, $(CH_3)_2CO$, CH_4, CH_3CHO és H_2O vegyületek között nem kevesebb, mint 213 minimális reakció lehetséges.

Hogy mire jó mindez? Például plazmareakciók tanulmányozásához: vegyületek egy adott zárt rendszerében, erőszakos behatás (pl. ívfény) esetén milyen vegyületek milyen valószínűséggel (gyakorisággal) jöhetnek létre, reakciók alapján? De pH-diagramok szerkesztéséhez, mint pl. [KMS]-ben, vagy a kémiai reakciórendszerek általános elmletében, mint pl. [HOS]-ben is felhasználhatók a cikkünkben leírt szimplex-generátor program output listái.

3. A szimplexek száma. Most számoljuk meg, hogy adott $H \subset \mathbb{R}^n$ (véges) vektorhalmazban mennyi szimplex is lehet legfeljebb és legalább. [LSZ1]-ben erre pontos választ találunk, ha H-ban párhuzamos vektorokat is megemgedünk (ami a gyakorlatban izomer és többszörös molekulák tanulmányozása esetén fontos). Ha pedig H-ban nem engedünk meg párhuzamos vektorokat, akkor csak $\mathbb{R}^3$-ban ismerjük a minimális konfigurációt, nagyobb dimenziókban csak sejtésünk van, a részletek [LSZ2]-ben találhatók meg.

Az egyszerűség kedvéért jelölje $\mathrm{simp}(H)$ a H-ban levő szimplexek számát, továbbá a párhuzamos vektorokat nevezzük most *ekvivalensnek*. [LSZ1] és [LSZ2]-ben a következő erdményeket bizonyítottuk be:

1. Tétel. *Adott méretű $H \subset \mathbb{R}^n$ vektorhalmazok közül, melyek kifeszítik $\mathbb{R}^n$-et, $\mathrm{simp}(H)$ pontosan akkor maximális, ha H bármely n vektora lineárisan független.*

2. Tétel. *Adott méretű $H \subset \mathbb{R}^n$ vektorhalmazok közül, melyek kifeszítik $\mathbb{R}^n$-et, $\mathrm{simp}(H)$ pontosan akkor minimális, ha H pontosan n lineárisan független ekvivalencia osztályból áll, melyek kifeszítik $\mathbb{R}^n$-et, és melyek méretei között az eltérés legfeljebb 1 lehet.*

Következmény. *Ha $H \subset \mathbb{R}^n$, H kifeszíti $\mathbb{R}^n$-et, $|H| = m$ és $m = a \cdot n + b$, ahol $0 \le b < n$, akkor*

$$b \cdot \binom{a+1}{2} + (n-b) \cdot \binom{a}{2} \le \mathrm{simp}(H) \le \binom{m}{n+1} \quad .$$

Speciálisan, ha m osztható n-nel, akkor

$$n \cdot \binom{\frac{m}{n}}{2} \le \mathrm{simp}(H) \le \binom{m}{n+1} \quad .$$

3. Tétel. *Amennyiben $H \subset \mathbb{R}^3$ nem tartalmaz párhuzamos vektorokat, $|H| = m \neq 3, 4, 7$, H kifeszíti $\mathbb{R}^3$-at, akkor $\mathrm{simp}(H)$ pontosan akkor minimális, ha H vektorai két metsző síkon helyezkednek el: $\{u_1, u_2, u_3\} \subset H$ lineárisan független vektorok, $u_4 \in H$ az $\{u_1, u_2\}$ vektorok által kifeszített síkon van, míg H többi vektora az $\{u_1, u_2\}$ síkra esik.*

Megjegyzések. 1) Mind a képletekből, mind az alábbi bizonyításból is kiolvasható, hogy a felső becslésből elhagyható az a feltétel, hogy H kifeszíti $\mathbb{R}^n$-et. Ha ugyanis H csak egy $N \leq n$ dimenziós alterét feszíti ki $\mathbb{R}^n$-nek, akkor az alábbi bizonyítás a

$$\mathrm{simp}(H) \leq \binom{m}{N+1}$$

felső becslést adja, ami $N+1 = [m/2]$ esetén maximális, vagyis $\binom{m}{N+1}$ nyilvánvalóan kisebb $\binom{m}{n+1}$-nél (ha $m \geq 2 \cdot n$), és így a lehető legtöbb szimplex előállításához nyilvánvalóan szükséges, hogy a vektorok kifeszítsék az egész $\mathbb{R}^n$ teret.

2) Tételeink nem csak a szimplexek maximális, illetve minimáis számát adják meg, hanem azt is kimondják, hogy a szélsőséges konfigurációk *egyértelműek*: csakis a leírt esetekben lehet $\mathrm{simp}(H)$ minimális, illetve maximális. Az 1. Tételből azt is látjuk, hogy a maximum esetekben nem kell bajlódnunk H párhuzamos vektoraival, csak a minimum esetben.) A 3. Tétel $|H| = 4, 7$ kivételes eseteiben két, ill. három különböző minimális konfiguráció van, ld. [LSZ2]-ben.)

3) Tetszőleges m és n esetén könnyen megadható $\mathbb{R}^n$-ben m darab olyan vektor, mely közül bármely n lineárisan független (azaz bármely $n+1$ szimplexet alkot): Legyen $i = 1, 2, \ldots, m$ esetén $\mathbf{x}_i := [1, a_i, a_i^2, \ldots, a_i^{n-1}]$, ahol $a_1, a_2, \ldots, a_m \in \mathbb{R}$ tetszőleges különböző valós számok. (Lineáris függetlenségük ún. Vandermonde- determinánsokkal látható be a legkönnyebben.)

Most ismertetjük az 1. Tétel bizonyítását. A 2. Tétel bizonyítása kissé hosszabb, [LSZ1]-ben megtalálható.

Az 1. Tétel bizonyítása. Tegyük fel tehát, hogy $H \subset \mathbb{R}^n$ kifeszíti $\mathbb{R}^n$-et, és legyen $R = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\} \subseteq H$ tetszőleges részhalmaz, amely generálja $\mathbb{R}^n$-et (azaz R bázis $\mathbb{R}^n$-ben H elemeiből.)

Tegyük fel, hogy van H-ban $n+1$-nél kevesebb elemből álló szimplex, azaz van olyan $u \in H \setminus R$ vektor, melyet H- nak valamely, legfeljebb $n-1$-méretű lineárisan független részhalmaza előállít. Válasszunk ekkor olyan $u' \in \mathbb{R}^n$ vektort, $u' \notin H$, mely H egyetlen $n-1$-elemű részhalmazának generátumába sem esik. Megmutatjuk ekkor, hogy a

$$H' := (H \setminus \{u\}) \cup \{u\}$$

halmazra

$$\mathrm{simp}(H') > \mathrm{simp}(H)$$

(és persze $|H'| = |H|$).

E célból H minden szimplexéhez injektív módon megfeleltetjük H' egy S' szimplexét. Legyen tehát $S = \{u_1, u_2, \ldots, u_k\} \subseteq H$ egy tetszőleges szimplex.

Ha $u \notin S$, akkor S H'-ben is szimplex, vagyis legyen $S' := S$.

Ha pedig $u \in S$, mondjuk, $u = u_i$, akkor $S \setminus \{u_i\}$ lineárisan független, és így találhatunk R-nek olyan $n-k+1$-elemű R részhalmazát, amelyre $S \setminus \{u_i\} \cup R^-$

lineárisan független (és kifeszíti $\mathbb{R}^n$-et). Ekkor pedig

$$S' := S \setminus \{u_i\} \cup R^- \cup \{u'\}$$

egy új szimplex H'-ben.

Mivel az $S \to S'$ leképezés injektív, ezért $\mathrm{simp}(H') \geq \mathrm{simp}(H)$. A fenti gondolatmenet szerint $\mathrm{simp}(H)$ maximális lehet például akkor, ha H-ban csak $n+1$-elemű szimplexek találhatók, vagyis ha H bármely n eleme lineárisan független. Az alábbiakban azt mutatjuk meg, hogy egyetlen más konfiguráció sem lehet maximális.

Legyen tehát $S \subseteq H$ tetszőleges l elemű szinplex, $l \leq n$. A fenti konstrukciót egymás után $m-l$-szer alkalmazva (vagyis $H \setminus S$ *minden* u elemét a fenti módon kicseréljük olyan $u' \in \mathbb{R}^n$ vektorra, $u' \notin H$, mely H, és az eddig választott u' vektorok egyetlen $n-1$-elemű részhalmazának generátumába sem esik), elérhetjük, hogy az így kapott $H' \setminus S$ összes eleme „teljesen független" (azaz $H' \setminus S$ bármely n eleme lineárisan független, sőt $H' \setminus S$ bármely u eleme lineárisan független $H' \setminus \{u\}$-tól).

Hány szimplexünk lesz ekkor? $S \subseteq H$ maga, és rajta kívül csak $n+1$-elemű szimplexek, hiszen mindegyik új $u' \in H' \setminus S$ vektor csak $n+1$-elemű szimplexekben lehet, amelyek azonban S-nek legfeljebb $l-1$ elemét tartalmazhatják ($|S| = l$). Vagyis

$$\mathrm{simp}(H) \leq 1 + \sum_{i=0}^{l-1} \binom{l}{i} \binom{m-l}{n+1-i} = 1 + \binom{m}{n+1} - \binom{m-l}{n+1-l},$$

ami $\binom{m}{n+1}$-nél kisebb, $l \leq n \leq m$ miatt.

□

A felső becslés közvetlenül is következik J. Spencer következő tételéből ($k = n+1$ választással): *Ha $|H| = m$, és $A_1, A_2, \ldots, A_t \subseteq H$ olyan Sperner-rendszer (azaz $A_i \not\subseteq A_j$ és $A_j \not\subseteq A_i$ minden $i, j \leq t$ indexre), melyben mindegyik A_i halmaz legfeljebb k-elemű, akkor legfeljebb $\binom{m}{k}$ ilyen A_i részhalmazunk lehet, azaz $t \leq \binom{m}{k}$.*

Azonban az általunk közölt bizonyítás ezen felül még azt is megmutatja, hogy maximális számú *szimplexet* tartalmazó H vektorhalmaz struktúrája csak *egyféle* lehet: bármely $n+1$ eleme lineárisan független!

A fenti bizonyításban $\mathbb{R}^n$ geometriájából mindössze a vektorok *lineáris függetlenségét* használtuk fel, a műveleteket nem. Márpedig lineáris függetlenség más struktúrákban is fellelhető (pl. gráfok körmentes élhalmazainál), és épp ezért hasznos a *matroidok* fogalma. Cikkünk terjedelme nem engedi meg a matroidok bevezetését, de az érdeklődő Olvasó részletesen is megismerkedhet velük (és elektronikai alkalmazásaikkal) Recski András [R] könyvében. Ha a gráfokat standard módon tekintjük matroidoknak, akkor a szimplexek fogalma éppen a gráfköröket jelenti, így fenti eredményeink a gráfok egyszerű köreinek számára is adnak becsléseket, a részletek [DLSZ] cikkünkben találhatók meg.

4. Egy kis algebra. Mivel az olvasók zöme valószínűleg nem járatos a lineáris algebróban, a következő fejezet könnyebb megértéséhez most röviden ismertetjük e fontos, a gyakorlatban is gyakran használt tudományterület alapfogalmait. Bár ezek a fogalmak minden lineáris algebrába bevezető (rengeteg) könyvben és egyetemi jegyzetben megtalálhatók, nem kívánjuk az Olvaóstól, hogy ezt az élvezetes cikket félretegye, és helyette lineáris algebrát kezdjen tanulmányozni ...

4.1. Vektorok. *Vektortérnek* (vagy *lineáris térnek*) nevezünk egy tetszőleges olyan V halmazt, melynek elemei között értelmezhető két mívelet: összeadás $(+)$ és a valós számokkal való szorzás $(\cdot)$, a geometriai (síkbeli és térbeli) vektoroknál megismert tulajdonságokkal. Vagyis: az összeadás kommutatív, asszociatív, létezik egy $0 \in V$ *nullvektor* ($v + 0 = v$, ha $v \in V$), és minden $v \in V$ elemnek létezik $-v$ ellentettje ($-v + v = 0$), valamint a valós számokkal való szorzásra tetszőleges $\lambda, \mu \in \mathbb{R}^n$ és $u, v \in V$ esetén fennállnak a $\lambda \cdot (u + v) = \lambda \cdot u + \lambda \cdot v$, $\lambda \cdot (\mu \cdot v) = (\lambda \cdot \mu) \cdot v$, $(\lambda + \mu) \cdot v = \lambda \cdot v + \mu \cdot v$ és $1 \cdot v = v$ asszociativitási és disztributivitási azonosságok. Egy V vektortér elemeit *vektoroknak* szokás hívni, és a valós számoktól való megkülönböztetésre a $\mathbf{v}$, $\underline{v}$ vagy $\overrightarrow{v}$ jelölések használatosak. A síkbeli és a térbeli geometriai vektorokat a derékszögű (Descartes) koordinátarendszerben azonosítani szoktuk a rendezett számpárok, ill. számhármasok $\mathbb{R}^2$, ill. $\mathbb{R}^3$ halmazával, így nem meglepő, hogy tetszőleges $n \in \mathbb{N}$ természetes szám esetén $\mathbb{R}^n$, a valós számok rendezett n-eseinek halmaza is vektortér a komponensenkénti összeadásra és számmal való szorzásra:

$$u + v = (u_1 + v_, u_2 + v_2, \ldots, u_n + v_n)$$

és

$$\lambda u = (\lambda u_1, \lambda u_2, \ldots, \lambda u_n),$$

ha $u = (u_1, u_2, \ldots, u_n)$ és $v = (v_1, v_2, \ldots, v_n)$, $\lambda \in \mathbb{R}$.

Néhány további fontos vektorteret még megemlítünk:

$\mathbb{R}^{n \times m} =$ az $n \times m$ méretű mátrixok halmaza,
$\mathbb{R}[x] =$ a valós együtthatós polinomok halmaza,
$\mathbb{R}^n[x] =$ a legfeljebb n-edfokú poinomok halmaza,
$\mathbb{R}^{\mathbb{N}} =$ a (tetszőleges) valós számsorozatok halmaza,
$l_\infty =$ a korlátos valós számsorozatok halmaza,
$c =$ a konvergens számsorozatok halmaza,
$c_0 =$ a 0-hoz tartó számsorozatok halmaza,
$C(I) =$ a rögzített I intervallumon értelmezett, folytonos függvények halmaza,
$D(I) =$ a rögzített I intervallumon értelmezett, differenciálható függvények halmaza,
$S(I) =$ a rögzített I intervallumon értelmezett, integrálható függvények halmaza,

a szokásos összeadással és $\lambda \in \mathbb{R}$ való szorzással.

Néha szükség van olyan vektorhalmazokra, amelyekben a vektorokat nem valós, hanem más számtestből vett számokkal kell szoroznunk. Ilyenkor egy Γ *számtest feletti vektortér*-ről beszélünk. Γ lehet például $\mathbb{Q}$, $\mathbb{R}$, $\mathbb{C}$, $GF(q)$[1] vagy akár a kvaterniók teste is. Gondoljunk például a racionális együtthatójú polinomok $\mathbb{Q}$ feletti vektorterére, de pl. a következő fejezetben szükségünk lesz a valós számok racionális számmal való szorzataira, azaz $\mathbb{R}$, mint $\mathbb{Q}$ feletti vektortérre.

A továbbiakban rögzítsünk egy tetszőleges V vektorteret egy Γ számtest felett.

4.2. Bázisok, koordináták. A vektortér műveleteinek segítségével, tetszőleges adott $v_1, v_2, \ldots, v_t$ vektorokból *előállítható* vektorok $\lambda_1 \cdot v_1 + \lambda_2 \cdot v_2 + \cdots + \lambda_t \cdot v_t$ alakúak, az ilyen összegeket az adott vektorok *lineáris kombinációinak* nevezzük. A vektortér $G = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$ vektorhalmazát *generátorrendszernek* hívjuk, ha a vektortér minden vektora előállítható G elemeinek lineáris kombinációjaként. Fontos az előállítás egyértelműsége is: G-t a vektortér *bázisának* nevezzük, ha a tér minden v vektora *egyféleképpen* állítható elő G elemeinek lineáris kombinációjaként. Ez utóbbi tulajdonságot az alábbi definíciók és állítások írják le pontosan:

4.1. Definíció. A $0 \cdot v_1 + 0 \cdot v_2 + \cdots + 0 \cdot v_k$ lineáris kombinációt *triviálisnak* nevezzük.

4.2. Definíció. A $v_1, v_2, \ldots, v_k$ vektorokat *lineárisan függetleneknek* nevezzük, ha a 0 csak triviális lineáris kombinációval állítható elő a $v_1, v_2, \ldots, v_k$ vektorokból. Minden más esetben e vektorokat *összefüggőknek* nevezzük.

4.3. Állítás. *Az alábbi tulajdonságok bármelyike ekvivalens azzal, hogy adott vektorok lineárisan függetlenek:*

a) *az adott vektorok* valamelyike *előáll a többi lineáris kombinációjaként.*

b) *a tér bármely vektora legfeljebb egyféleképpen állítható elő az adott vektorokból.*

4.4. Állítás. *Lineárisan független vektorok között a* 0 *nullvektor nem szerepelhet, és lineárisan független vektorok közül akárhányat elhagyva a maradék vektorok is lineárisan függetlenek maradnak.*

4.5. Definíció. A tér $\{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$ vektorhalmaza *bázis*, ha lineárisan független és generátorrendszer.

Az állítások igazolása mindössze pár soros könnyű számolást kíván.

Halmazelméleti módszerkkel könnyen megmutatható, hogy tetszőleges vektortérben *létezik* bázis (pl. az ún. Hamel-bázis), továbbá a Steiniz-féle kicserélési tétel alapján tetszőleges vektortérben minden bázis ugyanannyi elemű. Ezt a (vektortérre jellemző) számot a V vektortér *dimenziójának* nevezzük, és $\dim(V)$-vel jelöljük. Az alábbi eredmény szintén a Steiniz-féle kicserélési tétel következménye, és jobban megvilágítja a lineárisan független vektorhalmazok, generátorrendszerek és bázisok közötti kapcsolatot, elemszámaik összehasonlításával.

[1] A q-elemű véges test (Galois-field), q megfelelő természetes szám. $q = p$ prímszám esetén a p-vel való osztási maradékok $\{0, 1, \ldots, p-1\}$ halmazát kapjuk a szokásos műveletekkel.

4.6. Állítás. a) *Ha L, G, B rendre egy tetszőleges vektortér lineárisan független vektorhalmaza, generátorrendszere, bázisa, akkor*

$$|L| \leq |B| \leq |G|.$$

b) *A tér minden maximális (tovább már nem bővíthető) lineárisan független vektorhalmaza generátorrendszer is (vagyis bázis), és hasonlóan, a tér minden minimális generátorrendszere lineárisan független is, vagyis bázis.*

Mivel egy rögzített $B = \{b_1, b_2, \ldots, b_n\}$ bázis a tér *minden* u vektorának

$$u = \lambda_1 \cdot b_1 + \lambda_2 \cdot b_2 + \cdots + \lambda_n \cdot b_n$$

előállításában az együtthatók *egyértelműek* (a B-beli báziselemek sorrendjének rögzítése eetén), ezen együtthatókat az u vektor *B bázisra vonatkozó koordinátáinak* nevezzük: $[u]_B = [\lambda_1, \lambda_2 \ldots, \lambda_n]_B$. Megegmlítjük még, hogy tetszőleges $\{v_1, v_2, \ldots, v_k\}$ vektorhalmaz *rangjának* nevezzük a vektorhalmazban található maximális méretű, lineárisan független részhalmaz elemszámát. Természetesen bázisok és lineárisan független vektorhalmazok rangja az elemszámukkal egyenlő.

Lássunk most néhány *példát* bázisokra és koordinátáikra! Pl. $\mathbb{R}^n$-ben az ún. „standard" bázis a pontosan egy db 1-est (máshol 0-t) tartalmazó, n db vektor halmaza:

$$B = \left\{ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \ldots, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \right\}.$$

Ezen B bázisra vonatkozó koordinátákat is nagyon egyszerű kiszámítani: mivel tetszőleges $v = \begin{bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n$ vektorra

$$v = v_1 \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + v_2 \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} + \cdots + v_n \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix},$$

ezért a v vektor koordinátái éppen a vektor *komponensei*. (Itt jegyezzük meg, hogy bár $\mathbb{R}^n$ vektorainak függőleges, $\begin{bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix}$ alakú írásmódja szemléletes és könnyen kezelhető, a modern könyvekben sokszor a helykímélőbb $(v_1, v_2, \ldots, v_n)$ alakot használják.)

Másik példa: a polinomok $\mathbb{R}^n[x]$ terében vehetjük a kézenfekvő, ún. „standard" $\{1, x, x^2, \ldots, x^n\}$ bázist, mely esetben egy tetszőleges $p(x) \in \mathbb{R}^n[x]$

polinomnak a standard bázisra vonatkozó koordinátái éppen a polinom *együtthatói*!

4.3. Alterek. Most a vektrotében levő, kisebb vektortereket vizsgáljuk. Természetesen a műveletek ugyanazok mindkét térben. E kisebb tereket az eredeti tér altereinek nevezzük, vagyis a W vektortér *altere* a V térnek, ha $W \subseteq V$ és a műveletek mindkét térben ugyanazok. Ezt a kapcsolatot a $W \leq V$ jellel fogjuk jelölni.

4.7. Állítás. *Ha W tetszőleges olyan* részhalmaza *V-nek, amely zárt a V-beli műveletekre (azaz tetszőleges W-beli vektorok összege és bármely valós számmal való szorzata is eleme W-nek), akkor W altere V-nek.*

Bizonyítás. A bizonyítás azon alapul, hogy ha V-ben teljesülnek a műveletekre megkövetelt feltételek (asszociativitás, stb.), akkor szükségszerűen W-ben is igazak maradnak ezek a tulajdonságok.

□

A fenti állításokból következik például az, hogy a 0 nullvektor minden altérnek eleme, sőt a $\{0\}$ egyelemű részhalmaz is altere tetszőleges vektortérnek. Maga V is könnyen láthatóan altere önmagának, e két alteret (V-t és $\{0\}$-t) *triviális altereknek* nevezzük.

A fenti 4.7. Állítás másik következménye, hogy tetszőleges $v_1, v_2, \ldots, v_k$ vektorok esetén a belőlük képezhető összes lineáris kombinációk halmaza

$$\left\{\sum_{i=1}^{k} \lambda_i \cdot v_i : \lambda_i \in \Gamma, i = 1, 2, \ldots, k\right\}$$

is altér, sőt az adott $v_1, v_2, \ldots, v_k$ vektorokat tartalmazó alterek között a „legszűkebb". Ezt az alteret a $v_1, v_2, \ldots, v_k$ vektorok által *generált* vagy *kifeszített* altérnek nevezzük, melynek dimenziója mellesleg éppen az adott vektorhalmaz rangja.

Az $\mathbb{R}^3$ vektortér (= a geometriai 3 dimenziós tér *helyvektorai*) alterei pontosan az origón átmenő egyenesek és síkok, no és a triviális $\{0\}$ és $\mathbb{R}^3$ terek. Részletesebben: ha egyetlen vektor (azaz helyvektor), ami persze nem a nullvektor vagy egy egyenesebe eső (akárhány) vektor által generált alteret keresünk, akkor ez éppen az adott vektor(ok) által meghatározott egyenesre eső összes helyvektorok halmaza. Hasonlóan igaz, hogy két (nemnulla) vektor, mely nem esik egyazon (origón áthaladó) egyenesre, vagy akár egyetlen síkban fekvő (akárhány) vektor által generált altér éppen az adott vektor(ok) által meghatározott síkra eső összes helyvektor halmaza. Mivel pedig csak helyvektorokról van szó, a fenti egyenesek és síkok is az origón kell, hogy áthaladjanak. Geometriai tanulmányainkból még azt is tudjuk, hogy három tetszőleges nemnulla vektor, ha nem esik egy síkra, az egész $\mathbb{R}^3$ tér összes vektorát előállítja, azaz generálja. $\{0\}$ generálását talán nem kell részleteznünk!

További fontos példák alterekre még: $\mathbb{R}^n[x] \leq \mathbb{R}[x]$, $c_0 \leq c \leq l_\infty \leq \mathbb{R}^{\mathbb{N}}$ és $D(I) \leq C(I) \leq S(I)$.

A következő kérdés: ha $W \leq V$ adott altér, akkor hogyan tudjuk az eredeti V tér többi, W-ből kimaradt elemét előállítani. E célból vegyük W egy $B_0 \subset W$ bázisát, és B_0-t bővítsük ki V elemeiből (V-ben) maximális lineárisan független vektorhalmazzá, azaz egy B_0-t tartalmazó $B \subset V$ bázissá. Ekkor az új ($B \setminus B_0$-beli) elemek által generált $W' \leq V$ altér a következő fontos tulajdonsággal rendelekzik: *V minden v eleme előáll $v = w + w'$ alakban, ahol $w \in W$ és $w' \in W'$, sőt ez az előállítás egyértelmű.* Ez a tény közvetlenül következik abból, hogy minden V vektor egyértelműen áll elő

$$v = \lambda_1 b_1 + \lambda_2 b_2 + \cdots + \lambda_k b_k + \lambda_{k+1} b_{k+1} + \lambda_{k+2} b_{k+2} + \cdots \lambda_n b_n$$

alakban, ahol $B_0 = \{b_1, b_2, \ldots, b_k\}$ és $B \setminus B_0 = \{b_{k+1}, b_{k+2} \ldots, b_n\}$, vagyis

$$w = \lambda_1 b_1 + \lambda_2 b_2 + \cdots + \lambda_k b_k \qquad \text{és} \qquad w' = \lambda_{k+1} b_{k+1} + \lambda_{k+2} b_{k+2} + \cdots + \lambda_n b_n,$$

ahol $w \in W$ és $w' \in W'$. W'-t a W *altér egy kiegészítő* (vagy *komplementer*) *alterének* nevezzük.

Például $\mathbb{R}^3$-ben bármely, origón átmenő sík és rá nem illeszkedő tetszőleges egyenes (ami szintén átmegy az origón), egymás kiegészítő alterei. Vagy például $\mathbb{R}^7[x]$-ben (legfeljebb hetedfokú poinomok) az $\mathbb{R}^4[x]$ altér kiegészítő altere az $ax^5 + bx^6 + cx^7$ alakú polinomok halmaza. Vagy bonyolultabb példának vegyük a c tér (konvergens sorozatok) c_0 alterét. Mivel minden konvergens sorozat felírható egy konstans sorozat és egy 0-hoz tartó sorozat összegeként, így a c_0 altér kiegészítő altere (a c térben!) a konstans sorozatok altere, melyet az $(1) := (1, 1, 1, \ldots)$ konstans sorozat egymaga generál.

Vegyük észre azt a fontos, könnyen ellenőrizhető tényt, hogy W és W' rögzítése esetén $w \in W$ és $w' \in W'$ minden $v \in V$ esetén egyértelmű, de W' változtatása esetén (még ha W változatlanul marad is), w és w' mindkettő megváltozhat ugyanazon $v \in V$ esetén is!

W' általában nem egyértelmű, hiszen B_0 elemeit sokféle módon kiegészíthetjük V egy bázisává. Továbbá az is könnyen belátható, hogy tetszőleges $W \leq V$ altér kiegészítő alterének kiegészítő altere lehet W saját maga is.

Amennyiben W_1, W_2 két olyan altere V-nek, amelyekből minden $v \in V$ vektor *egyértelműen* áll elő $v = w_1 + w_2$ alakban, ahol $w_i \in W_i$ $(i = 1, 2)$, akkor azt is mondjuk, hogy a W_1 és W_2 alterek *direkt összege* V, és ezt $V = W \oplus W_2$-vel jelöljük.

4.4. Leképezések. Fontosak még a vektorterek közötti olyan függvények is, melyek a vektortereken értelmezett műveletekkel (összeadás és skalárral való szorzás) összhangban vannak:

4.8. Definíció. Legyenek $(V, +, \cdot)$ és $(W, +, \cdot)$ azonos Γ test feletti vektorterek, és legyen $\mathcal{A} : V \to W$ olyan függvény, amelyre minden $x, y \in V$ és $\lambda \in \Gamma$ esetén

$$\mathcal{A}(x + y) = \mathcal{A}(x) + \mathcal{A}(y) \qquad \text{és} \qquad \mathcal{A}(\lambda \cdot x) = \lambda \cdot \mathcal{A}(x).$$

Ekkor $\mathcal{A}$-t *lineáris leképezésnek*, míg $V = W$ esetén *lineáris transzformációnak* nevezzük.

Például minden olyan síkbeli (vagy térbeli) geometriai transzformáció, amely az origót helyben hagyja, $\mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$ (ill. $\mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$) lineáris transzformáció, vagy a deriválás művelete $\frac{\partial}{\partial x} : D(I) \to S(I)$, vagy a sorozatok határértékének kisázmítása $\lim : c \to \mathbb{R}$, stb. mind lineáris leképezések.

Fontos speciális lineáris leképezés még a V vektortér egy W alterére történő *vetítés* (*projekció*), ami a következő: ha $V = W \oplus W'$ és $v \in V$, $v = w + w'$, ahol $w \in W$ és $w' \in W'$, akkor legyen v *vetülete* w. (A $v \in V$ vektor vetülete persze függ W'-től, de W' rögzítése után már egyértelmű.) Könnyen láthatóan a fenti függvény $V \to W$ lineáris leképezés.

Végül fontosak még az olyan vektorterek, amelyekben valamilyen módon tudunk szöget és hosszat mérni, skaláris szorzattal ($\neq$ skalárral való szorzat!), normával, vagy valamilyen más módon. Azonban az ilyen vektorterek bevezetése már túlnyúlik e rövid cikkünk keretein. Az érdeklődő Olvasók az ilyen vektorterekkel bármely lineáris algebrai könyvben megismerkedhetnek.

5. Egy számelméleti probléma. Most egy számelméleti problémát ismertetünk, mely szintén lineáris algebra segítségével oldható meg egyszerűen.

Feladat. (ld. [ES]) *Tegyük fel, hogy az $S \subseteq \mathbb{R}$ halmaz $2n + 1$ irracionális számból áll. Mutassuk meg, hogy ekkor található olyan, legalább $n + 1$ elemű $T \subseteq S$ részhalmaz, amelynek egyetlen részhalmaz-összege sem racionális.*

Mivel egyelemű részhalmaz-összegek is lehetségesek, ezért S nyilván nem tartalmazhat racionális számokat!

Megoldás. ([ES]) Mivel az Olvasók zöme csak frissiben most ismerkedett meg a lineáris algebrával (az előző fejezetben), így az eredeti rövid megoldást sűrűn megtűzdeltük magyarázatokkal.

(1) Legyen $S = \{a_0, a_1, \ldots, a_{2n}\} \subset \mathbb{R}$ adott (S elemei irracionális számok), és legyen az $S \cup \{1\}$ halmaz által $\mathbb{Q}$ felett generált $V \subset \mathbb{R}$ véges dimenziós vektortér egy bázisa $\{1, b_1, \ldots, b_m\}$.

(Részletesebben: $S \subset \mathbb{R}$, $S \neq \mathbb{R}$ egy tetszőleges adott halmaz, és $V \subset \mathbb{R}$ a legszűkebb olyan $S \cup \{1\}$-et tartalmazó halmaz, $V \supset S \cup \{1\}$, mely zárt az összeadásra és a *racionális* számmal való szorzásra: V-beli elemek összege és racionális számú-többszöröse is V-beli. Mint tudjuk, V pontosan az $S \cup \{1\} = \{1, a_0, a_1, \ldots, a_{2n}\}$

halmaz elemeinek racionális együtthatójú lineáris kombinációinak halmaza. Mivel $S \cup \{1\}$ véges, így V-nek van véges sok elemből álló bázisa, pl. $S \cup \{1\}$ egy ($\mathbb{Q}$ felett) maximális lineárisan független részhalmaza. Ezt jelöltük $\{1, b_1, \ldots, b_m\}$-vel.)

(2) Legyen $W \leq V$ az $\{1\} \subset V$ által generált V-beli egydimenziós V_1 altér kiegészítő (komplementer) altere, és legyen $p : V \to W$ a lineáris projekció.

(Azaz: az $\{1\} \subset \mathbb{R}$ egyetlen vektor által ($\mathbb{Q}$ felett) generált V_1 altér éppen $\mathbb{Q}$. Mivel $S \cup \{1\}$ generátorrendszere V-nek, így minden $v \in V$ elem felírható

$$v = \lambda_0 a_0 + \lambda_1 a_1 + \cdots + \lambda_{2n} a_{2n} = \lambda_0 a_0 + w$$

alakban, ahol az együtthatók racionális számok: $\lambda_i \in \mathbb{Q}$. A w vektorok, vagyis az S-beli elemek lineáris kombinációinak halmaza is altere V-nek, amit V_1 *kiegészítő (komplementer) alterének* hívunk, hiszen, mint a fenti előállításban is látjuk; minden V-beli vektor (egyértelműen) előáll egy V_1-beli és egy W-beli vektor összegeként:

$$v = v_1 + w, \qquad \text{ahol} \qquad v \in V_1 \quad \text{és} \quad w \in W.$$

A $\pi : V \to W$, $v \mapsto w$ megfeleltetést a W *altérre való projekciónak* nevezzük. Ez az általános fogalom a gemetriai síkra való merőleges vetítés általánosítása: ha V_1 egy tetszőleges, origón átmenő sík, akkor a tér ($= \mathbb{R}^3$, vagyis V) bármely v vektora előűll a Σ síkra való merőleges v_1 vetületének, és egy arra merőleges w vektornak összegegként: $v = v_1 + w$.)

(3) Ami számunkra érdekes: S minden a_i eleme felírható $a_i = r_i + p(a_i)$ alakban, ahol $r_i \in \mathbb{Q}$ racionális szám, $p(a_i)$ pedig a $b_1, \ldots, b_m$ számok racionális együtthatójú nem triviális lineáris kombinációja, minden $i \leq 2n$ indexre. Fontos észrevennünk, hogy a $p(a_i)$ számok mind irracionálisak, sőt semmilyen részösszegük vagy (racionális) lineáris kombinációjuk sem lehet racionális, hiszen a V_1 altér kiegészítő alterében vannak, vagyis *nem* V_1-ben, márpedig $V_1 = 0$. Vegyük észre ugyanis, hogy a $p(a_i)$ számok mind nemtriviális lineáris kombinációkat, azaz nemüres részletösszegeket jelölnek, és ezért irracionálisak!

Könnyen belátható ekkor, hogy: az $a_0, a_1, \ldots, a_{2n}$ számok bármely részhalmazának pontosan akkor racionális szám az összege, ha $p(a_0), p(a_1), \ldots, p(a_{2n})$ valós számok ugyanazon részhalmazának összege nulla. Mivel pedig a $p(a_0), p(a_1), \ldots,$ $p(a_{2n})$ számok közül legalább $n+1$ számúnak az előjele mindenképpen azonos és nem nulla, így a feladatban szereplő állítás következik; azokat az a_i számokat kell kiválasztanunk, amelyekhez tartozó $p(a_i)$ számok azonos előjelűek.

□

Köszönetnyilvánítás. Köszönetemet fejezem ki dr. Pethő Árpád professzor úrnak (Institut für Matmatische Chemia, Hannover, Németország), aki megismertette velem a problémát, és segítségével eredményeimről a *„2nd German—North American Workshop on Chemical Engineering"* konferencián (Göttingen, 1991) meghívott előadóként is beszámolhattam.

Köszönet illeti a lektort is, aki hasznos észrevételeivel nagymértékben javított cikkem olvashatóságán.

F. Egy program output

A vegyületek:

1. *vegyület*: `H2`
2. *vegyület*: `O2`
3. *vegyület*: `H2O`
4. *vegyület*: `OH`
5. *vegyület*: `H2O2`

A rendszermátrix:

1. *sor*: `2, 0, 2, 1, 2`
2. *sor*: `0, 2, 1, 1, 2`

A minimális reakciók:

(1) `+ 1 H2 + 1/2 O2 -1 H2O = 0`
(2) `+ 1/2 H2 + 1/2 O2 -1 OH = 0`
(3) `+ 1 H2 + 1 O2 -1 H2O2 = 0`
(4) `-1/2 H2 + 1 H2O -1 OH = 0`
(5) `-1 H2 + 2 H2O -1 H2O2 = 0`
(6) `+ 1/4 O2 + 1/2 H2O -1 OH = 0`
(7) `+ 1/2 O2 + 1 H2O -1 H2O2 = 0`
(8) `+ 2 OH -1 H2O2 = 0`

IRODALOM

[DLSZ] Dósa, Gy., Laflamme, Cl., Szalkai, I., *On the Maximal and Minimal Number of Cycles and Bases of Matroids and Extremal Constructions*, Combinatorica, benyújtva

[ES] Erdős, P., Surányi, J., *Rationally Independent Subsets of the Reals*, Amer. Math. Monthly, E3319 probléma

[GL] Goldstein, J. A., Levy, M., *Linear Algebra and Quantum Chemistry*, Amer. Math. Monthly, **98**(1991), 710—718.

[H] Halmai Erzsébet, *Lineáris algebra*, Tankönyvkiadó, Bp. 1979.

[HOS] Happel, J., Otarod, M., Sellers, P. H., *Mechanistic Study of Chemical Reaction Systems*, Ind. Eng. Chem. Res. **29** (1990), 1057—1067.

[KP] Kumar, S., Pethő, Á., *Note on a Combinatorial Problem for the Stoichiometry of Chemical Reactions*, Intern. Chem. Eng. **25** (1985), 767—769.

[LSZ1] Laflamme, Cl., Szalkai, I., *Counting Simplexes in* $\mathbb{R}^n$, Hung. J. of ind. Chem. **23** (1995), 237—240.

[LSZ2] — , *On the Minimal Number of Simplexes in* $\mathbb{R}^3$ *from Nonparalel Vectors*, előkészületben

[KSM] Kristóf, T., Salamon, T., Mihálykó, Cs., *Determination of Electrochemical Equilibra in Complex Aqueous Systems*, Hungarian J. of Industrial Chemistry, **21** (1993), 75—79.

[P0] Pethő, Á., *Lectures on Linear Methods in Chemical Engineering Mathematics (Stoichiometry)*, preprint, 1990, Institut für Technische Chemie, Univ. Hannover, Germany.

[P1] — , *On a Class of Solutions of Algebraic Homogeneous Linear Equations*, Acta Math. Hungaricae, **18** (1967), 19—23.

[P2] — , *The Linear Relationship between Stoichiometry and Dimensional Analysis*, Chem. Eng. Technol., **13** (1990), 328—332.

[R] Recski, A., *Matroid Theory and its Applications*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1989.

[S] Scharnitzky, V., *Vektorgeometria és lineáris algebra*, Matematika a műszaki főiskolák számára, Tankönyvkiadó, Budapest, 1989.

[SZ] Szalkai, I., *Generating Minimal Reactions in Stoichiometry Using Linear Algebra*, Hung. J. of Ind. Chem. **19** (1991), 289—292.

[T] Tasnádi, T., *Plazmareakciók folyamatai*, szakmérnöki dolgozat, Veszprém, 1992.

dr. Szalkai István, Veszprémi egyetem, Matematikai és Számítástechnikai Tanszék, 8200 Veszprém, Pf. 158.