用矩阵的初等变换求体系的组分数

刘亚楠　吴技莲*
河南工业大学理学院　河 南　郑 州　450001

摘　要：矩阵的初等变换是线性代数的基本骨架，非常重要。本文以矩阵的初等变换为工具，通过实例展示了求解复杂平衡体系中的独立组分数、独立化学反应的个数和独立化学反应的反应式的方法。当体系处于平衡状态时，可写出物种的原子系数矩阵，然后把该矩阵化成行最简形矩阵，则该行最简形矩阵的非零行个数就是组分数，矩阵的列数减去其秩则是独立化学反应的个数，并利用行最简形矩阵确定体系中独立化学反应的反应式。该方法简单、快速且准确。通过实例加深学生对知识的理解和掌握，提高其对线性代数学习的兴趣。

关键词：矩阵；秩；最大无关组；独立组分数；独立反应数

引　言：

线性代数是数学的基础分支，主要内容包括行列式、矩阵、线性方程组、向量组的线性相关性、相似矩阵和线性空间等；它在各个领域都有着广泛的应用，它是高等院校理工科学生必修课之一[1]。学习线性代数，不仅可以让学生更深入地理解数学的本质，以及如何利用数学工具解决实际问题，为学生后续专业课的学习打下坚实的基础；还能培养学生的逻辑思维和推理能力，从而提升学生的思维品质。本文以化学工程专业为背景，研究线性代数在其领域内的应用，让学生更好地理解线性代数的实际应用和重要性，提高学习兴趣和动力。

一、利用矩阵的初等变换求解组分数

1. 基本知识

（1）矩阵的初等变换

矩阵的初等变换是指：①对换两行 / 列、②以一个非零数乘某一行 / 列的所有元素、③把某一行 / 列所有元素的若干倍加到另一行 / 列[1]。它是矩阵的一种十分重要的运算，在求矩阵的秩、求逆矩阵、解线性方程组和探讨向量组的线性相关性中都起着重要的作用[1]。矩阵的初等变换是线性代数的基本骨架，它串起了线性代数所有章节的基本内容；只要掌握了它，就基本掌握了线性代数的内容。矩阵的秩是指矩阵的最高阶非零子式的阶数，它是矩阵的重要数值指标之一[2]，是矩阵在初等变换过程中保持不变的量，它等于矩阵的最简形矩阵的非零行个数。

（2）原子系数矩阵

根据质量守恒定律：反应前后，原子种类及原子总数不改变。因此，可将平衡体系中的物质组成转化为矩阵的形式，即原子系数矩阵：

$$\begin{array}{c} \\ E_1 \\ E_2 \\ \vdots \\ E_m \end{array}\begin{array}{c} \begin{array}{cccc} S_1 & S_2 & \cdots & S_n \end{array} \\ \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \end{array}$$

其中S_i代表某物种，E_i某元素，

$a_{ij}(i=1,2\cdots m;\ j=1,2\cdots n)$代表第$j$种物质的第$i$种元素的个数。

（3）平衡体系的相律及组分数

相律是描述多相平衡系统内自由度、组分数和相数间关系的数学表达式，它可以确定一个复杂的平衡体系的独立变量个数，对于复杂平衡体系的研究具有重要意义。在平衡体系所处的条件下，能够确保各相组成所需的最少独立物种数称为独立组分数，简称组分数。若体系受到N个外界因素影响，则其数学表达式为$F=C-P+N$ [3]，其中F为自由度，C为组分数，P为相数，N为外界因素。

由相律的推导过程得组分数C的数学表达式为$C=S-R-R'$，其中S为体系中的物种数，R为体系中独立的化学平衡个数，R'为同一相中的独立浓度限制条件数目。相律中组分数C通常难以判断，如何快速准确地求出系统的组分数是相平衡研究中经常遇到的问题，本文介绍一种利用原子系数矩阵[5]及矩阵的初等变换快速准确求解体系中独立的化学反应个数的方法。

2. 平衡体系中独立组分数、独立化学反应的个数及独立化学反应的反应式的确定

在所有相均无独立浓度限制的条件下，平衡体系中的原子系数矩阵的秩$R(A)$就是组分数C，即$C=R(A)$[4]。同时，若体系中无其他特定的浓度限制条件，可求得体系中独立的化学反应个数R=物种数（矩阵总列数）n减矩阵的秩$R(A)$，即$R=n-R(A)$。因此，可以利用矩阵的初等变换快速准确的确定平衡体系的独立组分数C和独立化学反应个数R。此外，将原子系数矩阵进行初等行变换得到其行最简形矩阵，然后用该行最简形矩阵的列向量组的最大无关组分别去表示除最大无关组以外的列向量，该表达式即为体系中独立化学反应的反应式。

3. 应用举例

例：$NH_4HCO_3(s)$、$NH_3(g)$ 、$H_2O(g)$ 和 $CO_2(g)$ 成平衡，求体系中独立组分数、独立的化学反应个数，并确定体系中独立化学反应的反应式。

解：第一步：将题目中物种列成一行，依元素种类及各物种所含原子个数按列写出原子系数矩阵 $\mathbf{A}$：

$$\begin{array}{c} \mathrm{N} \\ \mathrm{H} \\ \mathrm{C} \\ \mathrm{O} \end{array} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 5 & 3 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 3 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

第二步：利用矩阵的初等行变换，化 $\mathbf{A}$ 为行最简形矩阵

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 5 & 3 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 3 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \underset{\sim}{r} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = B$$

第三步：判断，得结论

（a）、显然，矩阵 $\mathbf{A}$ 的秩等于矩阵 $\mathbf{B}$ 的非零行个数，因此组分数 $C = R(A) = 3$。

（b）、该矩阵总列数 = 物种数 =4，体系中除化学反应外无其他的限制条件，显然，独立的化学反应个数 $R = n - R(A) = 1$。

（c）、体系中独立化学反应的反应式的确定。设矩阵 $\mathbf{A}$ 的列向量组为 $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)$，由上述行最简形矩阵可知 $\alpha_4 = \alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3$，所以该体系中独立化学反应式为

$$NH_4HCO_3(s) \rightleftharpoons NH_3(g) + H_2O(g) + CO_2(g)$$

结　论：

本文把矩阵的初等变换、矩阵的秩和向量组的最大无关组与平衡体系的独立组分数、独立的化学反应数和独立化学反应的方程式相联系。通过实例，利用线性代数这一工具将复杂的专业问题转化为更加清晰透彻的形式，有助于提高学生对线性代数的兴趣，更好地掌握线性代数的知识，并将其应用于实际问题中，为未来的科研和工作打下坚实的基础。因此，教师在教学过程中，可根据不同专业的特点，通过实例灵活讲授线性代数的知识，将理论和实践相结合，提高学生的兴趣和认知。

参考文献：

[1] 同济大学数学系 . 工程数学 , 线性代数 . 第 6 版 [M]. 高等教育出版社 ,2014.

[2] 任芳国 , 王甜甜 . 关于矩阵秩的重要性质及应用 [J]. 高等数学研究 ,2022,25(05):28−31.

[3] 天津大学物理化学教研组 . 物理化学 (第六版上册)[M]. 高等教育出版社 ,2017.

[4] 王洪兴 . 一种确定体系独立组分数目的新方法 [J]. 矿物岩石，1997,17(3):89−90.

【基金项目】

1. 河南工业大学理学院本科教学研究类项目（lxyjy202314）。

2. 河南工业大学青年骨干教师培育计划。

作者简介：* 通讯作者：吴技莲。