

(* Die Eindeutigkeit der Konstanten K1, K2, K3 *)

(* die stochiometrische Matrix: *)

S := {{-2, -2, -1}, {-1, 0, -1}, {0, 1, -1}}

(*die Funktion ρ: *)

ρ[{x_, y_, z_}, K1_, K2_, K3_] := S.{K1*x^2*y, K2*x^2, K3*x*y*z} + {x, y, z}

ρρ[{x_, y_, z_}, K1_, K2_, K3_] := ρ[ρ[{x, y, z}, K1, K2, K3], K1, K2, K3];

(* So sieht die Funktion ρρ aus: *)

Expand[ρρ[{x, y, z}, K1, K2, K3]]

$$\begin{aligned} & \{x - 4 K2 x^2 + 8 K2^2 x^3 - 8 K2^3 x^4 - 4 K1 x^2 y + 16 K1 K2 x^3 y - K2 K3 x^3 y + 2 K1^2 x^4 y - 24 K1 K2^2 x^4 y + \\ & 2 K2^2 K3 x^4 y - 8 K1^2 K2 x^5 y + K1 K2 K3 x^5 y + 8 K1^2 K2^2 x^6 y - 2 K1 K2^2 K3 x^6 y + 8 K1^2 x^3 y^2 - \\ & 24 K1^2 K2 x^4 y^2 + 2 K1 K2 K3 x^4 y^2 - 8 K1^3 x^5 y^2 + 16 K1^3 K2 x^6 y^2 - 2 K1^2 K2 K3 x^6 y^2 - \\ & 8 K1^3 x^4 y^3 + 8 K1^4 x^6 y^3 - 2 K3 x y z + 6 K2 K3 x^2 y z + 3 K1 K3 x^3 y z - 8 K2^2 K3 x^3 y z - \\ & 10 K1 K2 K3 x^4 y z + K2 K3^2 x^4 y z + 8 K1 K2^2 K3 x^5 y z - 2 K2^2 K3^2 x^5 y z + 6 K1 K3 x^2 y^2 z + \\ & K3^2 x^2 y^2 z - 16 K1 K2 K3 x^3 y^2 z - K2 K3^2 x^3 y^2 z - 14 K1^2 K3 x^4 y^2 z - K1 K3^2 x^4 y^2 z + \\ & 24 K1^2 K2 K3 x^5 y^2 z - K1 K2 K3^2 x^5 y^2 z - 8 K1^2 K3 x^3 y^3 z - 2 K1 K3^2 x^3 y^3 z + 16 K1^3 K3 x^5 y^3 z + \\ & 2 K1^2 K3^2 x^5 y^3 z + K3^2 x^2 y z^2 - 2 K2 K3^2 x^3 y z^2 + K3^2 x y^2 z^2 - 2 K2 K3^2 x^2 y^2 z^2 - 7 K1 K3^2 x^3 y^2 z^2 - \\ & K3^3 x^3 y^2 z^2 + 8 K1 K2 K3^2 x^4 y^2 z^2 + K2 K3^3 x^4 y^2 z^2 - 2 K1 K3^2 x^2 y^3 z^2 - K3^3 x^2 y^3 z^2 + \\ & 10 K1^2 K3^2 x^4 y^3 z^2 + 3 K1 K3^3 x^4 y^3 z^2 - K3^3 x^2 y^2 z^3 + 2 K1 K3^3 x^3 y^3 z^3 + K3^4 x^3 y^3 z^3, \\ & y - 2 K1 x^2 y + 4 K1 K2 x^3 y - K2 K3 x^3 y + K1^2 x^4 y - 4 K1 K2^2 x^4 y + 2 K2^2 K3 x^4 y - 4 K1^2 K2 x^5 y + \\ & K1 K2 K3 x^5 y + 4 K1^2 K2^2 x^6 y - 2 K1 K2^2 K3 x^6 y + 4 K1^2 x^3 y^2 - 8 K1^2 K2 x^4 y^2 + 2 K1 K2 K3 x^4 y^2 - \\ & 4 K1^3 x^5 y^2 + 8 K1^3 K2 x^6 y^2 - 2 K1^2 K2 K3 x^6 y^2 - 4 K1^3 x^4 y^3 + 4 K1^4 x^6 y^3 - 2 K3 x y z + \\ & 2 K2 K3 x^2 y z + 2 K1 K3 x^3 y z - 6 K1 K2 K3 x^4 y z + K2 K3^2 x^4 y z + 4 K1 K2^2 K3 x^5 y z - \\ & 2 K2^2 K3^2 x^5 y z + 4 K1 K3 x^2 y^2 z + K3^2 x^2 y^2 z - 4 K1 K2 K3 x^3 y^2 z - K2 K3^2 x^3 y^2 z - \\ & 8 K1^2 K3 x^4 y^2 z - K1 K3^2 x^4 y^2 z + 12 K1^2 K2 K3 x^5 y^2 z - K1 K2 K3^2 x^5 y^2 z - 4 K1^2 K3 x^3 y^3 z - \\ & 2 K1 K3^2 x^3 y^3 z + 8 K1^3 K3 x^5 y^3 z + 2 K1^2 K3^2 x^5 y^3 z + K3^2 x^2 y z^2 - 2 K2 K3^2 x^3 y z^2 + K3^2 x y^2 z^2 - \\ & 5 K1 K3^2 x^3 y^2 z^2 - K3^3 x^3 y^2 z^2 + 4 K1 K2 K3^2 x^4 y^2 z^2 + K2 K3^3 x^4 y^2 z^2 - K1 K3^2 x^2 y^3 z^2 - \\ & K3^3 x^2 y^3 z^2 + 5 K1^2 K3^2 x^4 y^3 z^2 + 3 K1 K3^3 x^4 y^3 z^2 - K3^3 x^2 y^2 z^3 + K1 K3^3 x^3 y^3 z^3 + K3^4 x^3 y^3 z^3, \\ & 2 K2 x^2 - 4 K2^2 x^3 + 4 K2^3 x^4 - 4 K1 K2 x^3 y - K2 K3 x^3 y + 8 K1 K2^2 x^4 y + 2 K2^2 K3 x^4 y + \\ & K1 K2 K3 x^5 y - 2 K1 K2^2 K3 x^6 y + 4 K1^2 K2 x^4 y^2 + 2 K1 K2 K3 x^4 y^2 - 2 K1^2 K2 K3 x^6 y^2 + \\ & z - 2 K3 x y z + K1 K3 x^3 y z + 4 K2^2 K3 x^3 y z - 2 K1 K2 K3 x^4 y z + K2 K3^2 x^4 y z - \\ & 2 K2^2 K3^2 x^5 y z + 2 K1 K3 x^2 y^2 z + K3^2 x^2 y^2 z + 4 K1 K2 K3 x^3 y^2 z - K2 K3^2 x^3 y^2 z - \\ & 2 K1^2 K3 x^4 y^2 z - K1 K3^2 x^4 y^2 z - K1 K2 K3^2 x^5 y^2 z - 2 K1 K3^2 x^3 y^3 z + 2 K1^2 K3^2 x^5 y^3 z + \\ & K3^2 x^2 y z^2 - 2 K2 K3^2 x^3 y z^2 + K3^2 x y^2 z^2 + K2 K3^2 x^2 y^2 z^2 - 3 K1 K3^2 x^3 y^2 z^2 - \\ & K3^3 x^3 y^2 z^2 + K2 K3^3 x^4 y^2 z^2 - K3^3 x^2 y^3 z^2 + 3 K1 K3^3 x^4 y^3 z^2 - K3^3 x^2 y^2 z^3 + K3^4 x^3 y^3 z^3 \} \end{aligned}$$

Teil1 = Part[%, 1];

(* Als nächstes geben wir die Koeffizienten der Monome

K1^i K2^j K3^m an in der ersten Zeile von ρρ an *)

```

Koeff1 = CoefficientList[Part[
  Expand[ $\rho\rho[\{x, y, z\}, K1, K2, K3] + \{\epsilon * K2^4, \epsilon * K2^4, \epsilon * K2^4 + \epsilon * K1^4\}$ ], 1], {K1, K2, K3}
  {{{x, -2 x y z, x^2 y^2 z + x^2 y z^2 + x y^2 z^2, -x^3 y^2 z^2 - x^2 y^3 z^2 - x^2 y^2 z^3, x^3 y^3 z^3},
    {-4 x^2, -x^3 y + 6 x^2 y z, x^4 y z - x^3 y^2 z - 2 x^3 y z^2 - 2 x^2 y^2 z^2, x^4 y^2 z^2, 0},
    {8 x^3, 2 x^4 y - 8 x^3 y z, -2 x^5 y z, 0, 0}, {-8 x^4, 0, 0, 0, 0}, {\epsilon, 0, 0, 0, 0}},
  {{{-4 x^2 y, 3 x^3 y z + 6 x^2 y^2 z, -x^4 y^2 z - 2 x^3 y^3 z - 7 x^3 y^2 z^2 - 2 x^2 y^3 z^2, 3 x^4 y^3 z^2 + 2 x^3 y^3 z^3, 0},
    {16 x^3 y, x^5 y + 2 x^4 y^2 - 10 x^4 y z - 16 x^3 y^2 z, -x^5 y^2 z + 8 x^4 y^2 z^2, 0, 0},
    {-24 x^4 y, -2 x^6 y + 8 x^5 y z, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}},
  {{{2 x^4 y + 8 x^3 y^2, -14 x^4 y^2 z - 8 x^3 y^3 z, 2 x^5 y^3 z + 10 x^4 y^3 z^2, 0, 0},
    {-8 x^5 y - 24 x^4 y^2, -2 x^6 y^2 + 24 x^5 y^2 z, 0, 0, 0}, {8 x^6 y, 0, 0, 0, 0},
    {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}}, {{-8 x^5 y^2 - 8 x^4 y^3, 16 x^5 y^3 z, 0, 0, 0},
    {16 x^6 y^2, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}},
  {{{8 x^6 y^3, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}}}

```

(* Das gleiche machen wir nun noch mit den Zeilen 2
und 3 von $\rho\rho$ *)

```
Teil2 = Part[Expand[ $\rho\rho[\{x, y, z\}, K1, K2, K3]$ ], 2];
```

```

Koeff2 = CoefficientList[Part[
  Expand[ $\rho\rho[\{x, y, z\}, K1, K2, K3] + \{\epsilon * K2^4, \epsilon * K2^4, \epsilon * K2^4 + \epsilon * K1^4\}$ ], 2], {K1, K2, K3}
  {{{y, -2 x y z, x^2 y^2 z + x^2 y z^2 + x y^2 z^2, -x^3 y^2 z^2 - x^2 y^3 z^2 - x^2 y^2 z^3, x^3 y^3 z^3},
    {0, -x^3 y + 2 x^2 y z, x^4 y z - x^3 y^2 z - 2 x^3 y z^2, x^4 y^2 z^2, 0},
    {0, 2 x^4 y, -2 x^5 y z, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}, {\epsilon, 0, 0, 0, 0}},
  {{{-2 x^2 y, 2 x^3 y z + 4 x^2 y^2 z, -x^4 y^2 z - 2 x^3 y^3 z - 5 x^3 y^2 z^2 - x^2 y^3 z^2, 3 x^4 y^3 z^2 + x^3 y^3 z^3, 0},
    {4 x^3 y, x^5 y + 2 x^4 y^2 - 6 x^4 y z - 4 x^3 y^2 z, -x^5 y^2 z + 4 x^4 y^2 z^2, 0, 0},
    {-4 x^4 y, -2 x^6 y + 4 x^5 y z, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}},
  {{{x^4 y + 4 x^3 y^2, -8 x^4 y^2 z - 4 x^3 y^3 z, 2 x^5 y^3 z + 5 x^4 y^3 z^2, 0, 0},
    {-4 x^5 y - 8 x^4 y^2, -2 x^6 y^2 + 12 x^5 y^2 z, 0, 0, 0}, {4 x^6 y, 0, 0, 0, 0},
    {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}}, {{-4 x^5 y^2 - 4 x^4 y^3, 8 x^5 y^3 z, 0, 0, 0},
    {8 x^6 y^2, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}},
  {{{4 x^6 y^3, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}}}

```

(* Bei der dritten Zeile müssen wir ein wenig aufpassen *)

```

Koeff3 = CoefficientList[Part[
  Expand[ $\rho\rho$ [{x, y, z}, K1, K2, K3] + { $\epsilon * K2^4$ ,  $\epsilon * K2^4$ ,  $\epsilon * K2^4 + \epsilon * K1^4$ }], 3], {K1, K2, K3}
  {{{z, -2 x y z, x2 y2 z + x2 y z2 + x y2 z2, -x3 y2 z2 - x2 y3 z2 - x2 y2 z3, x3 y3 z3},
  {2 x2, -x3 y, x4 y z - x3 y2 z - 2 x3 y z2 + x2 y2 z2, x4 y2 z2, 0},
  {-4 x3, 2 x4 y + 4 x3 y z, -2 x5 y z, 0, 0}, {4 x4, 0, 0, 0, 0}, { $\epsilon$ , 0, 0, 0, 0}},
  {{0, x3 y z + 2 x2 y2 z, -x4 y2 z - 2 x3 y3 z - 3 x3 y2 z2, 3 x4 y3 z2, 0},
  {-4 x3 y, x5 y + 2 x4 y2 - 2 x4 y z + 4 x3 y2 z, -x5 y2 z, 0, 0}, {8 x4 y, -2 x6 y, 0, 0, 0},
  {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}}, {{0, -2 x4 y2 z, 2 x5 y3 z, 0, 0},
  {4 x4 y2, -2 x6 y2, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}},
  {{0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}},
  {{ $\epsilon$ , 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}, {0, 0, 0, 0, 0}}}]

Flatten[Koeff1];

Flatten[Koeff2];

Flatten[Koeff3];

(* Als nächstes geben wir die Matrix, deren i-te Zeile , wobei i von 1
  bis 3 rangiert, die Koeffizienten (meistens selber Polynome in x,y und
  z) enthält, die vor einem Ausdruck der Form (K1j * K2n * K3m) in
  der i-ten Zeile von  $\rho\rho$  auftreten.

  Es ist etwa -2xyz der Koeffizient von K3 in der ersten Zeile von
   $\rho\rho$  , (x2 y2 z + x2 y z2 + x y2 z2) der von K32 usw. *)

```


Koeffizientenmatrix = Transpose[Hilfsmatrix]

```
{ {x, -2 x y z, x^2 y^2 z + x^2 y z^2 + x y^2 z^2, -x^3 y^2 z^2 - x^2 y^3 z^2 - x^2 y^2 z^3, x^3 y^3 z^3, -4 x^2,
  -x^3 y + 6 x^2 y z, x^4 y z - x^3 y^2 z - 2 x^3 y z^2 - 2 x^2 y^2 z^2, x^4 y^2 z^2, 8 x^3, 2 x^4 y - 8 x^3 y z,
  -2 x^5 y z, -8 x^4, ε, -4 x^2 y, 3 x^3 y z + 6 x^2 y^2 z, -x^4 y^2 z - 2 x^3 y^3 z - 7 x^3 y^2 z^2 - 2 x^2 y^3 z^2,
  3 x^4 y^3 z^2 + 2 x^3 y^3 z^3, 16 x^3 y, x^5 y + 2 x^4 y^2 - 10 x^4 y z - 16 x^3 y^2 z, -x^5 y^2 z + 8 x^4 y^2 z^2,
  -24 x^4 y, -2 x^6 y + 8 x^5 y z, 2 x^4 y + 8 x^3 y^2, -14 x^4 y^2 z - 8 x^3 y^3 z, 2 x^5 y^3 z + 10 x^4 y^3 z^2,
  -8 x^5 y - 24 x^4 y^2, -2 x^6 y^2 + 24 x^5 y^2 z, 8 x^6 y, -8 x^5 y^2 - 8 x^4 y^3, 16 x^5 y^3 z, 16 x^6 y^2, 8 x^6 y^3},
  {y, -2 x y z, x^2 y^2 z + x^2 y z^2 + x y^2 z^2, -x^3 y^2 z^2 - x^2 y^3 z^2 - x^2 y^2 z^3, x^3 y^3 z^3, 0,
  -x^3 y + 2 x^2 y z, x^4 y z - x^3 y^2 z - 2 x^3 y z^2, x^4 y^2 z^2, 0, 2 x^4 y, -2 x^5 y z, 0, ε, -2 x^2 y,
  2 x^3 y z + 4 x^2 y^2 z, -x^4 y^2 z - 2 x^3 y^3 z - 5 x^3 y^2 z^2 - x^2 y^3 z^2, 3 x^4 y^3 z^2 + x^3 y^3 z^3, 4 x^3 y,
  x^5 y + 2 x^4 y^2 - 6 x^4 y z - 4 x^3 y^2 z, -x^5 y^2 z + 4 x^4 y^2 z^2, -4 x^4 y, -2 x^6 y + 4 x^5 y z,
  x^4 y + 4 x^3 y^2, -8 x^4 y^2 z - 4 x^3 y^3 z, 2 x^5 y^3 z + 5 x^4 y^3 z^2, -4 x^5 y - 8 x^4 y^2,
  -2 x^6 y^2 + 12 x^5 y^2 z, 4 x^6 y, -4 x^5 y^2 - 4 x^4 y^3, 8 x^5 y^3 z, 8 x^6 y^2, 4 x^6 y^3},
  {z, -2 x y z, x^2 y^2 z + x^2 y z^2 + x y^2 z^2, -x^3 y^2 z^2 - x^2 y^3 z^2 - x^2 y^2 z^3, x^3 y^3 z^3, 2 x^2,
  -x^3 y, x^4 y z - x^3 y^2 z - 2 x^3 y z^2 + x^2 y^2 z^2, x^4 y^2 z^2, -4 x^3, 2 x^4 y + 4 x^3 y z,
  -2 x^5 y z, 4 x^4, ε, 0, x^3 y z + 2 x^2 y^2 z, -x^4 y^2 z - 2 x^3 y^3 z - 3 x^3 y^2 z^2,
  3 x^4 y^3 z^2, -4 x^3 y, x^5 y + 2 x^4 y^2 - 2 x^4 y z + 4 x^3 y^2 z, -x^5 y^2 z, 8 x^4 y,
  -2 x^6 y, 0, -2 x^4 y^2 z, 2 x^5 y^3 z, 4 x^4 y^2, -2 x^6 y^2, 0, 0, 0, 0, ε}}
```

(*Die neue Länge einer Zeile ist nun 33 (im Unterschied zu 125 vorher). Die künstlich und aufgrund technischer Gründe eingeführte Variable ε stelle man sich als Null vor. Wir werden sie auch gleich auf Null setzen. Wir stellen uns weiterhin x,y,z als Komponenten des Eingabevektors ξ vor. *)

```
Length[Part[Koeffizientenmatrix, 1]]
```

```
33
```

(* Wir nehmen nun an, dass es einen festen Vektor $v=(v[1],v[2],\dots,v[33])$ gibt, der im Kern der Koeffizientenmatrix für ALLE Eingabedaten ξ aus der Datenbasis liegt. Wir wollen nun zeigen, dass v der Nullvektor sein muss. Diese Tatsache würde dann sichern, dass wir mit genügend vielen Gleichungen unseren gesuchten Vektor (der u.a. K1, K2 und K3 enthält) eindeutig bestimmen könnten. *)

(* Wir multiplizieren die Koeffizientenmatrix mit einem Vektor *)


```
Identität3 = Solve[Gleichung3 == 0 Range[112], Array[v, 33]]
```

```
Solve::svars: Equations may not give solutions for all "solve" variables.
```

```
{{v[1] → 0, v[2] → 0, v[3] → 0, v[4] → 0, v[5] → 0, v[6] → 0, v[7] → -4 v[19], v[8] → 0,  
v[9] → 0, v[10] → 0, v[11] → 0, v[12] → 0, v[13] → 0, v[16] → 0, v[17] → 0, v[18] → 0,  
v[20] → 0, v[21] → 0, v[22] → 0, v[23] → 0, v[25] → 0, v[26] → 0, v[27] → 0, v[28] → 0}}
```

(* Aus den drei Identitäten sieht man schnell, dass v der Nullvektor sein muss. Zum Beispiel folgt aus der dritten Identität, dass $v[5]=0$ ist. Aus Identität1 erhalten wir deswegen auch $v[31]=0$. Ebenso muss $v[29]=0$ sein, da $v[23]=0$ ist usw. *)