Höhere Mathematik für Bachelorstudiengänge I.2

Beispiel 5.14 (Chemische Reaktion)
Eine einfache chemische Reaktion laufe nach dem Schema

$$C_1 \xrightarrow{k_1} C_2 \xrightarrow{k_2} C_3$$

mit Reaktionsraten $k_1, k_2 > 0$ ab. Wir bezeichnen mit $y_1(x)$ die Stoffkonzentration (bzw. Stoffmenge) von C_1 zum Zeitpunkt x, analog $y_2(x)$ und $y_3(x)$. Für sie gilt

$$y_1'(x) = -k_1\, y_1(x),$$

d.h., die Abnahmerate der Stoffmenge ist proportional zur vorhandenen Menge. Die Konzentration von C_2 nimmt aufgrund der ersten Reaktion zu und aufgrund der zweiten ab:

$$y_2'(x) = +k_1\, y_1(x) - k_2\, y_2(x).$$

Schließlich ändert sich C_3 wie folgt:

$$y_3'(x) = +k_2\, y_2(x).$$

Die Reaktionsgleichung lässt sich also kurz schreiben als

$$\begin{pmatrix} y_1'(x) \\ y_2'(x) \\ y_3'(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -k_1 & 0 & 0 \\ k_1 & -k_2 & 0 \\ 0 & k_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1(x) \\ y_2(x) \\ y_3(x) \end{pmatrix} \quad \text{oder} \quad \vec{y}\,'(x) = A\, \vec{y}(x).$$

Beispiel 5.17 **(Chemische Reaktion)**
Wir lösen das Dgl-System aus Beispiel 5.14 für den Fall $k_1 = 1$, $k_2 = 2$, also mit

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Die Eigenwerte und zugehörigen Eigenvektoren von A sind

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 0, & \vec{v}_1 &= \alpha\,(0,0,1)^\top \\ \lambda_2 &= -1, & \vec{v}_2 &= \alpha\,(1,1,-2)^\top \\ \lambda_3 &= -2, & \vec{v}_3 &= \alpha\,(0,1,-1)^\top. \end{aligned}$$

Damit ergibt sich nach Satz 5.16 folgende **allgemeine Lösung** des homogenen Dgl-Systems $\vec{y}'(x) = A\,\vec{y}(x)$:

$$\vec{y}(x) = \sum_{i=1}^{3} c_i\, e^{\lambda_i\, x}\, \vec{v}_i = c_1\, e^{0\,x} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + c_2\, e^{-x} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix} + c_3\, e^{-2x} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

mit $c_1, c_2, c_3 \in \mathbb{R}$.
Die AB $\vec{y}(0) = (5,3,0)^\top$ wählt aus diesen Lösungen genau eine aus. Einsetzen ergibt:

$$\vec{y}(0) = c_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix} + c_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix},$$

also ein LGS für $(c_1, c_2, c_3)^\top$! Dessen eindeutige Lösung ist hier $(c_1, c_2, c_3) = (8, 5, -2)$.