Analogcomputermodell zur Berechnung des Flüssigkeitsvolumen im liegenden Zylinder

Gregor Zweig, Bernd Gruner und Tim Surber

Gliederung

1. Aufgabenstellung
2. Mathematische Grundlagen
3. Umsetzung
4. Ergebnisse
5. Fazit

Aufgabenstellung

- Herleitung der Formel für Flüssigkeitsvolumen V im liegenden Zylinder (geg.: Radius r, Füllhöhe h, Länge L)
- Reaktionsnetzwerk, zugehörige Massenwirkungskinetik und geeignete Belegung der Ratenkonstanten so dass r, h und L durch initiale Stoffkonzentrationen ausgedrückt werden
- Stoffkonzentration der Ausgabespezies nähert sich asymptotisch dem gesuchten Volumen V an
- Winkelfunktion mittels Taylorpolynom 5. Grades annähern

Mathematische Grundlagen

- Grundsätzliche Herangehensweise
- Berechnung der Kreissegmentfläche aus Radius r und Füllstand h
- Berechnung des Füllstandes

- Herleitung der Taylorreihe mit Restfehler 5%

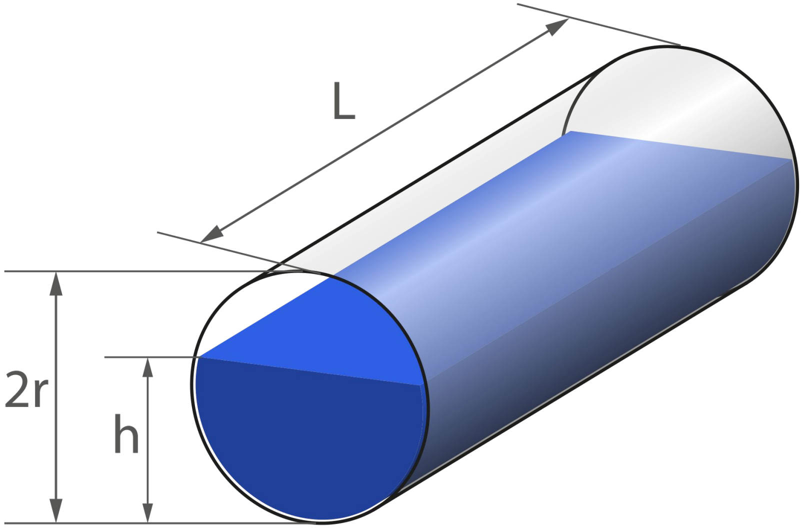
Grundsätzliche Herangehensweise

- Volumen eines Kreiszylinders

$$V = \underbrace{\pi r^2}_{\text{Kreisfläche}} * \underbrace{L}_{\text{Zylinderlänge}}$$

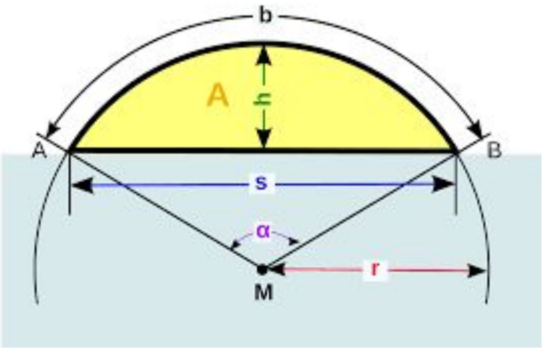
- Volumen der Füllstandes

V = Kreissegmentfläche * Zylinderlänge

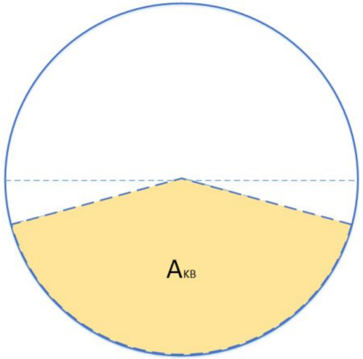


Berechnung der Kreissegmentfläche

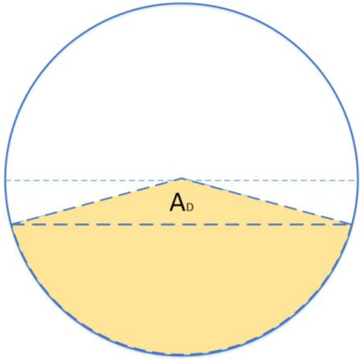
Kreissegment



Kreissektor



Dreiecksfläche



$A = A_{Kreissektor} - A_{Gl.\ Dreieck}$

$A = \pi r^2 * \alpha/2\pi = \alpha/2 * r^2$

Berechnung der Kreissegmentfläche (2)

- Fläche des gleichschenkligen Dreiecks (aus Radius r und Füllstand h)

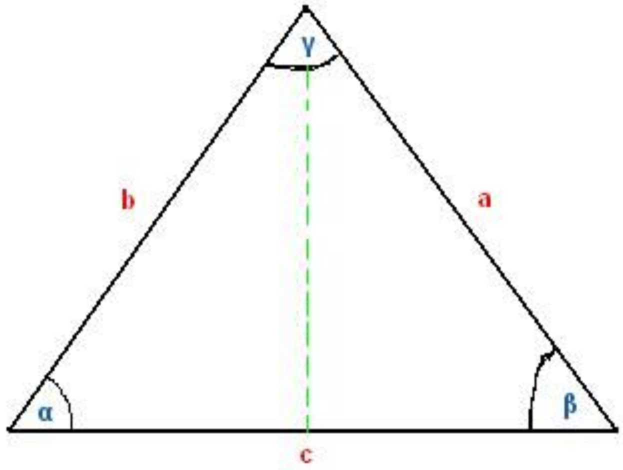
α = 2 * arccos ((r-h) / r)

A = 0,5 * x * (r-h)

x = r * sin (α/2) = 2 * r * sin(arccos ((r-h) / r))

mit sin (arccos(β)) = sqrt(1-β²)

A = (r-h) * sqrt(2*r*h - h²)



Berechnung der Kreissegmentfläche (3)

- Fläche des Kreissegmentes

$A = A_{Kreissektor} - A_{Gl. Dreieck}$

$A = \alpha/2 * r^2 - (r-h) * sqrt(2*r*h - h^2)$ mit $\alpha = 2 * arccos (r-h / r)$

$A = r^2 * 2 * arccos (r-h / r) - (r-h) * sqrt(2*r*h - h^2)$

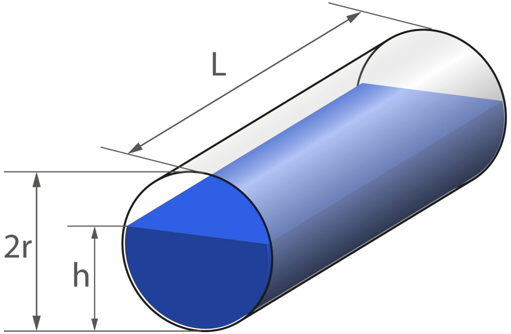
$$A_S = r^2 arc\cos\left(\frac{r-h}{r}\right) - (r-h)\sqrt{2rh - h^2}$$

Berechnung des Füllstandes

- Volumen der Füllstandes mit Zylinderlänge L

V = Zylinderlänge * Kreissegmentfläche

V = L * (r² * 2 * arccos (r-h / r) - (r-h) * sqrt(2*r*h - h²)



$$V = L\left(r^2 arc\cos\left(\frac{r-h}{r}\right) - (r-h)\sqrt{2rh-h^2}\right)$$

Berechnung des Füllstandes (2)

- Probe für $0 \leq h \leq 2r$

$$A_S = r^2 \arccos\left(\frac{r-h}{r}\right) - (r-h)\sqrt{2rh - h^2}$$

$A\ (h=0) = 0$

$A\ (h=r) = 0{,}5 * \pi * r^2$ (halbe Kreisfläche)

$A\ (h=2r) = \pi * r^2$

Taylorreihe von arcsin(x)

- Verwendung der Taylorreihe von für arccos(x) für COPASI

$\arccos(x) = \pi/2 - \arcsin(x)$

- Reihe von arcsin(x) kann eingesetzt werden
- Bestimmen der Taylorreihe von arcsin(x)

Taylorreihe von arcsin(x) (2)

- unter Verwendung der binomischen Reihe

$$(1+x)^\alpha = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{\alpha}{k} x^k$$

- für den Binomialkoeffizienten gilt

$$\binom{\alpha}{k} = \frac{\alpha(\alpha-1)\cdots(\alpha-k+1)}{k!}$$

- Integraldarstellung des Arkussinus

$$\arcsin(x) = \int_0^x \frac{\mathrm{d}t}{\sqrt{1-t^2}}$$

Taylorreihe von arcsin(x) (3)

- Integration der binomischen Reihe und Definition des Binomialkoeffizienten

$$\binom{-\frac{1}{2}}{k} = (-1)^k \frac{(2k-1)!!}{k!2^k} = (-1)^k \frac{(2k-1)!!}{(2k)!!}$$

- als Summe

$$(1-x^2)^{-\frac{1}{2}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k-1)!!}{(2k)!!} x^{2k}$$

- Eingesetzt in arcsin

arcsin(x) $= x + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2k-1)!!}{(2k)!!} \frac{x^{2k+1}}{2k+1} = x + \frac{1}{2} \cdot \frac{x^3}{3} + \frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 4} \cdot \frac{x^5}{5} + \frac{1 \cdot 3 \cdot 5}{2 \cdot 4 \cdot 6} \cdot \frac{x^7}{7} + \cdots$

Taylorreihe von arccos(x)

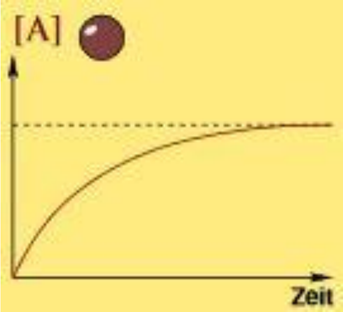
arccos(x) = π/2 - arcsin(x)

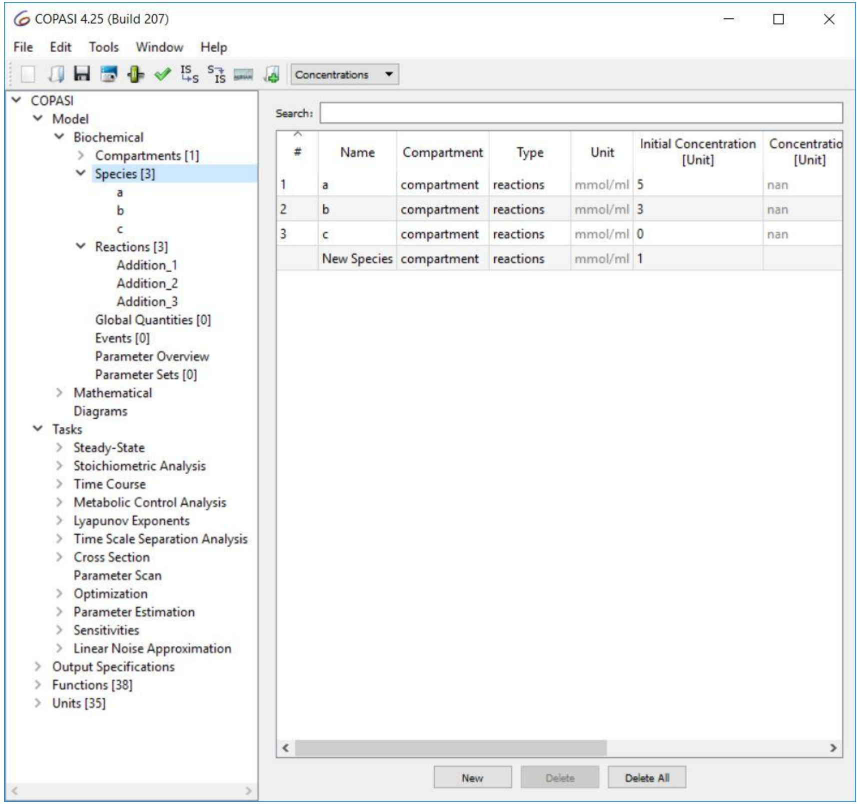
arccos(x) = π/2 - $x + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2k-1)!!}{(2k)!!} \frac{x^{2k+1}}{2k+1}$

- Abschätzung des Fehlers mit Lagrange-Restglied

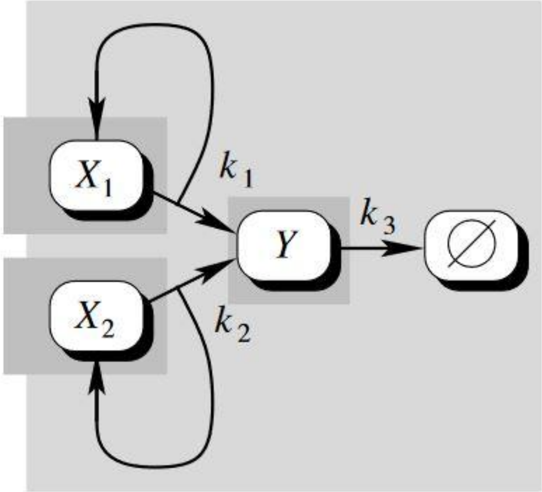
Chemischer Analogcomputer

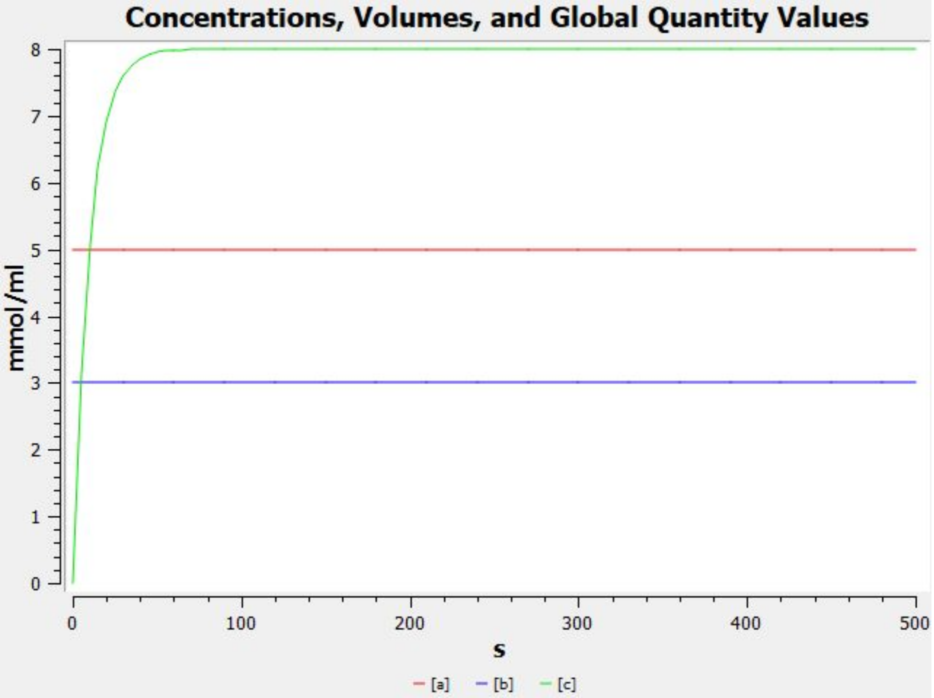
- Variablen ≙ Stoffe
- Zustand der Variable ≙ Zeitverlauf der Stoffkonzentration
- Änderung des Zustandes ≙ chemische Reaktionsgleichung





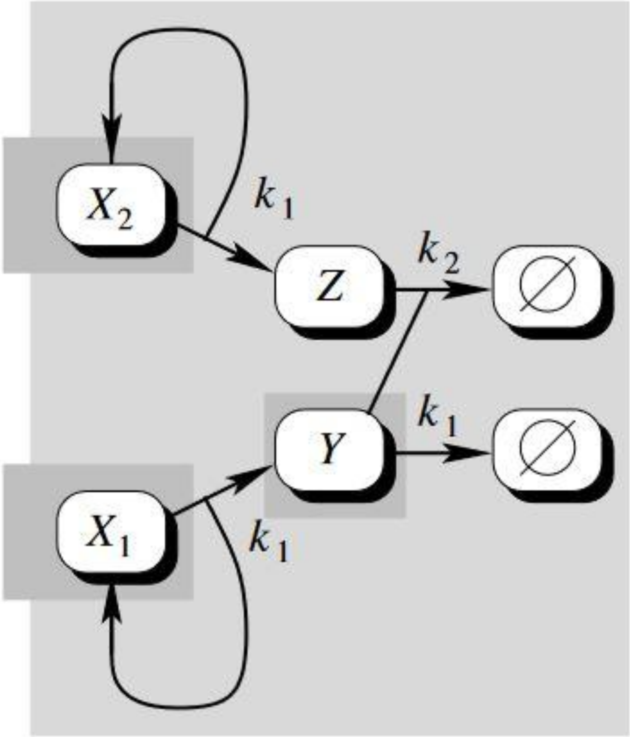
Grundrechenarten - Addition

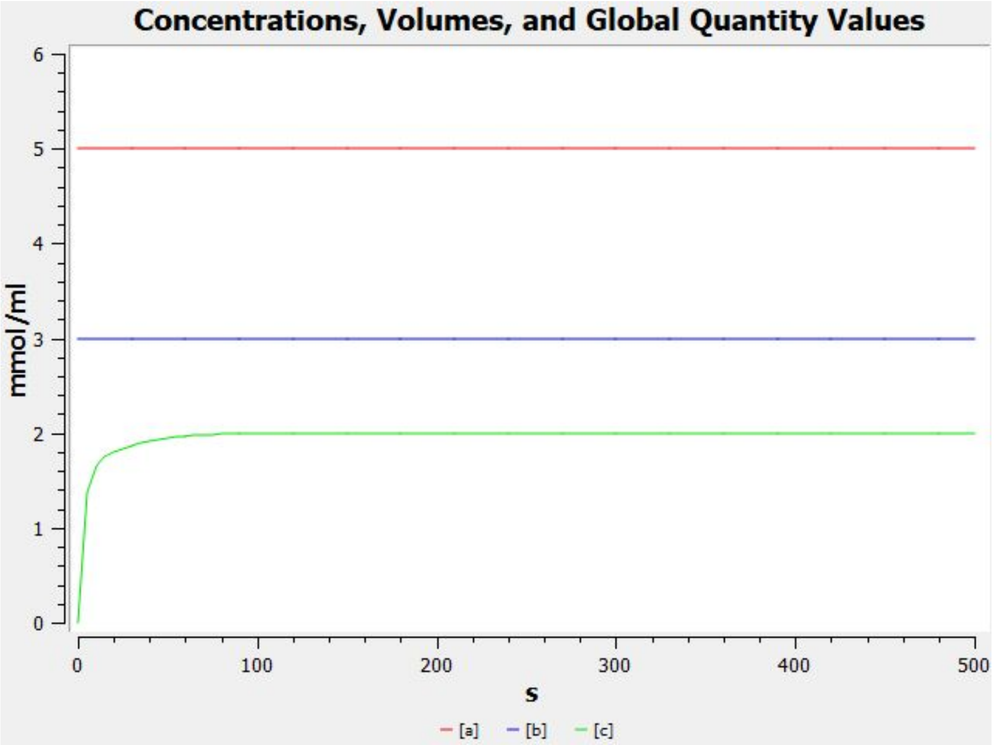




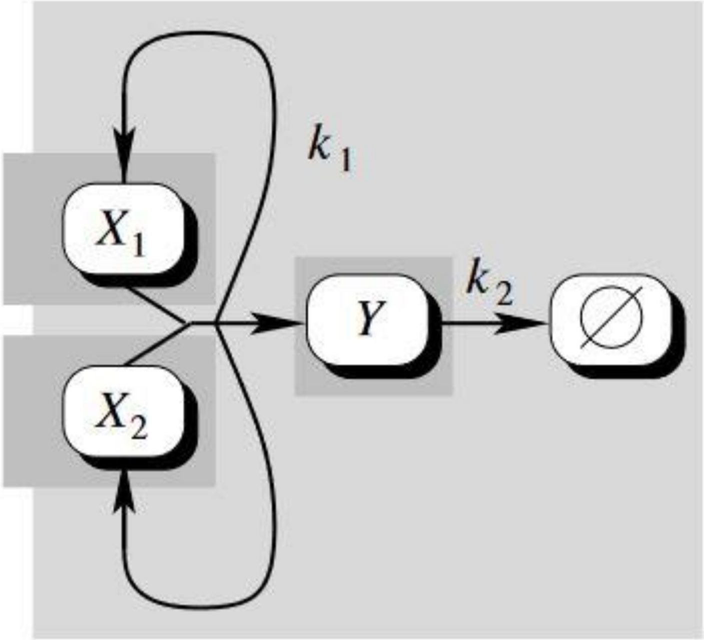
#	Name	Reaction	Rate Law	Flux [mmol/s]
1	Addition_1	x1 -> x1 + y	Mass action (irreversible)	0
2	Addition_2	x2 -> x2 + y	Mass action (irreversible)	0
3	Addition_3	y ->	Mass action (irreversible)	0

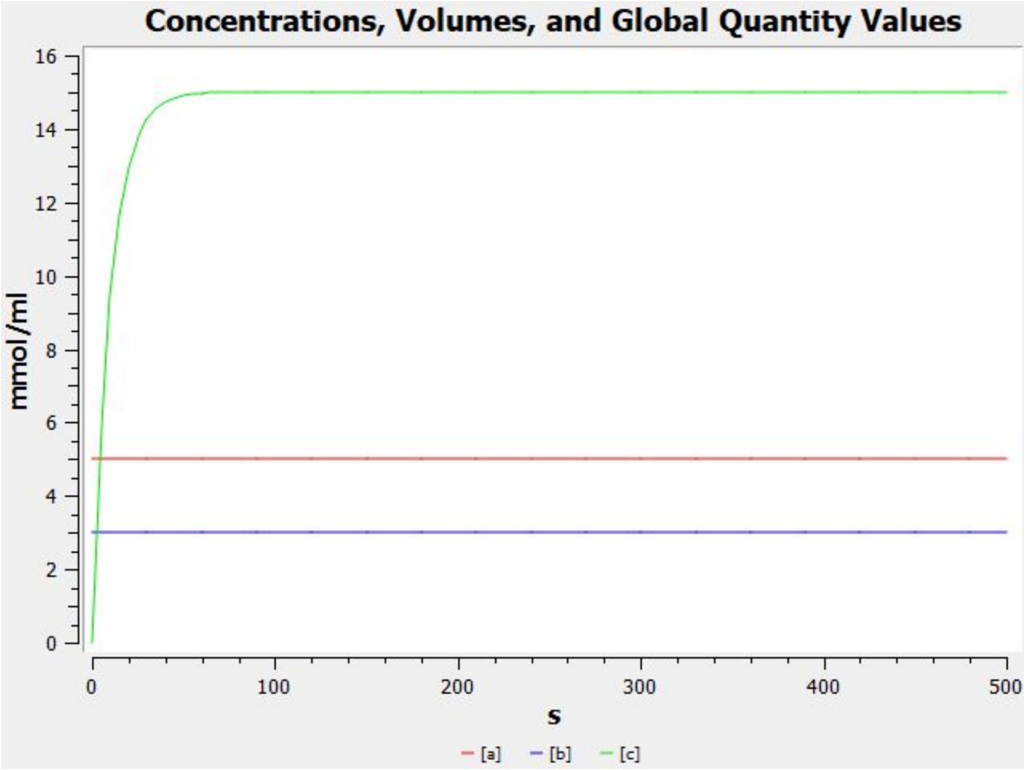
Grundrechenarten - Subtraktion (nicht-negativ)



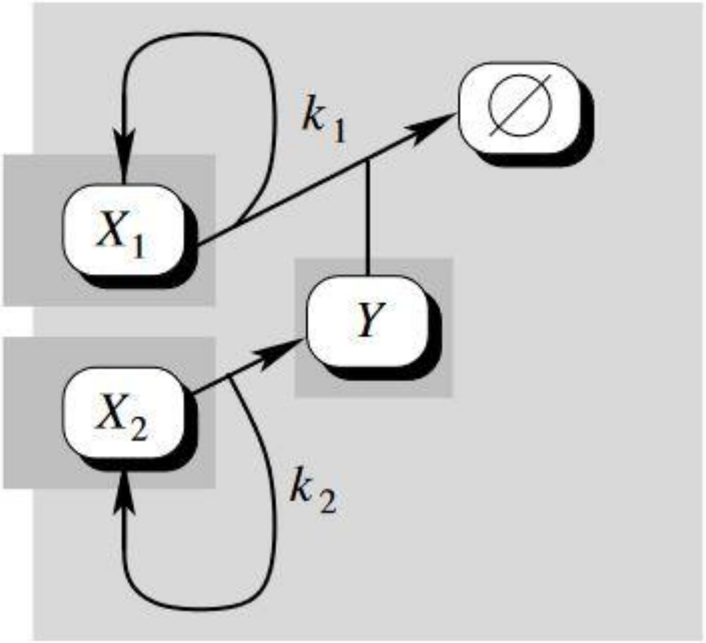


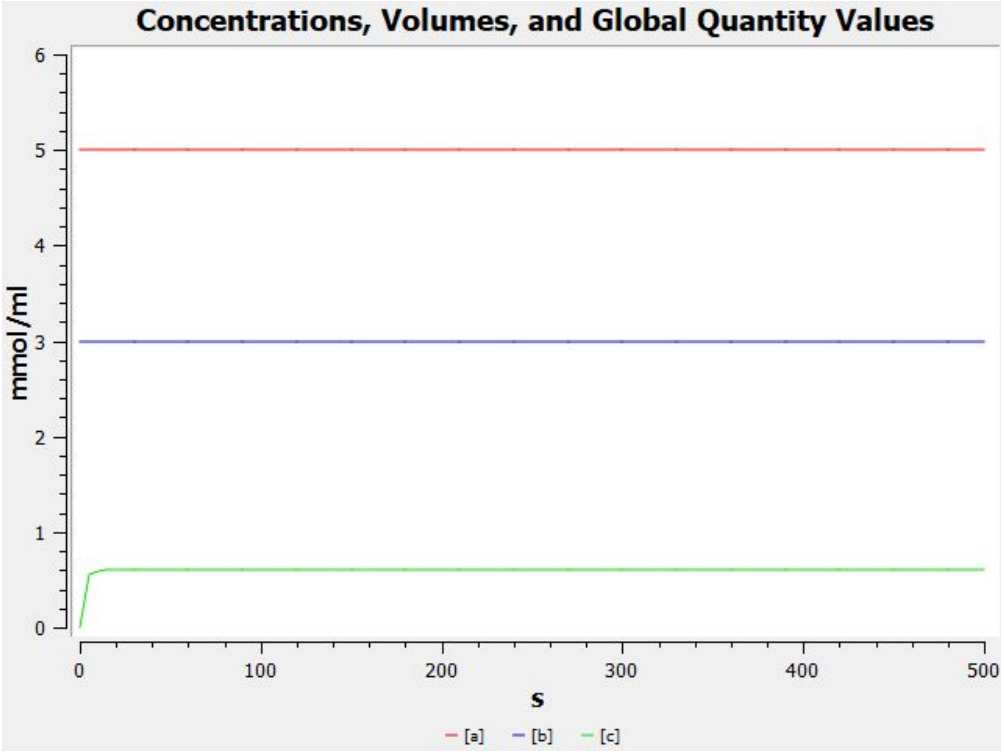
Grundrechenarten - Multiplikation





Grundrechenarten - Division





Zerlegung der Gleichung

$$V = r^2 L \left(\arccos\left(\frac{r-h}{r}\right) - (r-h)\frac{\sqrt{2rh-h^2}}{r^2} \right)$$

$$\Downarrow$$

$$A = r^2 \cdot \arccos\left(1 - \frac{h}{r}\right) - (r-h) \cdot \sqrt{2rh-h^2}$$

Zerlegung der Gleichung

$$A = r^2 \cdot \arccos\left(1 - \frac{h}{r}\right) - (r - h) \cdot \sqrt{2rh - h^2}$$

r * r

h / r = x1
1 - x1
Taylor

r - h

2 * r * h = x2
h * h = x3
x2 - x3 = x4
sqrt(x4)

Multiplikation

Multiplikation

Subtraktion

Multiplikation mit L

Spezialfälle

Randbedingung: 0 ≤ h ≤ 2 * r

$$A = r^2 \cdot \arccos\left(1 - \frac{h}{r}\right) - (r - h) \cdot \sqrt{2rh - h^2}$$

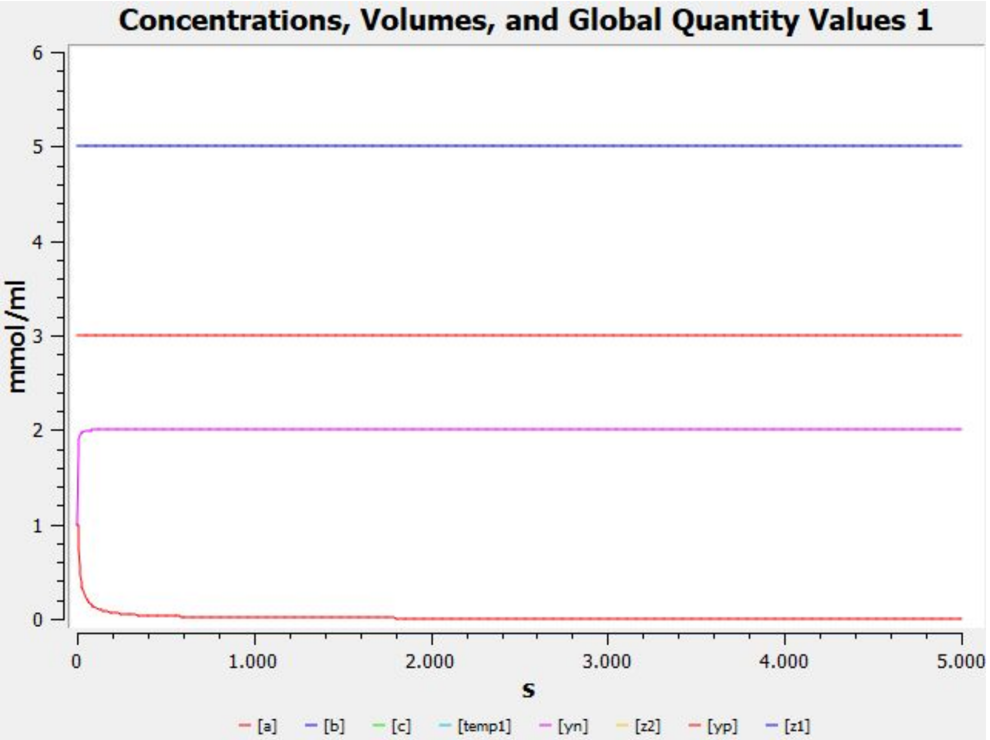
Spezialfälle

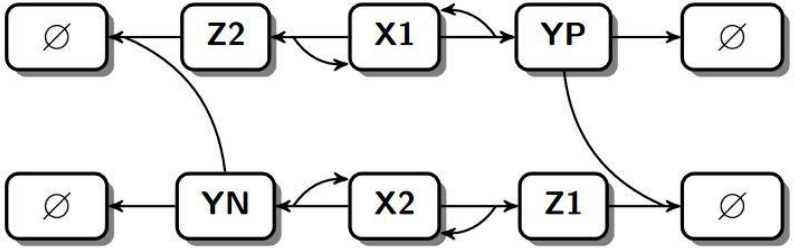
Randbedingung: 0 ≤ h ≤ 2 * r

$$A = r^2 \cdot \arccos\underbrace{\left(1 - \frac{h}{r}\right)} - \underbrace{(r - h)} \cdot \sqrt{2rh - h^2}$$

nicht-negative Subtraktion führt zu einem falschen Ergebnis

Behandlung der Spezialfälle





x1 = 3

x2 = 5

x1 - x2 = yp, yn

yp ≈ 0

yn ≈ 2

Spezialfälle

Randbedingung: 0 ≤ h ≤ 2 * r

$$A = r^2 \cdot \arccos\underbrace{\left(1 - \frac{h}{r}\right)} - \underbrace{(r - h)} \cdot \sqrt{2rh - h^2}$$

nicht-negative Subtraktion führt zu einem falschen Ergebnis

Behandlung der Spezialfälle

Berechnung des Vorzeichens:

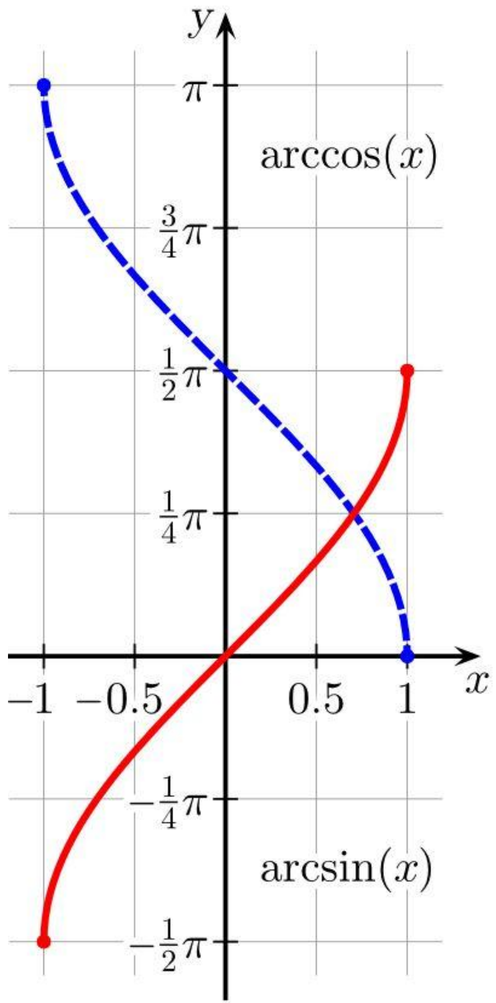
sgn = yp - (yp - (yn + 1))

If (sgn > 0) then:

arccos(x)

if (sgn ≈ 0) then:

2 * (0.5 π - arccos(x)) + arccos(x)



Spezialfälle

Randbedingung: 0 ≤ h ≤ 2 * r

$$A = r^2 \cdot \arccos\left(\underbrace{1 - \frac{h}{r}}_{}\right) - \underbrace{(r - h)}_{} \cdot \sqrt{2rh - h^2}$$

nicht-negative Subtraktion führt zu einem falschen Ergebnis

Behandlung der Spezialfälle

Berechnung des Vorzeichens:

sgn = yp - (yp - (yn + 1))

If (sgn > 0) then:

$$A = r^2 \cdot \arccos\left(1 - \frac{h}{r}\right) - (r - h) \cdot \sqrt{2rh - h^2}$$

if (sgn ≈ 0) then:

$$A = r^2 \cdot \arccos\left(1 - \frac{h}{r}\right) + (r - h) \cdot \sqrt{2rh - h^2}$$

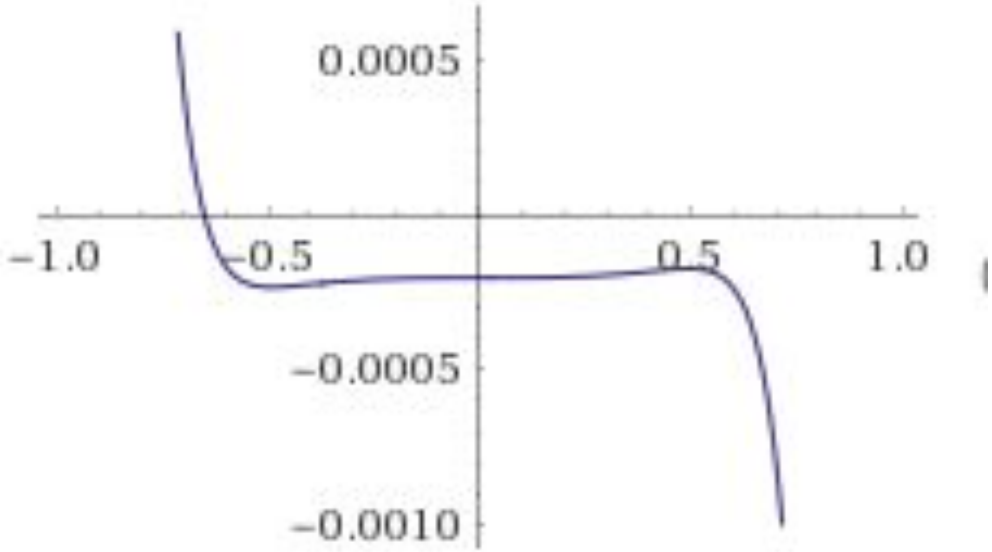
Umsetzung

Entwicklung eines Referenzprogrammes in Python

```
def calc(r, h, l):
    a = r**2 * math.acos(1-(h/r))-(r-h) * 
    math.sqrt(2*r*h-h**2)
    v = a * l
    print("Volumen: ",v)
```

Umsetzung

```
def acos_taylor(x):
    return 1.571 -
(x + 0.167 * x**3 +
0.075 * x**5 +
0.045 * x**7 + 0.03
* x**9)
```



Ergebnisse

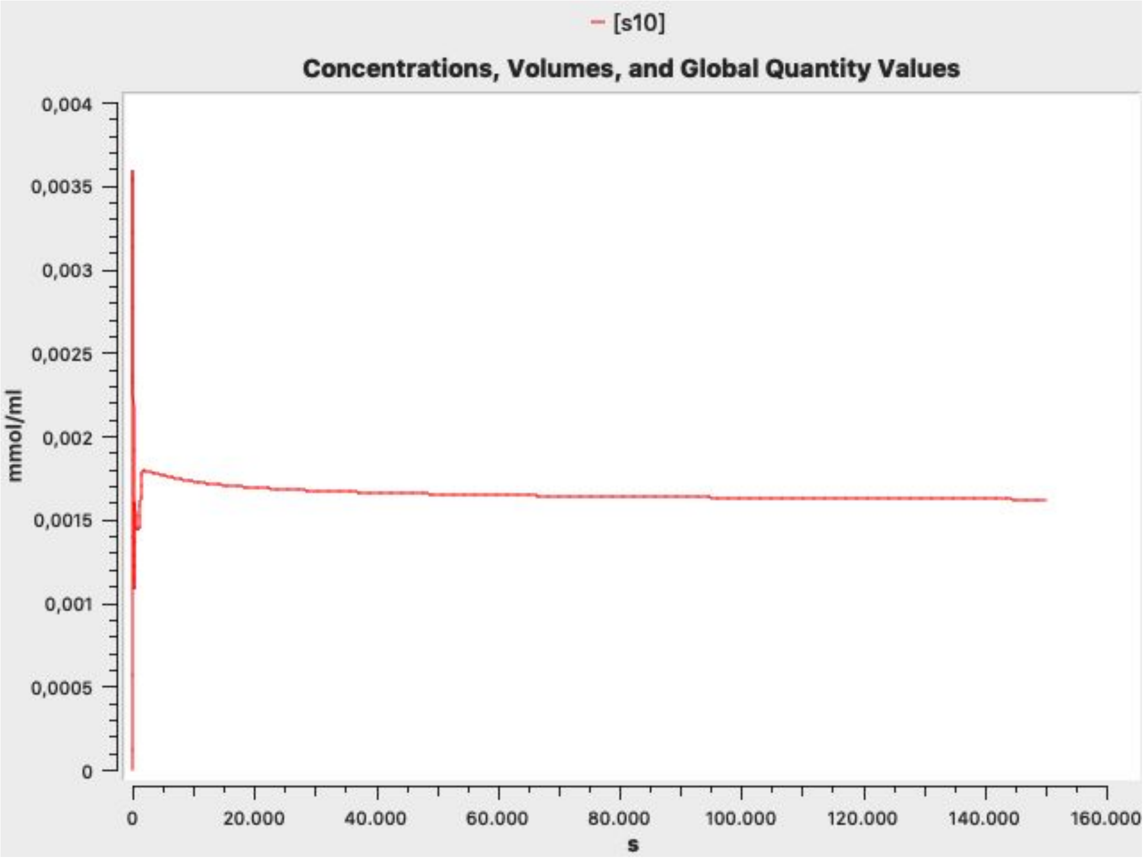
r = 0.1

h = 0.1

l = 0.1

Zeit bis 5% Abweichung: 26.000 Sekunden

Nach 150.000 Sekunden: 3,12 %



Ergebnisse

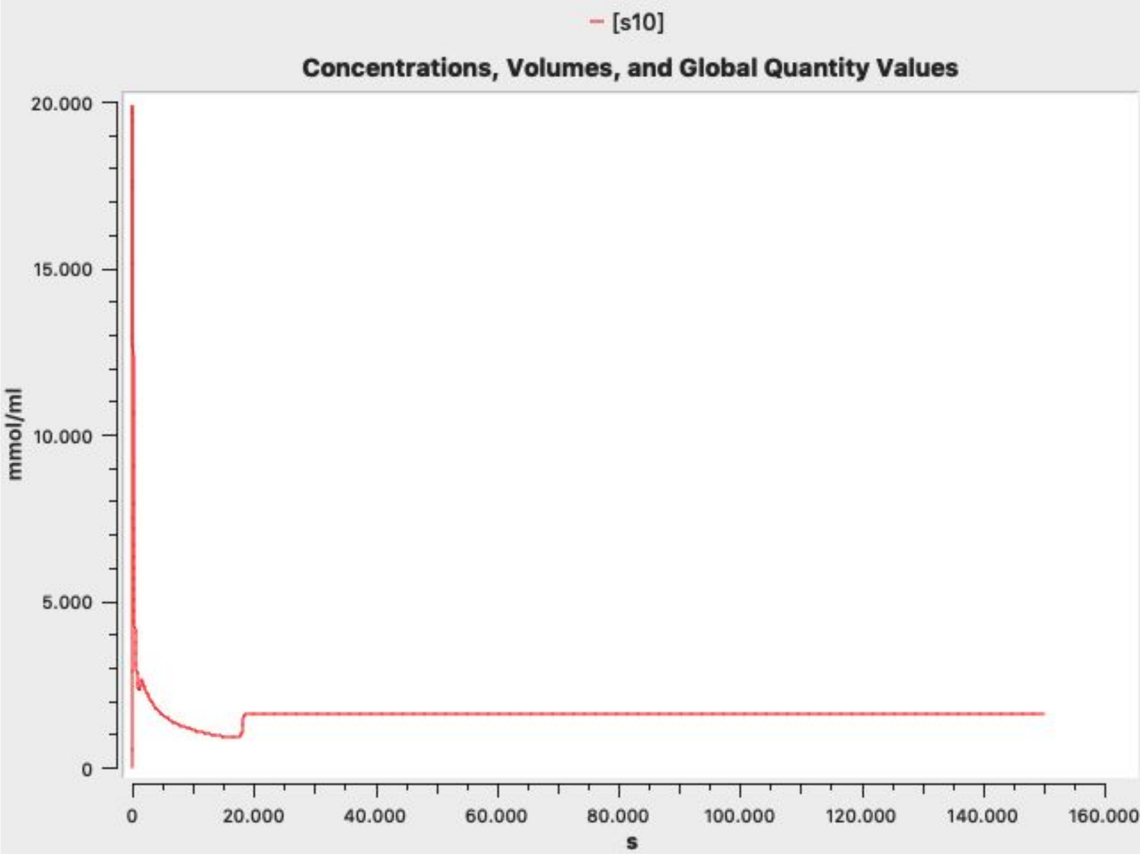
r = 10

h = 10

l = 10

Zeit bis 5% Abweichung: 18.000 Sekunden

Nach 150.000 Sekunden: 1,02 %



Ergebnisse

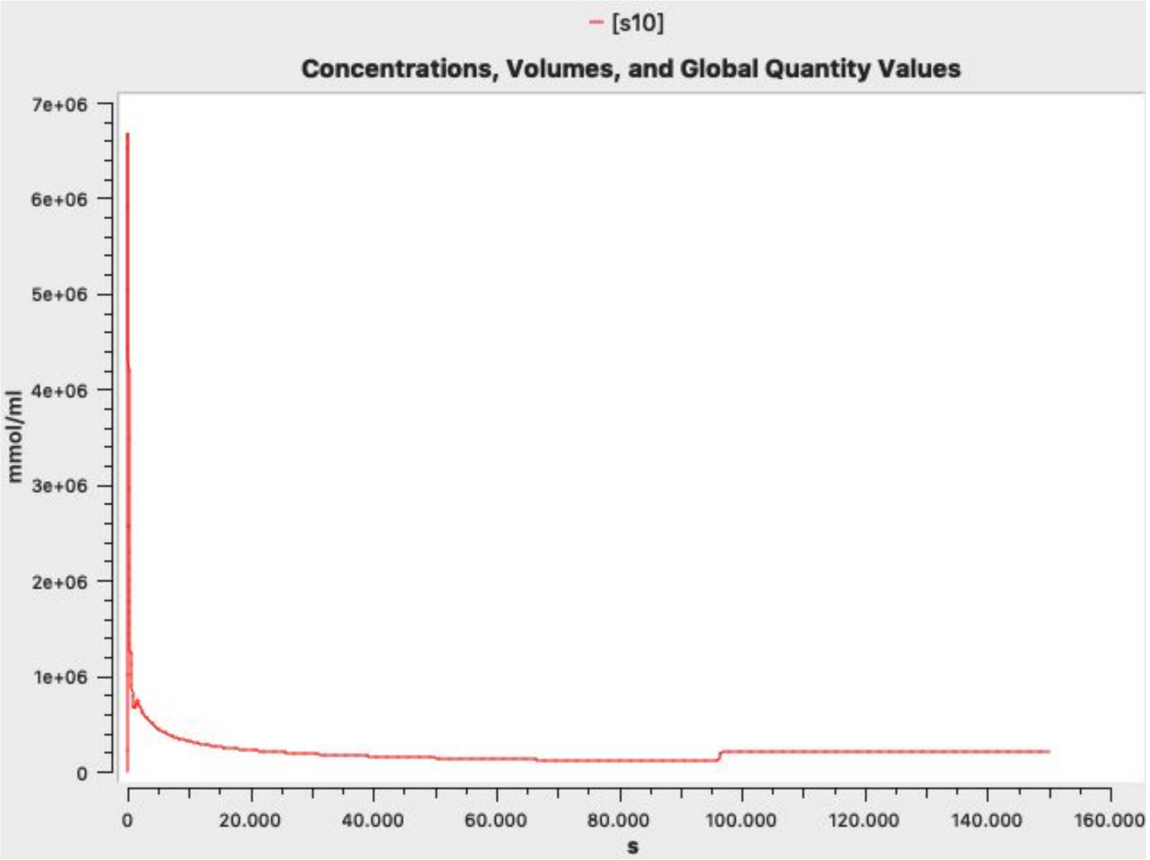
r = 50

h = 50

l = 50

Zeit bis 5% Abweichung:
96.000 Sekunden

Nach 150.000 Sekunden:
0.87 %



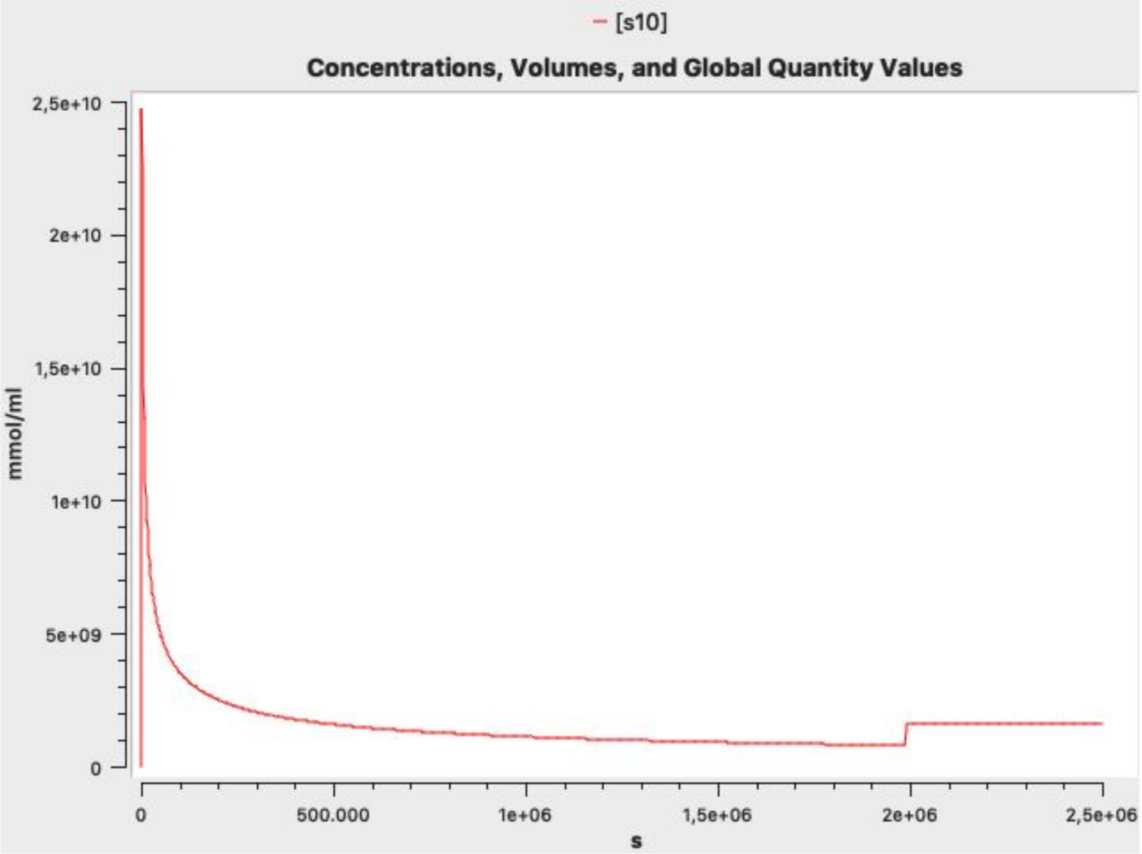
Ergebnisse

r = 1000

h = 1000

l = 1000

Nach 2 Mio. Sekunden: 0.23 %



Was ist der Unterschied zu Gleitkommaberechnungen?

Entwicklungsaufwand

- 97 Spezies
- 152 Reaktionen
- Zerlegung in 52 Gleichungen

Time Course Result

Save

	4	s5	s6	s7	s8	t1	s9	s14
1428	0	0.00334855...	0.00334855...	0.00334856...	0.00334857...	1.567447733	1574920.134	0.00167426.
1429	0	0.00334737...	0.00334738...	0.00334739...	0.00334740...	1.567448906	1574918.735	0.00167367..
1430	0	0.00334620...	0.00334621...	0.00334622...	0.00334623...	1.567450077	1574917.338	0.00167309.
1431	0	0.00334503...	0.00334504...	0.00334505...	0.00334506...	1.567451248	1574915.942	0.00167250.
1432	0	0.00334386...	0.00334387...	0.00334388...	0.00334389...	1.567452417	1574914.547	0.00167192..
1433	0	0.00334269...	0.00334270...	0.00334271...	0.00334272...	1.567453585	1574913.154	0.00167133..
1434	0	0.00334153...	0.00334154...	0.00334155...	0.00334156...	1.567454751	1574911.762	0.00167075..
1435	0	0.00334036...	0.00334037...	0.00334038...	0.00334039...	1.567455917	1574910.371	0.001670171
1436	0	0.00333920...	0.00333921...	0.00333922...	0.00333923...	1.567457081	1574908.982	0.00166958.
1437	0	0.00333803...	0.00333804...	0.00333805...	0.00333806...	1.567458244	1574907.595	0.00166900.
1438	0	0.00333687...	0.00333688...	0.00333689...	0.00333690...	1.567459406	1574906.209	0.00166842.
1439	0	0.00333571...	0.00333572...	0.00333573...	0.00333574...	1.567460566	1574904.824	0.00166784.
1440	0	0.00333455...	0.00333456...	0.00333457...	0.00333458...	1.567461725	1574903.44	0.00166726.
1441	0	0.00333340...	0.00333340...	0.00333341...	0.00333342...	1.567462883	1574902.059	0.00166668.
1442	0	0.00333224...	0.00333225...	0.00333226...	0.00333227...	1.56746404	1574900.678	0.00166610..
1443	0	0.00333108...	0.00333109...	0.00333110...	0.003331115...	1.567465196	1574899.299	0.00166553.
1444	0	0.00332993...	0.00332994...	0.00332995...	0.00332996...	1.567466351	1574897.921	0.00166495.
1445	0	0.00332878...	0.00332878...	0.00332879...	0.00332880...	1.567467504	1574896.545	0.00166437.
1446	0	0.00332762...	0.00332763...	0.00332764...	0.00332765...	1.567468656	1574895.17	0.00166380.
1447	0	0.00332647...	0.00332648...	0.00332649...	0.00332650...	1.567469807	1574893.796	0.00166322.
1448	0	0.00332532...	0.00332533...	0.00332534...	0.00332535...	1.567470957	1574892.424	0.00166265.
1449	0	0.00332417...	0.00332418...	0.00332419...	0.00332420...	1.567472105	1574891.053	0.00166207.
1450	0	0.00332303...	0.00332304...	0.00332304...	0.00332305...	1.567473253	1574889.684	0.00166150..
1451	0	0.00332188...	0.00332189...	0.00332190...	0.00332191...	1.567474399	1574888.316	0.00166093.
1452	0	0.00332074...	0.00332074...	0.00332075...	0.00332076...	1.567475544	1574886.95	0.00166035.
1453	0	0.00331959...	0.00331960...	0.00331961...	0.00331962...	1.567476688	1574885.584	0.00165978.
1454	0	0.00331845...	0.00331846...	0.00331847...	0.00331848...	1.56747783	1574884.221	0.00165921..
1455	0	0.00331731...	0.00331732...	0.00331733...	0.00331734...	1.567478972	1574882.858	0.00165864.
1456	0	0.00331617...	0.003316181...	0.00331619...	0.00331620...	1.567480112	1574881.497	0.00165807.
1457	0	0.00331503...	0.00331504...	0.00331505...	0.00331506...	1.567481251	1574880.137	0.00165750.
1458	0	0.00331389...	0.00331390...	0.00331391...	0.00331392...	1.567482389	1574878.779	0.00165693.
1459	0	0.00331275...	0.00331276...	0.00331277...	0.00331278...	1.567483526	1574877.422	0.00165636.
1460	0	0.00331162...	0.00331163...	0.00331164...	0.00331165...	1.567484661	1574876.066	0.00165579.
1461	0	0.00331048...	0.00331049...	0.00331050...	0.00331051...	1.567485795	1574874.712	0.00165523.
1462	0	0.00330935...	0.00330936...	0.00330937...	0.00330938...	1.567486929	1574873.359	0.00165466.
1463	0	0.00330822...	0.00330823...	0.00330824...	0.00330825...	1.567488061	1574872.008	0.00165409.
1464	0	0.00330709...	0.00330710...	0.003307111...	0.00330712...	1.567489192	1574870.658	0.00165353.

Fazit

- Umsetzung mit Analogcomputer möglich
- Entwicklungsaufwand deutlich höher als Programmierung in Hochsprachen
- Wahl der korrekten Betrachtungszeit nicht trivial
- COPASI ist keine IDE

Fragen?

Haben wir Euch noch im Boot?

Quellen

- Vorlesungsunterlagen Molekulare Algorithmen, T. Hinze, https://users.fmi.uni-jena.de/~hinze/molekulare-algorithmen-vorlesung1.pdf
- Projekt über Modellierungskonzept eines chemischen Analogcomputers, der auch negative Zahlen verarbeitet, H. Happe, http://cmc11.uni-jena.de/hinze/vortrag-happe.pdf
- https://de.wikipedia.org/wiki/Kreissegment
- https://nickhigham.wordpress.com/2017/08/31/how-fast-is-quadruple-precision-arithmetic/