Chemisches Analogcomputermodell zur Berechnung des nichtnegativen Teils einer Logarithmus-funktion $f(x) = \ln x$

Nafiseh Navabpour, Qiankuan Ye

Somersemester 2018

Einführung

Aufgabe Beschreibung

Entwicklung, Simulation und Auswertung eines chemischen Analogcomputermodells zur (näherungsweisen) Berechnung des nichtnegativen Teils einer Logarithmus-Funktion

$$f(x) = \ln(x) \text{ für } x \geq 1$$

- Gesucht ist ein Reaktionsnetzwerk sowie die zugehörige Massenwirkungskinetik einschließlich geeigneter Belegung der Ratenkonstanten.
- Die initiale Stoffkonzentration einer Eingabespezies den Argumentwert **X** übernimmt.
- Ein Taylorpolynom mindestens vom Grad 6 verwendet werden, das an der Nullstelle der Logarithmus-Funktion entwickelt wird.

Überblick

- Mathematische Erklärung
- Chemische Modellierung
- Ausführung

Mathematische Erklärung

Die Taylorreihe

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)} X_0}{n!} (X - X_0)^n$$

Die Taylorreihe

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}X_0}{n!}(X - X_0)^n$$

Bis zum Grad 6:

$$f(x) =$$
$$f(x_0) + f'(x_0)\frac{(x-x_0)}{1!} + f''(x_0)\frac{(x-x_0)^2}{2!} + f'''(x_0)\frac{(x-x_0)^3}{3!} +$$
$$f''''(x_0)\frac{(x-x_0)^4}{4!} + f'''''(x_0)\frac{(x-x_0)^5}{5!} + f''''''(x_0)\frac{(x-x_0)^6}{6!}$$

Um die Nullstelle zu finden soll $\ln(x) = 0$
Dafür X=1
Dann $X_0 = 1$

$$f(x) = 0 + \frac{1}{1!}(x-1)^1 + \frac{-1}{2!}(x-1)^2 + \frac{2}{3!}(x-1)^3 + \frac{-3}{4!}(x-1)^4 + \frac{4}{5!}(x-1)^5 + \frac{-5}{6!}(x-1)^6$$

Berechnung mit Mathematica

In[1]:= `Series[Log[x], {x, 1, 6}]`

Out[1]= $(x-1)-\frac{1}{2}(x-1)^2+\frac{1}{3}(x-1)^3-\frac{1}{4}(x-1)^4+\frac{1}{5}(x-1)^5-\frac{1}{6}(x-1)^6+O[x-1]^7$

In[2]:= `Normal[%]`

Out[2]= $-1-\frac{1}{2}(-1+x)^2+\frac{1}{3}(-1+x)^3-\frac{1}{4}(-1+x)^4+\frac{1}{5}(-1+x)^5-\frac{1}{6}(-1+x)^6+x$

In[3]:= $\mathbf{Simplify}\left[-1-\frac{1}{2}(-1+x)^2+\frac{1}{3}(-1+x)^3-\frac{1}{4}(-1+x)^4+\frac{1}{5}(-1+x)^5-\frac{1}{6}(-1+x)^6+x\right]$

Out[3]= $\frac{1}{60}\left(-147+360x-450x^2+400x^3-225x^4+72x^5-10x^6\right)$

In[5]:= $f[x\_] := \frac{1}{60}\left(-147+360x-450x^2+400x^3-225x^4+72x^5-10x^6\right)$

In[7]:= `f[1]`

Out[7]= 0

Ersetzen der Werte in die Taylor-Reihe gibt uns die folgende Formel:

$$f(x) = (x-1) - \frac{(x-1)^2}{2} + \frac{(x-1)^3}{3} - \frac{(x-1)^4}{4} + \frac{(x-1)^5}{5} - \frac{(x-1)^6}{6}$$

$$f(x) = -\frac{49}{20} + 6x - \frac{15}{2}x^2 + \frac{20}{3}x^3 - \frac{15}{4}x^4 + \frac{6}{5}x^5 - \frac{1}{6}x^6$$

Beweis

x = 1 ist zu beweisen für f(x) = ln(x)

$$f(x) = -\frac{49}{20} + 6x - \frac{15}{2}x^2 + \frac{20}{3}x^3 - \frac{15}{4}x^4 + \frac{6}{5}x^5 - \frac{1}{6}x^6$$

$$f(1) = -\frac{49}{20} + 6 - \frac{15}{2} + \frac{20}{3} - \frac{15}{4} + \frac{6}{5} - \frac{1}{6} = 0$$

Mathematische Modellierung

$$f(x) = -\frac{49}{20} + 6x - \frac{15}{2}x^2 + \frac{20}{3}x^3 - \frac{15}{4}x^4 + \frac{6}{5}x^5 - \frac{1}{6}x^6$$

$$f(x) = -\frac{49}{20}$$

$$+\frac{6}{1}x$$

$$-\frac{15}{2}x^2$$

$$+\frac{20}{3}x^3$$

$$-\frac{15}{4}x^4$$

$$+\frac{6}{5}x^5$$

$$-\frac{1}{6}x^6$$

Aufspalten der Formel

$$
\begin{array}{l|r}
C_1 = -\frac{49}{20} & f(x) = -\frac{49}{20} \\
C_2 = +\frac{6}{1}x & +\frac{6}{1}x \\
C_3 = -\frac{15}{2}x^2 & -\frac{15}{2}x^2 \\
C_4 = +\frac{20}{3}x^3 & +\frac{20}{3}x^3 \\
C_5 = -\frac{15}{4}x^4 & -\frac{15}{4}x^4 \\
C_6 = +\frac{6}{5}x^5 & +\frac{6}{5}x^5 \\
C_7 = -\frac{1}{6}x^6 & -\frac{1}{6}x^6
\end{array}
$$

Für jedes C_i in Formel gilt

$$C_i = \alpha_i x^{(i-1)}$$

deshalb

$$f(x) = -C_1 + C_2 - C_3 + C_4 - C_5 + C_6 - C_7$$

$$f(x) = -C_1 + C_2 - C_3 + C_4 - C_5 + C_6 - C_7$$

Wenn

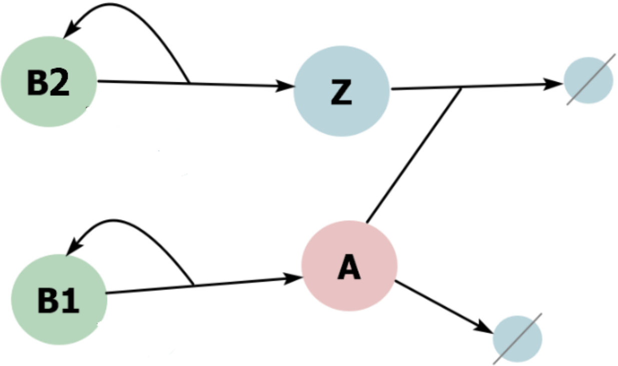
$$B1 = C_2 + C_4 + C_6$$

$$B2 = C_1 + C_3 + C_5 + C_7$$

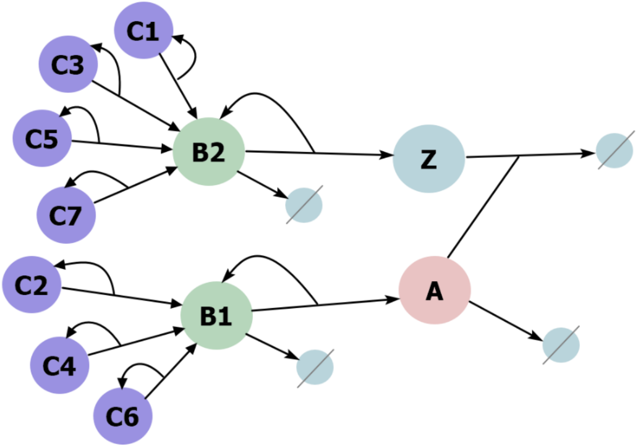
Dann gilt:

$$f(x) = B1 - B2$$

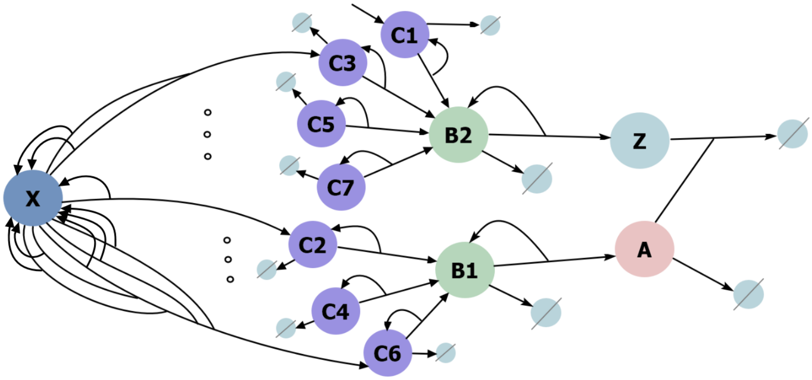
Chemische Modellierung



$$f(x) = B1 - B2 = A$$



$$B1 = C_2 + C_4 + C_6$$
$$B2 = C_1 + C_3 + C_5 + C_7$$



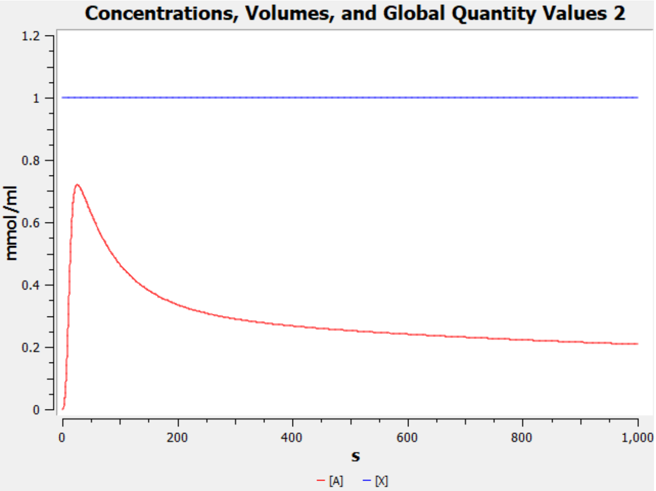
$$Ci = \alpha_i X^{(i-1)}$$

$$X \longrightarrow C$$

Ausführung des Modells

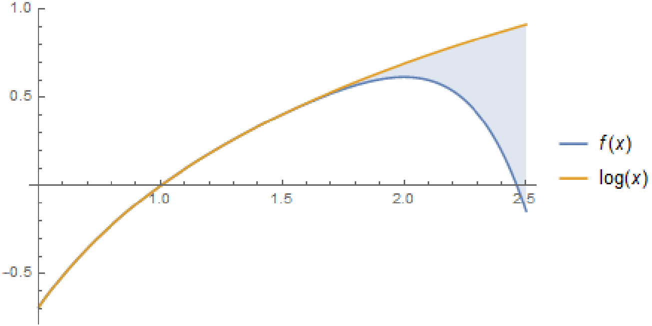
```
Kinetic Parameters
    reaction_XC2          nan mmol/(ml*s)
        k1      0.06 1/s
    reaction_XC3          nan mmol/(ml*s)
        k1      0.15 ml/(mmol*s)
    reaction_C1 zu Nichts             nan mmol/(ml*s)
        k1      0.2 1/s
    reaction_C1           nan mmol/(ml*s)
        v       0.49 mmol/(ml*s)
    reaction_C3 zu Nichts             nan mmol/(ml*s)
        k1      0.02 1/s
    reaction_C2 zu Nichts             nan mmol/(ml*s)
        k1      0.01 1/s
    reaction_XC4          nan mmol/(ml*s)
        k1      0.2 ml²/(mmol²*s)
    reaction_C4 zu Nichts             nan mmol/(ml*s)
        k1      0.03 1/s
    reaction_XC5          nan mmol/(ml*s)
        k1      0.15 ml³/(mmol³*s)
    reaction_XC6          nan mmol/(ml*s)
        k1      0.06 ml^4/(mmol^4*s)
    reaction_XC7          nan mmol/(ml*s)
        k1      0.01 ml^5/(mmol^5*s)
    reaction_C5 zu Nichts             nan mmol/(ml*s)
        k1      0.04 1/s
    reaction_C6 zu Nichts             nan mmol/(ml*s)
        k1      0.05 1/s
    reaction_C7 zu Nichts             nan mmol/(ml*s)
        k1      0.06 1/s
```

```
reaction_C1B2              nan mmol/(ml*s)
    k1      0.1 1/s
reactoin_C3B2              nan mmol/(ml*s)
    k1      0.1 1/s
reaction_C5B2              nan mmol/(ml*s)
    k1      0.1 1/s
reaction_C7B2              nan mmol/(ml*s)
    k1      0.1 1/s
reaction_B2 zu Nichts              nan mmol/(ml*s)
    k1      0.1 1/s
reaction_C2B1              nan mmol/(ml*s)
    k1      0.1 1/s
reaction_C4 B1             nan mmol/(ml*s)
    k1      0.1 1/s
reaction_C6 B1             nan mmol/(ml*s)
    k1      0.1 1/s
reaction_B1 zu Nichts              nan mmol/(ml*s)
    k1      0.1 1/s
reaction_B1 A              nan mmol/(ml*s)
    k1      0.1 1/s
reaction_B2 Z              nan mmol/(ml*s)
    k1      0.1 1/s
reaction_A+Z zu Nichts             nan mmol/(ml*s)
    k1      0.1 ml/(mmol*s)
reaction_A zu Nichts           nan mmol/(ml*s)
    k1      0.1 1/s
```



Verlauf von A für $X_0 = 1$

Verlauf von f(x) und ln(x)



Genauigkeit

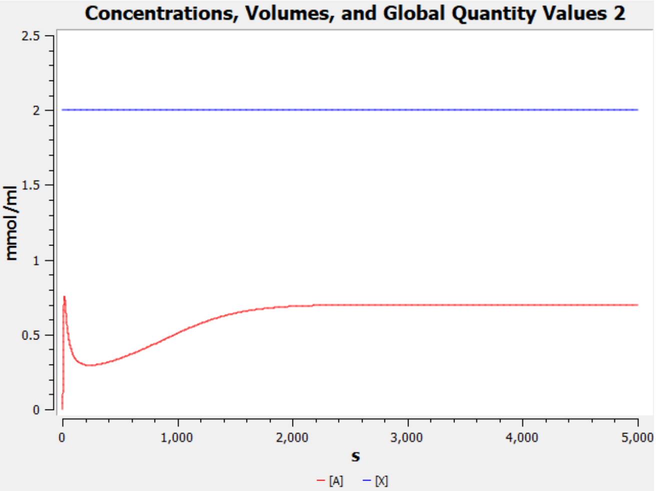
x	f(x)	log(x)	Fehler (%)
1.1	0.0953102	0.0953102	$1.37841 * 10^{-7}$
1.2	0.18232	0.182322	$8.53873 * 10^{-6}$
1.3	0.262339	0.262364	0.0000943896
1.4	0.336299	0.336472	0.000515852
1.5	0.404688	0.405465	0.00191782
1.6	0.467376	0.470004	0.00559066
1.7	0.523314	0.530628	0.0137838
1.8	0.570112	0.587787	0.0300699
1.9	0.603499	0.641854	0.0597556

Erweitere Modelle für $X_0 = 2$

$$f(x) = -\frac{7}{4} + \frac{3}{1}x - \frac{15}{8}x^2 + \frac{5}{6}x^3 - \frac{15}{64}x^4 + \frac{3}{80}x^5 - \frac{1}{384}x^6$$

$$f(2) \approx 0.693$$

$C_1 = -\frac{7}{4}$	$f(x) = -\frac{7}{4}$
$C_2 = +\frac{3}{1}x$	$+\frac{3}{1}x$
$C_3 = -\frac{15}{8}x^2$	$-\frac{15}{8}x^2$
$C_4 = +\frac{5}{6}x^3$	$+\frac{5}{6}x^3$
$C_5 = -\frac{15}{64}x^4$	$-\frac{15}{64}x^4$
$C_6 = +\frac{3}{80}x^5$	$+\frac{3}{80}x^5$
$C_7 = -\frac{1}{384}x^6$	$-\frac{1}{384}x^6$



Verlauf von A für $X_0 = 2$

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!