

Chemisches Rechnen
Kugelsegment
Volumenberechnung
Oana-Iuliana Popescu

Gliederung

1. Problemstellung
2. Annäherung von elementaren Operationen mit chemischen Reaktionen
3. Implementierung
4. Ergebnisse

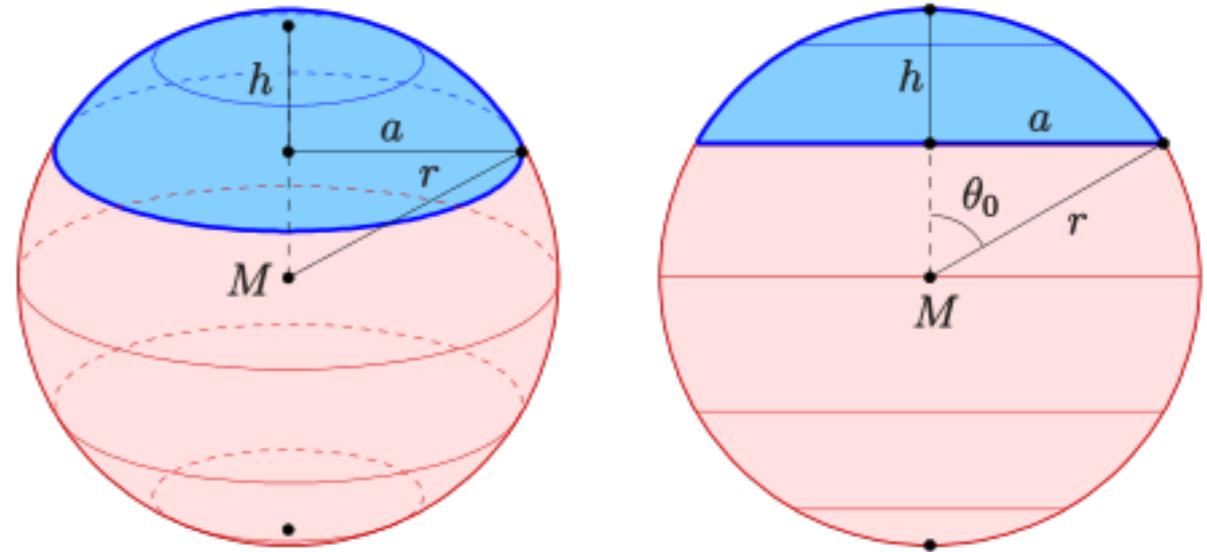
Gliederung

1. Problemstellung
2. Annäherung von elementaren Operationen mit chemischen Reaktionen
3. Implementierung
4. Ergebnisse

Kugelsegment Volumen

- Gegeben: Radius r , Höhe h

$$0 \leq h \leq 2r$$



- Ziel: Approximation der Volumen des Kugelsegments mittels chemischen Rechnens

- Volumen:

$$V = \frac{\pi}{3} \cdot h^2 \cdot (3r - h)$$

Herleitung der Formel

- Satz von Pythagoras:

$$(r - h)^2 + y^2 = r^2$$

$$y = \sqrt{h^2 - 2rh}$$

- Volumen von Rotationskörpern

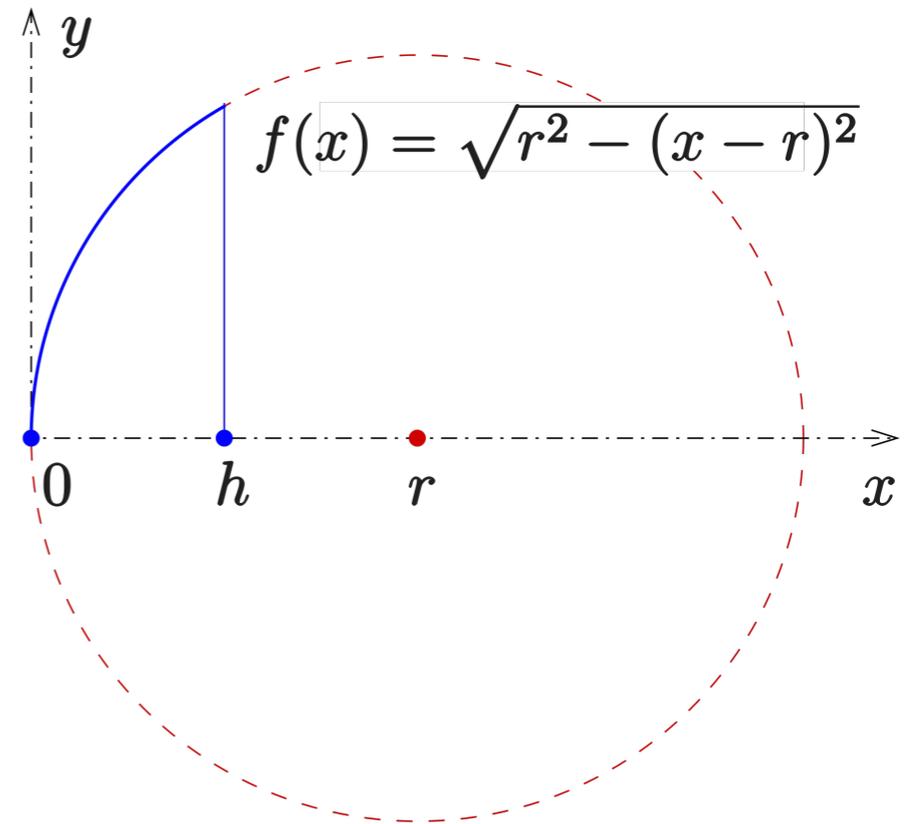
$$x = h$$

$$V = \pi \cdot \int_a^b (f(x))^2 dx$$

- Einsetzen von y :

$$V = \pi \int_0^h (2rx - x^2) dx = \pi \int_0^h 2rx dx + \pi \int_0^h x^2 dx$$

$$V = \pi rh^2 - \frac{\pi}{3}h^3 = \frac{\pi}{3}h^2(3r - h)$$



Gliederung

1. Problemstellung
2. Annäherung von elementaren Operationen mit chemischen Reaktionen
3. Implementierung
4. Ergebnisse

Nötige Operationen

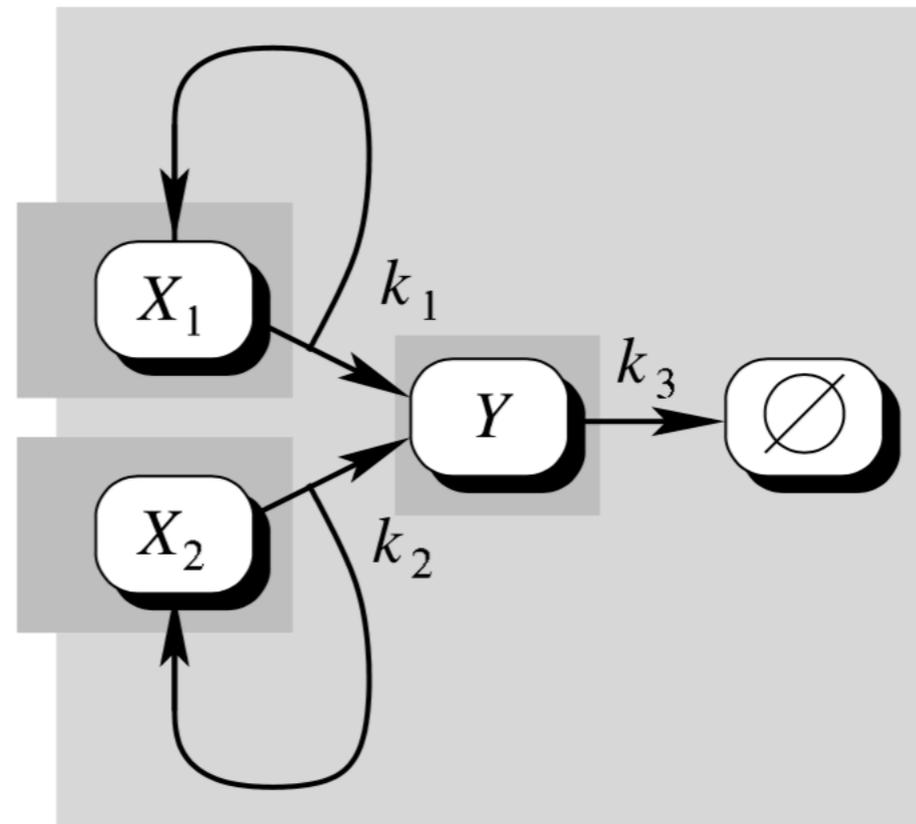
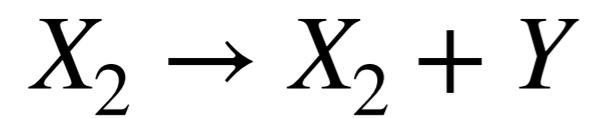
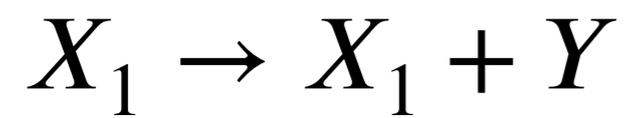
Für die Berechnung sind folgende elementare Operationen notwendig:

- Addition
- Nicht-negative Subtraktion
- Multiplikation
- Division
- Boolesche Operation IF-THEN

Diese können durch den Stoffkonzentrationswechsel innerhalb von Reaktionen approximiert werden.

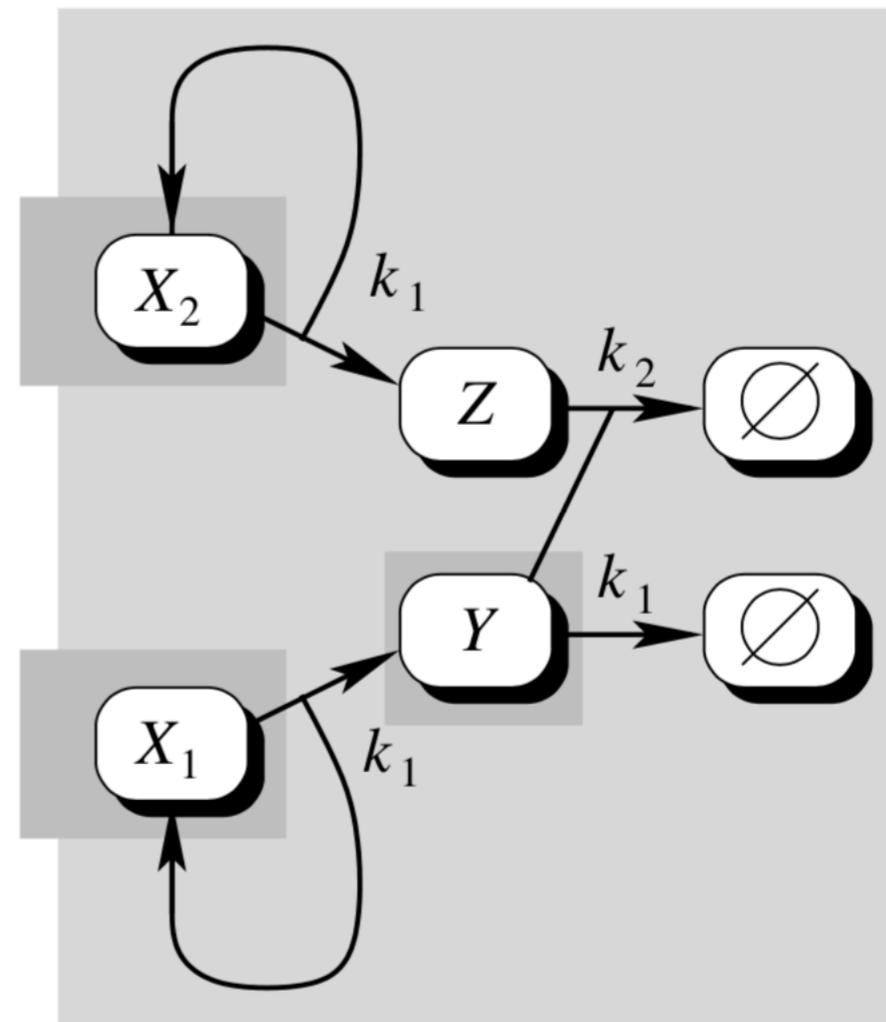
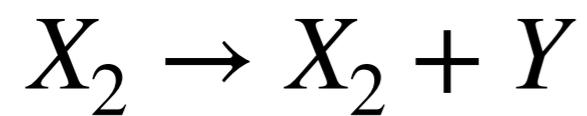
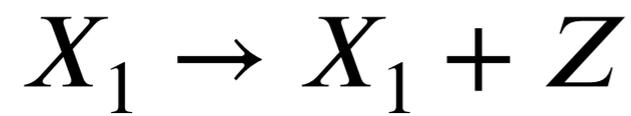
Addition

- Chemische Reaktionen:



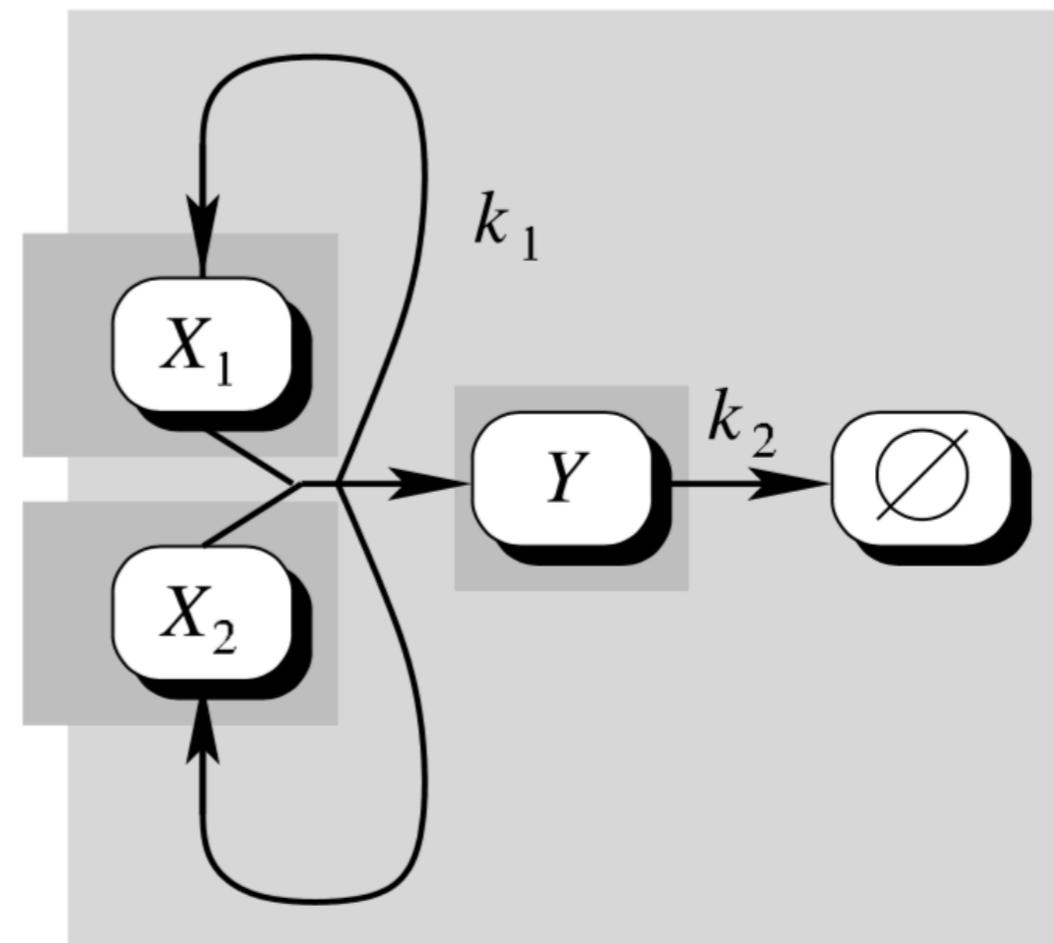
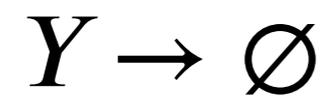
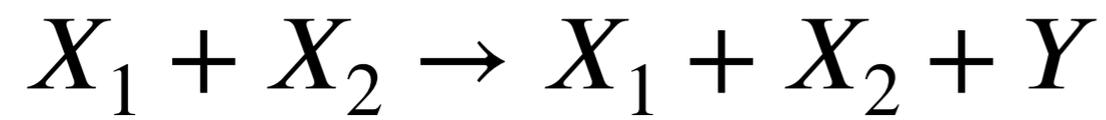
Nicht-negative Subtraktion

- Chemische Reaktionen:



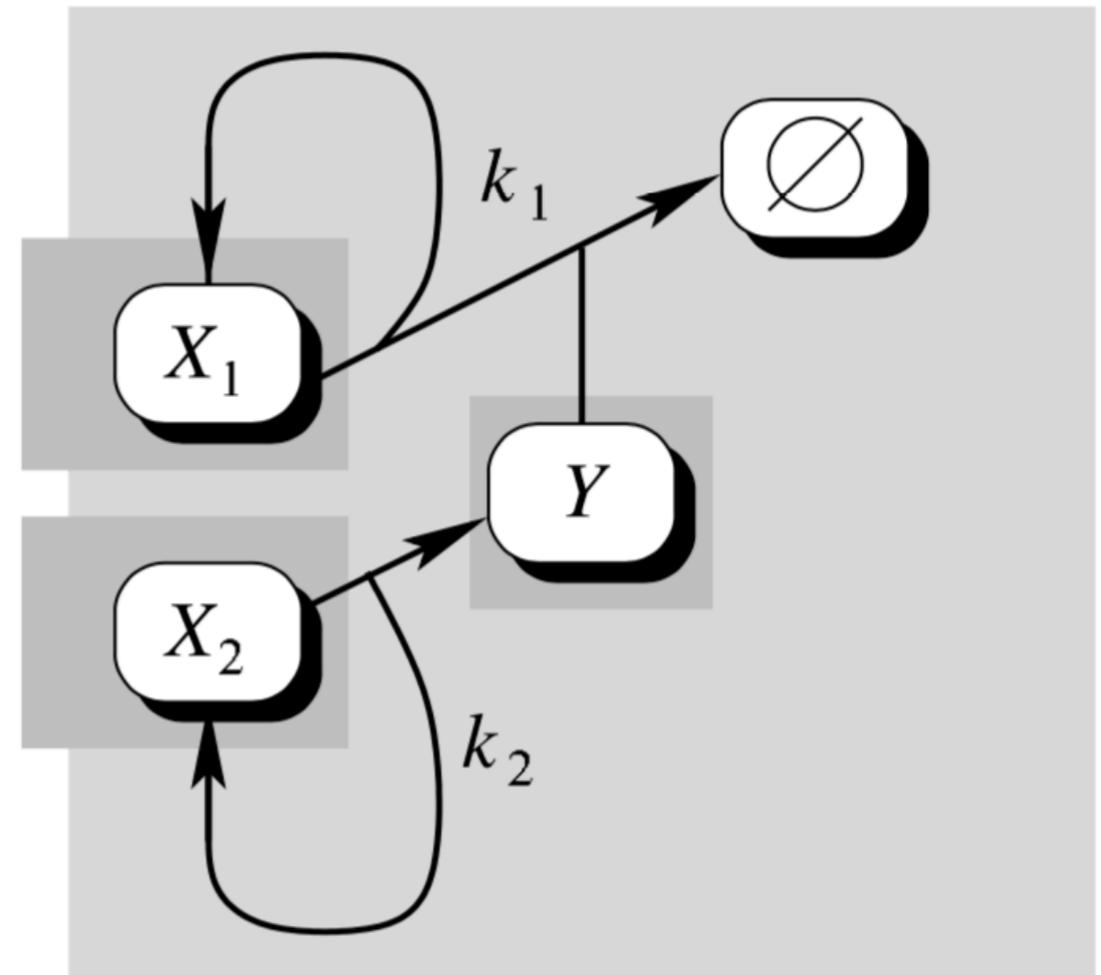
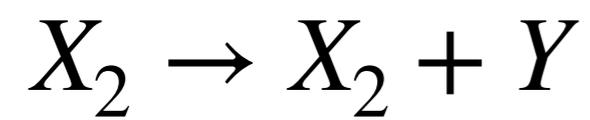
Multiplikation

- Chemische Reaktionen:



Division

- Chemische Reaktionen:



IF-THEN

- Chemische Reaktionen:

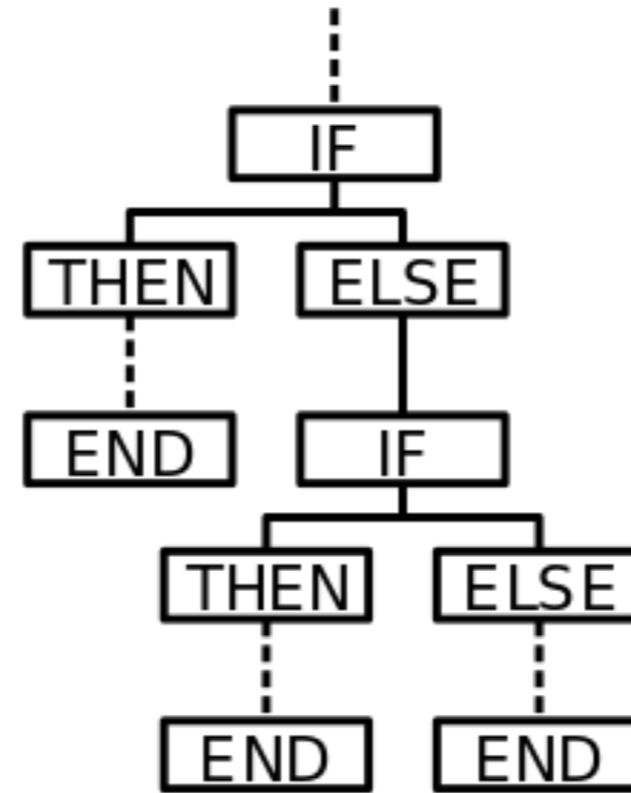
$$A = 1 - B$$

$$A \cdot X_1 + B \cdot X_2$$

- In diesem Fall:

$$A = \frac{2r - h}{(2r - h) + (h - 2r)} \in \{0,1\}$$

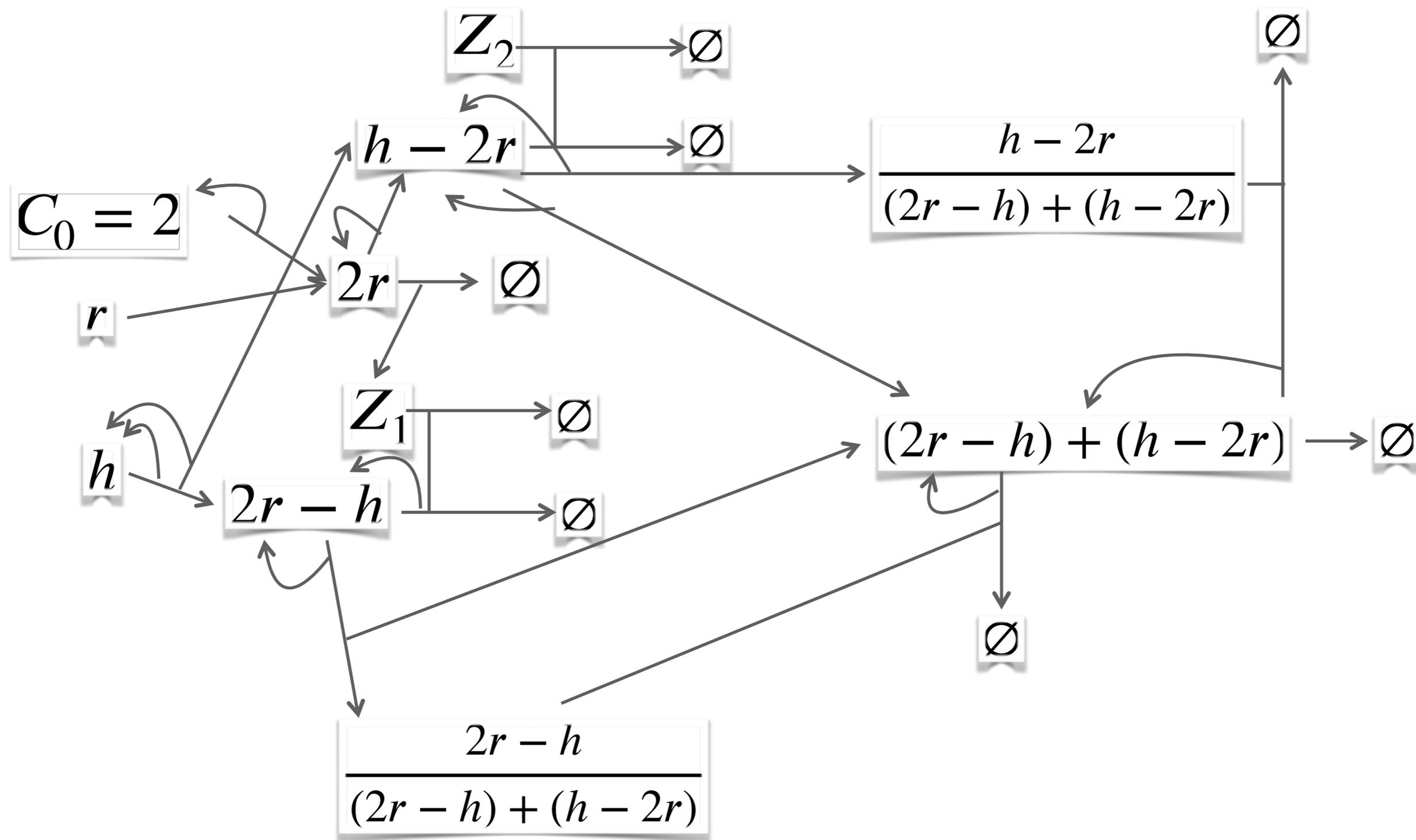
$$B = \frac{h - 2r}{(2r - h) + (h - 2r)} \in \{0,1\}$$



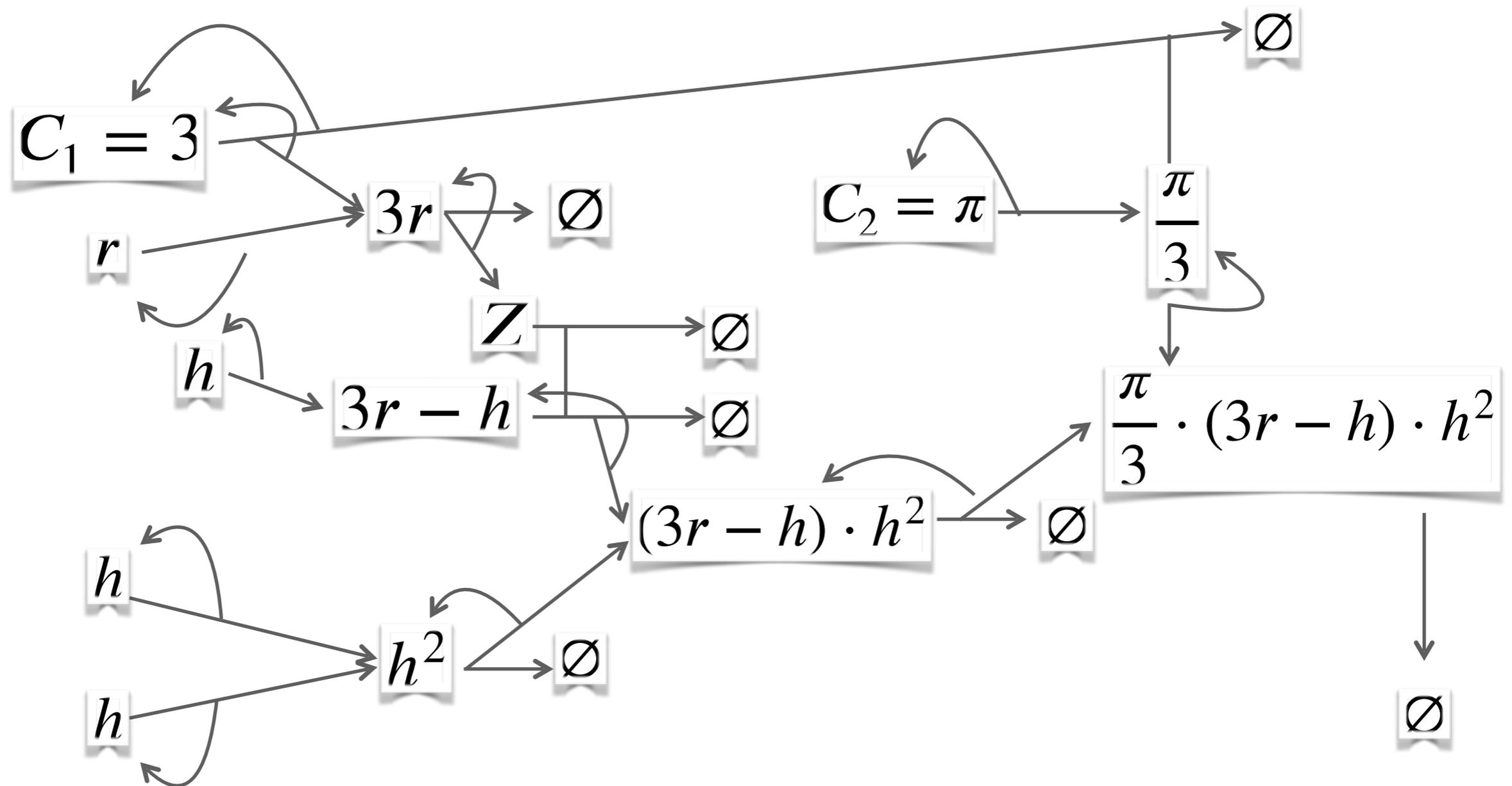
Gliederung

1. Problemstellung
2. Annäherung von elementaren Operationen mit chemischen Reaktionen
3. Implementierung
4. Ergebnisse

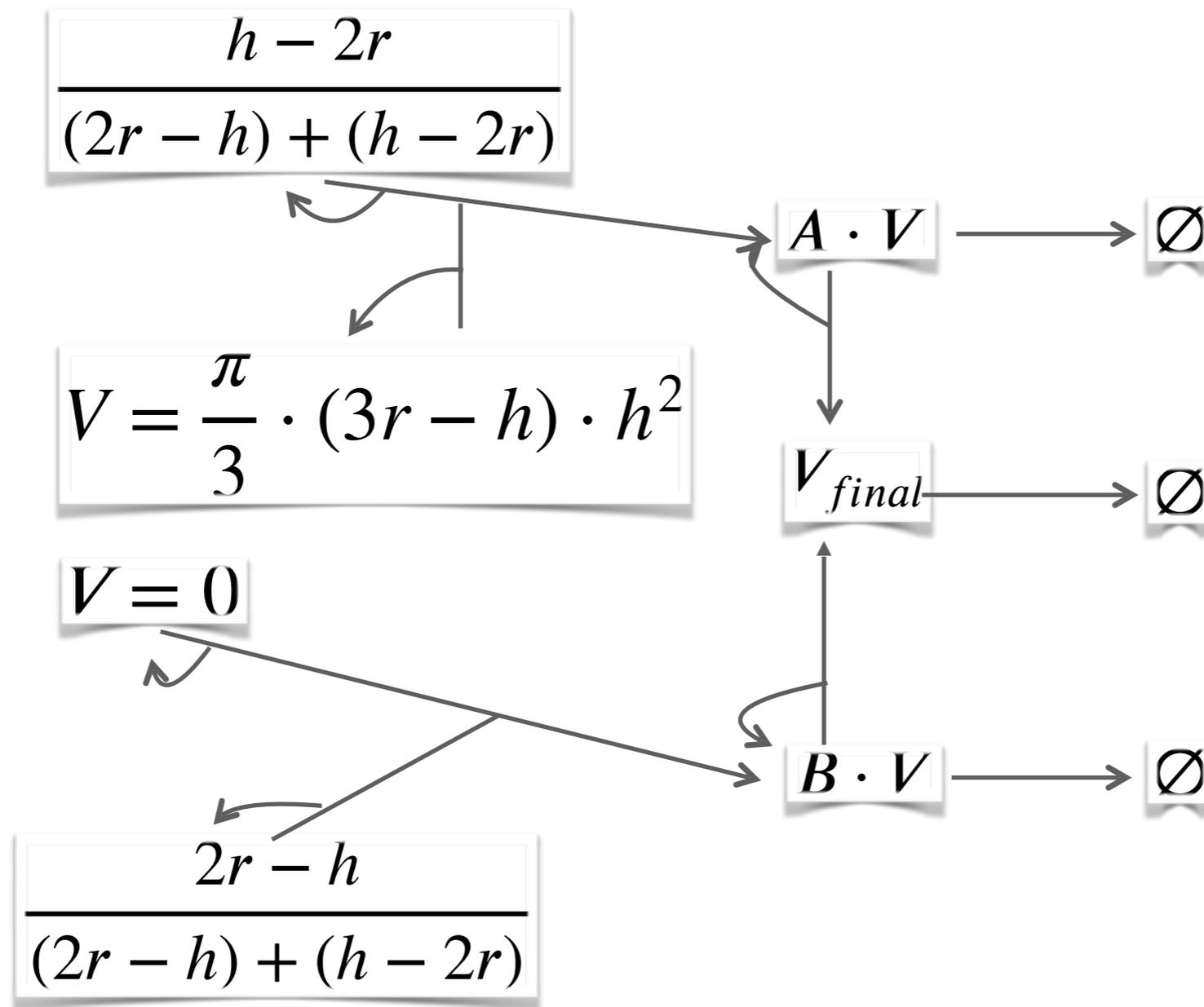
Chemisches Modell: IF-THEN



Chemisches Modell: Berechnung



Chemisches Modell: Verknüpfung



Implementierung

- Implementierung mit COPASI [2]
- Insgesamt 24 Spezies und 38 Reaktionen
- Simulation: LSODA [3]

Gliederung

1. Problemstellung
2. Annäherung von elementaren Operationen mit chemischen Reaktionen
3. Implementierung
4. Ergebnisse

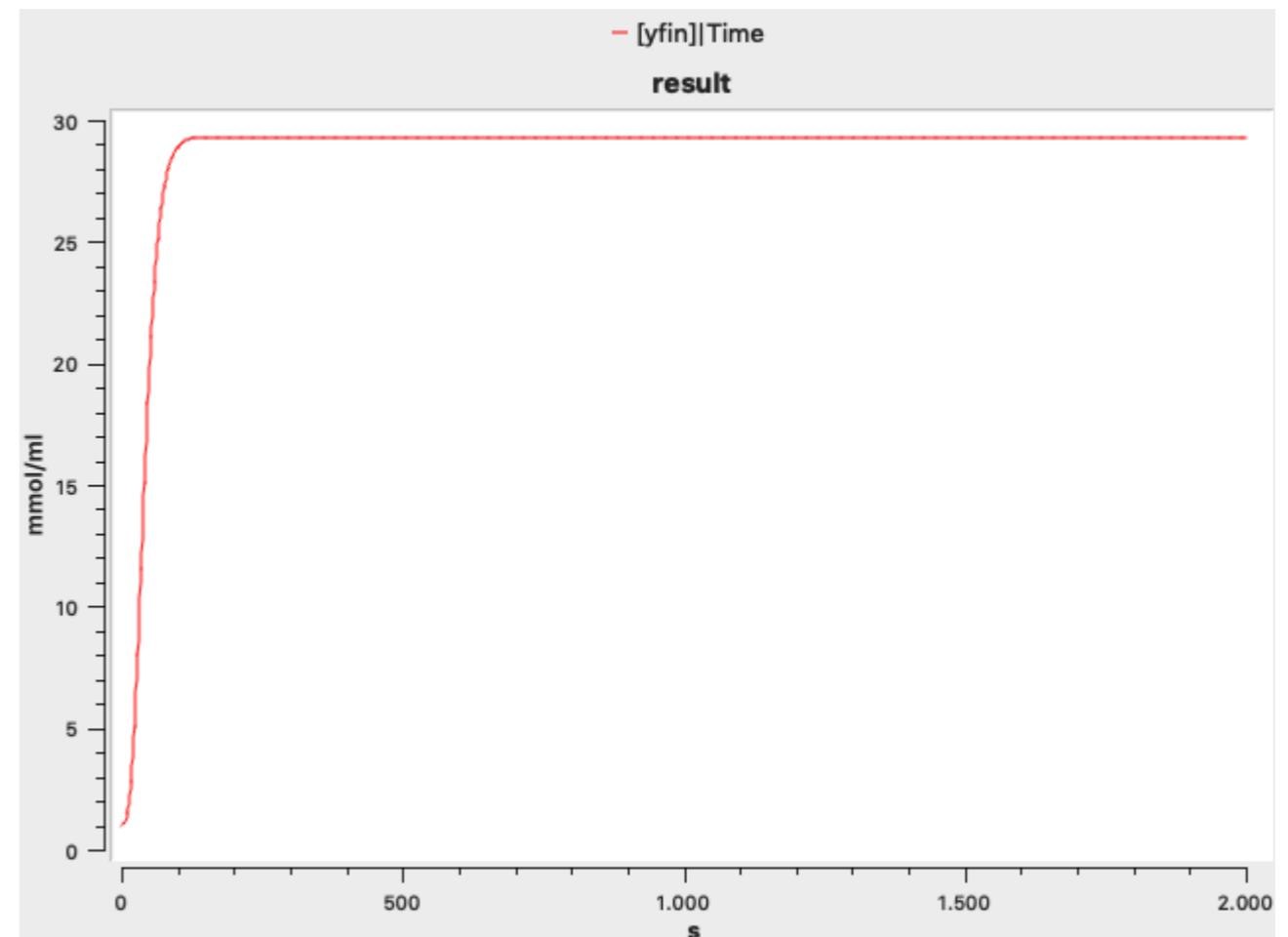
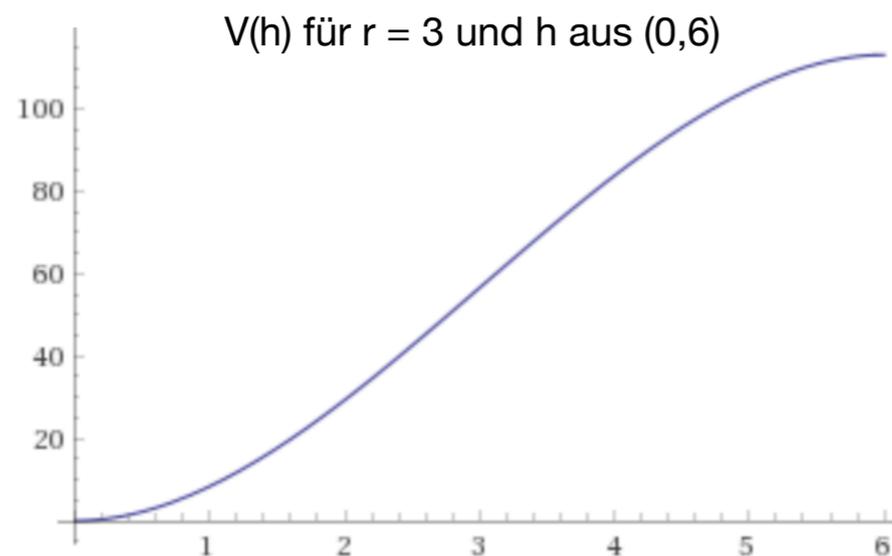
Ergebnisse

$$r = 3$$

$$h = 2$$

$$V = \frac{3.14}{3} \cdot 2^2 \cdot (3 \cdot 3 - 2) = 29.306$$

- Schritte bis Konvergenz: 200



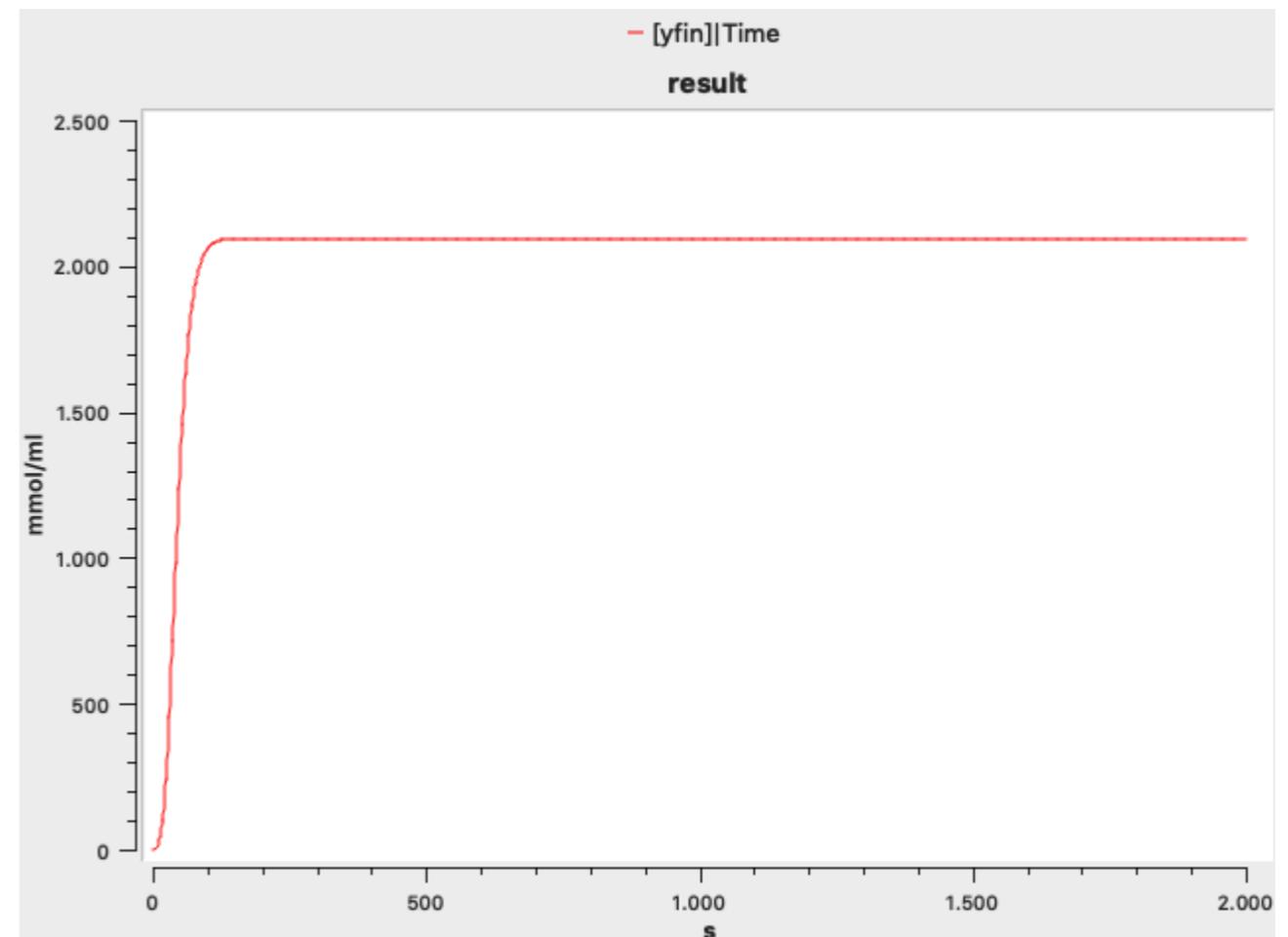
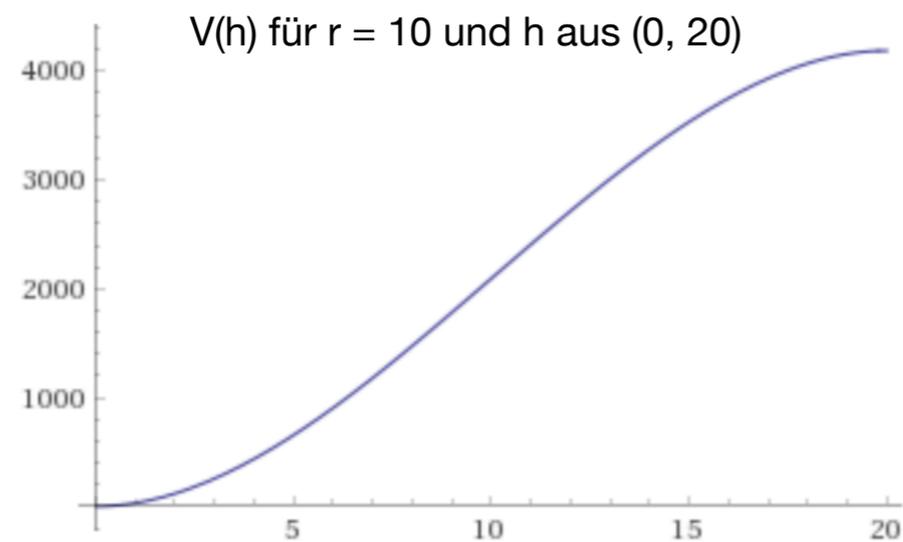
Ergebnisse

$$r = 10$$

$$h = 10$$

$$V = \frac{3.14}{3} \cdot 10^2 \cdot (3 \cdot 10 - 10) = 2093,333$$

- Schritte bis Konvergenz: 200



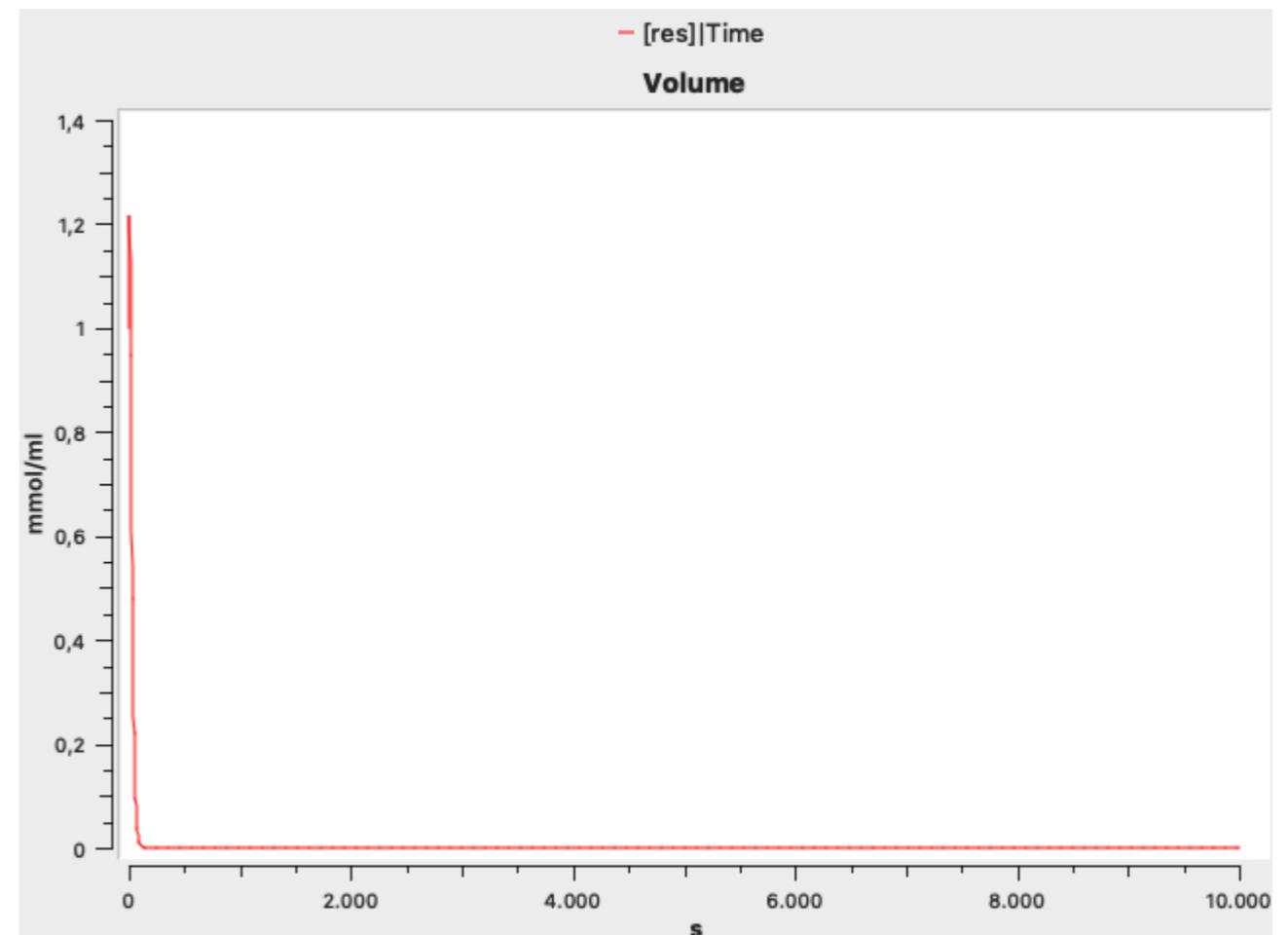
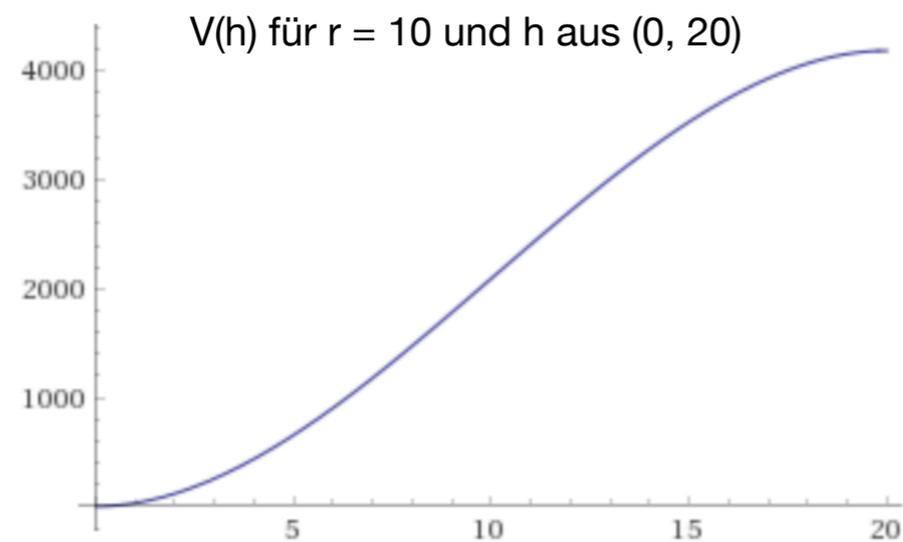
Ergebnisse

$$r = 10$$

$$h = 0.0001$$

$$V = \frac{3.14}{3} \cdot 0.0001^2 \cdot (3 \cdot 10 - 0.0001) \approx 0$$

- Schritte bis Konvergenz: 500



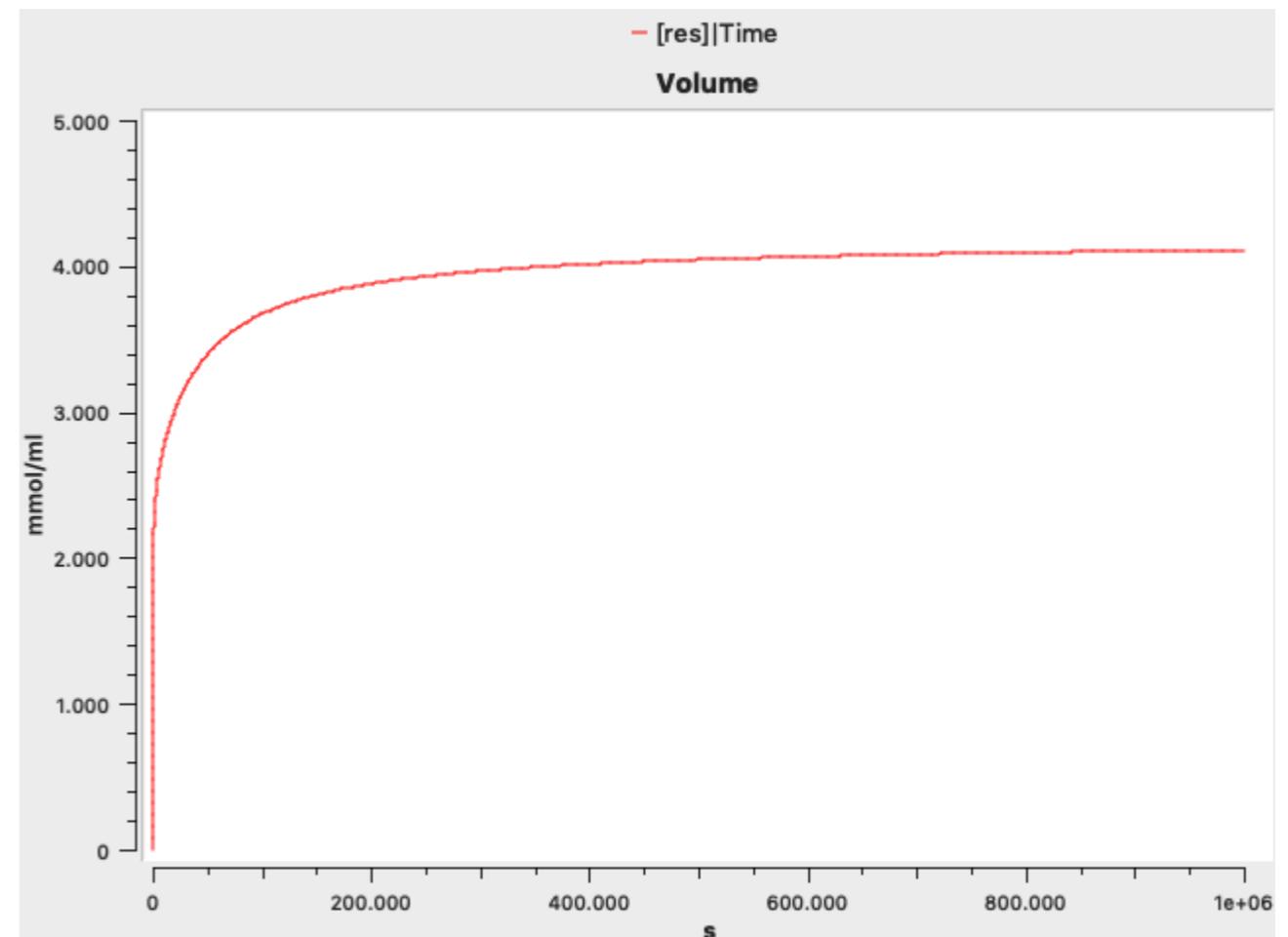
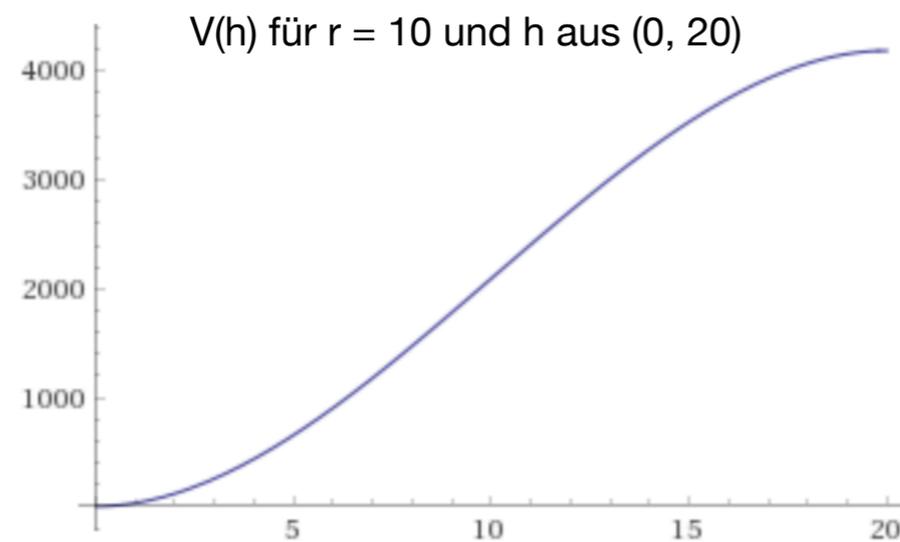
Ergebnisse

$$r = 10$$

$$h = 19.9$$

$$V = \frac{3.14}{3} \cdot 19.9^2 \cdot (3 \cdot 10 - 19.9) = 4186.353$$

- Schritte bis Konvergenz: über 800000



Referenzen

[1] Computer der Natur, Thomas Hinze, 2013. ISBN 978-87-403-0378-0.

[2] Hoops S., Sahle S., Gauges R., Lee C., Pahle J., Simus N., Singhal M., Xu L., Mendes P. and Kummer U. (2006). **COPASI: a COmplex PATHway Simulator**. *Bioinformatics* 22, 3067-74.

[3] A. C. Hindmarsh, "ODEPACK, A Systematized Collection of ODE Solvers," IMACS Transactions on Scientific Computation, Vol 1., pp. 55-64, 1983.