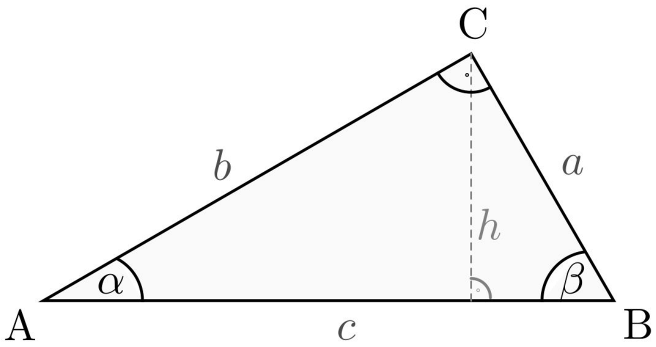
Entwicklung, Simulation und Auswertung eines chemischen Analogcomputermodells zur (näherungsweisen) Berechnung des Flächeninhalts eines beliebigen Dreiecks



https://www.grund-wissen.de/mathematik/elementare-geometrie/planimetrie/dreiecke.html

Henrik Voigt
01.07.2019

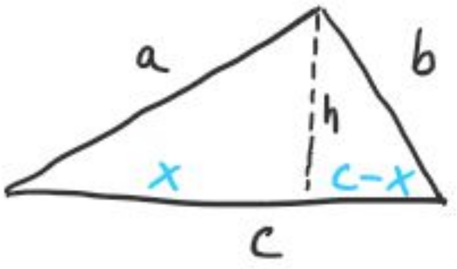
Gliederung

1. Herleitung Flächeninhaltsformel
2. Massenwirkungskinetik
3. Reaktionsnetzwerk
4. Simulation
5. Auswertung

1. Herleitung Flächeninhaltsformel

<u>Satz des Heron:</u>

bekannt Allgemeines Dreieck: $A = 1/2 \cdot c \cdot h$



linkes Teildreieck: $x^2 + h^2 = a^2$

rechtes Teildreieck: $(c - x)^2 + h^2 = b^2$

$$h^2 = a^2 - x^2$$

$$(c - x)^2 + a^2 - x^2 = b^2$$

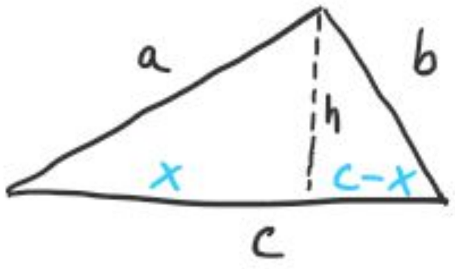
Herauslösen von x:

$$c^2 - 2cx + x^2 + a^2 - x^2 = b^2$$

$$c^2 + a^2 = b^2 + 2cx$$

$$c^2 + a^2 - b^2 = 2cx$$

$$(c^2 + a^2 - b^2)/2c = x$$



Einsetzen in Ausgangsgleichung:

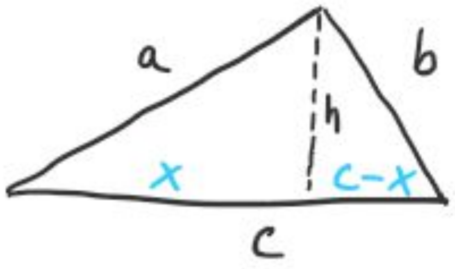
$$h^2 = a^2 - x^2$$

$$h^2 = a^2 - ((c^2 + a^2 - b^2)/2c)^2$$

$$h = \sqrt{a^2 - \left(\frac{c^2 + a^2 - b^2}{2c}\right)^2}$$

Einsetzen in Flächeninhaltsgleichung des Allgemeinen Dreiecks:

$$A = \frac{1}{2} \cdot c \cdot \sqrt{a^2 - \left(\frac{c^2 + a^2 - b^2}{2c}\right)^2}$$

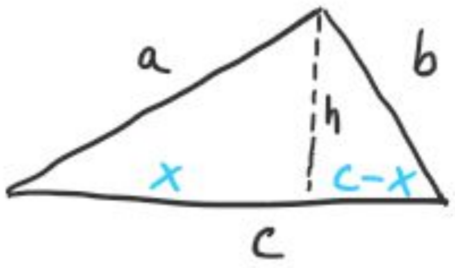


Umformen:

$$\frac{1}{2} \cdot c = \sqrt{\frac{c^2}{4}}$$

$$A = \frac{1}{2} \cdot c \cdot \sqrt{a^2 - \left(\frac{c^2+a^2-b^2}{2c}\right)^2}$$

Betrachte speziell den Term unter der Wurzel:



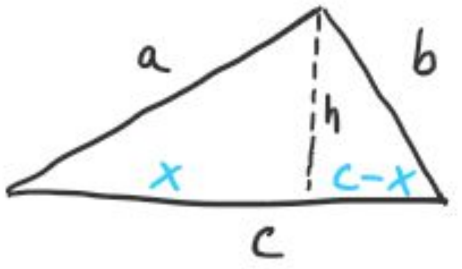
$$\sqrt{\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot} \qquad (1)$$

$$\frac{c^2}{4} \cdot \left(a^2 - \left(\frac{c^2+a^2-b^2}{2c} \right)^2 \right)$$

$$\frac{c^2 \cdot a^2}{4} - \frac{c^2}{4} \cdot \frac{\left(c^2+a^2-b^2\right)^2}{4 \cdot c^2}$$

$$\frac{c^2 \cdot a^2}{4} - \frac{\left(c^2+a^2-b^2\right)^2}{4^2}$$

$$\left(\frac{c \cdot a}{2}\right)^2 - \left(\frac{c^2+a^2-b^2}{4}\right)^2$$



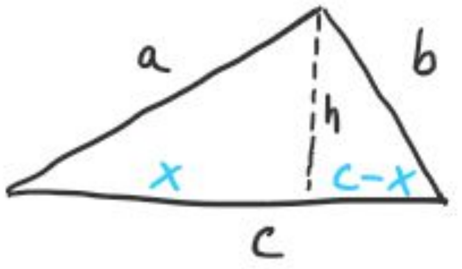
besondere Form:

$$x^2 - y^2 = (x+y)(x-y)$$

$$\left(\frac{c\cdot a}{2}+\frac{c^2+a^2-b^2}{4}\right)\left(\frac{c\cdot a}{2}-\frac{c^2+a^2-b^2}{4}\right)$$

Hauptnenner:

$$\left(\frac{c^2+2\cdot c\cdot a+a^2-b^2}{4}\right)\left(\frac{b^2-(c^2-2ca+a^2)}{4}\right)$$



Faktorisieren:

$$\left(\frac{(c+a)^2-b^2}{4}\right)\left(\frac{b^2-(c-a)^2}{4}\right)$$

erneut besondere Form:

$$x^2-y^2=(x+y)(x-y)$$

$$\left(\frac{(c+a+b)(c+a-b)}{4}\right)\left(\frac{(b+c-a)(b-c+a)}{4}\right)$$

$$\left(\frac{(c+a+b)(c+a-b)}{2\cdot 2}\right)\left(\frac{(b+c-a)(b-c+a)}{2\cdot 2}\right)$$

$$\left(\frac{a+b+c}{2}\right)\left(\frac{a+b+c-2b}{2}\right)\left(\frac{a+b+c-2a}{2}\right)\left(\frac{a+b+c-2c}{2}\right)$$

Substitution:

$$S = \frac{a+b+c}{2}$$

$$S \cdot (S - b) \cdot (S - a) \cdot (S - c)$$

Betrachten des Gesamtterms mit Wurzel aus (1):

$$A = \sqrt{S \cdot (S - b) \cdot (S - a) \cdot (S - c)}$$

Einsetzen und Umformen ergibt:

$$A = \frac{\sqrt{(a+b+c)(a+b-c)(b+c-a)(c+a-b)}}{4}$$

2. Massenwirkungskinetik

benötigte Rechenoperationen

- Addition
- Nichtnegative Subtraktion
- Multiplikation
- Quadratwurzel

2. Massenwirkungskinetik

Additionen (Bsp. erste Klammer)

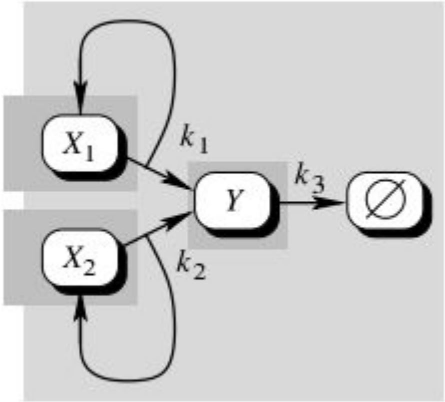
$$A = \frac{\sqrt{(a+b+c)(a+b-c)(b+c-a)(c+a-b)}}{4}$$

A -> A + ADD10
B -> B + ADD10
ADD10 -> W10

$\longrightarrow$ **A + B**

ADD10 -> ADD10 + ADD20
C -> C + ADD20
ADD20 -> W20

$\longrightarrow$ **(A + B) + C**



Analog für die weiteren Additionen in den Klammern.

2. Massenwirkungskinetik

Subtraktion (Bsp. zweite Klammer)

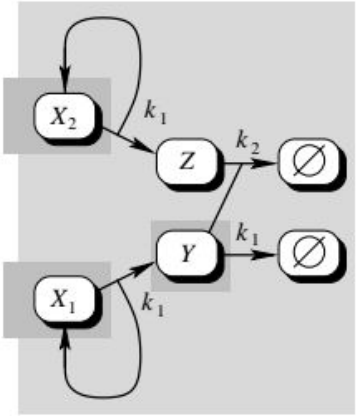
$$A = \frac{\sqrt{(a+b+c)(a+b-c)(b+c-a)(c+a-b)}}{4}$$

A -> A + ADD11
B -> B + ADD11
ADD11 -> W11

A + B

ADD11 -> ADD11 + SUB21
C -> C + Z21
Z21 + SUB21 -> W21
SUB21 -> W21

(A + B) - C



Analog für die weiteren Subtraktionen in den Klammern.

2. Massenwirkungskinetik

Multiplikation (Bsp. Klammern)

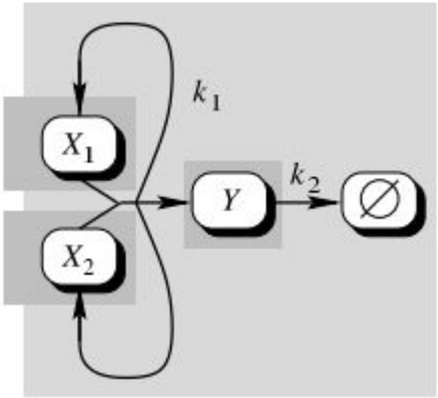
$$A = \frac{\sqrt{(a+b+c)(a+b-c)(b+c-a)(c+a-b)}}{4}$$

ADD20 + SUB21 -> ADD20 + SUB21 + MUL30
MUL30 -> W30

$\longrightarrow$ **(A+B+C)*(A+B-C)**

SUB22 + SUB24 -> SUB22 + SUB24 + MUL31
MUL31 -> W31

$\longrightarrow$ **(B+C-A)*(C+B-A)**



Analog für die weiteren Multiplikationen in den Klammern.

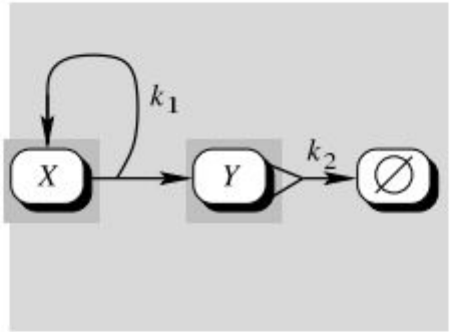
2. Massenwirkungskinetik

Quadratwurzel

$$A = \frac{\sqrt{(a+b+c)(a+b-c)(b+c-a)(c+a-b)}}{4}$$

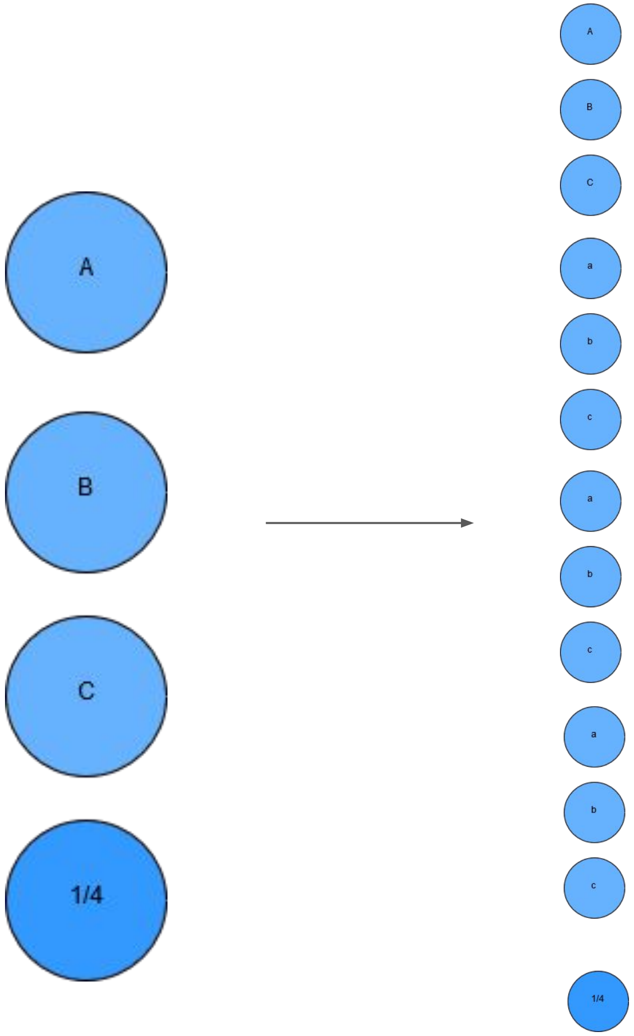
MUL40 -> MUL40 + SQRT50
2 * SQRT50 -> W50

$$\longrightarrow \quad \sqrt{\cdot\;\cdot\;\cdot\;\cdot\;\cdot}$$



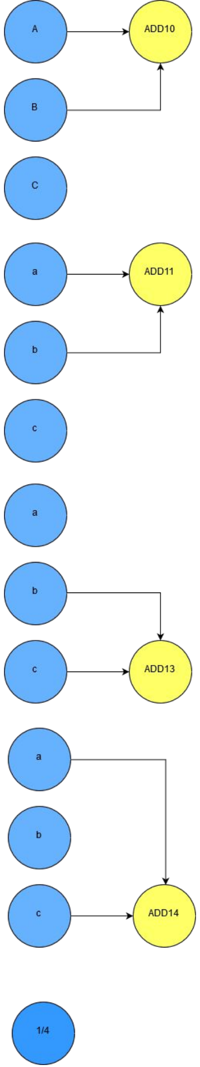
3. Reaktionsnetzwerk

$$A = \frac{\sqrt{(a+b+c)(a+b-c)(b+c-a)(c+a-b)}}{4}$$



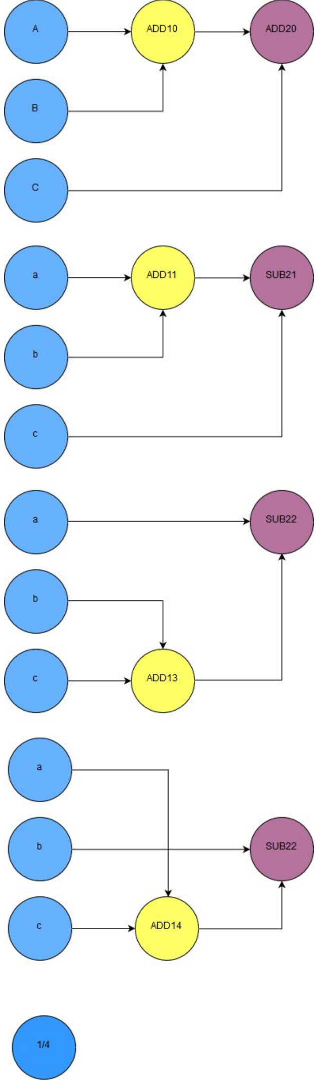
3. Reaktionsnetzwerk

$$A = \frac{\sqrt{(a+b+c)(a+b-c)(b+c-a)(c+a-b)}}{4}$$



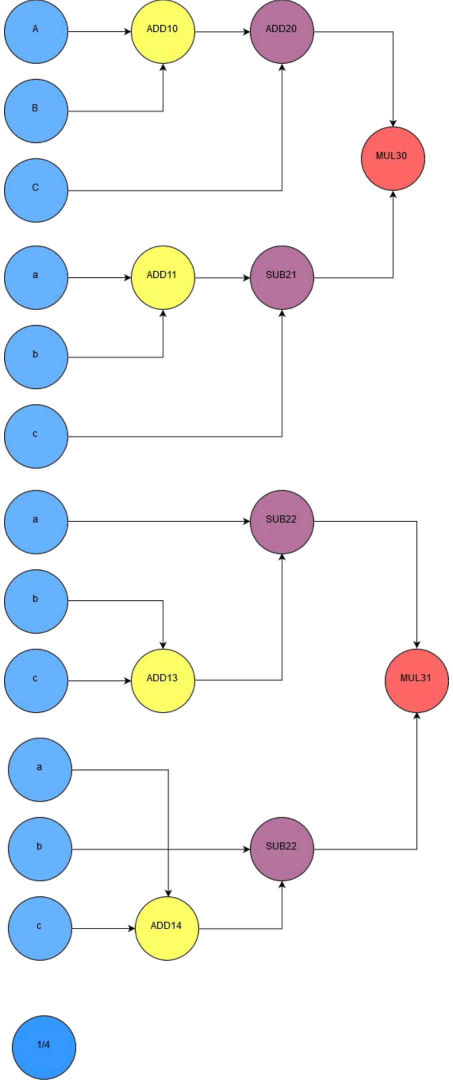
3. Reaktionsnetzwerk

$$A = \frac{\sqrt{(a+b+c)(a+b-c)(b+c-a)(c+a-b)}}{4}$$



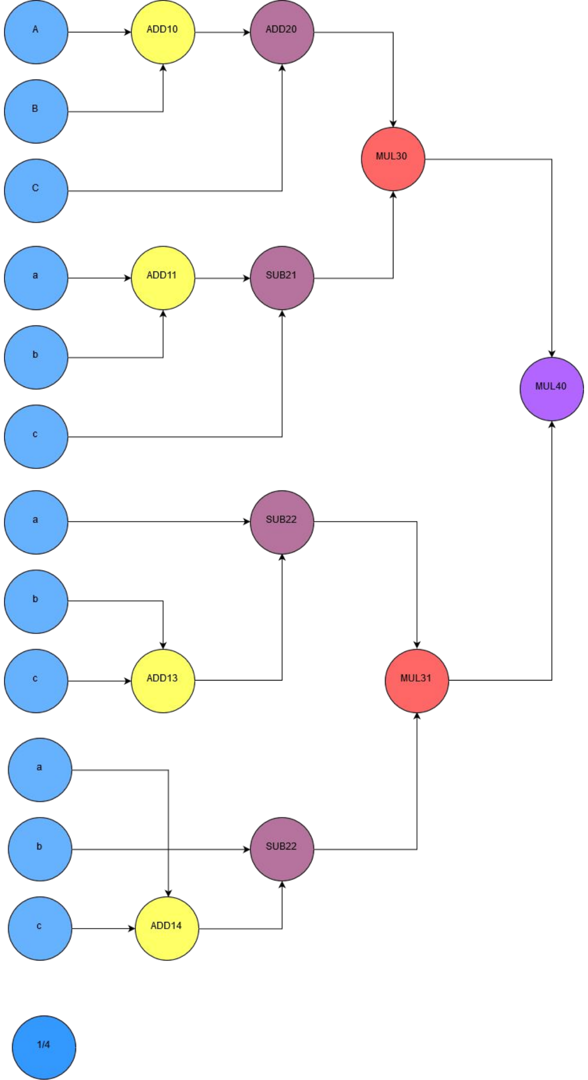
3. Reaktionsnetzwerk

$$A = \frac{\sqrt{(a+b+c)(a+b-c)(b+c-a)(c+a-b)}}{4}$$



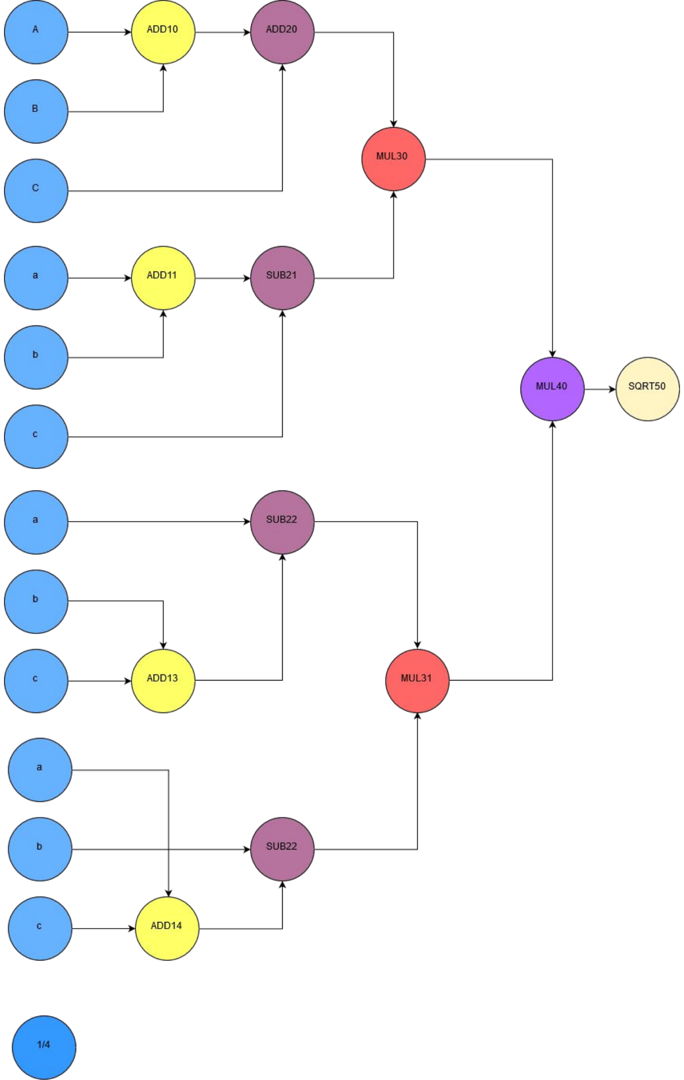
3. Reaktionsnetzwerk

$$A = \frac{\sqrt{(a+b+c)(a+b-c)(b+c-a)(c+a-b)}}{4}$$



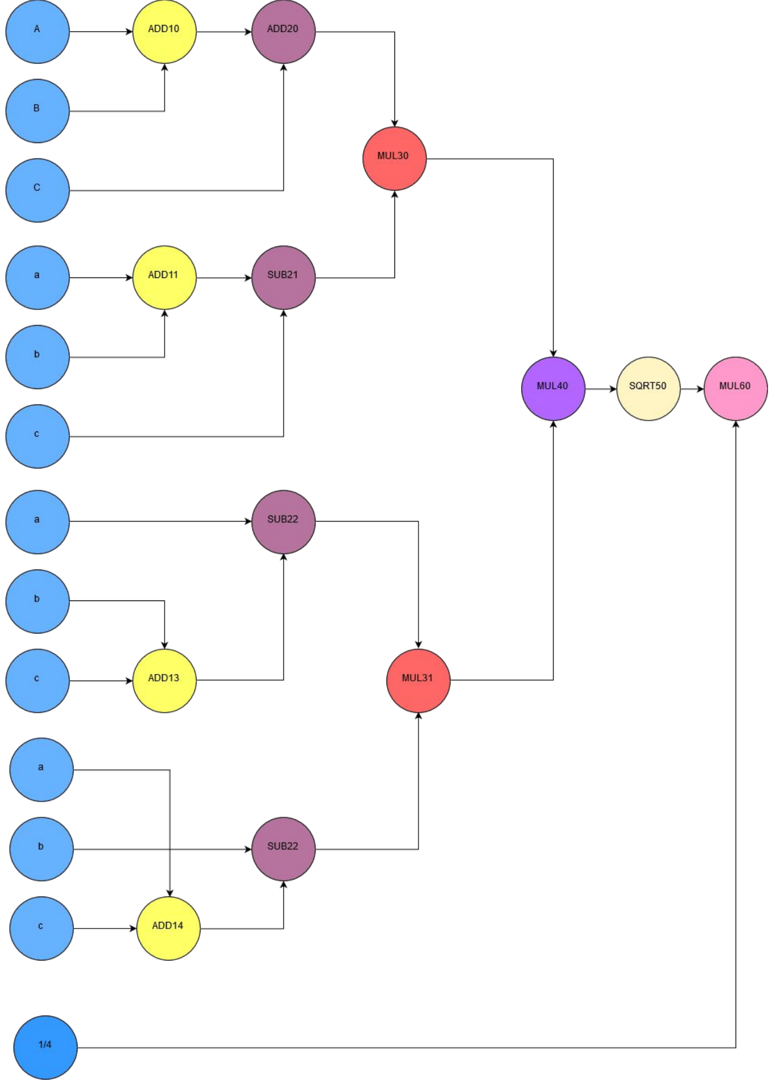
3. Reaktionsnetzwerk

$$A = \frac{\sqrt{(a+b+c)(a+b-c)(b+c-a)(c+a-b)}}{4}$$



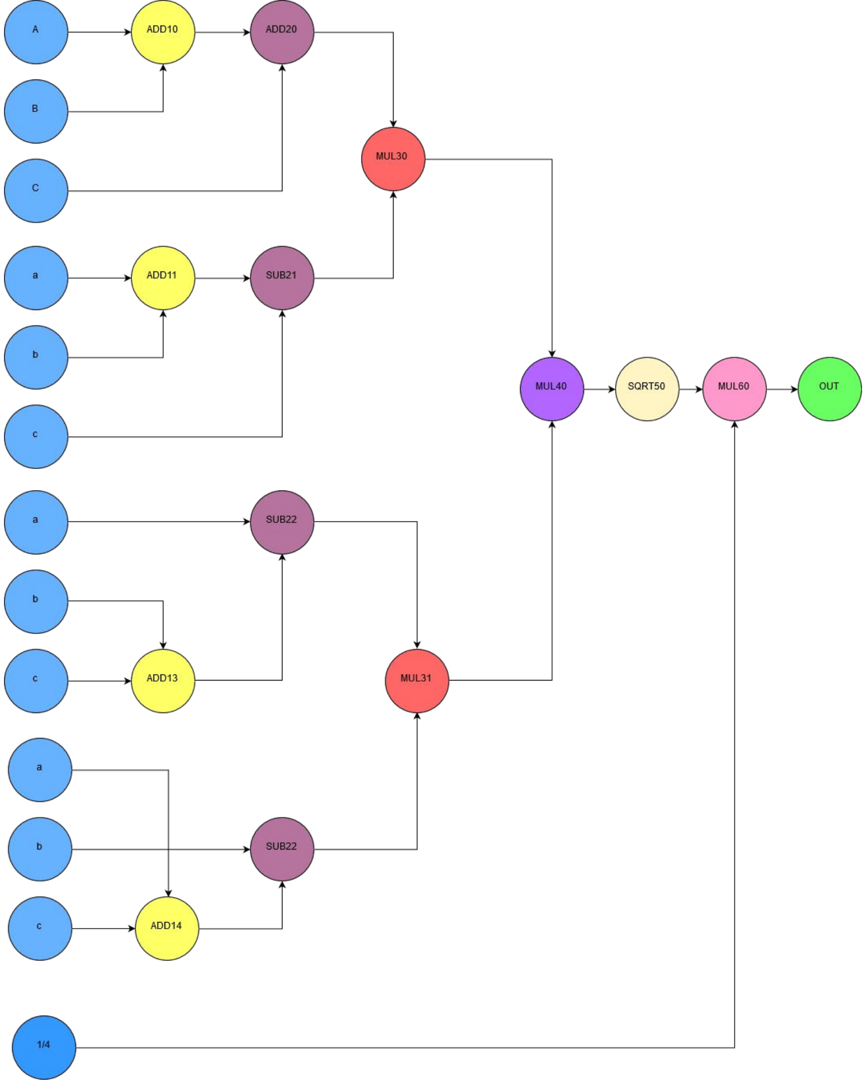
3. Reaktionsnetzwerk

$$A = \frac{\sqrt{(a+b+c)(a+b-c)(b+c-a)(c+a-b)}}{4}$$



3. Reaktionsnetzwerk

$$A = \frac{\sqrt{(a+b+c)(a+b-c)(b+c-a)(c+a-b)}}{4}$$



4. Simulation

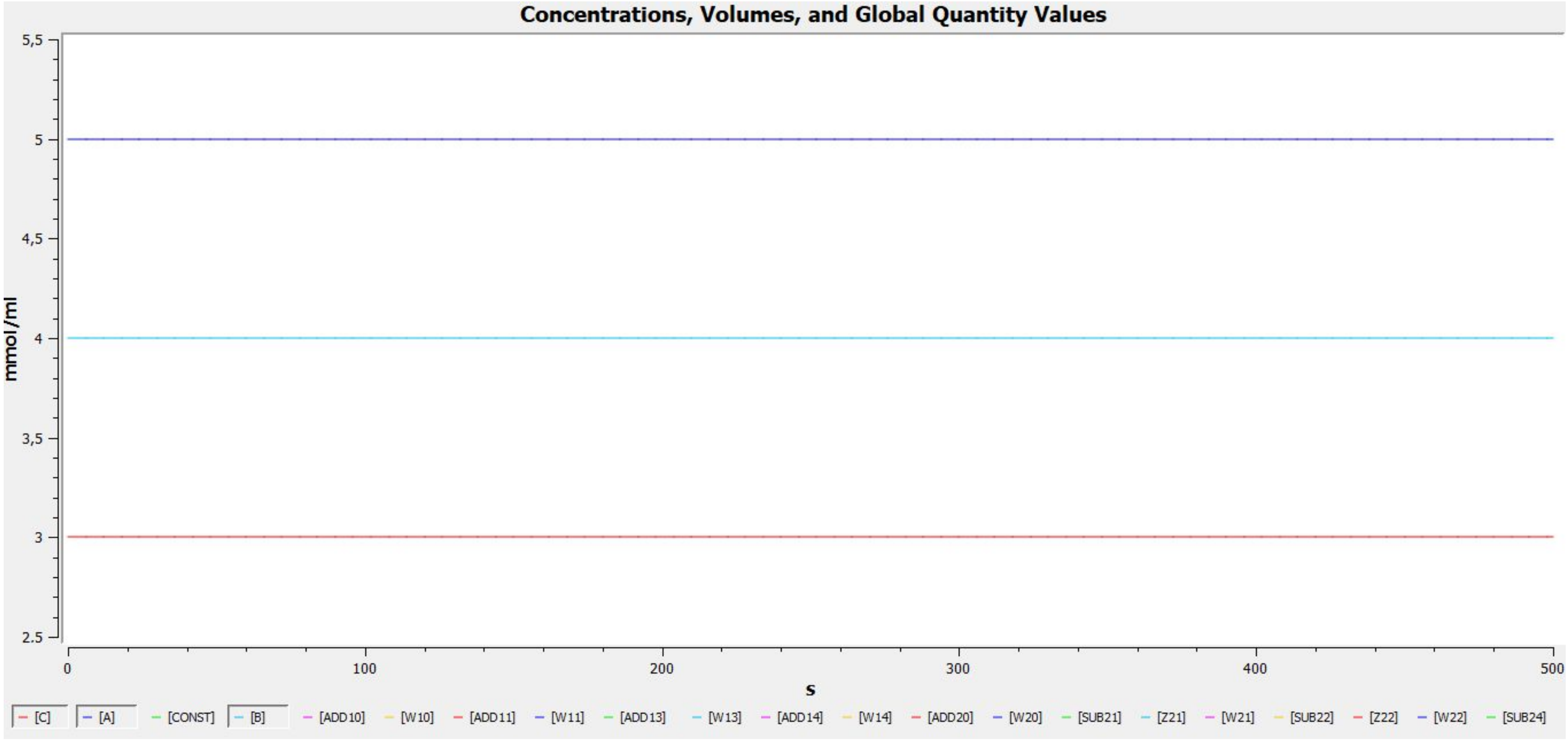
Seien a = 5, b = 4, c = 3.

S = (5+4+3)/2 = 6

$$A = \sqrt{6 \cdot (6-5) \cdot (6-4) \cdot (6-3)}$$

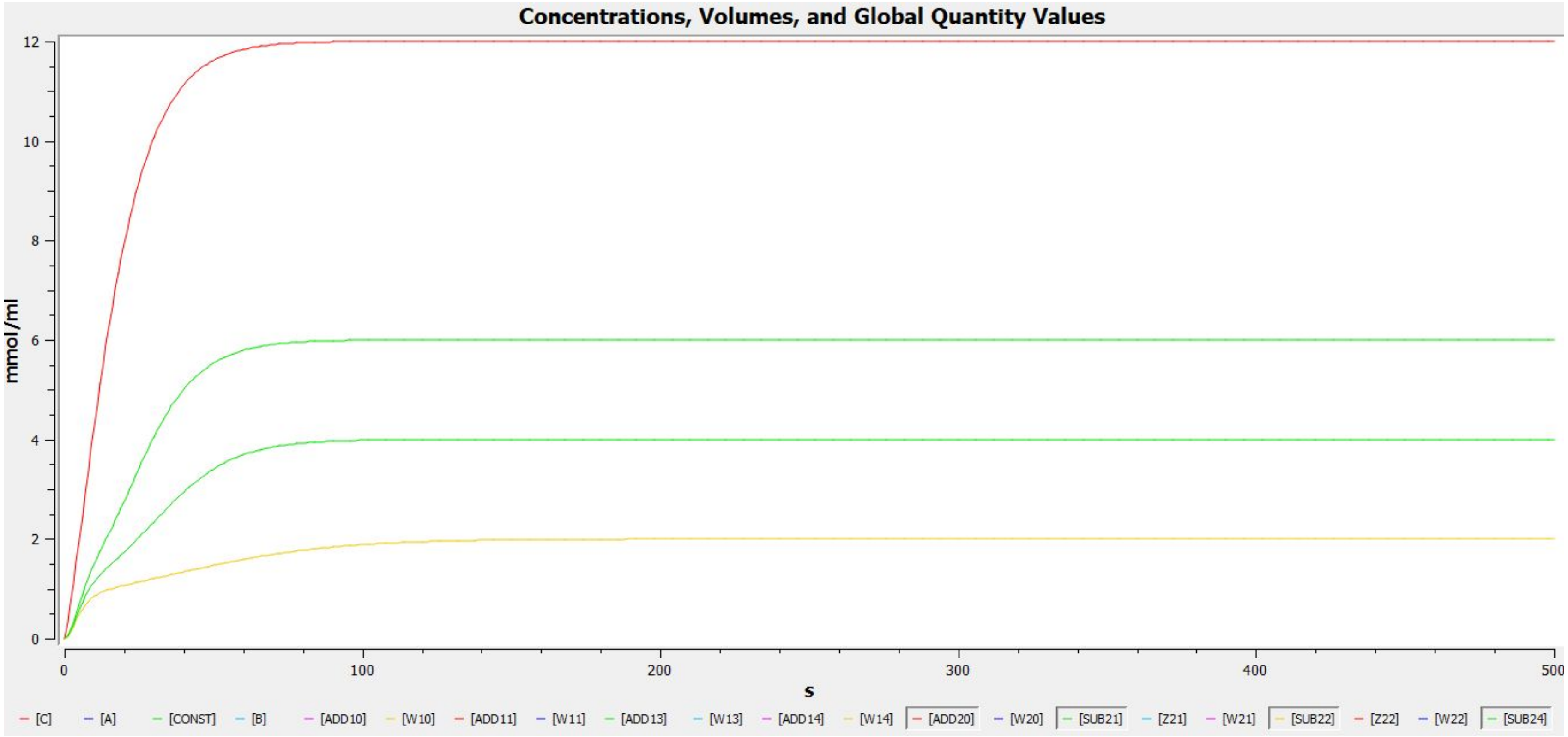
$$A = \sqrt{36} = 6$$

4. Simulation



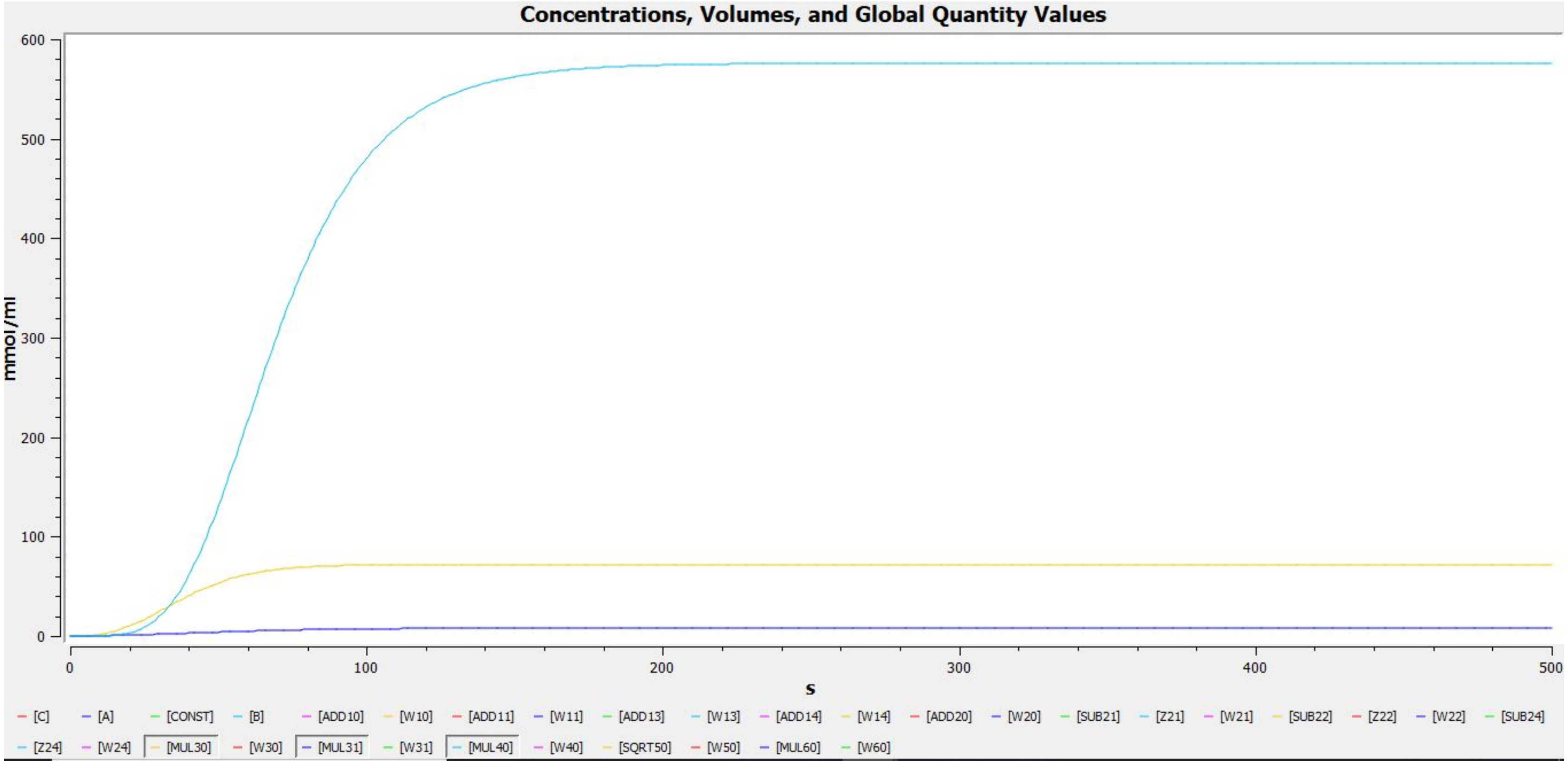
Eingabewerte a,b,c

4. Simulation



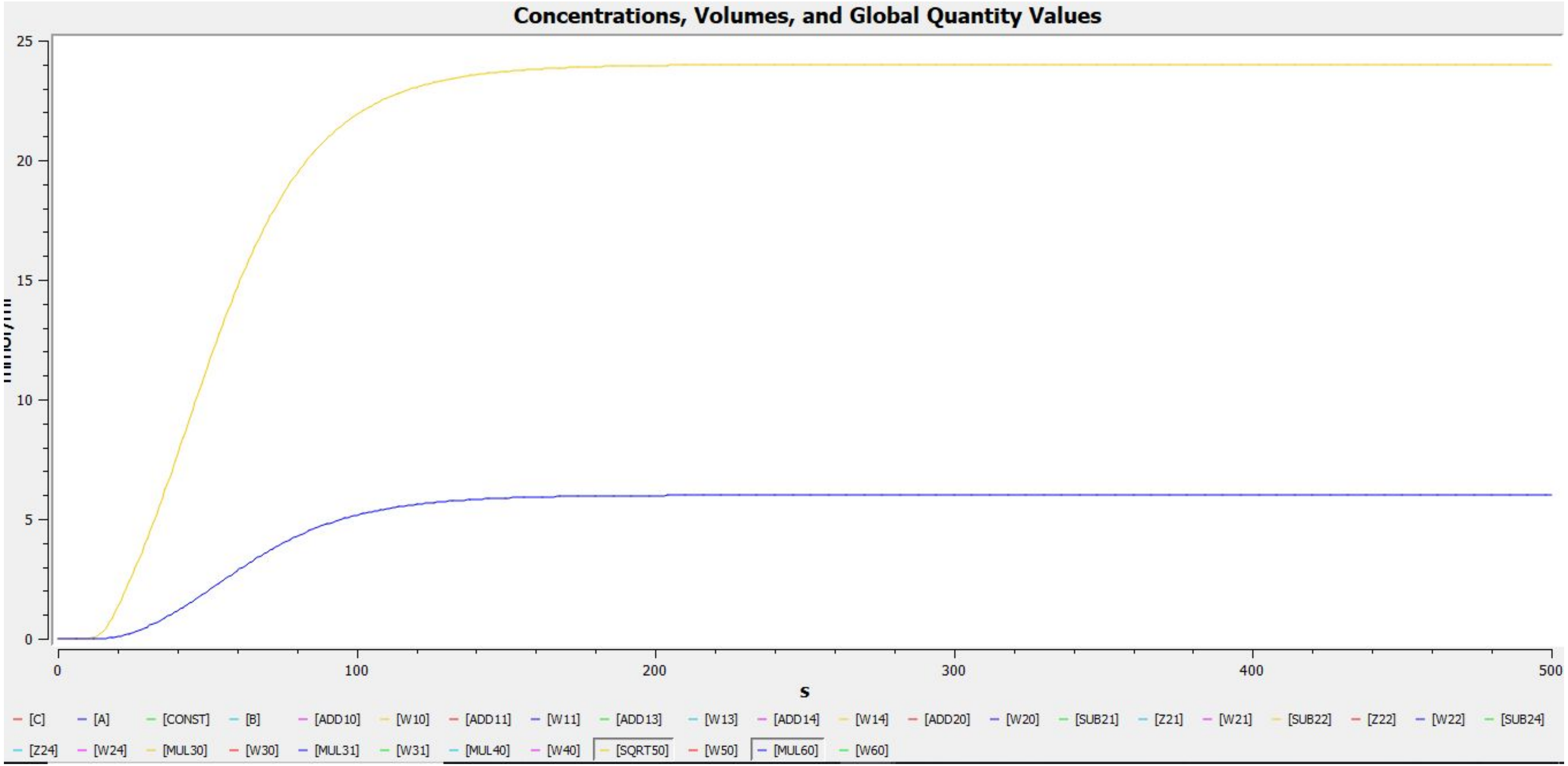
Zwischenergebnisse nach Klammerberechnung

4. Simulation



Zwischenergebnisse der Multiplikationen unter der Wurzel

4. Simulation



Wurzelberechnung und Endergebnis

5. Auswertung

Idee:

Nach einer bestimmten Laufzeit werden 99% der Zielkonzentration erreicht. Inwiefern ist die Laufzeit bis zur Erreichung der besagten 99% von der gewählten Ratenkonstante k abhängig?

Angewandt auf vorheriges Beispiel:

Zielkonzentration = 6 $\longrightarrow$ 99% = 5.94

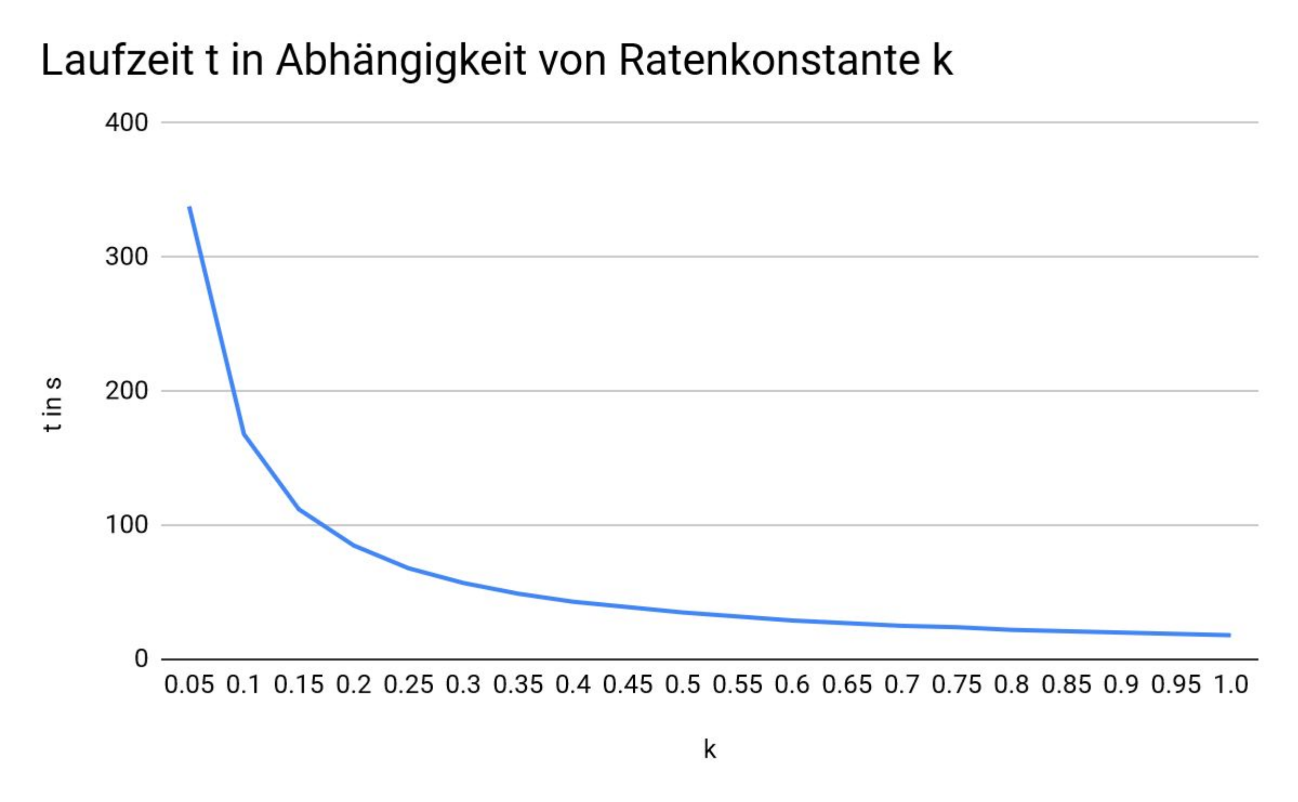
5. Auswertung

k	t in s
0.05	336
0.1	168
0.15	112
0.2	85
0.25	68
0.3	57
0.35	49
0.4	43
0.45	39

k	t in s
0.5	35
0.55	32
0.6	29
0.65	27
0.7	25
0.75	24
0.8	22
0.85	21
0.9	20

k	t in s
0.95	19
1.0	18

5. Auswertung



Quellen

KhanAcademyDeutsch, *Herleitung Satz des Heron*, https://www.youtube.com/watch?v=Thrj2xn_rGU, abgerufen am 24.06.2019

Hinze, T., *Computer der Natur. Ausgewählte molekulare Prinzipien der biologisch inspirierten Informationsverarbeitung,* ISBN 978-87-403-0378-0, Verlag bookboon.com, London, 118 S., 2013

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!