

Entwicklung, Simulation und Auswertung eines chemischen
Analogcomputermodells zur (näherungsweise) Berechnung der
Aufgabe 'Hund im Freibad'

T. Ruckdeschel & A. Theus

20. August 2025

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Chemische Analogcomputer	1
1.2	Der Hund im Freibad und das Fermatsche Prinzip	1
2	Material und Methoden	2
2.1	Rechnung	2
2.2	Konstruktion des Reaktionsnetzwerks	4
2.3	Umsetzung in COPASI	5
2.3.1	Berechnung von s	5
2.3.2	Fallunterscheidungen	9
3	Ergebnisse	11
3.1	Simulationsstudie 1	11
3.2	Simulationsstudie 2	11
3.3	Simulationsstudie 3	13
4	Schlussfolgerung	14

1 Einleitung

1.1 Chemische Analogcomputer

Chemische Reaktionssysteme können modelhaft als rechnerische Systeme aufgefasst werden. Dabei wird Information durch kontinuierliche Änderungen der Stoffkonzentrationen im Zeitverlauf kodiert. Somit kann das Verhalten des gesamten Systems als ein Berechnungsprozess interpretiert werden.

Das betrachtete Reaktionssystem besitzt ein festgelegtes Volumen V . In diesem Reaktionsraum sind die Teilchen gleichmäßig verteilt, wodurch eine ideale Durchmischung angenommen wird. Jedem beteiligten Stoff wird dabei ein definierter Bezeichner zugeordnet. Für jeden Stoff ist eine Anfangskonzentration c definiert. Die Reaktionsgeschwindigkeit v_R beschreibt die Dynamik der chemischen Umsetzungen der Stoffe innerhalb des Systems.

Die Reaktionskinetik lässt sich als ein System von Differentialgleichungen formulieren. Die Lösung dieses Gleichungssystems liefert den zeitabhängigen Verlauf der Stoffkonzentrationen und damit eine konkrete Beschreibung des Systemverhaltens. Das System führt Berechnungen durch, indem Stoffe miteinander reagieren; dadurch übernehmen chemische Reaktionen die Rolle von Rechenoperationen.

Im Rahmen dieses Projekts wird die im Folgenden beschriebene Problemstellung mit Hilfe von Reaktionssystemen im Programm COPASI [1] modelliert. COPASI ermöglicht die numerische Lösung der Reaktionskinetik und damit die Berechnung des Ergebniswertes.

1.2 Der Hund im Freibad und das Fermatsche Prinzip

Die Aufgabe 'Hund im Freibad' kann auch als anschauliche Analogie zum Verhalten von Licht aufgefasst werden. Der Hund bewegt sich mit zwei unterschiedlichen Geschwindigkeiten: Er läuft schneller an Land und schwimmt langsamer im Wasser. Um einen sich im Wasser befindlichen Ball in kürzester Zeit zu erreichen, muss er den optimalen Absprungpunkt vom Land wählen. Das spiegelt das Verhalten von Licht wider, das sich ebenfalls mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten in verschiedenen Medien bewegt.

In der Physik wird dieses Verhalten durch das *Fermat'sche Prinzip der kleinsten Zeit* beschrieben, das besagt, dass Licht zwischen zwei Punkten stets den Weg mit der geringsten Gesamtzeit wählt und nicht unbedingt den kürzesten Weg nach Distanz. Wenn Licht von einem Medium in ein anderes übergeht (z. B. von Luft ins Wasser), führt dieses Prinzip direkt zum *Snellius'schen Brechungsgesetz*: $n_1 \cdot \sin(\theta_1) = n_2 \cdot \sin(\theta_2)$, wobei die Brechungsindizes durch $n_1 = \frac{c}{v_1}$ und $n_2 = \frac{c}{v_2}$ gegeben sind, mit c als Lichtgeschwindigkeit und v_1, v_2 als Lichtgeschwindigkeiten in den jeweiligen Medien [2].

Im Fall des Hundes im Freibad liegt die gleiche mathematische Struktur vor: Bezeichnet v_1 die Geschwindigkeit an Land und v_2 im Wasser, sowie d_1 und d_2 die entsprechenden zurückgelegten Strecken, so ergibt sich die Gesamtzeit $T = \frac{d_1}{v_1} + \frac{d_2}{v_2}$.

Genau dieser Ausdruck wird auch beim Licht gemäß Fermat minimiert. Das Fermat'sche Prinzip ist nicht nur zentral in der Optik, sondern auch eines der frühesten Variationsprinzipien der Physik. Es zeigt, wie die Natur oft Pfade wählt, die Zeit, Weg oder Energie optimieren. Genau das können wir auch im Fallbeispiel des Hundes im Freibad betrachten.

2 Material und Methoden

2.1 Rechnung

Die Problembeschreibung lautet wie folgt: Ein Hund im Freibad will in kürzestmöglicher Zeit den Punkt $P(a, b)$ im Wasser erreichen. Er startet im Koordinatenursprung $P(0, 0)$ und läuft entlang der x-Achse am Beckenrand und springt am Punkt $P(s, 0)$ ins Wasser. Von dort aus schwimmt er in gerader Linie zum Ziel. Seine Geschwindigkeit v ist an Land um den Faktor c höher als im Wasser, wobei $c \geq 1$.

Gegeben sind also die Werte für a , b und c und gesucht ist der Wert von s , sodass die Gesamtzeit T minimal ist. Das Szenario ist in Abbildung 1 veranschaulicht.

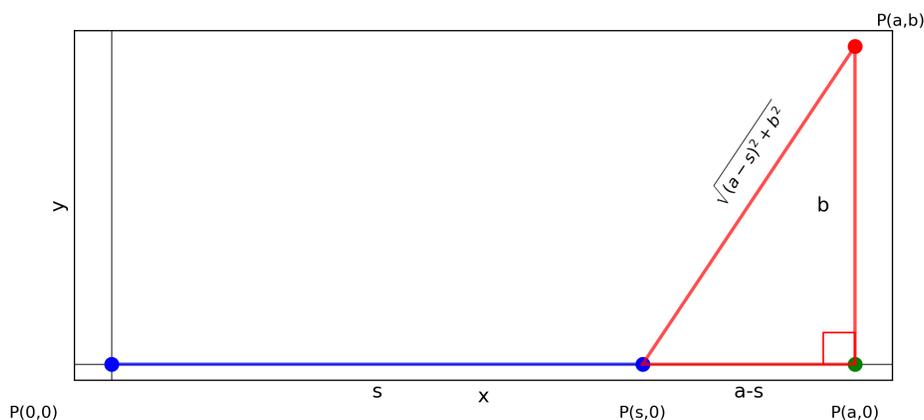


Abbildung 1: Skizze zur Fragestellung 'Hund im Freibad'

Folgende grundlegende Dinge können beobachtet werden. Die Gesamtzeit T kann in 2 Teilabschnitten berechnet werden, die Zeit t_1 , die auf Land benötigt wird und die Zeit t_2 , die im Wasser benötigt wird.

Die Strecke am Land entspricht dabei einfach s und die Strecke im Wasser ist die Länge einer Hypotenuse, welche durch den Satz von Pythagoras berechnet werden kann. Wir rufen uns in Erinnerung, dass die Geschwindigkeit auf dem ersten Abschnitt $c \cdot v$ war und auf dem zweiten Abschnitt v betrug.

Nun können wir die Funktion $f(s)$ aufstellen, welche die Gesamtzeit T in Abhängigkeit von s beschreibt.

Minimieren der Gesamtzeit T

Aufstellen der Funktion

$$T = t_1 + t_2$$

$$t_1 = \frac{s}{cv}, \quad t_2 = \frac{\sqrt{(a-s)^2 + b^2}}{v}$$

$$T = \frac{s}{cv} + \frac{\sqrt{(a-s)^2 + b^2}}{v}$$

$$T = \frac{1}{cv} \left[s + c\sqrt{(a-s)^2 + b^2} \right] \quad \rightarrow \quad f(s) = \frac{1}{cv} \left[s + c\sqrt{(a-s)^2 + b^2} \right]$$

Berechnen der Ableitung:

$$f'(s) = \frac{1}{cv} \left(1 + c \cdot \frac{d}{ds} \left[\sqrt{(a-s)^2 + b^2} \right] \right)$$

$$\frac{d}{ds} \left[\sqrt{(a-s)^2 + b^2} \right] = \frac{1}{2} \cdot ((a-s)^2 + b^2)^{-\frac{1}{2}} \cdot 2(a-s)(-1) = \frac{-(a-s)}{\sqrt{(a-s)^2 + b^2}}$$

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

Ermitteln des Extrempunkts durch $f'(s) = 0$:

$$\Rightarrow \frac{1}{cv} \left(1 - c \cdot \frac{a-s}{\sqrt{(a-s)^2 + b^2}} \right) = 0$$

$$\Rightarrow 1 - c \cdot \frac{a-s}{\sqrt{(a-s)^2 + b^2}} = 0 \quad (\text{Da } \frac{1}{cv} \neq 0, \text{ wegen } c \geq 1 \text{ und } v \geq 0)$$

$$\Rightarrow c \cdot \frac{a-s}{\sqrt{(a-s)^2 + b^2}} = 1$$

$$\Rightarrow \frac{a-s}{\sqrt{(a-s)^2 + b^2}} = \frac{1}{c}$$

$$\Rightarrow a-s = \frac{\sqrt{(a-s)^2 + b^2}}{c}$$

$$\Rightarrow c(a-s) = \sqrt{(a-s)^2 + b^2}$$

$$\Rightarrow c^2(a-s)^2 = (a-s)^2 + b^2$$

$$\Rightarrow c^2(a-s)^2 - (a-s)^2 = b^2$$

$$\Rightarrow (c^2 - 1)(a-s)^2 = b^2$$

$$\Rightarrow (a-s)^2 = \frac{b^2}{c^2 - 1}$$

$$\Rightarrow a-s = \pm \frac{b}{\sqrt{c^2 - 1}}$$

$$\Rightarrow \boxed{s = a \pm \frac{b}{\sqrt{c^2 - 1}}}$$

Wir untersuchen das Krümmungsverhalten, um zu überprüfen, dass es sich bei dem gefundenen Punkt wirklich um ein Minimum handelt.

Die zweite Ableitung von $f(s)$ ist

$$f''(s) = \frac{b^2}{v((a-s)^2 + b^2)^{3/2}}$$

Da $b^2 > 0$, $v > 0$ und auch $((a-s)^2 + b^2)^{3/2} > 0$, ist $f''(s) > 0$ für alle Werte von s . Das bedeutet, dass die Funktion überall nach oben gekrümmt (konvex) ist, sodass jeder kritische Punkt ein Minimum sein muss.

Allerdings müssen zwei Sonderfälle beachtet werden.

Für die korrekte Berechnung von s muss sowohl $c \leq 1$, als auch $a \leq \frac{b}{\sqrt{c^2-1}}$ gelten.

Wenn $c \leq 1$ ist, dann wäre der Hund an Land langsamer als im Wasser. Somit wäre es für ihn sinnvoll, sofort ins Wasser zu springen und das Ergebnis s wird auf 0 gesetzt. Es macht Sinn, diesen Bereich auszuschließen, denn wenn $c \leq 1$ ist, ist für $c = 1$ der Nenner 0 und für $c < 1$ der Wert unter der Wurzel negativ, was zu imaginären Zahlen als Ergebnis führen würde. Des Weiteren kann in einem chemischen Modell nur eine nicht-negative Subtraktion realisiert werden.

Im anderen Sonderfall gerät man ebenfalls an das Problem, eine potenziell negative Subtraktion zu erhalten. Das ist relevant bei $a - \frac{b}{\sqrt{c^2-1}}$. Um dies zu umgehen, müsste an der Stelle eigentlich die zweite mögliche Formel $s = a + \frac{b}{\sqrt{c^2-1}}$ benutzt werden, um das positive Ergebnis zu erhalten. Da dies aber im chemischen Modell sehr aufwändig wäre, wird hier das Ergebnis ebenfalls der Einfachheit halber auf 0 gesetzt.

2.2 Konstruktion des Reaktionsnetzwerks

Um den Wert s mit Hilfe eines Reaktionssystems zu berechnen, wird der Ausdruck $s = a - \frac{b}{\sqrt{c^2-1}}$ zunächst in seine elementaren Rechenoperationen zerlegt. Diese schrittweise Zerlegung ist sinnvoll, da sich die einzelnen Operationen, wie Multiplikation, Subtraktion, Wurzelziehen und Division, in COPASI jeweils durch Reaktionen simulieren lassen. Die Berechnung erfolgt dabei von innen nach außen. Schrittweise wird das berechnete Zwischenergebnis mit Hilfe der elementaren Rechenoperationen weiterverarbeitet, bis der Wert für s bestimmt wurde. Das schrittweise Vorgehen bei der Zerlegung des Ausdrucks ist in Abbildung 2 aufbereitet.

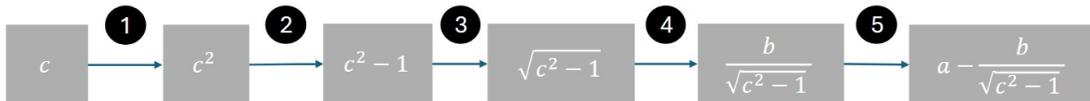


Abbildung 2: Schrittweises Berechnen der Formel $s = a - \frac{b}{\sqrt{c^2-1}}$

Um die zuvor genannten Sonderfälle zu behandeln, wurden zwei Fallunterscheidungen eingeführt. In chemischen Netzwerken lässt sich eine Fallunterscheidung der Form

IF $X < C$ THEN A ELSE B

als folgenden Ausdruck von Grundoperationen darstellen:

$$\frac{B \cdot (X - C)}{(X - C) + (C - X)} + \frac{A \cdot (C - X)}{(C - X) + (X - C)}$$

In dieser Arbeit sind insbesondere zwei Fallunterscheidungen von Interesse:

IF $1 < c$ THEN s ELSE 0

Verhindert, dass der Ausdruck unter der Wurzel negativ wird.

IF $a < \frac{b}{\sqrt{c^2 - 1}}$ THEN 0 ELSE s

Vermeidet eine negative Subtraktion.

Insgesamt ist der chemische Analogcomputer somit wie folgt aufgebaut:

$$f(a, b, c) = \begin{cases} \begin{cases} 0, & \text{wenn } a < \frac{b}{\sqrt{c^2 - 1}} \\ s, & \text{sonst} \end{cases} & \text{falls } c > 1, \\ 0, & \text{falls } c \leq 1. \end{cases}$$

2.3 Umsetzung in COPASI

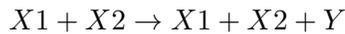
Reaktionsstoffe werden in COPASI als sogenannte Spezies eingeführt. Für jeden Stoff muss eine Anfangskonzentration angegeben werden. Basierend auf diesen Spezies können Reaktionen definiert werden. Für jede Reaktion wird eine Reaktionsgeschwindigkeitskonstante k erwartet, die beschreibt, wie schnell die beteiligten Stoffe mit bekannter Konzentration miteinander reagieren.

2.3.1 Berechnung von s

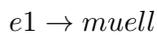
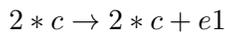
Im Folgenden werden die in Abbildung 2 visualisierten Schritte betrachtet und ihre Umsetzung in COPASI erläutert.

Schritt 1: Multiplikation

Der erste Schritt ist die Quadrierung der Variable c . Dafür wird c mit c multipliziert. Die Multiplikation lässt sich in COPASI durch die folgenden Reaktionen darstellen (siehe Abbildung 3):



Dadurch, dass c in diesem Fall mit sich selbst multipliziert wird, kann der Term wie folgt modifiziert werden:



Wobei $e1$ das erste Zwischenergebnis der Multiplikation und $muell$ eine Art 'Auffangspezies' ist, welche die kontinuierlich produzierte Ergebnisspezies $e1$ aufnimmt. Dies garantiert, dass das Produkt nicht kumuliert, sondern nur die aktuell gebildete Konzentration widerspiegelt. Da c in der ersten Reaktion sowohl Edukt als auch Produkt ist, ist garantiert, dass sich die Anfangskonzentration des Edukts nicht verändert. Somit nähert sich die Menge des Reaktionsproduktes basierend auf k , welches standardmäßig auf 0,1 gesetzt ist, nach einer gewissen Zeit einem bestimmten Wert an. Dieser entspricht dem Rechenergebnis.

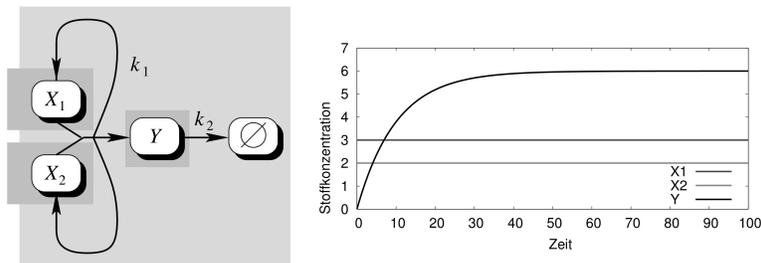
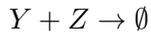


Abbildung 3: Modellierung der Multiplikation in einem Reaktionssystem

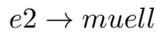
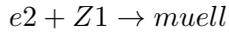
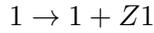
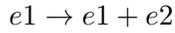
Schritt 2: Nicht-negative Subtraktion

Von dem Ergebnis aus Schritt 1, welches c^2 entspricht, wird nun der Wert 1 abgezogen. In der Aufgabenstellung ist festgelegt, dass $c \geq 1$ gelten muss. Wäre dies nicht so, würde es in diesem Schritt zu einem Fehler im System führen, da die Subtraktion ein negatives Ergebnis produzieren würde. Negative Konzentrationen sind jedoch in COPASI nicht realisierbar, ebenso wenig wie in der Natur. Die nicht-negative Subtraktion besteht aus den folgenden 4 Reaktionen (siehe Abbildung 4):





Angewandt auf unser Beispiel ergeben sich diese 4 Reaktionen:



Dabei entspricht $e1$ dem Ergebnis aus Schritt 1 und $e2$ dem zu berechnenden Ergebnis der nicht-negativen Subtraktion. $muell$ fängt auch hier wieder das kontinuierlich produzierte Ergebnis auf. $Z1$ ist in diesem Fall als eine Repräsentation des Subtrahenden zu verstehen, die dafür sorgt, dass die entsprechende Menge an Produkt zusätzlich zum konstanten Abfluss wegreagiert. Dadurch verringert sich die Produktkonzentration um den entsprechenden Subtrahenden und erreicht die gewünschte Konzentration, welche $e2$ und somit dem Rechenergebnis entspricht.

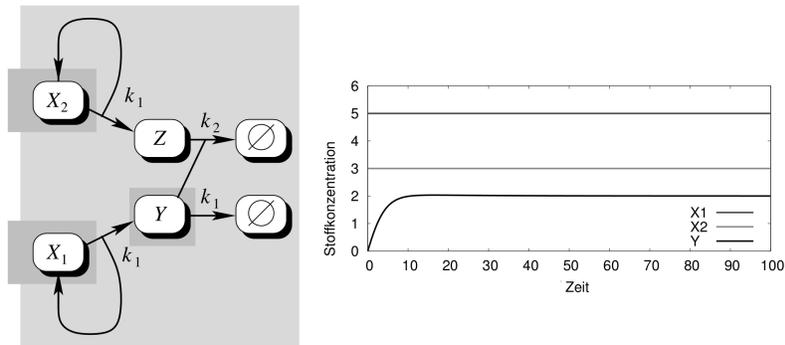
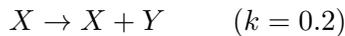


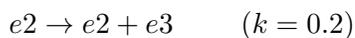
Abbildung 4: Modellierung der nicht-negativen Subtraktion in einem Reaktionssystem

Schritt 3: Radizieren

Als nächstes muss die Wurzel von $e2 = c^2 - 1$ gezogen werden. Das wird durch die folgenden zwei Reaktionen erreicht:



In unserem Fall gilt:



Dabei wird die Konzentration von $e3$ so modelliert, dass sie sich proportional zur Wurzel von der Konzentration $e2$ verhält. $e2$ produziert kontinuierlich $e3$, während $e3$ durch eine bimolekulare Reaktion entfernt wird. In einer bimolekularen Reaktion ist die Reaktionsgeschwindigkeit proportional zum Quadrat der Konzentration, weil die Reaktion durch den Zusammenstoß zweier Moleküle ausgelöst wird. Die Wahrscheinlichkeit eines solchen Zusammentreffens ist proportional zum Produkt der Konzentrationen beider Reaktionspartner. Die Umsetzung der beiden Stoffe hat die folgenden Reaktionsgeschwindigkeiten:

$$v_1 = k_1 \cdot [e2]$$

$$v_2 = k_2 \cdot [e3]^2$$

Im stationären Zustand gilt $v_1 = v_2$, also:

$$k_1 \cdot [e2] = k_2 \cdot [e3]^2 \implies [e3] = \sqrt{\frac{k_1}{k_2}} \cdot \sqrt{[e2]}$$

In dem Fall unsererer gewählten k-Werte gilt:

$$0.2 \cdot [e2] = 0.1 \cdot [e3]^2$$

$$[e3]^2 = \frac{0.2}{0.1} \cdot [e2]$$

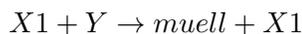
$$[e3]^2 = 2 \cdot [e2]$$

$$[e3] = \sqrt{2} \cdot \sqrt{[e2]}$$

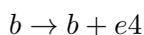
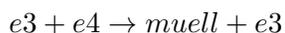
Der Faktor $\alpha = \sqrt{\frac{k_1}{k_2}}$ bestimmt die Proportionalität und muss passend gewählt werden. Auch wenn theoretisch $\alpha = 1$ das exaktere Ergebnis liefern sollte, liefert COPASI für den numerisch vermeintlich schlechteren Ansatz $\alpha = \sqrt{2}$ ein besseres Resultat. Das ist wahrscheinlich darauf zurückzuführen, dass bei einer durch den Vorfaktor höheren stationären Konzentration von $e3$ numerische Fehler im Simulationssystem geringer ins Gewicht fallen.

Schritt 4: Division

In diesem Schritt wird nun b durch $e4$ geteilt. Division wird in COPASI durch folgende zwei Reaktionen modelliert (siehe Abbildung 5):



In unserem Fall gilt:



Dabei verhält sich die Konzentration von $e4$ umgekehrt proportional zu $e3$. In der ersten Reaktion bleibt $e3$ erhalten und wirkt als eine Art Katalysator, sodass $e4$ mit einer Geschwindigkeit

proportional zu $e3$ verbraucht wird. In der zweiten Reaktion wird $e4$ mit einer Geschwindigkeit proportional zu b gebildet, wobei b erhalten bleibt.

Die Geschwindigkeiten lauten:

$$v_1 = k_1 \cdot [e3] \cdot [e4]$$

$$v_2 = k_2 \cdot [b]$$

Im stationären Zustand gilt somit:

$$k_2 \cdot [b] = k_1 \cdot [e3] \cdot [e4] \quad \Rightarrow \quad [e4] = \frac{k_2}{k_1} \cdot \frac{[b]}{[e3]}$$

Für $k_1 = k_2$ vereinfacht sich das zu:

$$[e4] = \frac{[b]}{[e3]}$$

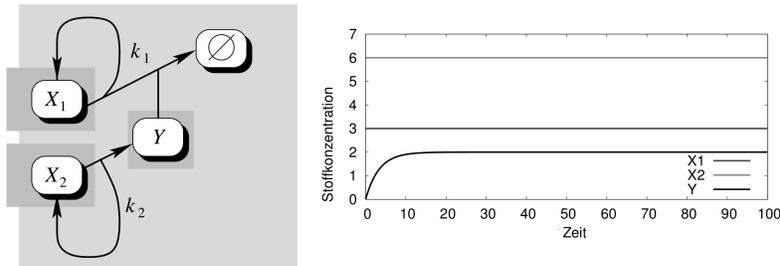
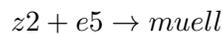
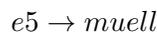
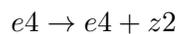
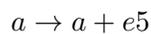


Abbildung 5: Modellierung der Division in einem Reaktionssystem

Schritt 5: Nicht-negative Subtraktion

In diesem Schritt wird wie in Schritt 2 eine nicht-negative Subtraktion modelliert, nur dass diesmal $e4$ der Subtrahend und a der Minuend ist. In unserem Fall ergeben sich die folgenden Reaktionsgleichungen:



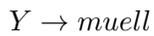
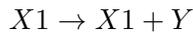
2.3.2 Fallunterscheidungen

Die Fallunterscheidungen sind jeweils ähnlich umfangreich wie die Berechnung von s . Der Einfachheit halber wird in dem Abschnitt nur noch die Addition beleuchtet, da die anderen verwendeten Grundoperationen (Multiplikation, Division und nicht-negative Subtraktion) bereits im vorhergehenden Abschnitt erläutert wurden.

Addition

In dem Term der Fallunterscheidungen gibt es mehrere Additionen. Die Addition wird im Folgenden beispielhaft an der Addition im Nenner $((X - C) + (C - X))$ erläutert. Das Zwischenergebnis von $(X - C)$ wird als $f1$ bezeichnet und von $(C - X)$ als $f2$. Das Ergebnis von $f1 + f2$ ist $f3$.

Allgemein kann eine Addition in COPASI wie folgt umgesetzt werden (siehe Abbildung 6):



$X1$ und $X2$ produzieren kontinuierlich die Ergebnisspezies Y .

In unserem Fall wurde die Addition von $f1$ und $f2$ zu $f3$ folgendermaßen implementiert:

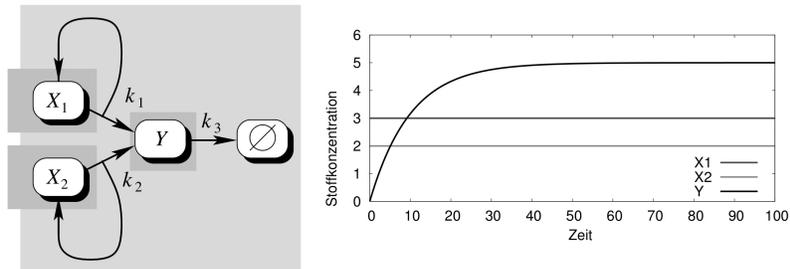
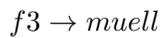
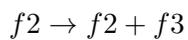
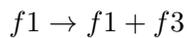


Abbildung 6: Modellierung der Addition in einem Reaktionssystem

3 Ergebnisse

3.1 Simulationsstudie 1

Wir wählen die Parameter annähernd so wie in der Abbildung der Aufgabenstellung. a wird somit auf 8 gesetzt, b auf 3, c hat laut Aufgabenstellung den Wert 3. Der Hund ist also dreimal so schnell an Land wie im Wasser.

Unser chemisches Netzwerk liefert uns nach etwa 400 Sekunden Konvergenzzeit das Ergebnis $f_8 = 6,93934$, welches den Absprungpunkt des Hundes darstellt. Die exakte Berechnung liefert uns ebenfalls diesen Wert, jedoch auch darstellbar mit weiteren Nachkommastellen. Nichtsdestotrotz zeigt dies, dass COPASI bis auf die fünfte Nachkommastelle genau rechnet, bis es wahrscheinlich eine Einschränkung der Anzahl der Nachkommastellen durch das Programm gibt. Man sieht also keinen Fehler zwischen Rechnen mit chemischen und analogen Computern in diesem Szenario.

Ebenfalls gut zu sehen ist, dass die beiden IF-Statements die Konvergenzzeit des finalen Ergebnisses deutlich sichtbar verlängern. Die blaue Kurve zeigt die Akkumulation der Ergebnisspezies f_8 nach Überprüfung durch die beiden IF-Spezies. Der rechnerische Wert für s ist schon deutlich früher berechnet, was an der roten Kurve zu sehen ist.

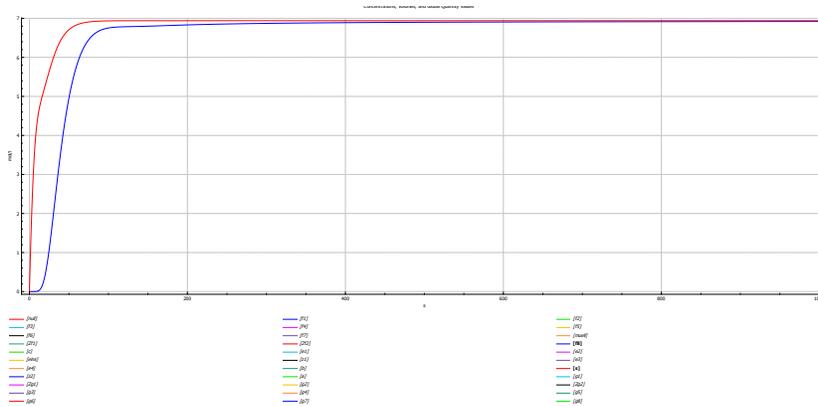


Abbildung 7: Verlauf von s (rot) und dem Ergebnis der Fallunterscheidung (blau) für $a = 8$, $b = 3$, $c = 3$ mit Ratenkonstante 0.1

3.2 Simulationsstudie 2

Für die Variation des Wertes c von 1 bis 5 wurde ein Parameter-Scan erstellt, der die initiale Konzentration von c in 100 Schritten von einem Minimum von 1 auf ein Maximum von 5 erhöht.

In Abbildung 8 sind die Werte von s in Abhängigkeit von c zu sehen. a wurde auf 10 gesetzt und b auf 5.

Es ist zu beobachten, wie der Wert von s mit höherem c ansteigt. Dies folgt aus der Tatsache, dass der Hund an Land schneller ist. Je länger die Strecke an Land, desto geringer die Gesamtzeit.

Mathematisch kann die Form der Kurve dadurch begründet werden, dass die erste Ableitung für die Steigung betrachtet wird und die zweite Ableitung für die Krümmung. Die erste Ableitung $\frac{ds}{dc} = \frac{bc}{(c^2-1)^{3/2}} > 0$ zeigt, dass $s(c)$ streng monoton steigend ist, wobei die Steigung für

$c \rightarrow 1^+$ gegen unendlich und für $c \rightarrow \infty$ gegen null geht.

Des Weiteren ist in Abbildung 8 zu sehen, dass die Steigung zu Beginn deutlich höher ist als mit steigendem Wert von c . Die zweite Ableitung $\frac{d^2s}{dc^2} = -\frac{b(2c^2+1)}{(c^2-1)^{5/2}} < 0$ ist stets negativ, was das Prinzip sinkender Wachstumsraten mit steigendem Wert von c bestätigt.

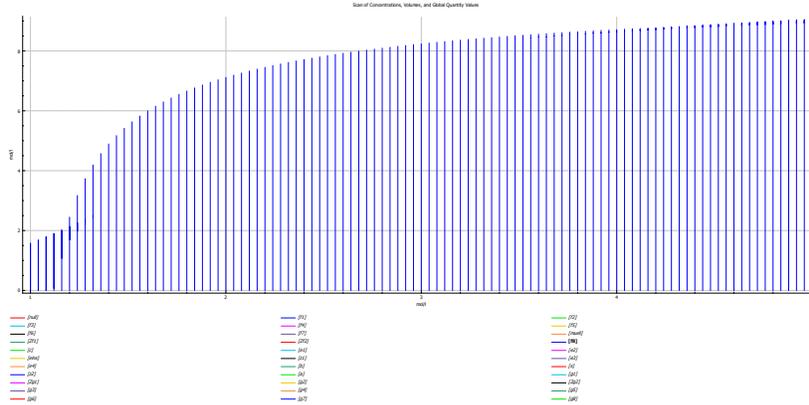


Abbildung 8: Wert von s in Abhängigkeit von c ; $a = 10$, $b = 5$, c variiert von 1 bis 5

Um den Fehler abzuschätzen, werden die Werte von s bei $c = 1, 2, 3, 4, 5$ betrachtet und für den chemischen und den Digitalcomputer verglichen.

c	Chemisches Netzwerk	Digitalcomputer
1	1,58312	nicht definiert
2	7,11075	7,11325
3	8,23148	8,23223
4	8,70863	8,70901
5	8,97915	8,97934

Tabelle 1: Vergleich der Ergebnisse des chemischen Computers und des Digitalcomputers von s für verschiedene c bei $k = 30$

Wegen Differenzen zwischen den Ergebnissen bei chemischem Netzwerk und Digitalcomputer wurde die Ratenkonstante auf 30 (bzw. 60) erhöht. Wie in Tabelle 1 zu sehen ist, sind trotzdem noch kleinere Differenzen zwischen dem chemischen Netzwerk und der exakten Rechnung durch den Digitalcomputer vorhanden. Dies könnte an einer weiterhin zu kurzen Konvergenzzeit im Modus Parameter-Scan liegen, denn wie in Studie 1 sichtbar wird, erreicht nach etwas Konvergenzzeit auch das chemische Netzwerk das exakte Ergebnis. Zur Überprüfung wurde im chemischen Netzwerk eine sehr hohe Ratenkonstante von 300 gewählt (bzw. 600) und die Werte wurden anschließend nochmal verglichen. In dem Fall gibt es nur noch kleinere Abweichungen ab der dritten Nachkommastelle (siehe Tabelle 2).

Der Fall $c = 1$ ist ein Sonderfall, der im chemischen Netzwerk durch das implementierte IF-Statement ($1 < c$) nicht abgefangen wird. Bei $c = 1$ wäre der Hund an Land genauso schnell wie im Wasser. Er würde also eigentlich gleich im Koordinatenursprung ins Wasser springen ($s = 0$) und auf kürzestmöglichem geradlinigen Weg den Punkt $P(a, b)$ erreichen.

c	Chemisches Netzwerk	Digitalcomputer
1	0,2020585	nicht definiert
2	7,11300	7,11325
3	8,23216	8,23223
4	8,70897	8,70901
5	8,97936	8,97934

Tabelle 2: Vergleich der Ergebnisse des chemischen Computers und des Digitalcomputers von s für verschiedene c bei Ratenkonstante von 300

Tatsächlich ist zu sehen, dass der Wert 0 nach entsprechender Konvergenzzeit erreicht wird. Dies zeigt an, dass der Parameterscan tatsächlich einfach Werte zu einem zu frühen Zeitpunkt wählt.

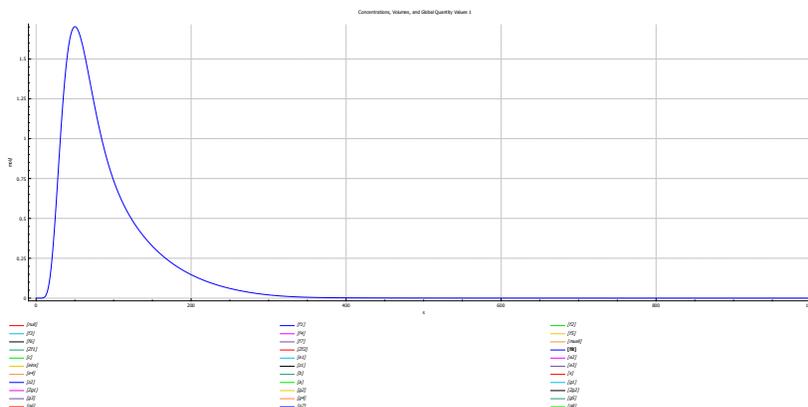


Abbildung 9: Wert von s ; $a = 10$, $b = 5$, $c = 1$ mit Ratenkonstante 30

3.3 Simulationsstudie 3

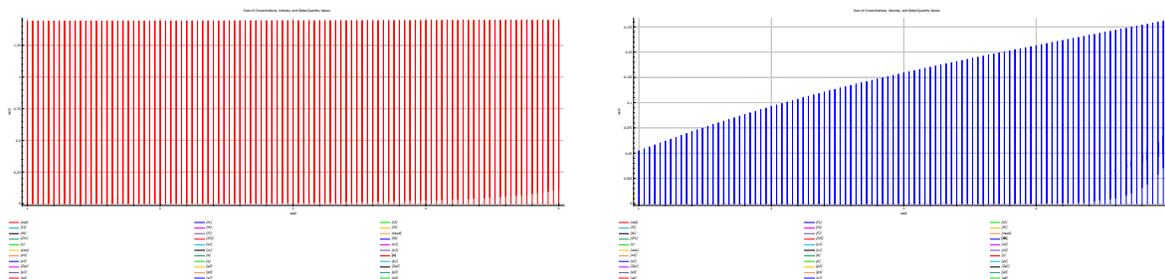
Der Wert des Parameters c wurde wie in der Simulationsstudie 2 angepasst. a liegt dieses Mal bei 5 und b bei 25.

In Abbildung 10a sind erneut die Werte von s in Abhängigkeit von c zu sehen. Der Wert von s liegt konstant bei etwa 1,45 und verändert sich auch nicht mit steigendem Wert von c .

Durch die IF-Statements sollte das Ergebnis (hier dargestellt durch die Spezies f_8) auf 0 gesetzt werden, da $a < \frac{b}{\sqrt{c^2-1}}$ gilt und in diesem Fall keine nicht-negative Subtraktion möglich ist.

Tatsächlich liegen die Werte auch nahe bei 0, bei etwa 0,05 bis 0,175 (siehe Abbildung 10b). Jedoch ist zu sehen, dass mit steigenden Werten von c der absolute Fehler größer wird, da der Fehler wahrscheinlich proportional zur Eingabegröße zunimmt.

Dies lässt sich wahrscheinlich, wie in der Simulationsstudie 2 zu sehen ist, darauf zurückführen, dass das chemische Netzwerk bei aktivem IF-Fall das Ergebnis nicht sofort exakt auf 0 setzen kann, sondern eine gewisse Konvergenzzeit zum Erreichen der Null notwendig ist, welche im Parameter Scan noch nicht erreicht wurde.



(a) Wert von s in Abhängigkeit von c
 $a = 10, b = 5, c$ variiert von 1 bis 5

(b) Wert von $f8$ in Abhängigkeit von c
 $a = 10, b = 5, c$ variiert von 1 bis 5

Abbildung 10: Vergleich von s und $f8$ in Abhängigkeit von c

4 Schlussfolgerung

Wir konnten zeigen, dass die Fragestellung 'Hund im Freibad' mit einem Molekülcomputer lösbar ist und nur geringe Abweichungen in den Ergebnissen im Vergleich zu einem Digitalcomputer aufweist.

Der Molekülcomputer hat jedoch Einschränkungen im Bezug auf negative Zahlen, da eine Subtraktion explizit nicht negativ sein muss. Negative Zahlen können nicht ohne Weiteres durch Konzentrationen dargestellt werden. Der Fall, dass negative Zahlen entstehen, muss durch Architekturveränderungen, wie etwa IF-Bedingungen abgefangen werden.

Es benötigt eine deutlich umfassendere Architektur, um IF-Bedingungen im chemischen Computer zu realisieren. Die beiden IF-Statements sind verantwortlich für den Großteil der Reaktionen und verursachen dadurch auch eine längere Konvergenzzeit.

Nach diesen Architekturveränderungen und bei Beachtung der Konvergenzzeit ist der Molekülcomputer jedoch dem Digitalcomputer nicht unterlegen.

Literatur

- [1] S. Hoops, S. Sahle, R. Gauges u. a., “COPASI—a COmplex PAthway Simulator,” *Bioinformatics*, Jg. 22, Nr. 24, S. 3067–3074, Okt. 2006, ISSN: 1367-4803. DOI: 10.1093/bioinformatics/btl485. eprint: https://academic.oup.com/bioinformatics/article-pdf/22/24/3067/48838880/bioinformatics_22_24_3067.pdf. Adresse: <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btl485>.
- [2] mitdank, *Das Fermat’sche Prinzip*, <https://people.physik.hu-berlin.de/~mitdank/dist/scripten/fermatsches-prinzip.pdf>, Physik-Skript, Humboldt-Universität zu Berlin, n.d.