



Molekulare Algorithmen

Thema 03: Chemische Berechnung einer maximalen Dreiecksfläche

Gregor Semmler, Lukas Günther und Paul Ehrlich

FSU Jena

Jena, 27. Juli 2026

PD. Dr. Thomas Hinze

1 Einführung

Chemische Analogcomputer verfolgen das Ziel, Rechenprozesse in ein kontinuierliches, physikalisches System zu übertragen, indem sie Konzentrationen und Reaktionskinetiken als Träger von Information nutzen. Dieses System kann dann für Berechnungen genutzt werden. Im Rahmen dieser Projektarbeit werden mehrere beispielhafte chemische Analogcomputermodelle entworfen, die bestimmte Berechnungen umsetzen. Die Motivation solcher Modelle liegt in der Einsicht, dass viele natürliche Systeme – insbesondere biologische Netzwerke – nicht digital, sondern über gekoppelte nichtlineare Differentialgleichungen operieren, deren Lösung unmittelbar in der zeitlichen Entwicklung chemischer Spezies sichtbar wird. Dadurch entsteht eine Rechenarchitektur, die inhärent parallel und energieeffizient ist, und sich für die Modellierung komplexer dynamischer Prozesse ebenso eignet, wie für die Entwicklung neuer Computer-Paradigmen. Die Verwendung von Softwarewerkzeugen wie COPASI ermöglicht es, solche chemischen Rechenmechanismen präzise zu formulieren, zu simulieren und systematisch zu analysieren, indem Reaktionsnetzwerke, Parameterabhängigkeiten und dynamische Verläufe numerisch untersucht werden. Mit diesem System werden auch unsere Berechnungen simuliert und im Anschluss analysiert.

2 Berechnungsansatz

2.1 Aufgabenstellung

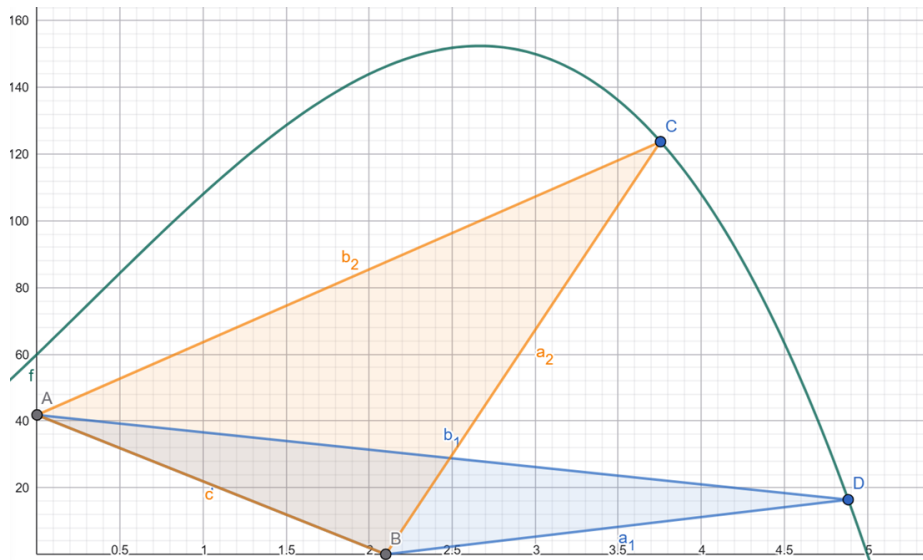


Abbildung 2.1: Skizze der Problemstellung mit $f(c)$; $\triangle ABC$ und $\triangle ABD$ für $a = 41.8$ und $b = 2.1$

Gegeben sind folgende Punkte

$$A = (0, a),$$

$$B = (b, 0),$$

$$C = (c, f(c)),$$

$$D = (d, f(d))$$

mit Einschränkungen $0 \leq a \leq 60$; $0 \leq b \leq 5$ und Funktion $f : X \rightarrow Y$

$$f(x) = -3x^3 + 3x^2 + 48x + 60; 0 \leq x \leq 5$$

a) Gesucht ist der Punkt C so, dass für gegebene A und B der Flächeninhalt von $\triangle ABC$ maximal ist.

b) Außerdem ist der Umfang des Dreiecks $\triangle ABD$ zu berechnen, für ein d , dass diesen Umfang minimiert. Für diesen Aufgabenteil gilt die zusätzliche Einschränkung $a = b$, mit der Konsequenz $0 \leq a \leq 5$.

2.2 Lösung

a) – Flächeninhalt

Liegen drei Punkte $A = (x_1, y_1)$, $B = (x_2, y_2)$, $C = (x_3, y_3)$ als kartesische Koordinaten vor, lässt sich der Flächeninhalt über die Determinantenformel berechnen:

$$\frac{1}{2} |(x_2 - x_1)(y_3 - y_1) - (x_3 - x_1)(y_2 - y_1)|$$

Setzt man die Koordinaten der gegebenen Punkte ein, ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} |(b - 0)(f(c) - a) - (c - 0)(0 - a)| &= \frac{1}{2} |b(f(c) - a) + ca| \\ &= \frac{1}{2} |bf(c) + ca - ab| \end{aligned}$$

was abgeleitet

$$\frac{(b(f(x) - a) + ax)(bf'(x) + a)}{2|b(f(x) - a) + ax|}$$

ist, hierbei ist $f'(x) = -9x^2 + 6x + 48$.

Effektiv lässt sich die Ableitung damit zu

$$\frac{(bf'(x) + a)}{2 \cdot \operatorname{sgn}(b(f(x) - a) + ax)}$$

vereinfachen, mit sgn als Sign(Vorzeichen)-Funktion. Da im gegebenen Intervall $1 = \operatorname{sgn}(b(f(x) - a) + ax)$ gilt, kann der Term vollständig ignoriert werden.

Damit ergeben sich die Nullstellen aus der quadratischen Gleichung $a + b(-9x^2 + 6x + 48) = 0$, die einzigen Nullstelle in den gegebenen Intervallen von x , a und b ist bei

$$c = \frac{1}{3} \left(\sqrt{\frac{a + 49b}{b}} + 1 \right)$$

(Diese Nullstelle ist nur dann in $(0, 5)$, wenn $\frac{a}{147} \leq b$, andernfalls wird $c > 5$. Im Folgenden wird angenommen, dass die Werte von a und b diese Ungleichung erfüllen.)

Hoch-/Tiefpunkt

Um sicherzustellen, dass es sich an der Nullstelle $c = \frac{\sqrt{\frac{a+49b}{b}}+1}{3}$ tatsächlich um einen Hochpunkt des Flächeninhalts handelt, wird die zweite Ableitung des Flächeninhalts betrachtet:

$$\begin{aligned}\triangle ABC'' &= (bf'(x) + a)' \\ (bf'(x) + a)' &= b(6 - 18x) \\ b(6 - 18 * \frac{\sqrt{\frac{a+49b}{b}} + 1}{3}) &< 0 \rightarrow_{b \neq 0} \\ 6 &< 6 * (\sqrt{\frac{a+49b}{b}} + 1) \\ &\square\end{aligned}$$

Da $\forall n > 0 : \sqrt{n} > 0$ gilt die Ungleichheit, wonach die Nullstelle als Hochpunkt bestätigt ist. Im Sonderfall $b = 0$ wäre unsere Eingabebedingung $\frac{a}{147} \leq b$ verletzt und die Nullstelle nicht berechenbar. Betrachtet man jedoch die Gleichung des Flächeninhalts $\frac{1}{2}|bf(c) + ca - ab|$, wird deutlich, dass mit $b = 0$ ac für den Flächeninhalt ausschlaggebend ist, also lediglich c auf 5 gesetzt werden muss.

Finale Formel

Zur Berechnung des maximalen Flächeninhalts muss also Punkt $(c|f(c))$ mit $c = \frac{\sqrt{\frac{a+49b}{b}}+1}{3}$ chemisch errechnet werden. Falls $b = 0$ ist kann c ohne Berechnung auf 5 gesetzt werden, sollte auch $a = 0$ sein, ist der Wert von c beliebig.

b) – Umfang des Dreiecks

Der Umfang eines Dreiecks ist als Summe der Seitenlängen definiert. Da die Seitenlänge $|AB|$ unabhängig von d ist, sind nur $|BD| + |AD|$ für die Optimierung relevant.

Ferner ist

$$|BD| = \sqrt{(b-d)^2 + (0-f(d))^2},$$

$$|AD| = \sqrt{(0-d)^2 + (a-f(d))^2}$$

Um das Minimum der Funktion $u(d) = |AD| + |BD|$ zu finden, wird die erste Ableitung u' betrachtet (Extremwertkriterium, x Extremstelle $\rightarrow u'(x) = 0$).

Für konkrete Werte von a und b wurde die Ableitung mithilfe von WolframAlpha auf 0 gesetzt und das optimale d sowie die Länge der Strecken $|AD| + |BD|$ berechnet. Zusammen mit $|AB| = \sqrt{2} \cdot a$ wurde so der Umfang errechnet. Es ergeben sich folgende Stützwerte:

$a = b = 0$	$a = b = 2$	$a = b = 4$
$x_{min} = 5$	$x_{min} = 4.99471$	$x_{min} = 4.99536$
$u = 10$	$u = 11.06455$	$u = 12.86033$

$a = b = 1$	$a = b = 3$	$a = b = 4.9$
$x_{min} = 4.99677$	$x_{min} = 4.99401$	$x_{min} = 4.99933$
$u = u = 10.4634$	$u = 11.84755$	$u = 14.00118$

$a = b = 5$
$x_{min} = 5$
$u = 14.14214$

Die jeweiligen Punkte (a, u) dienen als Basis, ein Polynom zu interpolieren, welches den Umfang in Abhängigkeit von a (bzw. b) approximiert.

Um das Lagrange-Polynom $P = \sum f_i l_i(a)$ zu berechnen, müssen zuerst die einzelnen Basisfunktionen l_i berechnet werden. Hierbei gilt:

$$l_i = \prod_{j \neq i} \frac{a - a_j}{a_i - a_j}$$

Für die konkreten $i \in \{0, 1, 2, 3, 4, 5\}$ sind die Basisfunktionen:

$$\begin{aligned}
l_0 &= \frac{a-1}{0-1} \cdot \frac{a-2}{0-2} \cdot \frac{a-3}{0-3} \cdot \frac{a-4}{0-4} \cdot \frac{a-4.9}{0-4.9} \cdot \frac{a-5}{0-5} \\
&= 0.00170068a^6 - 0.0338435a^5 + 0.269558a^4 - 1.09099a^3 + 2.34099a^2 - 2.48741a + 1 \\
l_1 &= \frac{a-0}{1-0} \cdot \frac{a-2}{1-2} \cdot \frac{a-3}{1-3} \cdot \frac{a-4}{1-4} \cdot \frac{a-4.9}{1-4.9} \cdot \frac{a-5}{1-5} \\
&= -0.0106838a^6 + 0.201923a^5 - 1.49145a^4 + 5.36218a^3 - 9.34402a^2 + 6.28205a \\
l_2 &= \frac{a-0}{2-0} \cdot \frac{a-1}{2-1} \cdot \frac{a-3}{2-3} \cdot \frac{a-4}{2-4} \cdot \frac{a-4.9}{2-4.9} \cdot \frac{a-5}{2-5} \\
&= 0.0287356a^6 - 0.514368a^5 + 3.52586a^4 - 11.3822a^3 + 16.7902a^2 - 8.44828a \\
l_3 &= -0.0438596a^6 + 0.741228a^5 - 4.72807a^4 + 13.9518a^3 - 18.5175a^2 + 8.59649a \\
l_4 &= 0.0462963a^6 - 0.736111a^5 + 4.39352a^4 - 12.125a^3 + 15.2269a^2 - 6.80556a \\
l_5 &= -0.105523a^6 + 1.58284a^5 - 8.96942a^4 + 23.7426a^3 - 28.9132a^2 + 12.6627a \\
l_6 &= 0.0833333a^6 - 1.24167a^5 + 7a^4 - 18.4583a^3 + 22.4167a^2 - 9.8a
\end{aligned}$$

Multipliziert man nun diese Basisfunktionen mit den jeweiligen Werten des Umfangs und summiert dann auf, erhält man das Lagrange-Polynom:

$$\begin{aligned}
P(a) &= 10 l_0 + 10.4634 l_1 + 11.06455 l_2 + 11.84755 l_3 + \\
&\quad 12.86033 l_4 + 14.00118 l_5 + 14.14214 l_6 \\
&= -0.0000068593822a^6 - 0.0000013592669a^5 + 0.000619035846a^4 + \\
&\quad 0.0042871109958a^3 + 0.0519134459429a^2 + 0.4065886258644a + 10
\end{aligned}$$

Dieses Polynom ist auch die Formel, die anschließend durch COPASI berechnet wird, sie approximiert den Umfang des Dreiecks $\triangle ABD$ minimalen Umfangs.

3 Berechnung über Stoffkonzentrationen

3.1 Berechnungsschemata

Es folgen DAGs, die die von Copasi auszuführenden Berechnungen skizzieren. Runde Knoten symbolisieren Konstanten bzw. Eingabeknoten, abgerundete Rechtecke sind Operatoren, und die Raute repräsentiert den Ziel- beziehungsweise Ausgabewert.

a)

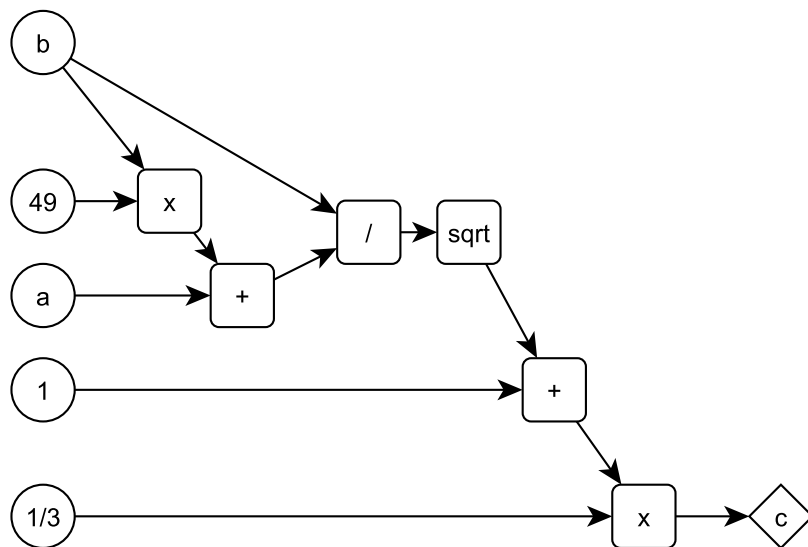


Abbildung 3.1: Berechnungsmodell für C

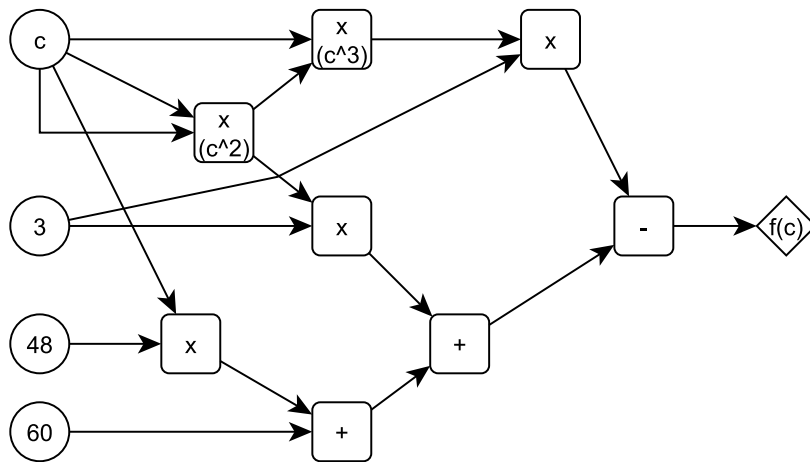


Abbildung 3.2: Berechnungsvorschrift für $f(c)$

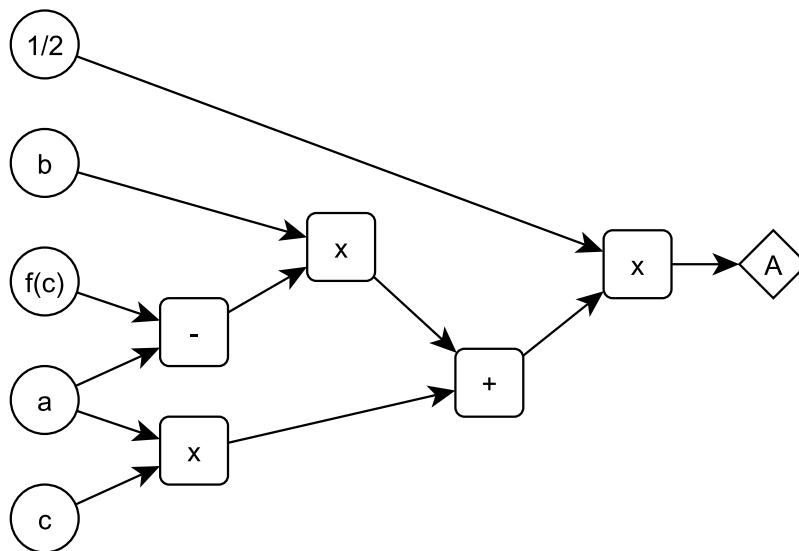


Abbildung 3.3: Berechnen des maximalen Flächeninhaltes

b)

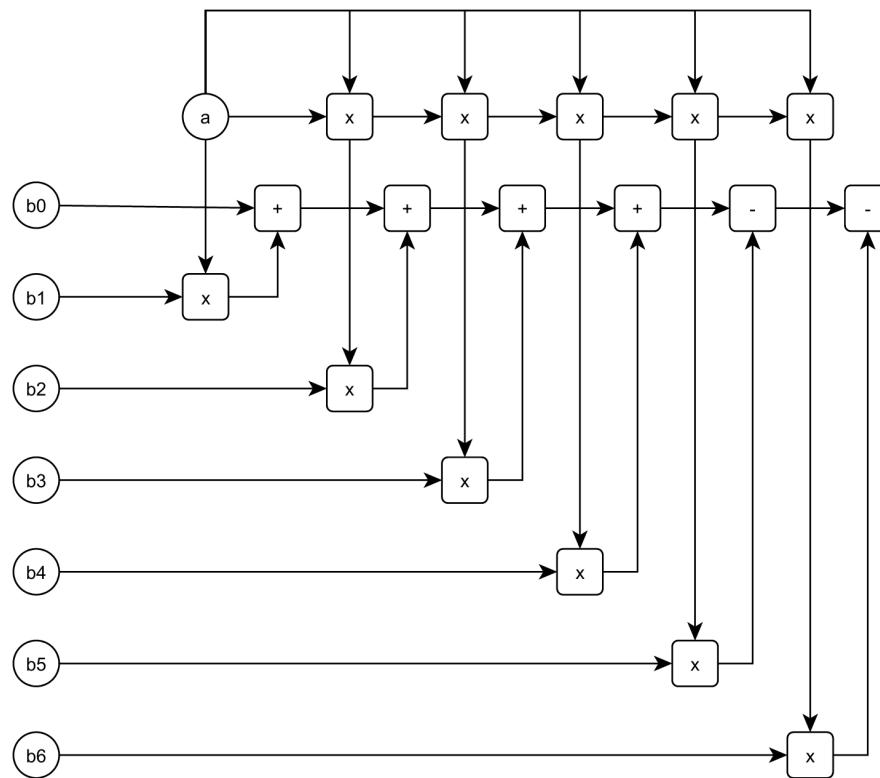
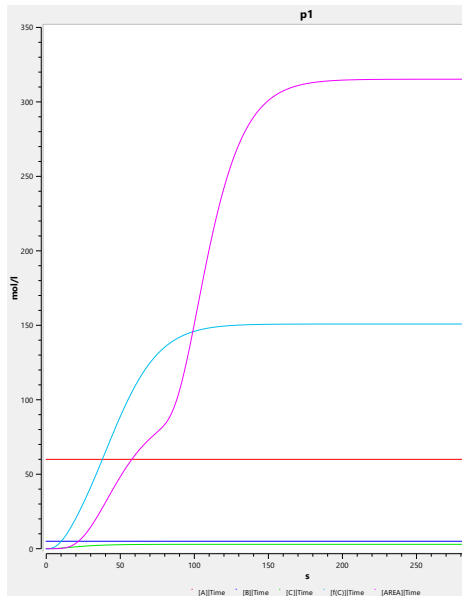


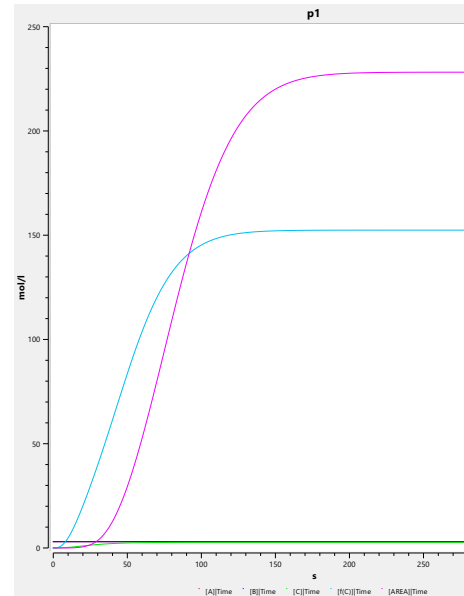
Abbildung 3.4: Berechnen des minimalen Umfangs

3.2 Ergebnisse – a)

In diesem Abschnitt werden für konkrete Werte a und b mit Copasi der Punkt C so berechnet, dass der Flächeninhalt $A_{\triangle ABC}$ maximal ist. Zusammen mit Punkt C wird auch der Flächeninhalt selbst berechnet.



Copasi-Plot von c [grün], $f(c)$ [cyan] und $A_{\triangle ABC}$ [magenta] für $a = 60$, $b = 5$



Copasi-Plot von c [grün], $f(c)$ [cyan] und $A_{\triangle ABC}$ [magenta] für $a = b = 3$

3.3 Ergebnisse – b)

Für unterschiedliche a, b wurde der minimale Umfang eines Dreiecks $\triangle ABD$ berechnet.

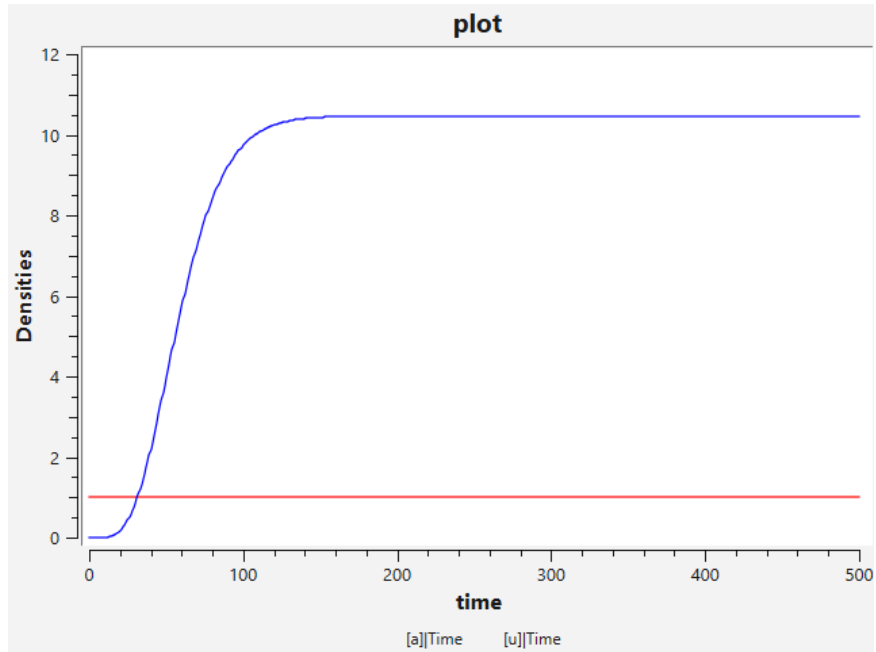


Abbildung 3.8: Copasi-Plot von $u_{\Delta ABD}$ [blau] für $a = b = 1$ [rot]

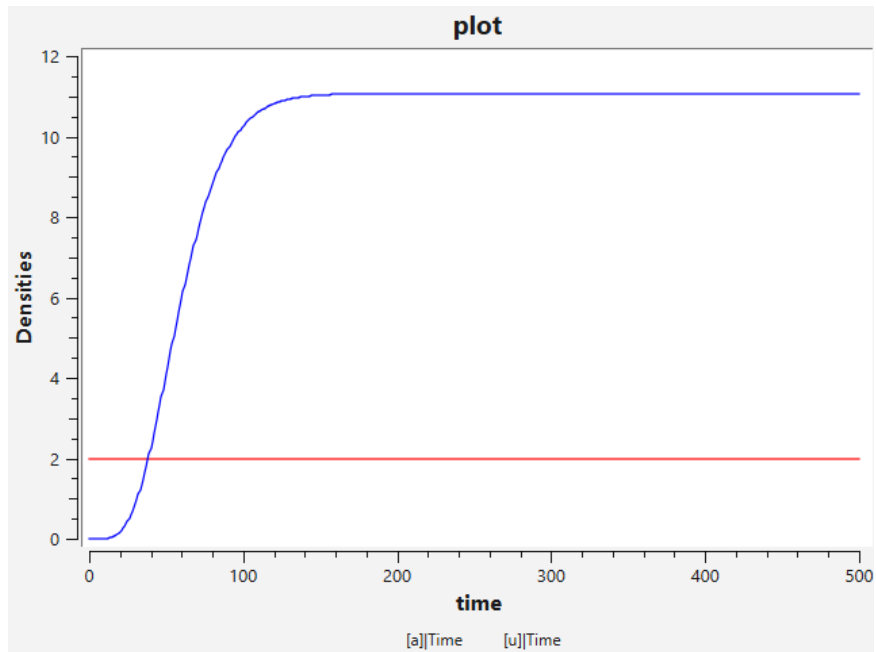


Abbildung 3.9: Copasi-Plot von $u_{\Delta ABD}$ [blau] für $a = b = 2$ [rot]

3.4 Auswertung

Fehlerbetrachtung – a)

Studie	a	b	Schritt	c	$f(c)$	$A_{\triangle ABC}$
1	60	5	0	0	0	0
			50	2.49081	69.9666	34.662
			100	2.9196	139.558	93.5632
			200	2.93674	150.817	311.763
			300	2.93675	150.853	315.226
			400	2.93675	150.853	315.236
			exakt	2.93675	150.853	315.236
2	3	3	0	0	0	0
			50	2.19418	65.9044	15.4647
			100	2.6698	137.178	125.255
			200	2.69034	152.363	225.786
			300	2.69036	152.433	228.174
			400	2.69036	152.433	228.184
			exakt	2.69036	152.433	228.184
3	60	4.53*	0	0	0	0
			50	2.51154	70.0708	34.8637
			100	2.94572	139.507	93.2705
			200	2.9631	150.487	290.915
			300	2.96311	150.521	293.965
			400	2.96311	150.521	293.974
			exakt	2.96311	150.521	293.974

Tabelle 3.1: Konvergenzverhalten des chemischen Modells zur Maximierung von $A_{\triangle ABC}$ für drei Parameterkombinationen;
der exakte Wert wurde analytisch durch WolframAlpha bestimmt;
*4.53113

In Tabelle 3.1 wird der zeitliche Verlauf der Simulation für die drei in der Aufgabenstellung geforderten Parameterkombinationen von a und b gezeigt. Zu Beginn besitzen alle Zielgrößen den Wert Null. Im weiteren Verlauf nähern sich die berechneten Werte für c , $f(c)$ und $A_{\triangle ABC}$ monoton ihren Endwerten an. Bereits nach etwa 300 Simulationsschritten ist weitestgehende Konvergenz der Werte erkennbar. Bis Schritt 400 treten lediglich geringfügige Veränderungen beim Flächeninhalt auf.

Zwischen den analytischen und simulierten Ergebnissen konnten keine relevanten Abweichungen festgestellt werden. Geringfügige Unterschiede während der Konver-

genz entstehen ausschließlich durch die numerische Berechnung sowie die begrenzte Ausgabegenauigkeit der Simulation. Nach Erreichen des stationären Zustands stimmen die berechneten Werte innerhalb der verwendeten Rundungsgenauigkeit mit den analytischen Lösungen überein.

Fehlerbetrachtung – b)

Studie	a	b	Schritt	u_{ABD}
1	1	1	0	0
			50	3.9506
			100	9.73223
			200	10.4626
			300	10.4634
			400	10.4634
			exakt	10.4634
2	2	2	0	0
			50	4.09357
			100	10.2551
			200	11.0636
			300	11.0646
			400	11.0646
			exakt	11.06455
3	3	3	0	0
			50	4.27986
			100	10.9362
			200	11.8484
			300	11.8576
			400	11.8475
			exakt	11.84755

Tabelle 3.2: Konvergenzverhalten des chemischen Modells zur Berechnung des Lagrange-Polynoms für den minimalen Umfang des Dreiecks $\triangle ABD$ für drei a ;
der exakte Wert wurde analytisch durch WolframAlpha bestimmt

Für das Umfangsproblem konnte keine praktikable geschlossene analytische Lösung gefunden werden. Stattdessen wurde entsprechend der abgeänderten Aufgabenstellung eine Lagrange-Interpolation auf Basis von sieben vorgegebenen Stützstellen zur Approximation des Umfangs des Dreiecks $\triangle ABD$ mit $a = b \in \{1, 2, 3\}$ verwendet. Das chemische Modell berechnet somit den interpolierten minimalen Umfang und nicht den optimalen Punkt $(d, f(d))$. Da die Interpolation die Stützstellen definitionsgemäß exakt reproduziert, ergibt sich an diesen Stellen kein Interpolationsfehler. Die Simulation konvergiert nach etwa 300 Simulationsschritten gegen einen stationären Endwert.

Im Wesentlichen können Fehler beziehungsweise Ungenauigkeiten nur zwischen den einzelnen Stützstellen auftreten. Da dort jedoch keine exakten Referenzwerte vorliegen, können weder für das chemische Modell noch für die Interpolation selbst Aussagen über die Genauigkeit getroffen werden. Das Interpolationspolynom stellt somit eine Näherung des minimalen Umfangs innerhalb des Intervalls $a, b \in (0, 5)$ dar. Außerhalb dieses Bereichs ist das Polynom nicht validiert. Die verbleibenden numerischen Abweichungen beschränken sich wie zuvor auf begrenzte Ausgabegenauigkeit des Modells.

Fazit

In der Fehlerabschätzung wird ersichtlich, dass die Genauigkeit der chemischen Modelle nicht schlechter als die herkömmlicher Rechner ist. Wie in den Copasi-Plots 3.7 und 3.11 zu sehen, konvergiert die Berechnung nach ≈ 180 Sekunden gegen den zu berechnenden Wert. Für Aufgabenteil b) konvergiert die Berechnung zwar schneller, benötigt aber dennoch 120 Sekunden. Es lässt sich festhalten, dass für diese eher simple Kalkulation 3 Minuten Berechnungszeit nicht mit der Rechenzeit vergleichbar ist, die herkömmliche Rechner benötigen. Dieser Umstand widerlegt aber keineswegs das theoretische und auch praktische Interesse an chemischen Analogcomputermodellen, da deren Stärke primär in der Energieunabhängigkeit nach Reaktionsbeginn und einer hohen Datenparallelisierung liegt; zwei Aspekte, die bei dieser Problemstellung nicht zum Tragen kommen.

Anhang

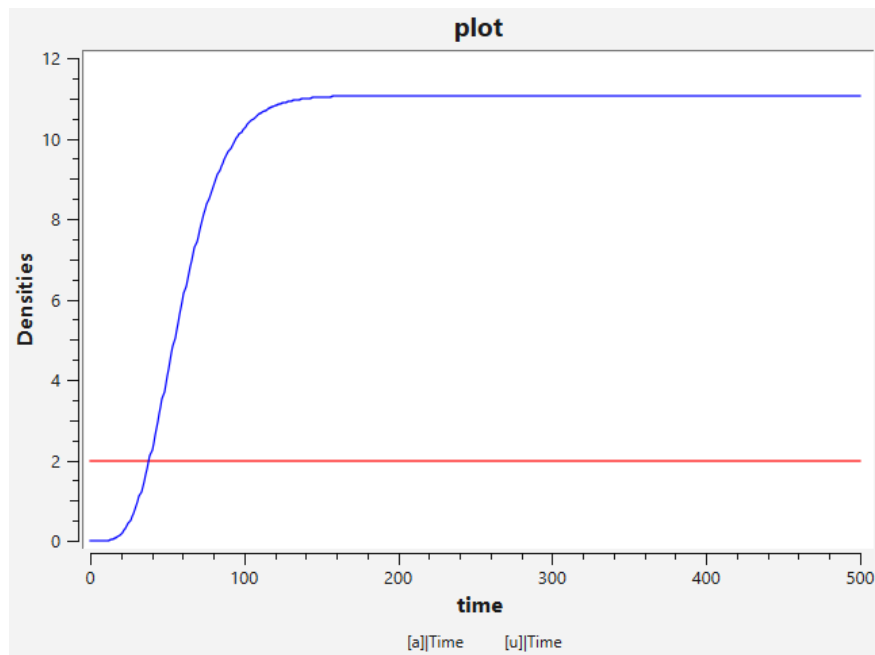


Abbildung 3.10: Copasi-Plot von $u_{\triangle ABD}$ [blau] für $a = b = 3$ [rot]

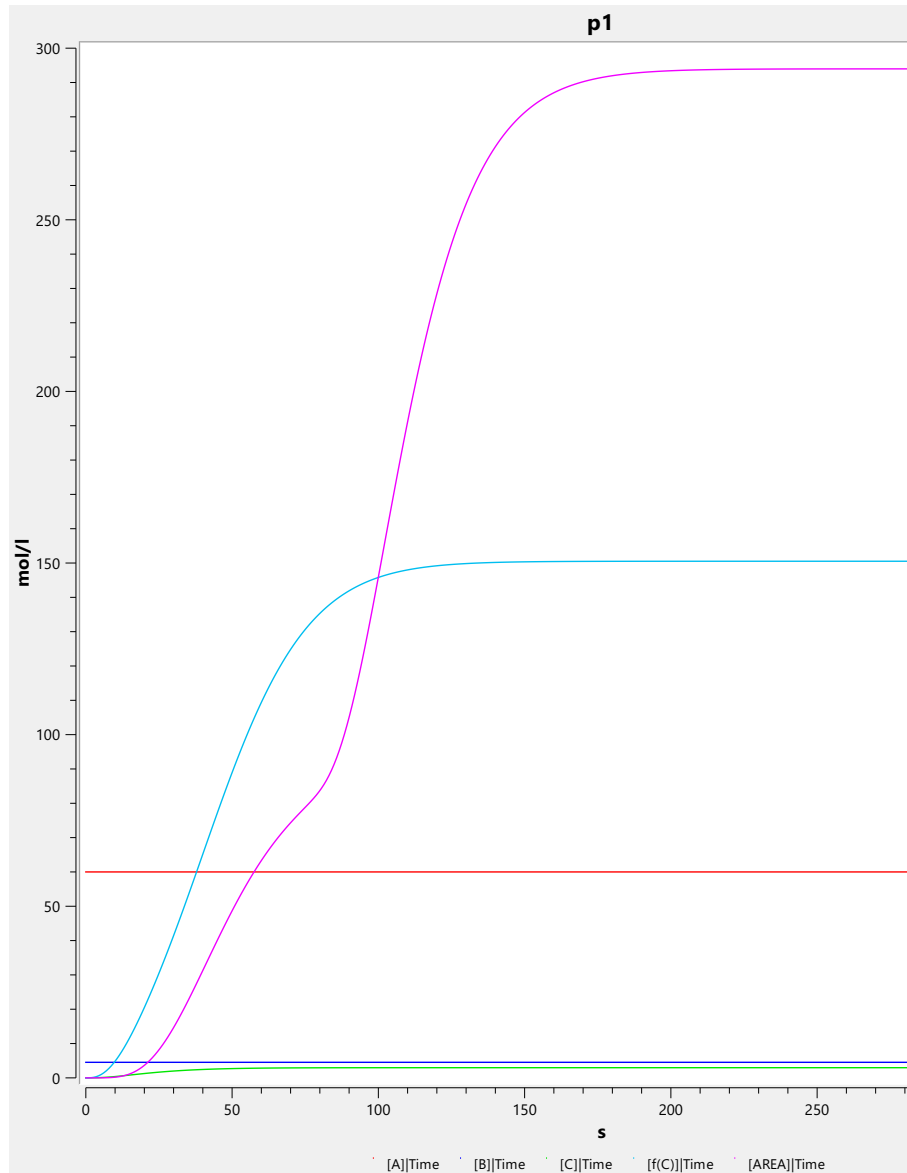


Abbildung 3.11: Copasi-Plot von c [grün], $f(c)$ [cyan] und $A_{\triangle ABC}$ [magenta] für $a = 60$, $f(b) = 60 \rightarrow b = 4.53113$