



FRIEDRICH-SCHILLER-
UNIVERSITÄT
JENA

Fakultät für Mathematik und Informatik
Molekulare Algorithmen

Chemische Berechnung optimaler Öffnungswinkel

Name: Juliane Thum, Patrick Stahl
Matrikelnummer: 200895, 198314
Dozent/in: PD Dr.-Ing. habil. Thomas Hinze
Abgabedatum: 16. Juli 2026

Zusammenfassung

Diese Arbeit zeigt am Beispiel der Maximierung einer zusammengesetzten Fläche aus gleichschenkligen Dreieck und angelagertem Halbkreis, wie mathematische Berechnungen in einem chemischen Analogcomputermodell durchgeführt werden können. Zunächst wird die mathematische Grundlage zur Bestimmung des optimalen Winkels und des maximalen Flächeninhalts hergeleitet. Darauf folgt die Übersetzung der Berechnungsvorschriften in ein chemisches Reaktionsnetzwerk, in dem Eingabe- und Ausgabewerte durch Spezieskonzentrationen kodiert werden. Die Implementierung des Modells wird mithilfe zweier Simulationsstudien evaluiert.

1. Problemstellung

Gegeben ist ein gleichschenkliges Dreieck mit frei wählbarer Schenkellänge s ($s > 0$). An der Basisseite des Dreiecks mit der Länge $2 \cdot r$ ist ein Halbkreis bündig angelagert. Der Winkel α zwischen den beiden Schenkeln des Dreiecks kann im Bereich zwischen 0° und 180° verändert werden. Je nach Größe von α ändert sich auch die grau hinterlegte Fläche (siehe Abbildung 1), die sich aus der Summe von Dreiecksfläche und Halbkreisfläche ergibt.

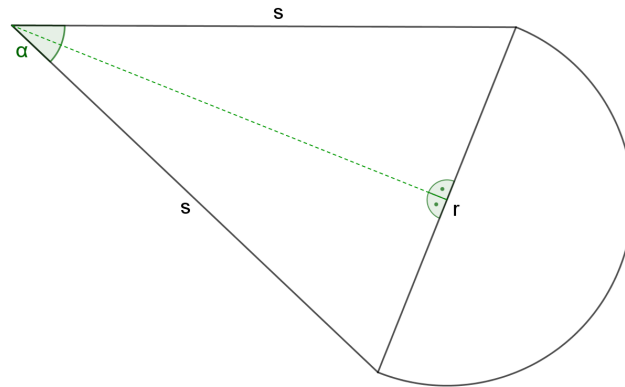


Abbildung 1: Schematische Darstellung des Problems.

2. Mathematische Modellierung

Im Folgenden wird die geometrische Problemstellung mathematisch beschrieben. Ziel ist es, zunächst den Flächeninhalt der zusammengesetzten Figur in Abhängigkeit von der Schenkellänge s und dem Winkel α zu bestimmen. Anschließend wird der Winkel hergeleitet, bei dem dieser Flächeninhalt maximal wird.

2.1. Geometrische Vorüberlegungen

Das betrachtete Dreieck ist gleichschenkelig. Die beiden gleich langen Schenkel besitzen jeweils die Länge $s > 0$. Der eingeschlossene Winkel zwischen diesen beiden Schenkeln ist α . Da der Winkel im Bereich von 0° bis 180° variiert werden kann, betrachten wir im Folgenden

$$\alpha \in [0, \pi]. \quad (1)$$

Für die analytischen Rechnungen wird also das Bogenmaß verwendet. Die Umrechnung in Grad erfolgt über

$$\alpha^\circ = \alpha \cdot \frac{180^\circ}{\pi}. \quad (2)$$

Die Basisseite des Dreiecks besitzt die Länge $2r$. Da das Dreieck gleichschenkelig ist, halbiert die Höhe auf die Basisseite sowohl die Basisseite als auch den Winkel α . Dadurch entstehen zwei kongruente rechtwinklige Dreiecke. In einem dieser Teildreiecke ist s die Hypotenuse, r die halbe Basis und der Winkel an der Spitze beträgt $\frac{\alpha}{2}$.

Damit gilt

$$\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) = \frac{r}{s}. \quad (3)$$

Folglich ergibt sich der Radius des angelagerten Halbkreises und die Höhe des Dreiecks zu

$$r = s \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right), h = s \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right). \quad (4)$$

Diese beiden Beziehungen bilden die Grundlage für die Berechnung der Dreiecks- und Halbkreisfläche.

2.2. Flächenberechnung

Die Gesamtfläche setzt sich aus der Dreiecksfläche und der Halbkreisfläche zusammen. Es gilt also

$$A(\alpha) = A_{\text{dreieck}}(\alpha) + A_{\text{halb}}(\alpha). \quad (5)$$

Zunächst wird die Fläche des Dreiecks betrachtet. Mit der Grundseite $2r$ und der Höhe h gilt

$$A_{\text{dreieck}} = \frac{1}{2} \cdot 2r \cdot h = rh. \quad (6)$$

Durch Einsetzen von (4) folgt

$$A_{\text{dreieck}}(\alpha) = s^2 \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right). \quad (7)$$

Unter Verwendung der trigonometrischen Identität

$$\sin(\alpha) = 2 \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right)$$

ergibt sich

$$A_{\text{dreieck}}(\alpha) = \frac{1}{2} s^2 \sin(\alpha). \quad (8)$$

Der an die Basisseite angelagerte Halbkreis besitzt den Radius r . Da die Fläche eines Kreises mit Radius r gleich πr^2 ist, gilt für den Halbkreis

$$A_{\text{halb}} = \frac{1}{2} \pi r^2. \quad (9)$$

Mit (8) folgt

$$A_{\text{halb}}(\alpha) = \frac{1}{2} \pi s^2 \sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right). \quad (10)$$

Die Gesamtfläche erhält man nun durch Einsetzen von (8) und (10) in (5):

$$A(\alpha) = \frac{1}{2} s^2 \sin(\alpha) + \frac{1}{2} \pi s^2 \sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right). \quad (11)$$

Zur weiteren Berechnung vereinfachen wir die Formel. Mit

$$\sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) = \frac{1 - \cos(\alpha)}{2} \quad (12)$$

ergibt sich

$$A(\alpha) = \frac{1}{2} s^2 \sin(\alpha) + \frac{1}{4} \pi s^2 (1 - \cos(\alpha)). \quad (13)$$

Durch Ausklammern von $\frac{s^2}{4}$ folgt die für die Optimierung verwendete Darstellung

$$A(\alpha) = \frac{s^2}{4} (2 \sin(\alpha) + \pi (1 - \cos(\alpha))). \quad (14)$$

2.3. Winkelberechnung

Gesucht ist nun der Winkel α , für den die Gesamtfläche $A(\alpha)$ maximal wird. Da $s > 0$ gilt, ist s^2 eine positive Konstante; der optimale Winkel hängt somit nicht von der Schenkellänge s ab. Zur Bestimmung des Maximums wird (14) nach α abgeleitet:

$$A'(\alpha) = \frac{s^2}{4} (2 \cos(\alpha) + \pi \sin(\alpha)). \quad (15)$$

Ein inneres Extremum erfüllt

$$A'(\alpha) = 0. \quad (16)$$

Da $\frac{s^2}{4} > 0$ gilt, ist dies äquivalent zu

$$2 \cos(\alpha) + \pi \sin(\alpha) = 0. \quad (17)$$

Umstellen liefert

$$2 \cos(\alpha) = -\pi \sin(\alpha). \quad (18)$$

Für $\alpha \in (0, \pi)$ gilt $\sin(\alpha) > 0$. Daher kann durch $\sin(\alpha)$ dividiert werden. Es folgt

$$\tan(\alpha) = -\frac{2}{\pi}. \quad (19)$$

Da $\tan(\alpha) < 0$ ist und $\alpha \in (0, \pi)$ gilt, liegt der gesuchte Winkel im zweiten Quadranten. Somit ergibt sich

$$\alpha_{\max} = \pi - \arctan\left(\frac{2}{\pi}\right). \quad (20)$$

Numerisch entspricht $\alpha_{\max}$ damit jeweils im Bogen- und Gradmaß:

$$\alpha_{\max} \approx 2.574681149 \text{ rad} \approx 147.52^\circ \quad (21)$$

Zur Überprüfung, dass es sich tatsächlich um ein Maximum handelt, wird die zweite Ableitung betrachtet. Aus (15) folgt

$$A''(\alpha) = \frac{s^2}{4} (-2 \sin(\alpha) + \pi \cos(\alpha)). \quad (22)$$

Für den Winkel $\alpha_{\max}$ liegt α im zweiten Quadranten. Deshalb sind sowohl $\sin(\alpha_{\max}) > 0$ als auch $\cos(\alpha_{\max}) < 0$ und es gilt:

$$A''(\alpha_{\max}) < 0. \quad (23)$$

Der gefundene Winkel beschreibt also ein lokales Maximum. Da an den Randpunkten

$\alpha = 0$ und $\alpha = \pi$ keine größere Fläche entsteht, ist dieses Maximum zugleich das globale Maximum im betrachteten Winkelbereich.

2.4. Maximaler Flächeninhalt

Zur Berechnung des maximalen Flächeninhalts wird (20) in (14) eingesetzt. Sei dazu

$$\beta = \arctan\left(\frac{2}{\pi}\right). \quad (24)$$

Dann gilt

$$\alpha_{\max} = \pi - \beta. \quad (25)$$

Aus

$$\tan(\beta) = \frac{2}{\pi} \quad (26)$$

folgen

$$\sin(\beta) = \frac{2}{\sqrt{\pi^2 + 4}} \quad (27)$$

und

$$\cos(\beta) = \frac{\pi}{\sqrt{\pi^2 + 4}}. \quad (28)$$

Da $\alpha_{\max} = \pi - \beta$ gilt, erhalten wir

$$\sin(\alpha_{\max}) = \frac{2}{\sqrt{\pi^2 + 4}} \quad (29)$$

und

$$\cos(\alpha_{\max}) = -\frac{\pi}{\sqrt{\pi^2 + 4}}. \quad (30)$$

Einsetzen in (14) liefert

$$A_{\max}(s) = \frac{s^2}{4} \left(2 \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi^2 + 4}} + \pi \left(1 - \left(-\frac{\pi}{\sqrt{\pi^2 + 4}} \right) \right) \right). \quad (31)$$

Nach Zusammenfassen der Terme ergibt sich als gesuchte Berechnungsvorschrift für den maximalen Flächeninhalt

$$A_{\max}(s) = \frac{\pi + \sqrt{\pi^2 + 4}}{4} s^2. \quad (32)$$

3. Chemische Modellierung

Nachdem im letzten Abschnitt die mathematischen Berechnungsvorschriften hergeleitet wurden, werden diese nun in ein chemisches Analogcomputermodell übersetzt. Dabei kodieren wir Zahlenwerte durch Konzentrationen chemischer Spezies. Die Berechnung erfolgt damit durch die zeitliche Entwicklung eines Reaktionssystems. Ziel ist es, ein Reaktionsnetzwerk zu konstruieren, dessen stabile Gleichgewichtskonzentrationen den gesuchten Rechenergebnissen entsprechen. Für eine Spezies X , die gegen einen Zielwert g konvergieren soll, kann allgemein eine Dynamik der Form

$$\frac{d[X]}{dt} = g - [X] \quad (33)$$

verwendet werden. Im stationären Zustand (Konzentration der beteiligten Stoffe ändert sich nicht mehr) gilt

$$\frac{d[X]}{dt} = 0. \quad (34)$$

Daraus folgt

$$[X]^* = g. \quad (35)$$

Der Produktionsterm g treibt die Spezies also in Richtung des gewünschten Zielwerts, während der Abbau proportional zu $[X]$ ein unbeschränktes Anwachsen verhindert und den Gleichgewichtswert stabilisiert.

3.1. Kodierung der Eingabe

Die Schenkellänge s wird durch die Konzentration einer Eingabespezies S kodiert:

$$[S] = s. \quad (36)$$

Da s eine frei wählbare Eingabegröße ist und während einer Simulation nicht verändert werden soll, wird S als konstante Spezies behandelt. Das Reaktionssystem darf also von $[S]$ abhängen, verändert $[S]$ selbst aber nicht.

3.2. Modellierung des maximalen Flächeninhalts

Aus (32) ergibt sich für den maximalen Flächeninhalt

$$A_{\max}(s) = \frac{\pi + \sqrt{\pi^2 + 4}}{4} s^2. \quad (37)$$

Zur besseren Lesbarkeit wird die Konstante

$$C = \frac{\pi + \sqrt{\pi^2 + 4}}{4} \approx 1.716446108. \quad (38)$$

Damit kann die Berechnungsvorschrift kompakt als

$$A_{\max}(s) = Cs^2 \quad (39)$$

geschrieben werden. Das chemische Modell muss also die Abbildung

$$s \mapsto Cs^2 \quad (40)$$

realisieren. Dazu wird die Berechnung in zwei Teilschritte zerlegt:

$$S \longrightarrow Q \longrightarrow F. \quad (41)$$

Die Spezies Q dient als Zwischenspezies zur Berechnung von s^2 . Die Spezies F ist die Ausgabespezies für den maximalen Flächeninhalt.

3.2.1. Quadratmodul

Zunächst soll eine Spezies Q so konstruiert werden, dass im stationären Zustand

$$[Q]^* = [S]^2 \quad (42)$$

gilt. Dafür wird die Dynamik

$$\frac{d[Q]}{dt} = [S]^2 - [Q] \quad (43)$$

verwendet. Im stationären Zustand folgt aus (43)

$$0 = [S]^2 - [Q] \quad (44)$$

und damit

$$[Q]^* = [S]^2 = s^2. \quad (45)$$

Dieses Verhalten wird durch zwei Reaktionsprozesse modelliert. Q wird mit einer Rate proportional zu $[S]^2$ produziert und mit einer Rate proportional zu seiner eigenen Konzentration abgebaut:



Die Kombination beider Reaktionen ergibt die gewünschte Dynamik (43). Ist $[Q]$ kleiner

als $[S]^2$, so ist die Nettoänderung positiv und $[Q]$ steigt. Ist $[Q]$ größer als $[S]^2$, so ist die Nettoänderung negativ und $[Q]$ sinkt. Dadurch konvergiert $[Q]$ gegen den stabilen Zielwert s^2 .

3.2.2. Skalierungsmodul für die Fläche

Nachdem Q den Zwischenwert s^2 berechnet, soll die Spezies F gegen den maximalen Flächeninhalt konvergieren. Es soll also gelten:

$$[F]^* = C[Q]^*. \quad (47)$$

Eine direkte Dynamik wäre

$$\frac{d[F]}{dt} = C[Q] - [F]. \quad (48)$$

Da allerdings keine Ratenkonstante größer als 1 sein darf, wird die Konstante C wie folgt aufgeteilt. Es gilt

$$C = 1 + c \quad (49)$$

und damit

$$C[Q] = [Q] + c[Q]. \quad (50)$$

Die Produktion von F wird also durch zwei parallele Reaktionen realisiert und die Abbaugeschwindigkeit bleibt proportional zu $[F]$:



Damit ergibt sich insgesamt

$$\frac{d[F]}{dt} = [Q] + c[Q] - [F]. \quad (52)$$

Mit (49) können wir die Terme wieder zusammenfassen. Im stationären Zustand gilt dann analog zum vorherigen Modul

$$[F]^* = C[Q]^*. \quad (53)$$

Da $[Q]^* = s^2$ gilt, folgt

$$[F]^* = Cs^2 = A_{\max}(s). \quad (54)$$

3.3. Modellierung des optimalen Winkels

Neben dem maximalen Flächeninhalt soll auch der optimale Winkel ausgegeben werden. Aus (20) ist bekannt, dass

$$\alpha_{\max} = \pi - \arctan\left(\frac{2}{\pi}\right) \quad (55)$$

gilt. Dieser Wert hängt nicht von s ab. Der Winkel muss daher nicht aus der Eingabespezies S berechnet werden, sondern kann als konstante Ausgabengröße modelliert werden.

Um auch hier eine Konzentration als Ausgabe zu verwenden und zugleich die Beschränkung der Ratenkonstanten einzuhalten, wird statt des direkten Winkels im Bogenmaß der normierte Winkel

$$\Theta_n = \frac{\alpha_{\max}}{\pi} \quad (56)$$

verwendet. Damit gilt

$$\Theta_n = \frac{\pi - \arctan\left(\frac{2}{\pi}\right)}{\pi} \approx 0.819546. \quad (57)$$

Dieser Wert liegt unter 1 und kann daher als zulässiger Produktionsterm verwendet werden. Für das Modell wird die Referenzkonstante

$$\theta_{\text{ref}} = \frac{\pi - \arctan\left(\frac{2}{\pi}\right)}{\pi} \quad (58)$$

eingeführt.

Die Spezies Θ_n soll gegen diesen Wert konvergieren. Dafür wird die Dynamik

$$\frac{d[\Theta_n]}{dt} = \theta_{\text{ref}} - [\Theta_n] \quad (59)$$

verwendet. Im stationären Zustand gilt damit

$$[\Theta_n]^* = \theta_{\text{ref}}. \quad (60)$$

Dieses Modul wird durch eine konstante Produktion und einen linearen Abbau realisiert. Es gilt



Der tatsächliche Winkel kann aus der normierten Ausgabe durch Multiplikation mit π zurückgewonnen werden. Es gilt

$$\alpha_{\max} = \pi \Theta_n. \quad (62)$$

3.4. Gesamtes Reaktionssystem

Das vollständige chemische Analogcomputermodell besteht aus der Eingabespezies S , der Zwischenspezies Q , der Flächenausgabe F und der normierten Winkelausgabe Θ_n . Die zugehörigen Differentialgleichungen lauten:

$$\frac{d[S]}{dt} = 0, \quad (63)$$

$$\frac{d[Q]}{dt} = [S]^2 - [Q], \quad (64)$$

$$\frac{d[F]}{dt} = [Q] + c[Q] - [F], \quad (65)$$

$$\frac{d[\Theta_n]}{dt} = \theta_{\text{ref}} - [\Theta_n]. \quad (66)$$

Die Konstanten sind

$$c = \frac{\pi + \sqrt{\pi^2 + 4}}{4} - 1 \approx 0.716446108 \quad (67)$$

und

$$\theta_{\text{ref}} = \frac{\pi - \arctan\left(\frac{2}{\pi}\right)}{\pi} \approx 0.819546. \quad (68)$$

Die entsprechenden Reaktionen sind in Tabelle 1 zusammengefasst.

Reaktion	Reaktionsschema	Rate
R_1	$\emptyset \rightarrow Q$	$[S]^2$
R_2	$Q \rightarrow \emptyset$	$[Q]$
R_3	$\emptyset \rightarrow F$	$[Q]$
R_4	$\emptyset \rightarrow F$	$c[Q]$
R_5	$F \rightarrow \emptyset$	$[F]$
R_6	$\emptyset \rightarrow \Theta_n$	θ_{ref}
R_7	$\Theta_n \rightarrow \emptyset$	$[\Theta_n]$

Tabelle 1: Reaktionen des chemischen Analogcomputermodells.

Das Gleichgewicht des Modells liefert die gesuchten Berechnungsergebnisse:

$$[Q]^* = s^2, \quad (69)$$

$$[F]^* = A_{\text{max}}(s) = \frac{\pi + \sqrt{\pi^2 + 4}}{4} s^2, \quad (70)$$

und

$$[\Theta_n]^* = \frac{\alpha_{\text{max}}}{\pi}. \quad (71)$$

Damit werden sowohl die Flächenberechnung als auch die Winkelberechnung durch stabile Konzentrationen des Reaktionssystems implementiert.

3.5. Umsetzung in COPASI

Das beschriebene Reaktionssystem wurde anschließend in COPASI als deterministisches Reaktionsmodell umgesetzt. Die Eingabespezies S wurde dabei als konstante Spezies modelliert, während Q , F und Θ_n durch Reaktionen bestimmt werden. Für die Produktionsraten $[S]^2$, $c[Q]$ und θ_{ref} wurden benutzerdefinierte kinetische Gesetze verwendet.

Die Zeitentwicklung des Systems wurde als deterministischer Zeitverlauf simuliert. Die Spezies Q , F und Θ_n starten jeweils mit Anfangskonzentration 0 und konvergieren im Verlauf der Modellzeit gegen ihre jeweiligen Zielwerte. Die Simulationsergebnisse und die Bestimmung der chemischen Rechenzeit werden im folgenden Abschnitt untersucht. Zur Nachvollziehbarkeit der Implementierung sind Ausschnitte der relevanten COPASI-Funktionsdefinitionen und Reaktionseinstellungen im Anhang dokumentiert.

4. Simulationsstudien

Zur Überprüfung des chemischen Analogcomputermodells wurden zwei Simulationsstudien durchgeführt. In der ersten Studie wird untersucht, ob das Modell für verschiedene Eingabewerte s die korrekten stationären Ausgabewerte berechnet. In der zweiten Studie wird bestimmt, nach welcher Modellzeit alle relevanten Ausgabespezies eine Genauigkeit von mindestens 99.9 % erreicht haben.

Alle Simulationen wurden als deterministische Zeitverläufe in COPASI durchgeführt. Die Eingabe wurde jeweils durch die Konzentration der Spezies S kodiert. Die Spezies Q , F und Θ_n wurden mit Anfangskonzentration 0 initialisiert.

4.1. Studie 1: Validierung der Berechnung für verschiedene Eingaben

In der ersten Simulationsstudie wurde überprüft, ob das Modell für verschiedene Werte der Eingabespezies S die erwarteten stationären Werte liefert. Dazu wurde ein Parameter-Scan über die Anfangskonzentration von S durchgeführt. Für jeden Eingabewert wurde ein Zeitverlauf bis zur Modellzeit $T = 30$ mit einer Intervallgröße von $\Delta t = 0.1$ und 300 Intervallen simuliert. Die im Modell berechneten Konzentrationen besitzen folgende Bedeutung: Die Spezies Q soll gegen den Quadratwert der Eingabe konvergieren,

$$[Q]^* = s^2. \quad (72)$$

Die Spezies F repräsentiert den maximalen Flächeninhalt und soll gegen

$$[F]^* = A_{\max}(s) = \frac{\pi + \sqrt{\pi^2 + 4}}{4} s^2 \quad (73)$$

konvergieren. Die Spezies Θ_n kodiert den normierten optimalen Winkel. Da der optimale Winkel unabhängig von s ist, ist auch der Zielwert von Θ_n für alle Eingabewerte gleich:

$$[\Theta_n]^* = \frac{\pi - \arctan\left(\frac{2}{\pi}\right)}{\pi} \approx 0.819546. \quad (74)$$

Am Ende der Simulation wurden die Werte der Spezies Q , F und Θ_n mit den theoretisch erwarteten Gleichgewichtswerten verglichen. Die Ergebnisse des Parameter-Scans sind in Tabelle 2 dargestellt. Die Simulationsergebnisse zeigen, dass alle berechneten Werte der Spezies Q , F und Θ_n mit den theoretisch erwarteten Gleichgewichtswerten übereinstimmen.

$s = [S]_0$	$[Q](30)$	$[Q]^*$	$[F](30)$	$[F]^* = A_{\max}(s)$	$[\Theta_n](30)$	$[\Theta_n]^*$
0.5	0.25	0.25	0.429112	0.429112	0.819546	0.819546
1	1	1	1.71645	1.71645	0.819546	0.819546
2	4	4	6.86578	6.86578	0.819546	0.819546
3	9	9	15.4480	15.4480	0.819546	0.819546
5	25	25	42.9112	42.9112	0.819546	0.819546

Tabelle 2: Endwerte des Parameter-Scans zur Modellzeit $t = 30$ im Vergleich mit den theoretischen Gleichgewichtswerten.

4.2. Studie 2: Bestimmung der chemischen Rechenzeit

In der zweiten Simulationsstudie wurde untersucht, nach welcher Modellzeit alle relevanten Ausgabespezies eine Genauigkeit von 99.9 % erreichen. Dazu wurde exemplarisch der Eingabewert $s = 2$ verwendet. Für diesen Eingabewert gelten die Zielwerte $[Q]^* = 4$, $[F]^* \approx 6.865784432$ und $[\Theta_n]^* \approx 0.819546$ wie in Tabelle 2 bereits dargestellt. Ein Ergebnis gilt als mit 99.9 % Genauigkeit vorliegend, wenn der relative Fehler höchstens 0.001 beträgt. Für eine Ausgabespezies X mit Zielwert X^* bedeutet dies

$$\frac{|X^* - X(t)|}{X^*} \leq 0.001. \quad (75)$$

Da alle betrachteten Spezies monoton von 0 gegen ihren Zielwert konvergieren, kann äquivalent geprüft werden, ob

$$X(t) \geq 0.999X^* \quad (76)$$

gilt. Tabelle 3 zeigt für jede Spezies jeweils den exakten Zielwert X^* , den Wert, der mindestens vorliegen muss um eine Genauigkeit von 99.9 % zu erreichen, sowie die erste Modellzeit, zu der dieser Wert erreicht wurde exemplarisch für $s = 2$.

Spezies	Zielwert X^*	99.9 %-Schwelle	erste beobachtete Modellzeit
Q	4	3.996	7.0
F	6.865784432	6.858918648	9.3
Θ_n	0.819546	0.818727	7.0

Tabelle 3: Bestimmung der Modellzeit bis zum Erreichen einer Genauigkeit von 99.9 % für $s = 2$.

Die simulativ beobachtete Rechenzeit kann anhand der Differentialgleichung für Q nachvollzogen werden. Für $s = 2$ gilt im stationären Zustand $[Q]^* = s^2 = 4$. Die Dynamik von Q ist durch

$$\frac{d[Q]}{dt} = [Q]^* - [Q] \quad (77)$$

Da es sich hierbei um eine lineare Differentialgleichung erster Ordnung mit konstantem Zielwert $[Q]^*$ handelt und Q mit der Anfangskonzentration $[Q](0) = 0$ initialisiert wird,

ergibt sich die Lösung

$$[Q](t) = [Q]^* (1 - e^{-t}). \quad (78)$$

Zur Bestimmung der Modellzeit bis 99.9 % Genauigkeit wird (78) in die Bedingung

$$[Q](t) \geq 0.999[Q]^* \quad (79)$$

eingesetzt. Dadurch folgt

$$[Q]^* (1 - e^{-t}) \geq 0.999[Q]^*. \quad (80)$$

Da $[Q]^* > 0$ gilt, kann durch $[Q]^*$ dividiert werden:

$$1 - e^{-t} \geq 0.999. \quad (81)$$

Umstellen liefert

$$e^{-t} \leq 0.001. \quad (82)$$

Durch Logarithmieren erhält man

$$t \geq \ln(1000). \quad (83)$$

Damit ergibt sich

$$t \geq 6.91. \quad (84)$$

Für Q wird theoretisch also erwartet, dass die 99.9 %-Schwelle nach etwa 6.91 Modellzeiteinheiten erreicht wird. Die in Tabelle 3 beobachtete erste Modellzeit von $t = 7.0$ stimmt damit überein. Die leichte Abweichung ergibt sich daraus, dass der simulierte Zeitverlauf mit einer endlichen Schrittweite ausgewertet wurde. Analog dazu könnte auch für Spezies F und Θ_n die theoretische Rechenzeit bestimmt werden, aus didaktischen Gründen wird dies hier jedoch nicht weiter ausgeführt.

5. Fazit

In der vorliegenden Arbeit wurde gezeigt, wie die Maximierung einer aus einem gleichschenkligen Dreieck und einem angelagerten Halbkreis zusammengesetzten Fläche mithilfe eines chemischen Analogcomputermodells implementiert werden kann. Die Simulationen in COPASI bestätigen, dass das Modell für verschiedene Eingabewerte die erwarteten Werte für den maximalen Flächeninhalt und den normierten optimalen Winkel liefert. Für den exemplarischen Eingabewert $s = 2$ lagen alle Ausgabewerte nach etwa 9.3 Modellzeiteinheiten mit einer Genauigkeit von mindestens 99.9% vor. Aufbauend auf diesem Modell könnten weitere geometrische Optimierungsprobleme betrachtet werden, beispielsweise zusammengesetzte Flächen mit anderen Kreissegmenten oder die chemische Berechnung zusätzlicher geometrischer Kenngrößen.

A. COPASI-Modell

Im Folgenden werden die für die Implementierung relevanten COPASI-Definitionen tabellarisch zusammengefasst. Das vollständige Projekt inklusive COPASI-Modell und Auswertungsdateien ist öffentlich auf GitHub verfügbar: <https://github.com/PatrickStahl/MolekulareAlgorithmen>

A.1. Benutzerdefinierte Funktionen

Name	Typ	Mathematische Beschreibung
v_square	userdefined	$S \cdot S$
v_scaled_Q	userdefined	$c \cdot Q$
v_const_theta	userdefined	θ_{ref}

Tabelle 4: Benutzerdefinierte kinetische Funktionen in COPASI.

A.2. Spezies

Name	Kompartiment	Typ	Anfangskonzentration
S	cell	fixed	s , exemplarisch 2
Q	cell	reactions	0
F	cell	reactions	0
Theta_n	cell	reactions	0

Tabelle 5: Im Modell verwendete Spezies.

A.3. Globale Größen

Name	Typ	Wert
c_area	fixed	0.716446108
theta_ref	fixed	0.819545628

Tabelle 6: Globale Modellparameter.

A.4. Reaktionen

Name	Reaktionsschema	Rate Law
R_Q_prod	$\emptyset \rightarrow Q; S$	v_square
R_Q_deg	$Q \rightarrow \emptyset$	Mass action, $k = 1$
R_F_prod_1	$\emptyset \rightarrow F; Q$	v_scaled_Q
R_F_prod_c	$\emptyset \rightarrow F; Q$	v_scaled_Q
R_F_deg	$F \rightarrow \emptyset$	Mass action, $k = 1$
R_Theta_prod	$\emptyset \rightarrow \Theta_n$	v_const_theta
R_Theta_deg	$\Theta_n \rightarrow \emptyset$	Mass action, $k = 1$

Tabelle 7: Reaktionen des COPASI-Modells. Spezies hinter dem Semikolon wirken als Modifier und werden durch die jeweilige Reaktion nicht verbraucht.

A.5. Parameterzuordnungen der Reaktionen

Da die Funktion v_scaled_Q mehrfach verwendet wird, sind die jeweiligen Parameterzuordnungen in Tabelle 8 separat aufgeführt.

Reaktion	Funktionssymbol	Zugeordnetes Modellobjekt / Wert
R_Q_prod	S	Spezies S
R_F_prod_1	Q	Spezies Q
R_F_prod_1	c	1
R_F_prod_c	Q	Spezies Q
R_F_prod_c	c	globale Größe c_area
R_Theta_prod	theta_ref	globale Größe theta_ref

Tabelle 8: Relevante Parameterzuordnungen der benutzerdefinierten kinetischen Funktionen.

Die Zuordnung in Tabelle 8 stellt insbesondere sicher, dass für die Flächenausgabe zwei parallele Produktionsreaktionen mit den Raten $[Q]$ und $c[Q]$ verwendet werden. Damit ergibt sich insgesamt

$$\frac{d[F]}{dt} = [Q] + c[Q] - [F].$$

Alle verwendeten Ratenkonstanten besitzen Werte kleiner oder gleich 1.

Tabellenverzeichnis

1.	Reaktionen des chemischen Analogcomputermodells.	11
2.	Endwerte des Parameter-Scans zur Modellzeit $t = 30$ im Vergleich mit den theoretischen Gleichgewichtswerten.	14
3.	Bestimmung der Modellzeit bis zum Erreichen einer Genauigkeit von 99.9 % für $s = 2$	14
4.	Benutzerdefinierte kinetische Funktionen in COPASI.	17
5.	Im Modell verwendete Spezies.	17
6.	Globale Modellparameter.	17
7.	Reaktionen des COPASI-Modells. Spezies hinter dem Semikolon wirken als Modifier und werden durch die jeweilige Reaktion nicht verbraucht.	18
8.	Relevante Parameterzuordnungen der benutzerdefinierten kinetischen Funk- tionen.	18