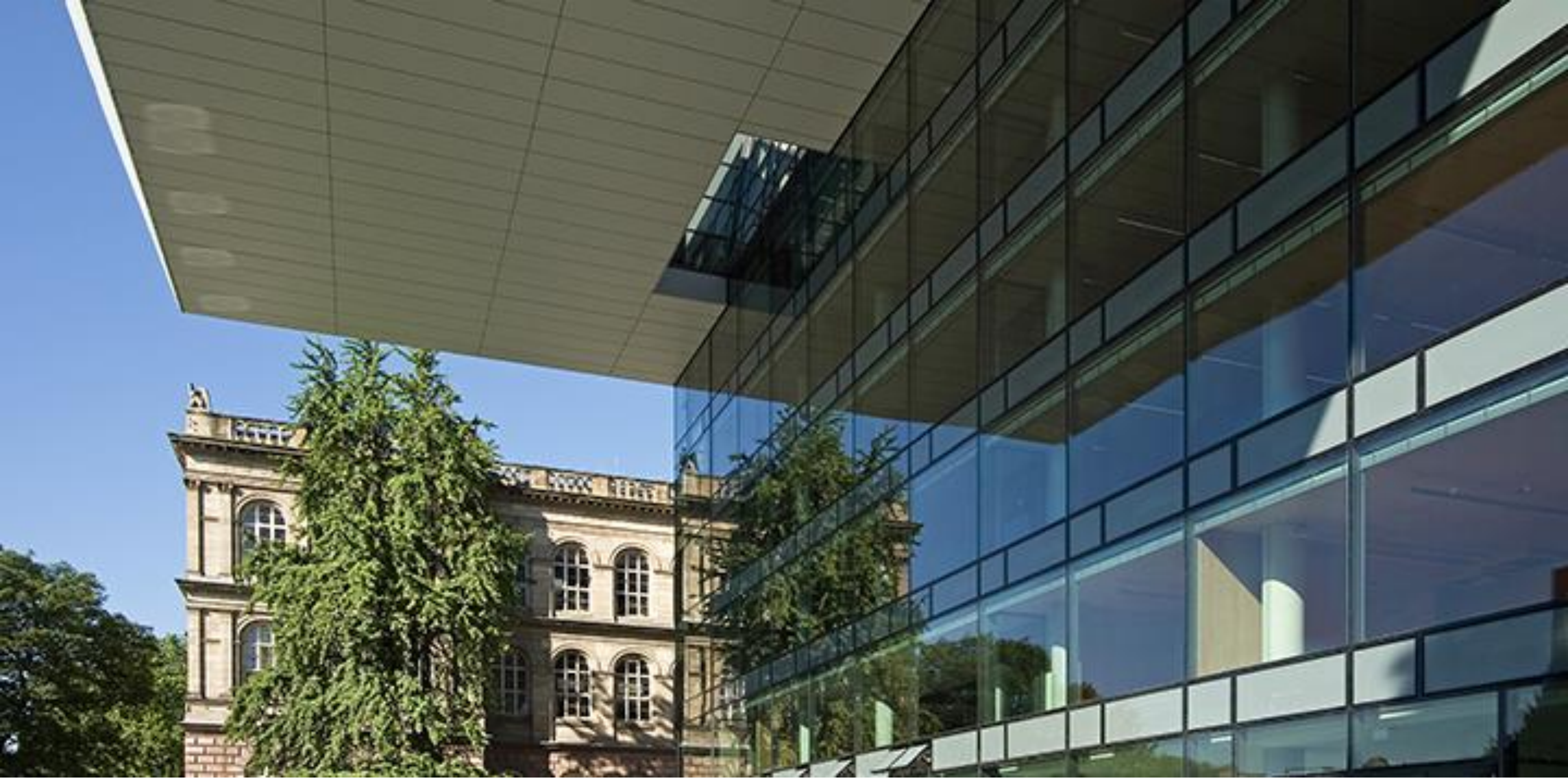

Mathematik in den Naturwissenschaften

Demonstration interaktiver Übungsaufgaben in unterschiedlichen Fachkontexten

IMMC | RWTH AACHEN UNIVERSITY

Lehrstuhl A für Mathematik | RWTH AACHEN UNIVERSITY

Studienverlaufsplan Chemie B. Sc.

Mathematische Ausbildung für Chemiestudierende

- Gelehrt im 1./2. Semester: Differential-/Integralrechnung
- Benötigt im 3./4. Semester: Lineare Algebra sowie Gruppen-/Darstellungstheorie (aber nicht gelehrt)

<table>
<tr><th>1. Semester</th><th>2. Semester</th><th>3. Semester</th><th>4. Semester</th><th>5. Semester</th><th>6. Semester</th></tr>
<tr><td rowspan="2">Allgemeine Chemie 1</td><td rowspan="2">Allgemeine Chemie 2</td><td colspan="2">Anorganische Chemie A</td><td>Anorganische Chemie F</td><td rowspan="3">Moderne Methoden</td></tr>
<tr><td>Organische Chemie A</td><td></td><td>Organische Chemie F</td></tr>
<tr><td></td><td></td><td colspan="2">Physikalische Chemie A</td><td>Physikalische Chemie F</td></tr>
<tr><td></td><td></td><td colspan="2">Technische und Makromolek. Chemie (TMC) A</td><td>TMC F</td><td></td></tr>
<tr><td></td><td></td><td>Chemie in der berufl. Praxis</td><td>Angewandte Spektroskopie</td><td></td><td>Computational Chemistry</td></tr>
<tr><td></td><td></td><td>Math. Methoden und Symmetrie</td><td></td><td colspan="2">Studentische Übungsbetreuung</td></tr>
<tr><td colspan="2">Mathematik</td><td></td><td></td><td></td><td>Bachelor-Arbeit</td></tr>
<tr><td colspan="3">Physik</td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td colspan="6">Wahlbereich</td></tr>
</table>

Mathematische Ausbildung für Chemiestudierende

Studierenden-Feedback auf ein Lernspiel

Ein Formelsatz-Plugin für das Forum wäre schön! :-)

Musterlösungen und insgesamt mehr Übungsaufgaben (vom Klausurschwierigkeitsgrad) wären klasse!

Kein Story, bitte. Aufgaben, Aufgaben, Aufgaben. Und bitte knallhart!

Technische Chemie II

- Prüfungsleistung bisher: Studierende schreiben eine Abschlussklausur
  - Prüfungsinhalte sehen keine Methoden der Linearen Algebra vor
- Prüfungsleistung 2020: Studierende können eine Bonusaufgabe erstellen
  - Wiederaufnahme von Inhalten der Linearen Algebra in die Vorlesung
  - Werden sich die Studierenden an Lineare Algebra herantrauen?

Die Bonusaufgabe
Erstellen Sie eine Übungsaufgabe zum Stoff dieser Vorlesung inklusive der Musterlösung und der Erklärung. Sie erhalten auf die Klausurnote einen Bonus.

Von 158 Studierenden reichten 63 eine Aufgabe ein, davon 5 zu Linearer Algebra.

Ein Beispiel

a) In einem System liegen die folgenden Stoffe vor: A_2B, A_2BC, D_3A_2B, DA_2B, DA_8B_4C, A_2BC_3, D_3C, DC. Wie viele Schlüsselkomponenten gibt es? Machen Sie einen Vorschlag, welche Stoffe man als Schlüsselkomponenten nutzen könnten.

Zunächst wird die Element-Spezies Matrix erstellt.

		A_2B	A_2BC	D_3A_2B	DA_2B	DA_8B_4C	A_2BC_3	D_3C	DC
	A	2	2	2	2	8	2	0	0
L	B	1	1	1	1	4	1	0	0
	C	0	1	0	0	1	3	1	1
	D	0	0	3	1	1	0	3	1

Es lässt sich erkennen, dass es einen Rangabfall gibt, da A und B linear abhängig sind. Für die Anzahl der Schlüsselkomponenten gilt jetzt: $R = N - L = 8 - 3 = 5$

Die Reihe für B wird also eliminiert, sodass die folgende Matrix entsteht:

		A_2B	A_2BC	D_3A_2B	DA_2B	DA_8B_4C	A_2BC_3	D_3C	DC
	A	2	2	2	2	8	2	0	0
L	C	0	1	0	0	1	3	1	1
	D	0	0	3	1	1	0	3	1

Die L x L Untermatrix (grau hinterlegt) zeigt jetzt keinen Rangabfall mehr. Bei den Stoffen außerhalb der Untermatrix (DA_2B, DA_8B_4C, A_2BC_3, D_3C, D) handelt es sich also um ein mögliches Set an Schlüsselkomponenten. Diese Matrix ist nicht die einzig mögliche Lösung.

Reaktionstechnik

- Prüfungsleistung bisher: Studierende schreiben eine Abschlussklausur
  - Prüfungsinhalte sehen keine Methoden der Linearen Algebra vor
- Prüfungsleistung 2020: Studierende erstellen eine Abschlussklausur
  - Wiederaufnahme von Inhalten der Linearen Algebra in die Vorlesung
  - Werden sich die Studierenden an Lineare Algebra herantrauen?

Die Hausaufgabe:

Erstellen Sie eine Klausur zum Stoff dieser Vorlesung (Rühren und Mischen in homogenen, pseudohomogenen und in mehrphasigen Systemen, Dimensionsanalyse, Korrelationen – siehe das Material im Moodle-Lernraum) inklusive der Musterlösung sowie einen etwa einseitigen Kommentar Ihrer Arbeit.

Ein Beispiel

Der Ingenieur Peter schlägt eine neue Verfahrensanlage vor. Laut seinen Angaben spielen die folgenden Parameter (in der gegebenen Reihenfolge) eine entscheidende Rolle:

- Flüssigkeitsdichte ρ
- Rührerdurchmesser D
- Tankdurchmesser T
- Kinematische Viskosität ν
- Gravitationskraft g

Ingenieurin Alexa fällt nach kurzer Zeit auf, dass sie ein ähnliches Experiment bereits schon einmal in ihrem Studium mitbekommen hat und glaubt sich daran zu erinnern, dass hier die Galilei-Zahl $\mathrm{Ga} = g \cdot D^3 \cdot \nu^{-2}$ die systemrelevante dimensionslose Kennzahl sein muss.

a) Prüfen Sie die Aussage von Ingenieurin Alexa, indem Sie selber die dimensionslose Kennzahl herleiten. **(7P.)**

Ein Beispiel

Rührerdurchmesser D und Tankdurchmesser T können durch die charakteristische Länge L ausgedrückt werden, daher lautet die Relevanzliste R wie folgt: R = {ρ, L, v, g}.

Die Dimensionsmatrix wird aufgestellt:

	ρ	L	v	g
M	1	0	0	0
L	-3	1	2	1
T	0	0	-1	-2

Wenn die Dimensionsmatrix aus einer 3x4-Matrix mit den korrekten physikalischen Größen besteht, dann **1P.**, *wenn Rührer- und Tankdurchmesser nicht durch die charakteristische Länge zusammengefasst wurden, dann stattdessen* **0P.**
Korrekte Einheiten als Matrixelemente **2P.**, *für jeden Fehler hierbei je* **1P.** *Abzug.*

Die Kernmatrix wird diagonalisiert:

	ρ	L	v	g
M	1	0	0	0
L	0	1	0	-3
T	0	0	1	2

Wenn die Dimensionsmatrix im Ansatz korrekt umgeformt wurde **1P.**, *wenn alle Matrixelemente korrekt sind* **1P.** *zusätzlich.*

Aus der Restematrix lässt sich die Kennzahl $\Pi = \frac{g}{L^{-3} \cdot v^2} = \mathrm{Ga}$ **(1P.)** entnehmen, sodass die Aussage von Ingenieurin Alexa bestätigt werden kann. **(1P.)**

Dissertation: Mathematische Module für Chemiker

- Ausgangspunkt: „Mathematische Methoden und Symmetrien der Chemie“
- Ziel: Blended-Learning-Konzept „Lineare Algebra für Chemiker“
- Zentraler Aspekt: Interaktive Onlineaufgaben
  - „Man lernt Mathematik erst dann, wenn man Mathematik macht“
- Organisatorische Rahmenbedingungen: keine Hausaufgaben, keine Korrektur
- Zielvorgabe: Interaktive Onlineaufgaben
  - Umfangreiches Übungsangebot für Standardaufgaben
  - Randomisierte Aufgaben (Wiederholungsmöglichkeit)
  - Individuelles Feedback statt generischer Musterlösung
- STACK bietet Möglichkeiten um solche Aufgaben zu erstellen

Kurzinfo: Was ist STACK?

- Fragetyp für Moodle-Test
  - welcher ein CAS zur Erstellung und Auswertung der Fragen einbindet
- Erweitert Funktionalität der Moodle-Tests
  - Komplexe (mathematische) Fragestellungen
  - Randomisierte, strukturierte Aufgaben
  - Spezifisches Feedback basierend auf eingegebener Antwort
- Auswertung der Eingaben nach folgendem Pseudo-Code (stark vereinfacht)

```
if
        vereinfache(studierenden_antwort – dozenten_antwort) = 0
then
        bewertung = 1,
else
        bewertung =0.
```

- „vereinfache“: beliebige Weiterverarbeitung von „studierenden_antwort“

Aufgaben in verschiedenen Kontexten

- Bestimmung von Eigenwerten und Eigenvektoren einer Matrix
  - Standardverfahren in vielen Anwendungen
  - Typische Übungs-/Klausuraufgabe
- Reihenwert einer Geometrische Reihe
  - Typische Übungs-/Klausuraufgabe
  - Spezifisches Feedback bei bekannten Fehlern statt generischer Musterlösung
- Punktgruppenbestimmung von Molekülen
  - Symmetrie von Molekülen in chemischen Fragestellungen relevant
  - Vordergründig keine Mathematik, STACK als Hilfsmittel für randomisierte Erzeugung
- Bestimmung von Schlüsselkomponenten
  - Lineare Algebra als Rechenwerkzeug in der Reaktionstechnik

Berechnung von Eigenwerten und Eigenvektoren (Offline)

Frage nachbessern | Frage-Tests und eingesetzte Variante

Betrachten Sie die Matrix $M = \begin{pmatrix} 17 & -6 & -3 \\ 12 & -9 & -5 \\ 21 & -12 & -5 \end{pmatrix}$. Bestimmen Sie die Eigenwerte λ_i und die zugehörigen Eigenvektoren v_i von M und geben Sie diese ein.

$\lambda_1 =$

$v_1 =$

$\lambda_2 =$

$v_2 =$

$\lambda_3 =$

$v_3 =$

Anmerkungen zur Eingabe:

- Eigenvektoren sind nicht eindeutig bestimmt, d.h. nach der Durchführung des Gauß-Jordan-Algorithmus erhalten Sie einen Lösungsvektoren mit Variablen. Trennen Sie den Lösungsvektor anhand der verwendeten Variablen auf, d.h. erstellen Sie für jede verwendete Variable einen eigenen Vektor und setzen Sie anschließend für jede Variable eine 1 (oder eine beliebige andere Zahl $\neq 0$) ein und verwenden Sie den so entstandenen Vektor für die Eingabe.
- Eine Matrix $M \in \mathbb{R}^{3\times 3}$ besitzt höchstens 3 Eigenwerte bzw. 3 linear unabhängige Eigenvektoren. Sollten Sie bei der Bearbeitung weniger Eigenwerte bzw. Eigenvektoren als Ergebnis erhalten, tragen Sie für die verbleibenden Eigenwerte und Vektoren in jedes Feld bitte eine 0 ein.
- Falls Sie zu einem Eigenwert mehr als einen linear unabhängigen Eigenvektor erhalten, tragen Sie den Eigenwert entsprechend oft in einem passenden Antwortfeld zusammen mit einem der linear unabhängigen Eigenvektoren ein.

Geometrische Reihe – Aufgabenstellung (Offline)

Bestimmen Sie den Grenzwert der folgenden Reihe:

$$\sum_{k=1}^{\infty} \left(-\frac{1}{2}\right)^k$$

Mathematischer Hintergrund: für $|q| < 1$ ist die geometrische $\sum_{k=0}^{\infty} q^k$ absolut konvergent und wir können den Reihenwert mit einer einfachen Formel berechnen.

$$\sum_{k=0}^{\infty} q^k = \frac{1}{1-q}.$$

- Zwei häufige Fehler
  - Nichtbeachtung des Startwerts (k=0 notwendig zur Anwendung der Formel)
  - Vorzeichenfehler in der Formel (1+q statt 1-q)
- Spezifische Rückmeldung bei Auftreten dieser Fehler wünschenswert

Geometrische Reihe – Falscher Startwert (Offline)

✖ Incorrect answer.

Das ist leider falsch. Um die Formel für den Reihenwert einer geometrischen Reihe verwenden zu können, muss der Startwert $k = 0$ sein:

$$\sum_{k=1}^{\infty}\left(-\frac{1}{2}\right)^k = -1 + \sum_{k=0}^{\infty}\left(-\frac{1}{2}\right)^k = -1 + \frac{1}{1 - -\frac{1}{2}} = -1 + \frac{2}{3}$$

- System erkennt diesen Fehler und geht gezielt auf den Fehler ein

Geometrische Reihe – Falsche Formel (Offline)

✖ Incorrect answer.

Das ist leider falsch, die verwendete Formel für den Reihenwert einer geometrischen Reihe ist nicht korrekt.

$$\sum_{k=1}^{\infty} q^k = -1 + \sum_{k=0}^{\infty} q^k = -1 + \frac{1}{1-q} \neq -1 + \frac{1}{1+q} = 1$$

- Erneut: System erkennt diesen Fehler und geht gezielt auf den Fehler ein

Geometrische Reihe – Unbekannter Fehler (Offline)

✘ Incorrect answer.

Das ist leider falsch. Wir wollen die Formel für den Reihenwert einer geometrischen Reihe verwenden:

$$\sum_{k=1}^{\infty}\left(-\frac{1}{2}\right)^k = -1 + \sum_{k=0}^{\infty}\left(-\frac{1}{2}\right)^k = -1 + \frac{1}{1 - -\frac{1}{2}} = -\frac{1}{3}$$

- Bei einem unbekannten/unerwarteten Fehler: allgemeine Musterlösung

Punktgruppenbestimmung (Offline)

Bestimmen Sie die Punktgruppe des Moleküls SiF_2Cl_2.

Anmerkung zur Eingabe: jede Punktgruppe lässt sich durch Angabe von 3 Parametern eindeutig beschreiben.

Bestimmen Sie die Punktgruppe des Moleküls CD_2Br_2.

Anmerkung zur Eingabe: jede Punktgruppe lässt sich durch Angabe von 3 Parametern eindeutig beschreiben.

Bestimmen Sie die Punktgruppe des Moleküls CCl_2H_2.

Anmerkung zur Eingabe: jede Punktgruppe lässt sich durch Angabe von 3 Parametern eindeutig beschreiben.

- STACK nicht für mathematische Zwecke sondern „Randomisierung mit Struktur“

Abgasreinigung eines Otto-Motors (Offline)

Frage nachbessern | Frage-Tests und eingesetzte Va

Betrachte das folgende Reaktionsschema, welches die in der Abgasreinigung eines Otto-Motors am Drei-Wege-Katalysator ablaufenden Reaktionen umfasst.

$$\mathrm{CO} + \tfrac{1}{2}\mathrm{O_2} \rightleftharpoons \mathrm{CO_2}$$

$$\mathrm{C}_x\mathrm{H}_y + (x + \frac{y}{4})\mathrm{O_2} \rightleftharpoons x\mathrm{CO_2} + \frac{y}{2}\mathrm{H_2O}$$

$$\mathrm{NO} + \mathrm{CO} \rightleftharpoons \tfrac{1}{2}\mathrm{N_2} + \mathrm{CO_2}$$

$$\mathrm{NO} + \mathrm{H_2} \rightleftharpoons \tfrac{1}{2}\mathrm{N_2} + \mathrm{H_2O}$$

$$\mathrm{CO} + \mathrm{H_2O} \rightleftharpoons \mathrm{CO_2} + \mathrm{H_2}$$

$$\frac{4x+y}{2}\mathrm{NO} + \mathrm{C}_x\mathrm{H}_y \rightleftharpoons \frac{4x+y}{2}\mathrm{N_2} + \frac{y}{2}\mathrm{H_2O} + x\mathrm{CO_2}$$

$$\mathrm{H_2} + \tfrac{1}{2}\mathrm{O_2} \rightleftharpoons \mathrm{H_2O}$$

$$\mathrm{NO} + \tfrac{5}{2}\mathrm{H_2} \rightleftharpoons \mathrm{NH_3} + \mathrm{H_2O}$$

$$\mathrm{C}_x\mathrm{H}_y + \frac{3x}{2}\mathrm{H_2O} \rightleftharpoons \frac{x}{2}\mathrm{CO} + \frac{x}{2}\mathrm{CO_2} + \frac{3x+y}{2}\mathrm{H_2}$$

Zur Vereinfachung werden hier die Oxidationsreaktionen des Ceroxids, das als Sauerstoffspeicherkomponente des Katalysators eine katalytisch relevante Rolle spielt, vernachlässigt. Auch wurde davon ausgegangen, dass überwiegend NO vorliegt, wie dies beim klassischen Otto-Motor mit Drei-Wege-Katalysator näherungsweise der Fall ist.

Die ersten drei Reaktionen sind die drei Hauptreaktionen, die den Abbau der Schadstoffe CO, $\mathrm{C}_x\mathrm{H}_y$ und NO bewirken, und nach denen der Drei-Wege-Katalysator seinen Namen erhalten hat. Insgesamt laufen 18 Reaktionen ab, wenn man allgemein von reversiblen Reaktionen und einem einzigen Modellkohlenwasserstoff $\mathrm{C}_x\mathrm{H}_y$ ausgeht.

Nachfolgend wird für den Kohlenwasserstoff $\mathrm{C}_x\mathrm{H}_y$ exemplarisch von Butan ($x = 4$ und $y = 10$) ausgegangen. Bestimmen Sie die Anzahl R der Schlüsselreaktionen.

$R =$

- Lineare Algebra als Rechenwerkzeug in der Reaktionstechnik

Einsatz in anderen Veranstaltungen

- Zahlentheorie, SS 19, Dr. Wernz
  - Größtenteils Rechenaufgaben zu Standardtechniken (euklid. Algorithmus, chin. Restsatz)
- Vorkurs Mathematik, Block „Lineare Algebra“, WS 19/20, Dr. Wernz
  - Zusätzliche Übungsaufgaben, insbesondere zum Umgang mit Matrizen
- Mathematik für Bio(-techno-)logen, seit WS 19/20, Prof. Walcher, Dr. Hirshman
  - Vergrößerung des Übungsangebots, umfasst Stoff von der Mittelstufe bis zur Differential- und Integralrechnung
- Höhere Mathematik II, SS 20, Prof. Noelle, Priv.-Doz. Wittich
  - E-Tests mit Bonuspunkten für Klausur, klausurtypische Rechenaufgaben zur linearen Algebra, Integralrechnung, mehrdim. Analysis und gewöhnlichen Differentialgleichungen
- Analysis 1, WS 20/21, Prof. Walcher, Dr. Bless, David Bartusel M. Sc.
  - Ergänzendes Angebot, soll neben Rechenaufgaben Aufgaben zur Theorie beinhalten

- Weitere Veranstaltungen (Physik, Ingenieurwissenschaften etc.) denkbar

Vielen Dank
für Ihre Aufmerksamkeit