

Ausgleichen von Reaktionsgleichungen

Überblick

<https://ln.topdf.de/chemie/>

altes design: https://ln.topdf.de/Schule/chemie_website/src/

was nutze ich?

- HTML 5
- JS (JavaScript)
- CSS (Cascading Style Sheet)
- Twitter Bootstrap (Bootstrap 5.1.*)

Prozess

- Design und Grund Gerüst der ersten Seite mit HTML und CSS

Logik des umstellen der Reaktionsgleichungen mit JS

1. Zeichenkette in eine Reaktionsgleichung umwandeln und Passend Speichern
 2. Die gespeicherte Reaktionsgleichung mit dem Gaußschem Eliminationsverfahren ausgleichen.
 3. Zurück in eine Zeichenkette umwandeln
- Testen
 - Das alte design nicht mögen und ein neues machen

Wenn ich davon rede, dass der Source Code auf GitHub zu finden ist rede ich von diesem Repository: https://github.com/Hellow2/Reaktionsgleichungen_Ausgleichen

Wenn ich Zeilenangaben mache, meine ich in dieser Datei:

https://github.com/Hellow2/Reaktionsgleichungen_Ausgleichen/blob/master/website/js/input_output.js

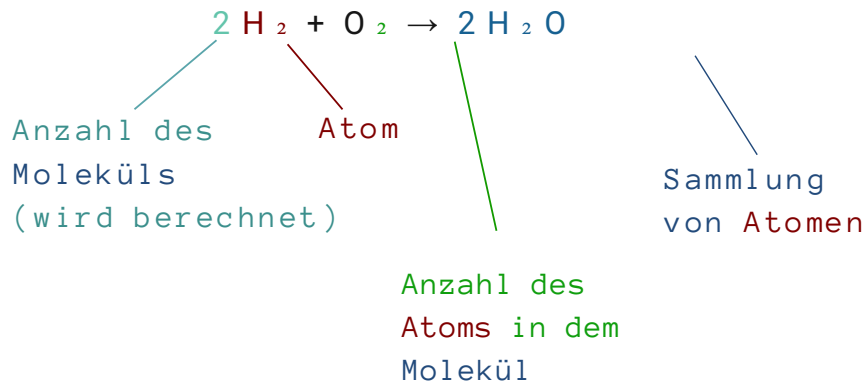
Diese können aber nur ungefähr sein und vielleicht gar nicht stimmen, da ich vermutlich nachträglich noch die ein oder andere Sache verbessern werde.

Ausgleichen von Reaktionsgleichungen

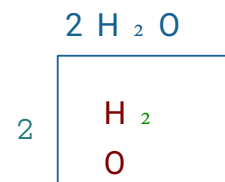
Speicherung

Die Speicherart

Aus was besteht eigentlich eine Reaktionsgleichung?



Das heißt man kann eine Gleichung Als 2 Listen (Produkt und Edukt) aus Molekülen speichern. Ein Molekül ist eine Liste aus Atomen. (siehe Bild rechts)



Dies habe ich zuerst mit ineinander geschachtelten Listen gemacht, das wurde aber sehr schnell sehr unübersichtlich. Deshalb habe ich in v2 stattdessen Datenklassen verwendet.

Wikipedia [https://de.wikipedia.org/wiki/Klasse_\(Objektorientierung\)](https://de.wikipedia.org/wiki/Klasse_(Objektorientierung)):

Unter einer **Klasse** (auch *Objektyp* genannt) versteht man in der [objektorientierten Programmierung](#) ein abstraktes Modell bzw. einen *Bauplan* für eine Reihe von ähnlichen [Objekten](#).

Das heißt, ich nutze Klassen es als Speicherort für meine Daten, in denen ich auch gleich den code schreiben kann, der die Daten zurückgibt und mit ihnen rechnet.

Dies macht alles viel übersichtlicher.

```
13
14 class LGS {...}
205
206 class Atom {...}
230
231 class Molecule {...}
314
315 class Equation {...}
577
```

Ausgleichen von Reaktionsgleichungen

Der Speicherprozess

Jetzt muss ich aus eine Zeichenkette wie „H2 + O2 = H2O“ in den Klassen einspeichern. Um dies zu machen schaue ich nacheinander Jedes Zeichen einzeln an.

- Wenn es ein Leerzeichen ist, mache gar nichts (ja dass musste ich extra sagen)
- Wenn das Zeichen ein „+“ ist, dann füge ein neues leeres Molekül zu dem Produkt/Edukt hinzu
- Wenn es ein kleiner Buchstabe ist, füge den Buchstaben zu dem Namen des letzten Atoms in dem letzten Molekül hinzu.
- Wenn es ein großer Buchstabe ist, füge ein neues Atom mit dem Namen des Buchstabens zu dem letzten Molekül hinzu.
- Wenn es eine Zahl ist, verändere den Index des letzten Atoms
- Wenn es ein „=“ ist, Wechsel vom Produkt zum Edukt

(Bild nächste Seite)

```
saveStr(inputStr) {
  this.educt = [new Molecule()];
  this.product = [];

  let addToEduct = true;
  let currentInd = 0;

  for (const c of inputStr) {
    switch (c) {
      case ' ':
        break;
      case '+':
        currentInd++;
        this.getSide(addToEduct).push(new Molecule());
        break;

      case isAlphaOrParen(c.toLowerCase()):
        this.getSide(addToEduct)[currentInd].changeLastName(c);
        break;

      case isAlphaOrParen(c.toUpperCase()):
        this.getSide(addToEduct)[currentInd].addAtom(c);
        break;

      case parseInt(c).toString():
        this.getSide(addToEduct)[currentInd].changeLastSubscript(parseInt(c));
        break;

      case '=':
        addToEduct = false;
        currentInd = 0;
        this.getSide(addToEduct)[currentInd] = new Molecule();
        break;
    }
  }

  return this.LGS();
}
```

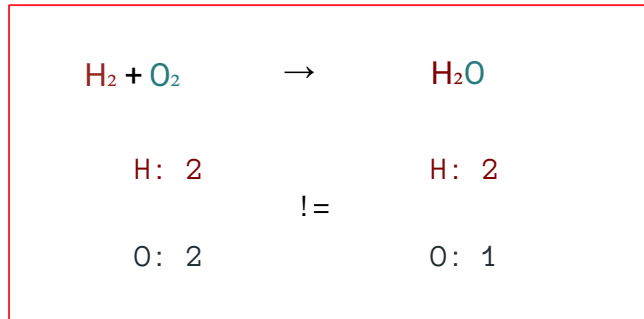
Ausgleichen von Reaktionsgleichungen

Ausgleichung der Reaktionsgleichung

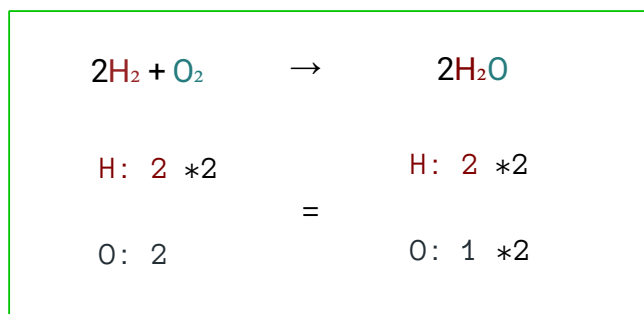
Was bedeutet ausgleichen?

Dies scheint sehr offensichtlich aber man muss es wenn man es programmieren will einmal genau formulieren.

Im Grunde, muss wenn man auf der Produkt- und Edukt- Seite die Atome zusammenzählt, auf beiden Seiten die gleiche Anzahl der Atome der jeweils Gleichen Elemente sein.



Also brauch ich ein Algorithmus, der genau dies macht.



Das Gaußsche Eliminationsverfahren

Dieser Algorithmus hat schon der Mathematiker Gauß entwickelt (Bild rechts). Deshalb muss ich dies nicht mehr machen.

Um diesen anzuwenden braucht man erst einmal ein Lineares Gleichungssystem



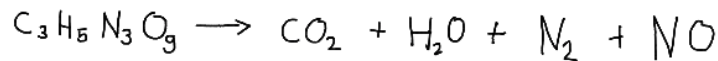
Quelle:
https://de.wikipedia.org/wiki/Carl_Friedrich_Gau%C3%9F#/media/Datei:Carl_Friedrich_Gauss.jpg

Dieses Verfahren zu erklären, würde hier den Rahmen sprengen, aber wenn es Sie interessiert hier der Wikipedia Artikel:

https://de.wikipedia.org/wiki/Gau%C3%9Fsches_Eliminationsverfahren

Ausgleichen von Reaktionsgleichungen

Umwandlung einer Reaktionsgleichung in ein Lineares Gleichungssystem

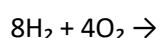
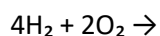
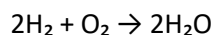
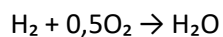


Ich habe diese Grafik selbst gemacht aber das Konzept wird hier erklärt:
<https://www.youtube.com/watch?v=LgzMZrFWBCw>

Dies sind über 150 Zeilen JavaScript, also erspare ich Ihnen das, aber wenn Sie wollen ist der Source Code auf GitHub unter MIT Lizenziert, zu finden in der Klasse „LGS“ von ca. Z. 32-80 und Z.135-186.

Eigene Modifikationen an dem Algorithmus

Das erzeugte Lineare Gleichungssystem kann man leider nicht mit dem Gaußschen Eliminationsverfahren lösen, da man mit ihm nur eindeutige Systeme lösen kann, also Lineare Gleichungssysteme, die nur eine Lösung haben. Dies ist hier nicht der Fall, da wenn man eine Reaktionsgleichung ausgleichen will, gibt es, wenn es Lösungen gibt unendlich viele (unten).



....

Deshalb setzte ich für alle Moleküle auf der Edukt Seite (die Produktseite würde genauso gehen) als Koeffizient ganze Zahlen ein, die zusammen möglichst gering sind. (rechts)

Das heißt ich nehme die kleinste Kombination ganzer Zahlen und setzte diese in die Edukt Seite ein. Dann berechne ich mit dem Eulerschen Eliminationsverfahren die Produktseite. Sind alle Koeffizienten der Produktseite ganze Zahlen ist dies die Lösung, sonst erhöhe ich die Zahlen auf der Edukt Seite.

Also z.B.:

1	1
2	1
1	2
...	...

Der Programmcode dafür ist ungefähr von Z. 14 - 204 und von Z. 519 – 573 zu finden.

Ausgleichen von Reaktionsgleichungen

Das Gelöste LGS in eine Zeichenkette umwandeln

Als erstes erstelle ich mir ein leere Zeichenkette, an die ich dann Zeichen anhängen kann.

Dann läuft eine Schleife über alle Moleküle des Eduktes und fügt bei jedem Molekül den Koeffizient zu der Zeichenkette, wenn dieser nicht 1 ist, und zwischen jedem Molekül wird ein „+“ hinzugefügt. Bei jedem Molekül wird auch eine Schleife über alle Atome gelaufen, die jeweils die Elementbuchstaben und den Index, wenn dieser nicht 1 ist dranhängt.

Dann wird nach dem alle Moleküle des Edukts an die Zeichenkette angehängt wurden, „→“ an die Zeichenkette gehängt und das Produkt wird genauso wie das Edukt an die Zeichenkette gehängt.

Dies ist der source code:

```
equationStr() {
  //ziemlich wenig code :)
  let solutionStr = '';

  for (let i = 0; i < this.educt.length; i++) {
    if (i !== 0) {
      solutionStr += ' + '
    }
    if (this.eductCoefficients[i] !== 1) {
      solutionStr += this.eductCoefficients[i].toString();
    }

    solutionStr += this.educt[i].moleculeStr;
  }

  if (this.product.length > 0) {
    solutionStr += ' → ';
  } else {
    // #636466
    return '';
  }

  for (let i = 0; i < this.product.length; i++) {
    if (i !== 0) {
      solutionStr += ' + '
    }
    if (this.productCoefficients[i] !== 1) {
      solutionStr += this.productCoefficients[i].toString();
    }

    solutionStr += this.product[i].moleculeStr;
  }

  return solutionStr;
}
```

Die Details wie ich die Zeichenkette ausgabe und die Seite generell strukturiert ist erspare ich ihnen aber auch der Source Code ist auf GitHub zu finden.

Ausgleichen von Reaktionsgleichungen

Testen

Um ein Bot zu schreiben, der diese Seite testet, habe ich die Scriptsprache Python und die Library Selenium genutzt, die es mir erlaubt entweder Chrome oder Firefox mit einem Programm fernzusteuern.

Damit probiere ich dann einfach eine Liste von unausgeglichenen Reaktionsgleichungen aus, und schreibe die die nicht funktioniert haben in eine Log Datei.

Dies ist der Source code:

```
from selenium import webdriver
import time

from selenium.webdriver.common.keys import Keys

with open('equations.txt', 'r') as equations_file:
    equations_raw = equations_file.read().split('\n')

    equations = []
    blacklist = "()[]"
    for equation in equations_raw:
        add = True
        for blacklisted_item in blacklist:
            if blacklisted_item in equation:
                add = False
                break

        if add:
            equations.append(equation.replace("->", "="))

    print(equations)

def debug(msg: str):
    with open("fails.log", "a") as debug_file:
        debug_file.write(msg)

driver = webdriver.Firefox()
driver.get("https://ln.topdf.de/chemie/")

input_frame = driver.find_element_by_id("reaction-input")
output_frame = driver.find_element_by_id("output")

prev_len = 0
for equation in equations:
    for i in range(prev_len):
        input_frame.send_keys(Keys.BACK_SPACE)
    input_frame.send_keys(equation)
    input_frame.send_keys(Keys.ENTER)

    prev_len = len(equation)
    time.sleep(0.5)
    print(output_frame.get_attribute('value'))
    if output_frame.get_attribute('value') == "invalid":
        debug(equation + '\n')
```

In meiner GFS sehen sie dann eine Demonstration des Bots

Ausgleichen von Reaktionsgleichungen

Der Bot hat bei 17 von 263 Reaktionsgleichungen ein Fehler gefunden bzw. dass diese nicht funktionieren auf meiner Webseite:

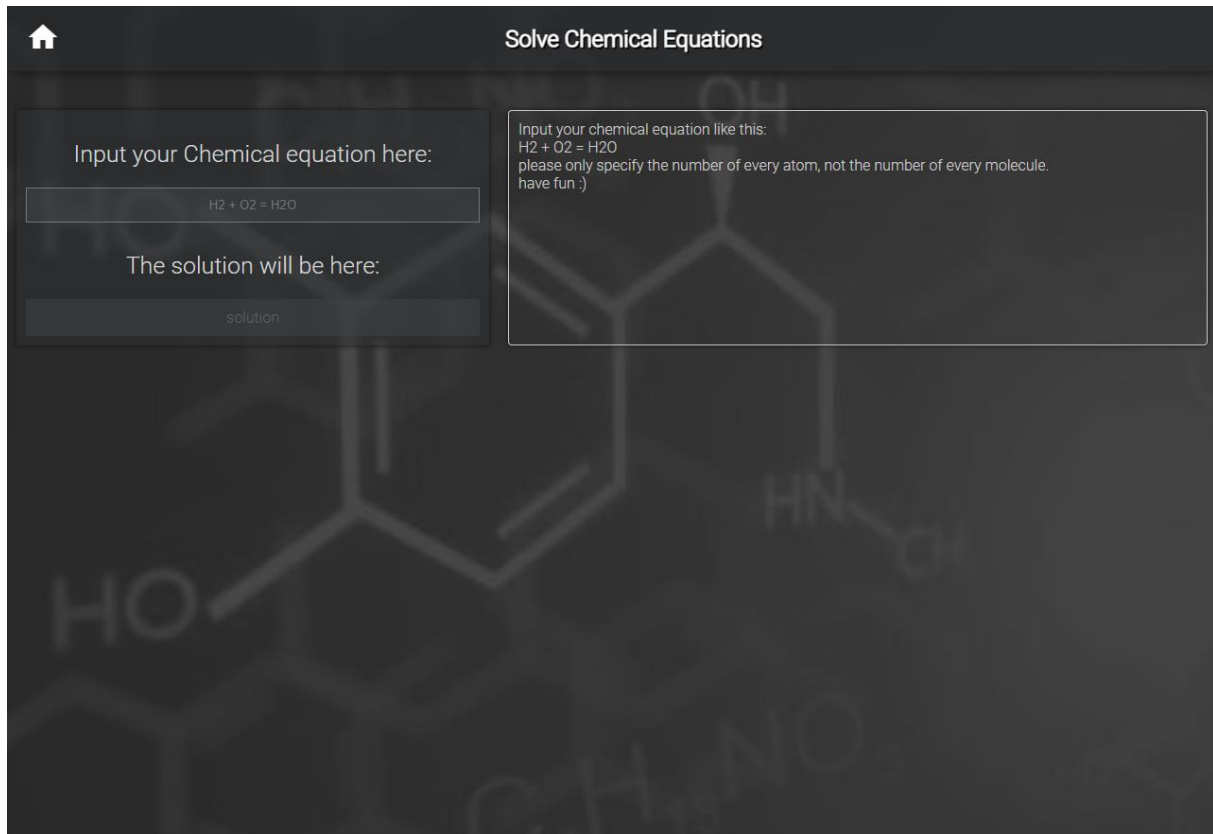
FeS + H₂SO₄ = H₂S + FeSO₄
Hg₂CO₃ = Hg + HgO + CO₂
BeF₂ + Mg = MgF₂ + Be
NH₄NO₃ = N₂O + H₂O
MnS + HCl = H₂S + MnCl₂
HNO₃ + P₂O₅ = N₂O₅ + HPO₃
UF₄ + Mg = MgF₂ + U
Mn₂O₃ + Al = Al₂O₃ + Mn
VO₂Cl + NH₄OH = NH₄VO₃ + NH₄Cl
+ H₂O
TiCl₄ + Mg = MgCl₂ + Ti
H₂SO₄ + NaHCO₃ = Na₂SO₄ + CO₂ +
H₂O
POCl₃ + H₂O = H₃PO₄ + HCl
C + SiO₂ + Cl₂ = SiCl₄ + CO
H₃PO₄ + HCl = PCI₅ + H₂O
Na₃AsO₃ + H₂S = As₂S₃ + NaOH
H₂SO₄ + HI = H₂S + I₂ + H₂O
V₂O₅ + Al = Al₂O₃ + V

Da diese erfolgsrate für ein Prototyp bzw. eine GFS sehr gut ist, ich kein Ansatz hätte und dieses Projekt jetzt schon Wochen Entwicklung verbraucht hat, habe ich mich dafür entschieden dies auf sich zu belassen.

Ausgleichen von Reaktionsgleichungen

Neues Design

Da ich mit dem Design (unten) noch überhaupt nicht zufrieden war und die Website überhaupt nicht mit Handys funktioniert hat, habe ich mich dafür entschieden ein neues Design zu gestalten.



Wenn ich das Design ändern will, muss ich dies (*vereinfacht*) im CSS (Cascading Style Sheet) machen. Bei meinem alten Design habe ich dies komplett selber geschrieben, und auch wenn ich damit schon wirklich schöne und individuelle Websites gemacht habe, habe ich in dem alten Design keine schöne Website gemacht. Daraufhin habe ich mich entschieden ein CSS-Framework zu benutzen, also „Designtools“ die jemand anderes gemacht hat. Ich habe mich für Bootstrap welches von Twitter geschrieben wurde entschieden. Dies sollte allen oder den meisten bekannt vorkommen, da zum Beispiel Moodle oder BigBlueButton Bootstrap nutzt.

(Das neue Design ist auf der nächsten Seite zu sehen)

Ausgleichen von Reaktionsgleichungen

Chemie GFS

Dies ist ein Werkzeug um Reaktionsgleichungen einzurichten.
Es wurde 2021 im Rahmen einer Chemie GFS erstellt.

Eingabe der Reaktionsgleichung

H₂ + O₂ = H₂O

Die eingerichtete Gleichung wird hier erscheinen.

2H₂ + O₂ → 2H₂O

© Lars Noack

Chemie GFS

Dies ist ein Werkzeug um
Reaktionsgleichungen einzurichten.
Es wurde 2021 im Rahmen einer Chemie
GFS erstellt.

Eingabe der Reaktionsgleichung

H₂ + O₂ = H₂O

Die eingerichtete Gleichung wird hier erscheinen.

2H₂ + O₂ → 2H₂O

© Lars Noack