

Molekulare Algorithmen

Chemische Berechnung der Überlappungsfläche zweier Kreise

Yeo, Tze Ching

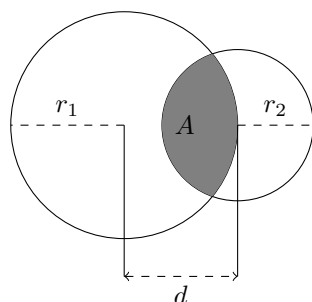
11.07.2024

Betreut von Dr. Thomas Hinze

Friedrich Schiller Universität Jena

Matrikelnummer : 207011

1 Einleitung

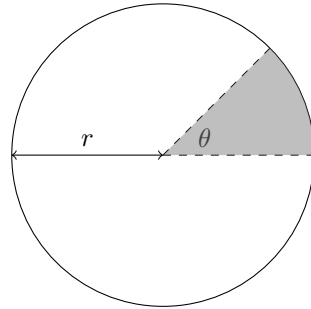


Die chemische Berechnung der Überlappungsfläche zweier Kreise stellt ein Problem dar, das nicht nur mathematische Konzepte, sondern auch innovative Ansätze aus der Chemie nutzt. In dieser Studie werden zwei Kreise durch ihre Radien $r_1 > 0$ und $r_2 > 0$ sowie den Abstand d ihrer Mittelpunkte mit $0 \leq d \leq r_1 + r_2$ definiert. Unser Ziel ist es, eine Berechnungsvorschrift in Form einer expliziten Formel abzuleiten, die es ermöglicht, die Überlappungsfläche A beider Kreise basierend auf den gegebenen Werten von r_1 , r_2 und d zu bestimmen.

Darüber hinaus soll diese Berechnungsvorschrift in ein chemisches Analogcomputermodell übertragen werden, damit sie in einem anderen Anwendungsbereich angewendet werden kann. Chemische Prozesse und Reaktionen werden in einem chemischen Analogcomputer verwendet, um komplexe Berechnungen auszuführen. Durch die Integration chemischer Prinzipien in die Berechnung ist es uns möglich, komplexe Probleme besser zu begreifen und neue Lösungsansätze zu entwickeln. Hier haben wir die Möglichkeit, moderne Programme wie Python einzusetzen, um diese chemischen Analogcomputermodelle zu simulieren und zu verbessern. Python-Programme können die Leistung und Präzision solcher Modelle verbessern, indem sie eine anpassungsfähige und programmierbare Umgebung zur Untersuchung und Analyse unterschiedlicher Szenarien bereitstellen.

Um die Leistungsfähigkeit unseres Modells zu überprüfen, werden unterschiedliche Simulationsstudien durchgeführt. In der ersten Studie soll die Überlappungsfläche einen Teil der beiden Kreise umfassen, während in der zweiten Studie der Kreis mit dem Radius r_1 vollständig im anderen Kreis liegt. Die dritte Studie untersucht den umgekehrten Fall, bei dem der Kreis mit dem Radius r_2 vollständig im anderen Kreis liegt. Diese Untersuchungen ermöglichen es uns, die Robustheit und Vielseitigkeit unseres chemischen Modells zu beurteilen und seine Anwendbarkeit in verschiedenen Szenarien zu evaluieren.

1.1 Fläche eines Kreissektors

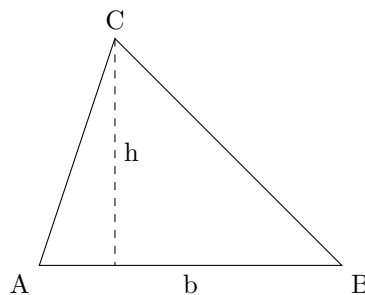


Die Sektorfläche eines Kreises ist die Fläche, die durch den dazugehörigen Bogen und zwei Radien begrenzt wird. Es handelt sich im Wesentlichen um einen Bruchteil des gesamten Kreises, der den Anteil des Sektors an der Gesamtfläche des Kreises darstellt. Es ist, als würde man eine Pizza von der Mitte bis zur Kruste durchschneiden, und die Fläche ist der Teil des Kreises, den dieses Stück bedeckt. Die Formel zur Berechnung der Fläche eines Kreissektors lautet :

$$A = \frac{1}{2}r^2(\theta) \quad (1)$$

wobei r der Radius des Kreises ist und θ der Mittelpunktswinkel im Bogenmaß.

1.2 Fläche eines Dreiecks



Eine weitere wichtige Formel, die zur Berechnung der Schnittfläche benötigt wird, ist die Dreiecksfläche. Die Fläche eines Dreiecks ist ein grundlegendes Konzept in der Geometrie und stellt den von seinen drei Seiten eingeschlossenen Raum dar. Es wird generell anhand der Formel berechnet :

$$A = \frac{1}{2} \times b \times h \quad (2)$$

wobei b die Basis des Dreiecks ist und h die Höhe.

In dieser Diskussion über Dreiecke wird eine alternative Formel zur Berechnung ihrer Fläche untersucht. Stattdessen wird die trigonometrische Methode, die als "Sinusformel" oder "Sinusregel" bekannt ist, verwendet. Die Formel basiert auf dem Sinus eines der Winkel des Dreiecks und den Längen der beiden an diesen Winkel angrenzenden Seiten.

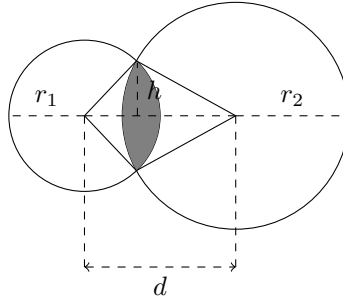
$$A = \frac{1}{2} \times \sin(\theta) \times r_1 \times r_2 \quad (3)$$

2 Ableitung der Formel

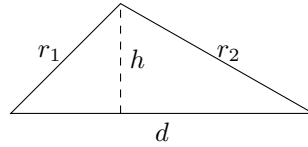
Um die Formel für die Schnittfläche A zweier Kreise abzuleiten, werden verschiedene Fälle basierend auf den relativen Positionen der Kreise berücksichtigt. Folgendes wird bezeichnet:

- r_1 als Radius des ersten Kreises.
- r_2 als Radius des zweiten Kreises.
- d als Abstand zwischen den Mittelpunkten der Kreise.

2.1 Teilweise Überlappung



Wenn die Flächen der vier Sektoren summiert werden, bedecken sie den Überlappungsbereich der beiden Kreise, wobei sich eine zusätzliche Überlappung in der Mitte befindet. Unser Interesse gilt der Überlappungsfläche der beiden Kreise, nachdem die Fläche des Vierecks abgezogen wurde. Es sollen Berechnungen für zwei Kreise mit unterschiedlichen Radien, die zwei große Sektoren und zwei kleine Sektoren darstellen, durchgeführt werden. Also müssen wir lediglich den Winkel θ ermitteln, um die Fläche des Sektors zu bestimmen. Uns bleibt nur noch übrig, h zu finden, um den Winkel θ zu berechnen.



Das große Dreieck kann zerlegt werden, und der Satz des Pythagoras wird angewendet, wobei die Quadratsumme der Längen der beiden Katheten eines rechtwinkligen Dreiecks gleich der Quadratsumme der Länge der Hypotenuse ist, also

$$a^2 + b^2 = c^2$$

Daraus folgt, dass

$$a = \pm \sqrt{c^2 - b^2} \quad (4)$$

Daher ist die Basis des Dreiecks auf einer Seite gleich $\sqrt{r_1^2 - h^2}$ und die Basis des Dreiecks auf einer Seite ist gleich $\sqrt{r_2^2 - h^2}$. Der Abstand zwischen den Mittelpunkten der beiden Kreise beträgt d , also $d = (\sqrt{r_1^2 - h^2}) + (\sqrt{r_2^2 - h^2})$. Um h zu lösen, geht man wie folgt vor:

$$\begin{aligned} (d - (\sqrt{r_2^2 - h^2}))^2 &= (\sqrt{r_1^2 - h^2})^2 \\ d^2 - 2d(\sqrt{r_2^2 - h^2}) + r_2^2 - h^2 &= r_1^2 - h^2 \\ 2d(\sqrt{r_2^2 - h^2}) &= d^2 + r_2^2 - r_1^2 \\ \sqrt{r_2^2 - h^2} &= \frac{d^2 + r_2^2 - r_1^2}{2d} \\ h^2 &= r_2^2 - \left(\frac{d^2 + r_2^2 - r_1^2}{2d}\right)^2 \\ h &= \sqrt{r_2^2 - \left(\frac{d^2 + r_2^2 - r_1^2}{2d}\right)^2} \end{aligned} \quad (5)$$

Nachdem das h gefunden wurde, wird der Sinussatz verwendet, um θ_1 und θ_2 zu ermitteln.

$$\sin \theta_1 = \frac{h}{r_1} \rightarrow \theta_1 = \sin^{-1} \left(\frac{h}{r_1} \right) \quad (6)$$

$$\sin \theta_2 = \frac{h}{r_2} \rightarrow \theta_2 = \sin^{-1} \left(\frac{h}{r_2} \right) \quad (7)$$

Bevor die Schnittfläche berechnet wird, muss zuerst θ_3 berechnet werden, und dann ist es erforderlich, die Fläche des Dreiecks mithilfe dieser Formel zu bestimmen.

$$\theta_3 = (\pi - \theta_1 - \theta_2) \quad (8)$$

Um die Schnittfläche in diesem Dreieck zu berechnen, lautet die Gleichung :

$$A' = \left(\frac{1}{2} \cdot \theta_1 \cdot r_1^2\right) + \left(\frac{1}{2} \cdot \theta_2 \cdot r_2^2\right) - \left(\frac{1}{2} \cdot \sin \theta_3 \cdot r_1 \cdot r_2\right) \quad (9)$$

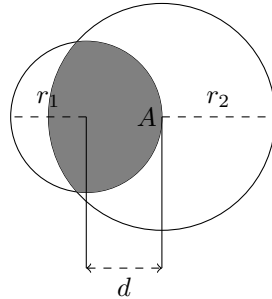
Die errechnete Schnittfläche entspricht lediglich dem oberen Teil. Um die Gesamtschnittfläche zu erhalten, muss sie mit zwei multipliziert werden, d.h.:

$$A = \left[\left(\frac{1}{2} \cdot \theta_1 \cdot r_1^2\right) + \left(\frac{1}{2} \cdot \theta_2 \cdot r_2^2\right) - \left(\frac{1}{2} \cdot \sin \theta_3 \cdot r_1 \cdot r_2\right)\right] \times 2 \quad (10)$$

Die abgeleitete Formel gilt für den Fall, dass d größer oder gleich der Quadratwurzel des Absolutwerts der Differenz zwischen r_1^2 und r_2^2 ist.

2.1.1 Andere Fälle

Es gibt zwei weitere Bedingungen, unter denen die Formel leicht unterschiedlich ist, um θ zu berechnen. Eine ist, wenn $d < \sqrt{|(r_1^2 - r_2^2)|}$ und $r_1 < r_2$, und die andere ist, wenn $d < \sqrt{|(r_1^2 - r_2^2)|}$ und $r_1 > r_2$.



Wenn d kleiner ist als die Quadratwurzel der Differenz zwischen r_1 im Quadrat und r_2 im Quadrat und wenn r_1 kleiner als r_2 ist, lautet das Formel von θ :

$$\theta_1 = \pi - \arcsin\left(\frac{h}{r_1}\right) \quad (11)$$

$$\theta_2 = \arcsin\left(\frac{h}{r_2}\right) \quad (12)$$

$$\theta_3 = (\pi - \theta_1 - \theta_2) \quad (13)$$

Die andere Bedingung ist, wenn d kleiner ist als die Quadratwurzel der Differenz zwischen r_1 im Quadrat und r_2 im Quadrat und wenn r_1 größer als r_2 ist :

$$\theta_1 = \arcsin\left(\frac{h}{r_1}\right) \quad (14)$$

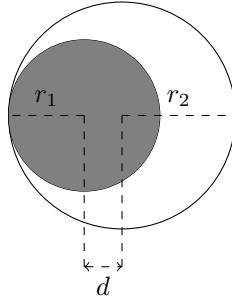
$$\theta_2 = \pi - \arcsin\left(\frac{h}{r_2}\right) \quad (15)$$

$$\theta_3 = (\pi - \theta_1 - \theta_2) \quad (16)$$

Bisher sind alle notwendigen Formeln zur Berechnung des Schnittbereichs zweier Kreise bekannt, selbst wenn diese teilweise überlappen.

2.2 Vollständige Überlappung

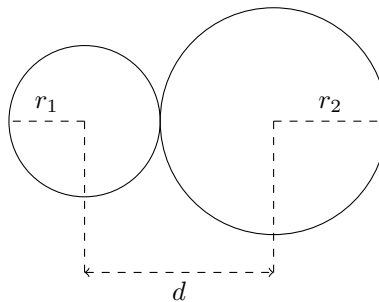
Bei einer eingehenden Untersuchung der Schnittmenge zweier Kreise liegt der Fokus auf ihrer vollständigen Überlappung. Diese spezifische Gegebenheit tritt auf, wenn ein Kreis vollständig innerhalb des anderen liegt. Die vollständige Überlappung wird betrachtet, wenn entweder ein Kreis mit dem Radius r_1 oder r_2 sich vollständig innerhalb des anderen Kreises befindet. Diese Analyse ermöglicht es, die Konfiguration und Eigenschaften des Schnittpunkts in dieser speziellen Anordnung zu untersuchen.



Dieses einzigartige Szenario ergibt eine Schnittfläche, die die präzisen Dimensionen des kleineren Kreises widerspiegelt. Man kann sagen, dass die Schnittfläche die Fläche des kleineren Kreises ist. Dies geschieht, wenn der Abstand d kleiner ist als der Unterschied zwischen den Radien der Kreise ($d < |r_1 - r_2|$). Es ist ein geometrischer Tanz der Einschließung, bei dem der größere Kreis seinen kleineren Gegenpart großzügig umarmt und dabei eine visuell eindrucksvolle Überlappung schafft, die die Eleganz mathematischer Beziehungen hervorhebt.

Wenn $r_1 > r_2$, wird die Gesamtfläche als $\pi \cdot r_2^2$ berechnet. Andernfalls, wenn $r_1 < r_2$, wird die Gesamtfläche als $\pi \cdot r_1^2$ berechnet.

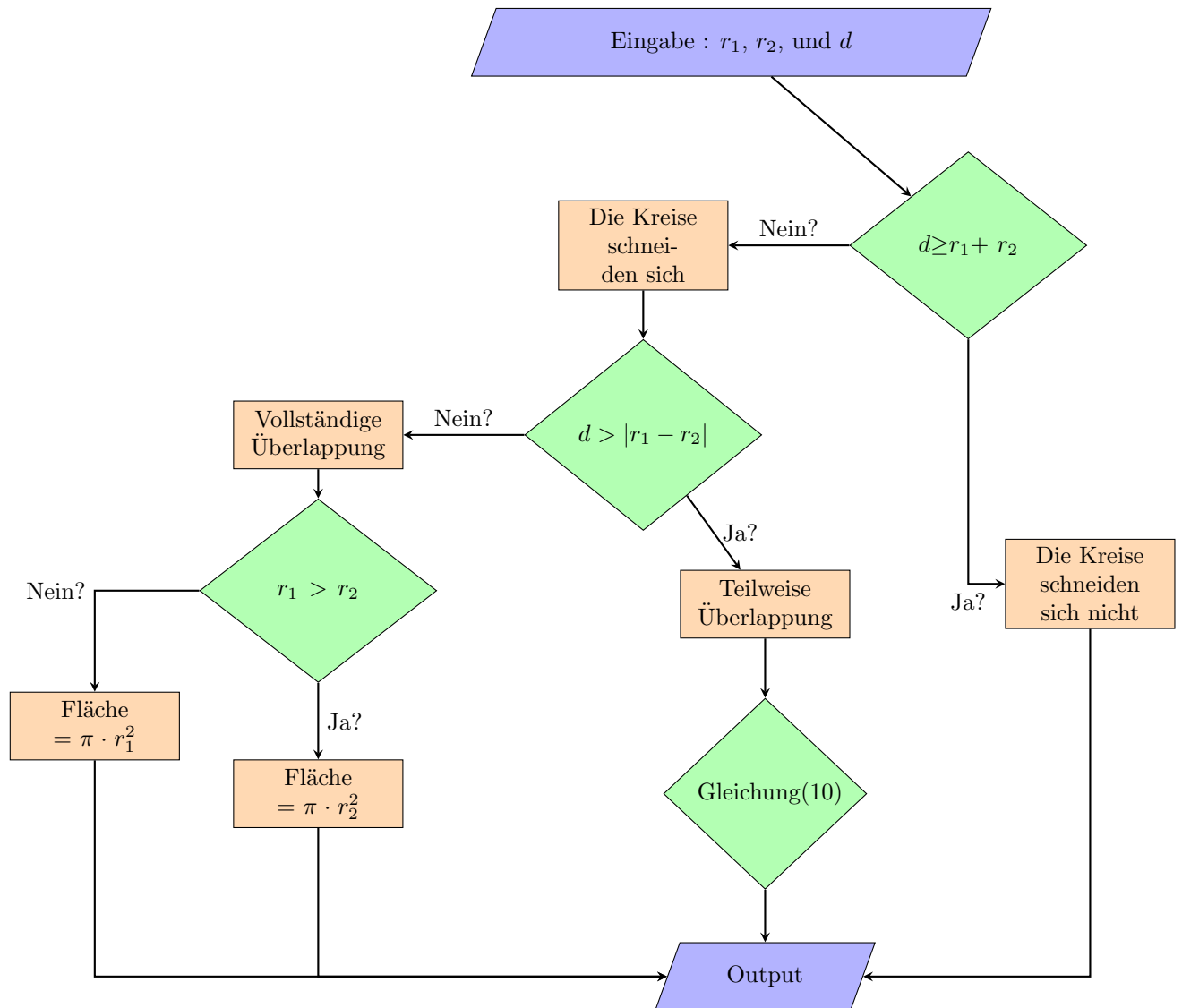
2.3 Nicht überlappende Kreise



Wenn der Abstand zwischen den Mittelpunkten zweier Kreise, dargestellt durch d , größer oder gleich der Summe ihrer Radien ist, bezeichnet als r_1 und r_2 jeweils, dann schneiden sich die Kreise nicht. Diese Bedingung wird als "disjunkte Kreise" bezeichnet, was bedeutet, dass es keinen gemeinsamen Schnittpunkt gibt, wo sich die Kreise überschneiden. Mathematisch ausgedrückt bedeutet dies, dass die Entfernung zwischen den Mittelpunkten der Kreise größer ist als die Summe ihrer Radien. In dieser Konfiguration liegen die Kreise vollständig voneinander getrennt, ohne dass ihre Umfänge sich berühren oder schneiden. Dieses Konzept ist entscheidend bei der Platzierung von Objekten in technischen Anwendungen, insbesondere bei der Konstruktion von Maschinen, bei der Anordnung von Sensoren oder bei der Gestaltung von Produktionsanlagen, um sicherzustellen, dass keine unerwünschten Kollisionen oder Interferenzen auftreten.

3 Überführung der Berechnungsvorschrift

Um die Situation zu simulieren, wird ein Python-Skript erstellt. Der Ablauf beginnt damit, dass die Werte r_1 , r_2 und d eingegeben werden. Zunächst wird überprüft, ob die Bedingung $d \geq r_1 + r_2$ erfüllt ist. Falls dies zutrifft, schneiden sich die Kreise; andernfalls tun sie es nicht. Wenn die Kreise sich schneiden, wird weiter überprüft, ob $d > |r_1 - r_2|$ gilt. Falls ja, liegt eine teilweise Überlappung vor; ansonsten gibt es keine vollständige Überlappung. Bei einer Überlappung wird zusätzlich überprüft, ob $r_1 > r_2$ ist. Falls dies der Fall ist, beträgt die Fläche des überlappenden Bereichs $\pi \cdot r_2^2$; andernfalls ist sie $\pi \cdot r_1^2$. Im Falle einer teilweisen Überlappung wird auch überprüft, ob $d < \sqrt{|r_1^2 - r_2^2|}$ ist. Nach Abschluss des Prozesses werden die Ergebnisse ausgegeben, und der Prozess endet.



3.0.1 Ergebnisse

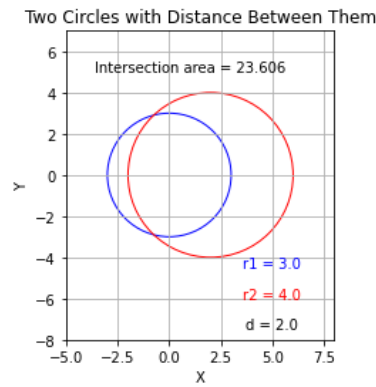


Figure 1: Simulation des Codes mit $r_1 = 2$, $r_2 = 4$, und $d = 2$

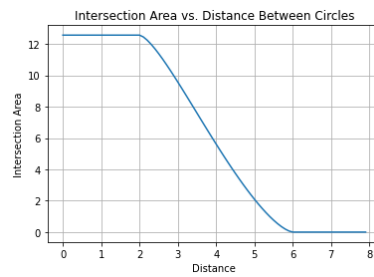


Figure 2: Simulation des Codes mit $r_1 = 2$ und $r_2 = 4$

Mit zunehmendem Abstand d zwischen den Zentren der beiden Kreise werden im Diagramm deutliche Veränderungen sichtbar. Zunächst, wenn d relativ klein im Vergleich zur Summe der Radien der Kreise ($r_1 + r_2$) ist, wird der Schnittbereich signifikant sein, da sich die Kreise weitgehend überlappen. Folglich wird das Diagramm einen relativ großen Schnittbereich zeigen. Wenn jedoch d diesen Punkt überschreitet, nimmt die Überlappung zwischen den Kreisen ab, was zu einer Reduzierung des Schnittbereichs führt. Schließlich, wenn d größer wird als die Summe der Radien, werden sich die Kreise nicht mehr schneiden und der Schnittbereich beträgt null. Somit wird das Diagramm mit zunehmendem d einen allmählichen Rückgang des Schnittbereichs zeigen, der schließlich null erreicht, wenn der Abstand zwischen den Kreiszentren die Summe ihrer Radien übersteigt.

4 COPASI-Model

COPASI ist ein spezielles Computerprogramm, das Wissenschaftlern hilft, zu untersuchen und zu verstehen, wie verschiedene Teile unseres Körpers zusammenarbeiten. Es kann verwendet werden, um detaillierte Modelle zu erstellen, wie Dinge wie Nahrung, Signale in unserem Körper und Gene interagieren. Mit COPASI können Wissenschaftler sehen, wie sich diese Prozesse im Laufe der Zeit verändern, die besten Werte für bestimmte Faktoren finden und sehen, wie stabil ein System ist. Es verfügt über einfach zu verwendende Tools und kann mit verschiedenen Datentypen arbeiten, was es zu einem beliebten Tool für das Studium der Biologie macht.

4.1 Addition

Die Menge der Substanz Y, die wir haben, ist eine genaue Schätzung, die auf einer bestimmten Berechnung basiert. Die Gleichungen, die wir verwenden, stellen sicher, dass wir die Mengen der Ausgangssubstanzen X1 und X2 während der Berechnung nicht ändern. Dadurch können wir X1 und X2 in weiteren Berechnungen verwenden.

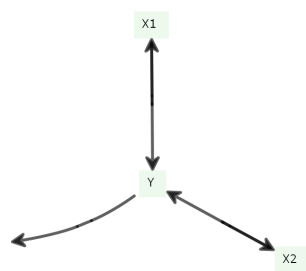
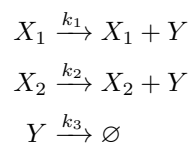


Figure 3: Reaktionsnetzwerk zur Ausführung der Addition.

4.2 Nichtnegative Subtraktion

Die Subtraktion handelt sich um X_1, X_2 als Operanden und $Y = X_1 - X_2$ als Ergebnis. Die Konzentration von Y wird durch die Differenz der Konzentrationen von X1 und X2 bestimmt, wobei nur positive Werte berücksichtigt werden. Wenn beispielsweise X1 eine höhere Anfangskonzentration als X2 hat, wird die Konzentration von Y auf den Unterschied dieser beiden Werte hinauslaufen, während negative Differenzen ausgeschlossen werden.

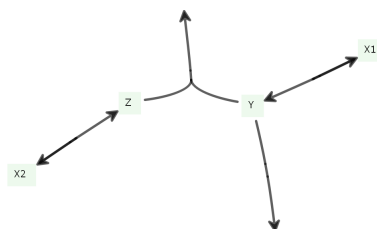
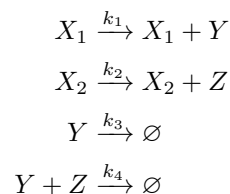


Figure 4: Reaktionsnetzwerk zur Ausführung der Subtraktion.

4.3 Multiplikation

Aus den Anfangskonzentrationen der Stoffe X1 und X2 ergibt sich asymptotisch eine Ergebniskonzentration des Stoffes Y durch eine Multiplikation. Dies bedeutet, dass im Verlauf der Reaktion die Konzentration von Y durch das Produkt der Konzentrationen von X1 und X2 bestimmt wird. Diese Art der Berechnung ist in Systemen relevant, die durch COPASI modelliert werden. COPASI ermöglicht es, solche dynamischen Prozesse zu simulieren und die resultierenden Konzentrationen der beteiligten Stoffe zu berechnen.

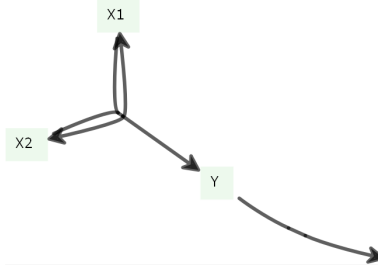


Figure 5: Reaktionsnetzwerk zur Ausführung der Multiplikation.

4.4 Division

Mithilfe der Gleichung $Y = \frac{X_2}{X_1}$ kann das Ergebnis der Division errechnet werden. Das Reaktionsnetzwerk verwendet X1 als Katalysator für den Zerfall von Y, während Y durch X2 gespeist wird. Zusätzliche Autokatalyse stellt sicher, dass die Konzentration der Eingabespezies erhalten bleibt. Dadurch wird ein stabiles Gleichgewicht im System aufrechterhalten, in dem die dynamischen Wechselwirkungen zwischen X1 und X2 die Produktion und den Zerfall von Y regulieren.

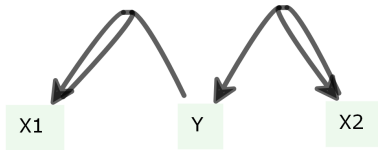


Figure 6: Reaktionsnetzwerk zur Ausführung der Division.

4.5 Quadratwurzel

In COPASI gibt es eine Möglichkeit, die Quadratwurzel einer Zahl X zu ermitteln. Die Berechnung erfolgt über die Gleichung $y = \sqrt{x}$, wobei die Antwort auf diese Berechnung als Y bezeichnet wird und die ursprüngliche Zahl X unverändert bleibt. Es gibt auch einen Teil, W, der die Nebenprodukte der Berechnung darstellt und für weitere Betrachtungen irrelevant ist.

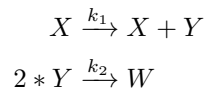


Figure 7: Reaktionsnetzwerk zur Ausführung der Quadratwurzel.

4.6 Taylorreihe für die Sinusfunktion

Die Taylorreihe für die Sinusfunktion ist eine unendliche Reihe, die die Sinusfunktion als Summe von Potenzen der Variablen x darstellt. Die Sinusfunktion $\sin(x)$ kann durch die folgende Taylorreihe dargestellt werden:

$$\sin(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!}$$

Diese Reihe ergibt sich aus den Grundrechenoperationen Addition, Subtraktion, Multiplikation und Division. In praktischen Anwendungen wird die Reihe oft nach einer endlichen Anzahl von Termen abgeschnitten, was eine Approximation der Sinusfunktion ergibt. Je mehr Terme verwendet werden, desto genauer ist die Approximation. In dem Modell ist die Terme bis zur vierten Potenz der Variablen x in der Taylorreihe berücksichtigt.

4.7 Taylorreihe für die Arc-Sinus-Funktion

Die Umkehrfunktion der Sinusfunktion, der $\arcsin(x)$, hat ebenfalls eine Darstellung durch eine Taylorreihe:

$$\arcsin(x) = x + \frac{1}{2} \cdot \frac{x^3}{3} + \frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 4} \cdot \frac{x^5}{5} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n)!}{4^n (n!)^2 (2n+1)} x^{2n+1}$$

Auch diese Reihe setzt sich aus den Grundrechenoperationen zusammen und ist in dem Copasi-Modell zu implementieren.

4.8 Simulation einfacher Model

In der COPASI-Simulation wird die Bedingung simuliert, dass bei der d kleiner als r_1 und r_2 ist und $d < \sqrt{|r_1^2 - r_2^2|}$ sowie $r_1 < r_2$. Dabei wurde darauf geachtet, dass die Werte von d , r_1 und r_2 so gewählt wurden, dass diese Ungleichungen erfüllt sind, um die gewünschten Szenarien korrekt zu modellieren.

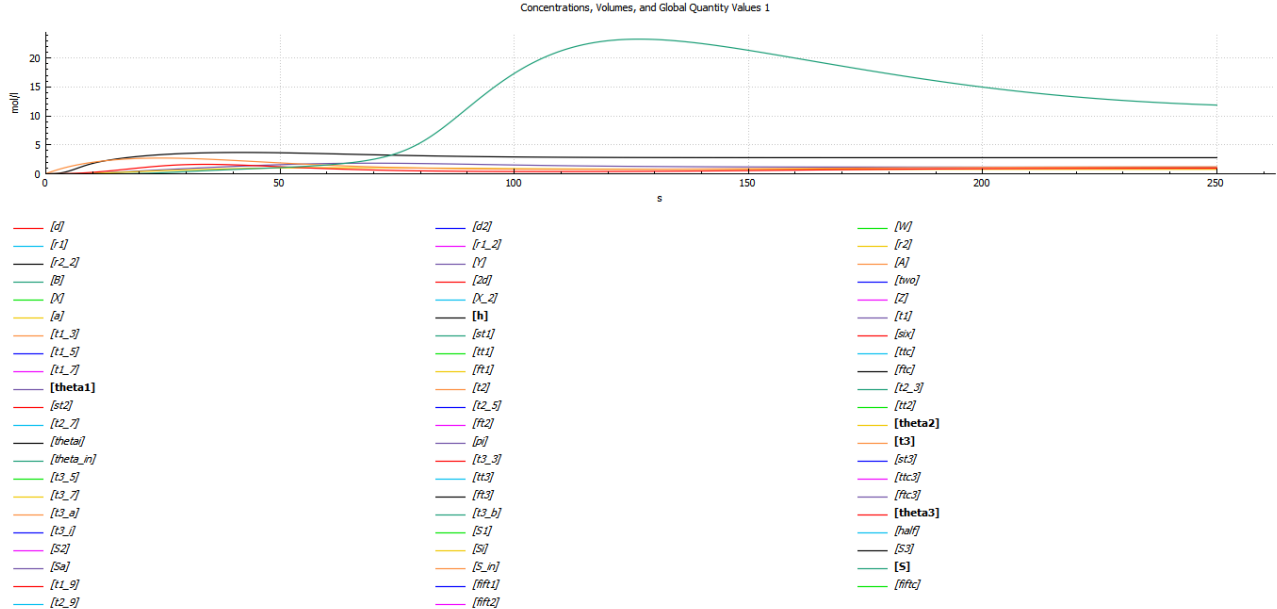


Figure 8: Ergebnisse des COPASI-Modell nach Ausführung.

Nach der Simulation ergab sich ein Wert von $S = 11,89$, welcher den Ergebnissen in Python entspricht. S stellt die Fläche der Schnittmenge dar, die durch die Simulation berechnet wurde. Dies bestätigt die Korrektheit der in der COPASI-Simulation angewendeten Berechnungen und die Übereinstimmung der Resultate zwischen den beiden Plattformen. Die genaue Übereinstimmung der Werte zeigt, dass die Simulationsbedingungen korrekt umgesetzt wurden und die Berechnungsmodelle konsistent sind.

5 Schlussfolgerung

Manche Leute könnten sich fragen, warum die Berechnung des Überlappungsbereichs überhaupt notwendig ist. Es ist jedoch von Bedeutung zu verstehen, dass in verschiedenen industriellen Abläufen wie Ätzprozessen in der Produktion die Anordnung und Verteilung von Düsen in Sprühsystemen eine maßgebliche Rolle spielt. Oft haben die Düsen in solchen Systemen eine runde Form. Wenn diese Düsen nahe beieinander liegen, entsteht ein Bereich, in dem sie sich überlappen, der durch präzise Berechnungen erfasst werden muss. Diese Berechnungen ermöglichen es, den optimalen Abstand und die Ausrichtung der Düsen zu bestimmen, um eine gleichmäßige und effiziente Verteilung von Chemikalien oder anderen Substanzen sicherzustellen.

Ein ähnliches Prinzip gilt auch für die Beleuchtungstechnik. Angenommen, eine Lampe strahlt üblicherweise in einem kreisförmigen Muster aus. Durch die Berechnung dieses Überlappungsbereichs kann die richtige Platzierung von Lampen oder anderen Lichtquellen festgelegt werden, um eine gleichmäßige Ausleuchtung zu gewährleisten und unerwünschte Schatten zu vermeiden. Diese Berechnungsmethode für den Überlappungsbereich findet in einer Vielzahl von Anwendungen und ist für die Optimierung verschiedener Prozesse und Systeme von wesentlicher Bedeutung. Egal, ob es um die Verteilung von Chemikalien in der Produktion oder um die Beleuchtung in technischen Anwendungen geht, die genaue Bestimmung des Überlappungsbereichs ermöglicht es Ingenieuren und Fachleuten, effiziente und zuverlässige Lösungen zu entwickeln, die den Anforderungen ihrer jeweiligen Industrie gerecht werden.