

# Entwicklung und Simulation eines chemischen Analogcomputermodells zur Reihenentwicklung der Kreiszahl $\pi$

Robert Avemarg, René Gesele

Juli 2020

Friedrich-Schiller-Universität Jena  
Fakultät Mathematik und Informatik  
Modul Molekulare Algorithmen 2020

## 1 Einleitung

Die Berechnung von  $\pi$  ist schon seit Jahrtausenden ein Thema das viele Mathematiker bis heute in seinen Bann zieht. Das Ziel dieser ist häufig möglichst viele Dezimalstellen von  $\pi$  zu ermitteln. Die ältesten überlieferten Schätzungen für  $\pi$  stammen aus dem 20. Jahrhundert v. Chr. aus Babylon [6]. Bedeutende Mathematiker, die sich mit  $\pi$  beschäftigten, waren unter anderem Leibniz, der zwischen 1673 und 1676 die Leibniz-Reihe zur Annäherung von  $\pi$  entwickelte, welche die wohl bekannteste Reihe für diesen Zweck ist, sowie Euler, welcher die Reihe entwickelte, auf welche wir auch in diesem Artikel das Hauptaugenmerk richten. Mit Hilfe der Entwicklung der Computer um 1950 stieg die Rechenleistung und somit auch die bekannten Dezimalstellen von  $\pi$  dramatisch. Heutzutage werden für diese Aufgabe Supercomputer und sehr komplexe Reihen verwendet, wie die der Gebrüder Chudnovsky [5], welche eine Variante der unendlichen Reihe von Ramanujan [1] ist und jeder Summand etwa 15 Dezimalstellen generiert. Mit der Entwicklung von chemischen Analogcomputern gilt es nun  $\pi$  durch geeignete Umsetzungen für diese Technologie zu berechnen. Dies ist das Augenmerk der vorliegenden Arbeit.

## 2 Reihenentwicklungen von $\pi$

Wie oben bereits genannt, gibt es verschiedene Reihenentwicklungen für  $\pi$ , welche unterschiedliche Eigenschaften besitzen und unter anderem unterschiedlich schnell konvertieren. Der bekannteste Vertreter, die Leibniz-Reihe, mit der For-

mel

$$\frac{\pi}{4} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{2k+1}$$

ist eine einfache Reihe, welche allerdings nur sehr langsam konvergiert. Für fünf Dezimalstellen werden mehrere 10.000 Summanden benötigt. Eine Weitere Reihe ist das Wallissche Produkt

$$\frac{\pi}{2} = \prod_{k=1}^{\infty} \frac{4(k)^2}{4k^2 - 1}$$

welches auch kein gutes Konvergenzverhalten besitzt. Aus diesem Grund, entscheiden wir uns für die Reihe [7]

$$\pi = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(k!)^2 \cdot 2^{k+1}}{(2k+1)!} \quad (1)$$

bzw.

$$\frac{\pi}{2} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k!}{(2k+1)!!} \quad (2)$$

welche beide deutlich schneller konvergieren. Für beide sind 15 Summanden nötig um  $\pi$  bzw.  $\frac{\pi}{2}$  auf fünf Dezimalstellen genau, also 3.1416, zu berechnen. Dabei erhält man den Wert 3.14156, welcher gerundet den Zielwert von 3.1416 ergibt. Dieser kann mit der gewählten Reihe nur durch Rundung erreicht werden, da die Summanden der Reihe immer positiv sind, sich also von 0 an  $\pi$  annähern und es gilt, dass 3.1416 größer als der tatsächliche Wert für  $\pi$  ist. Um ein besseres Gefühl für die Formel zu bekommen bevor wir diese implementieren schauen wir uns die ersten acht Summanden der beiden Reihen an. Die der Reihe 1 haben die Form

$$\begin{aligned} \pi &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(k!)^2 \cdot 2^{k+1}}{(2k+1)!} \\ &= 2 + \frac{1 \cdot 4}{(2+1)!} + \frac{4 \cdot 8}{(4+1)!} + \frac{36 \cdot 16}{(6+1)!} \\ &\quad + \frac{576 \cdot 32}{(8+1)!} + \frac{14400 \cdot 64}{(10+1)!} + \frac{518400 \cdot 128}{(12+1)!} + \frac{25401600 \cdot 256}{(14+1)!} \\ &= 2 + \frac{2}{3} + \frac{4}{15} + \frac{4}{35} + \frac{16}{315} + \frac{16}{693} + \frac{32}{3003} + \frac{32}{6435} \end{aligned}$$

und die der Reihe 2

$$\begin{aligned} \frac{\pi}{2} &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k!}{(2k+1)!!} \\ &= 2 + \frac{1}{3} + \frac{2}{15} + \frac{2}{35} + \frac{8}{315} + \frac{8}{693} + \frac{16}{3003} + \frac{16}{6435} \end{aligned}$$

welche logischerweise halb so groß sind die wie der ersten, da sie gegen  $\frac{\pi}{2}$  konvertiert statt gegen  $\pi$ . Der Einfluss der einzelnen Summanden sinkt dabei mit wachsendem  $k$ , da die Brüche immer kleiner werden und so die größeren, bereits korrekten Dezimalstellen nicht weiter verändert werden. Dies sehen wir später auch noch in dem Kapitel der Simulation der Reihe. Um anschließend eine Abschätzung für die Konvergenz zu bekommen berechnen wir die Summe der ersten acht Summanden der ersten Reihe, welche

$$\sum_{k=0}^7 \frac{(k!)^2 \cdot 2^{k+1}}{(2k+1)!} \approx 3.13712$$

ergibt. Dabei ist zu erkennen, dass bereits die ersten beiden Dezimalstellen korrekt sind. Bei einer Rundung des Ergebnisses auf die dritte Nachkommastelle ist auch diese schon korrekt, was für die relativ schnelle Konvergenz spricht.

### 3 Beweis der Konvergenz der gewählten Reihe

Wir verwenden Summe 1 mit  $\pi = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(k!)^2 \cdot 2^{k+1}}{(2k+1)!}$  um  $\pi$  mit einer Simulation eines chemischen Analogcomputermodells zu berechnen. Im folgenden wird der Beweis, dass die Reihe gegen  $\pi$  konvergiert aufgezeigt.

Dazu wird die Eigenschaft des Arcustangens verwendet der für verschiedene Werte vielfach von  $\pi$  annimmt. Die Vorgehensweise dieses Beweises ist in [3] beschrieben und wurde im Folgenden nachvollzogen.

Sei

$$x = \frac{t^2}{1+t^2}$$

durch umformen erhalten wir

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow \frac{1}{x} &= \frac{1+t^2}{t^2} \Leftrightarrow \frac{1}{\frac{1}{x}-1} = t^2 \\ \Leftrightarrow t &= \sqrt{\frac{x}{1-x}} \end{aligned}$$

Sei

$$y = \frac{1+t^2}{t} \cdot \arctan t = \frac{1}{\sqrt{x-x^2}} \cdot \arctan \sqrt{\frac{x}{1-x}}$$

Um den Ausdruck zu vereinfachen sei

$$z = \arctan \sqrt{\frac{x}{1-x}} \Rightarrow \frac{x}{1-x} = \tan^2 z = \frac{\sin^2 z}{\cos^2 z} = \frac{\sin^2 z}{1-\sin^2 z} \Rightarrow \sin^2 z = x$$

Dadurch kann  $y$  geschrieben werden als

$$y = \frac{1}{\sqrt{x-x^2}} \cdot \arcsin \sqrt{x}$$

Dieser Ausdruck wird abgeleitet

$$\frac{dy}{dx} = y' = \frac{d}{dx}(x - x^2)^{-\frac{1}{2}} \cdot \arcsin x^{-\frac{1}{2}} = \dots$$

Mit Hilfe der Produktregel ergibt sich

$$\begin{aligned} \dots &= -\frac{1}{2} \cdot (1 - 2x)^{-\frac{3}{2}} \cdot \arcsin x^{-\frac{1}{2}} + (x - x^2)^{-\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{2} \cdot x^{-\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{1-x}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{x-x^2} \cdot 2\sqrt{x} \cdot \sqrt{1-x}} + \frac{(1-2x) \cdot \arcsin \sqrt{x}}{2(x-x^2)^{\frac{3}{2}}} = \dots \end{aligned}$$

durch einfaches umformen erhält man schließlich

$$\begin{aligned} \dots &= -\frac{1}{2} \cdot (1 - 2x)^{-\frac{3}{2}} \cdot \arcsin x^{-\frac{1}{2}} + (x - x^2)^{-\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{2} \cdot x^{-\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{1-x}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{x-x^2} \cdot 2\sqrt{x} \cdot \sqrt{1-x}} + \frac{(1-2x) \cdot \arcsin \sqrt{x}}{2(x-x^2)^{\frac{3}{2}}} \end{aligned}$$

Durch einsetzen von  $y$  ergibt sich

$$y' = \frac{1}{2(x-x^2)} - \frac{1-2x}{2(x-x^2)^2} y$$

Diese kann nun zu einer Differentialgleichung umgeformt

$$\begin{aligned} y' &= \frac{1}{2(x-x^2)} \cdot [1 - (1-2x)y] \\ \Leftrightarrow 2(x-x^2)y' &= 1 - (1-2x)y \\ \Leftrightarrow 1 &= 2(x-x^2)y' + (1-2x)y \end{aligned}$$

und mit Hilfe von Potenzreihen gelöst werden [2]. Dazu wird die Potenzreihe für  $y$  und  $y'$  eingesetzt.

$$\sum_{n=1}^{\infty} 2na_n x^n + \sum_{n=1}^{\infty} -2na_n x^{n+1} + \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n + \sum_{n=0}^{\infty} -2a_n x^{n+1} = \dots$$

Dann werden die Potenzen durch Indexverschiebung angeglichen

$$\dots = \sum_{n=1}^{\infty} 2na_n x^n + \sum_{n=2}^{\infty} -2(n-1)a_{n-1} x^n + \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n + \sum_{n=1}^{\infty} -2a_{n-1} x^n = \dots$$

Nun müssen die Grenzwerte der Summen angepasst werden

$$\begin{aligned} \dots &= a_1 x + \sum_{n=2}^{\infty} 2na_n x^n + \sum_{n=2}^{\infty} -2(n-1)a_{n-1} x^n + \\ a_0 + a_1 x + \sum_{n=2}^{\infty} a_n x^n - 2a_0 x + \sum_{n=2}^{\infty} -2a_{n-1} x^n &= \dots \end{aligned}$$

Zusammenfassen ergibt

$$\dots = 2a_1 + a_0 + a_1x - 2a_0x + \sum_{n=2}^{\infty} [2na_n - 2(n-1)a_{n-1} + a_n - 2a_{n-1}]x^n = \dots$$

und schließlich

$$\dots = a_0 + (2a_1 - 2a_0)x + \sum_{n=2}^{\infty} [(2n+1)a_n - 2na_{n-1}]x^n = 1$$

Die Auswertung der Parameter  $a_n$  ergibt

$$\begin{aligned} a_0 &= 1, \\ (2a_1 - 2a_0) &= 0 \implies a_1 = \frac{2}{3}, \\ (2n+1)a_n - 2na_{n-1} &= 0 \end{aligned}$$

Durch Umformen der letzten Gleichung ergibt sich eine rekursive Bildungsvorschrift.

$$a_n = \frac{2n}{2n+1} a_{n-1}$$

Auch nach längerem Probieren ist es uns nicht gelungen die geschlossen Form selbst zu entwickeln. Die folgende Formel ist aus [3].

$$a_n = \frac{(n!)^2 2^{2n}}{2n+1}$$

Damit ist der Parameter  $a_n$  bestimmt und man erhält

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n!)^2 2^{2n}}{(2n+1)!} x^n$$

Mit den Definition für  $y$  und  $x$  ergibt sich

$$\arctan t = y \frac{t}{1+t^2} = \frac{t}{1+t^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n!)^2 2^{2n}}{(2n+1)!} \frac{t^{2n}}{1+t^2}$$

Für  $t = 1$  erhält man

$$\frac{\pi}{4} = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n!)^2 2^{2n}}{(2n+1)!} \left(\frac{1}{2}\right)^n$$

Und damit ergibt sich 1

$$\pi = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n!)^2 2^{2n+1}}{(2n+1)!}$$

□

## 4 Simulation der Reihe mit Hilfe von Copasi

Um  $\pi$  auf die gewünschte Genauigkeit zu berechnen nutzen wir die unendliche Reihe 1 ( $\pi = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(k!)^2 \cdot 2^{k+1}}{(2k+1)!}$ ) und implementieren diese als endliche Partialsumme mit fünfzehn Summanden. Dabei haben wir den Wert des ersten Summanden auf 2 und den der anderen Summanden auf 0 festgesetzt. Für diese berechnen wir die entsprechenden Zähler und Nenner vor und simulieren die Ergebnisse der Division mit Hilfe von Copasi um die jeweiligen Werte der Summanden zu erhalten. Diese wurden im Anschluss aufsummiert um schließlich  $\pi$  zu erhalten. Abbildung 1 verdeutlicht das Reaktionssystem, welches für die Berechnung aufgestellt wurde. Es zeigt schematisch an vier Summanden, wie die Divisionen parallel durchgeführt wurden und die Ergebnisse, addiert werden um anschließend  $\pi$  zu erhalten.

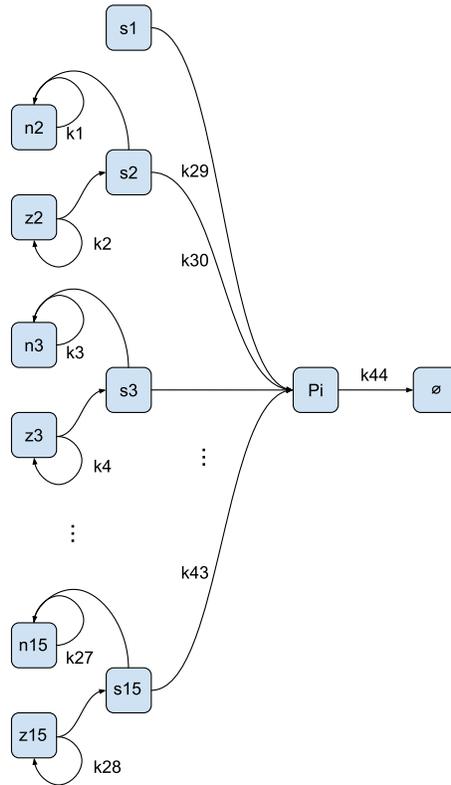
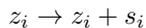


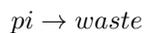
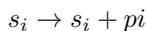
Abbildung 1: Schematische Darstellung der Berechnung der Summanden sowie von  $\pi$ . Hierbei enthält Pi das Ergebnis der Berechnung,  $s_i$  mit  $i \in \{1, 2, 3, \dots, 15\}$  die fünfzehn Summanden, von denen der erste auf den festen Wert 2 gesetzt ist,  $n_i$  mit  $i \in \{2, 3, \dots, 15\}$  für die Nenner und  $z_i$  mit  $i \in \{2, 3, \dots, 15\}$  die Zähler des jeweiligen Summanden.

Zur Berechnung der Division, wurden die beiden Reaktionen



für  $i \in \{2, 3, 4, \dots, 15\}$  verwendet, da der erste Summand auf 2 festgelegt wurde, müssen nur noch vierzehn Divisionen durchgeführt werden. Hierbei sind die Anfangskonzentrationen für die jeweiligen Zähler  $z_i$  und Nenner  $n_i$  festgelegt und das Ergebnis wird im Summanden  $s_i$  berechnet.

Um die einzelnen Summanden letztendlich zu  $\pi$  aufzusummieren wenden wir die nachfolgenden beiden Reaktionen für  $i \in \{1, 2, 3, 4, \dots, 15\}$  an



Waste dient hierbei als Spezies um Nebenprodukte, welche nicht zum Simulationsergebnis beitragen, aufzufangen.

Im nachfolgendem Graph werden die Simulationsergebnisse dargestellt. Dabei ist zu beobachten, dass die Werte der Summanden sowie  $\pi$  gegen ihren gewollten Wert konvergieren. Des Weiteren ist zu sehen, dass der erste Summand von Beginn an den Wert 2 besitzt, welcher ihm fest zugewiesen wurde.

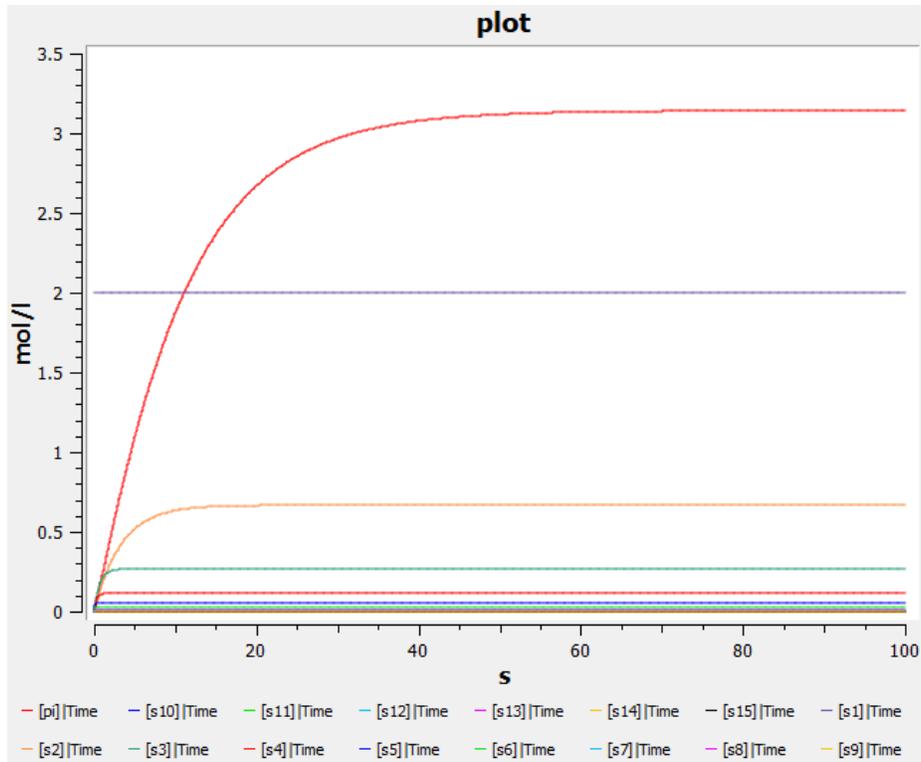


Abbildung 2: Darstellung der Simulationsergebnisse, wobei der Verlauf der Stoffkonzentration in  $\frac{mol}{l}$  gegenüber der Zeit in  $s$  abgebildet wird.

Die exakten Ergebnisse der Simulation von Copasi sind in der Abbildung 3 dargestellt. Hier sind die Werte aller berechneten Summanden sowie  $\pi$  aufgeführt.

|    | Name  | Type      | Concentration<br>[mol/l] |
|----|-------|-----------|--------------------------|
| 1  | waste | reactions | 3.14157e+08              |
| 2  | pi    | reactions | 3.14157                  |
| 3  | s2    | reactions | 0.666667                 |
| 4  | s3    | reactions | 0.266667                 |
| 5  | s4    | reactions | 0.114286                 |
| 6  | s5    | reactions | 0.0507937                |
| 7  | s6    | reactions | 0.023088                 |
| 8  | s7    | reactions | 0.010656                 |
| 9  | s8    | reactions | 0.0049728                |
| 10 | s9    | reactions | 0.00234014               |
| 11 | s10   | reactions | 0.00110849               |
| 12 | s11   | reactions | 0.000527852              |
| 13 | s12   | reactions | 0.000252451              |
| 14 | s13   | reactions | 0.000121176              |
| 15 | s14   | reactions | 5.83442e-05              |
| 16 | s15   | reactions | 2.81662e-05              |

Abbildung 3: Die Werte der Stoffmengenkonzentrationen Summanden in  $\frac{mol}{l}$  sowie die der Approximation von  $\pi$ .

Um den Einfluss der einzelnen Summanden besser abschätzen zu können wurden die Werte aus 4 auch auf einer logarithmischen Skala geplottet. Dort kann man sehen, dass die Werte im logarithmischen in festen Abständen kleiner werden.

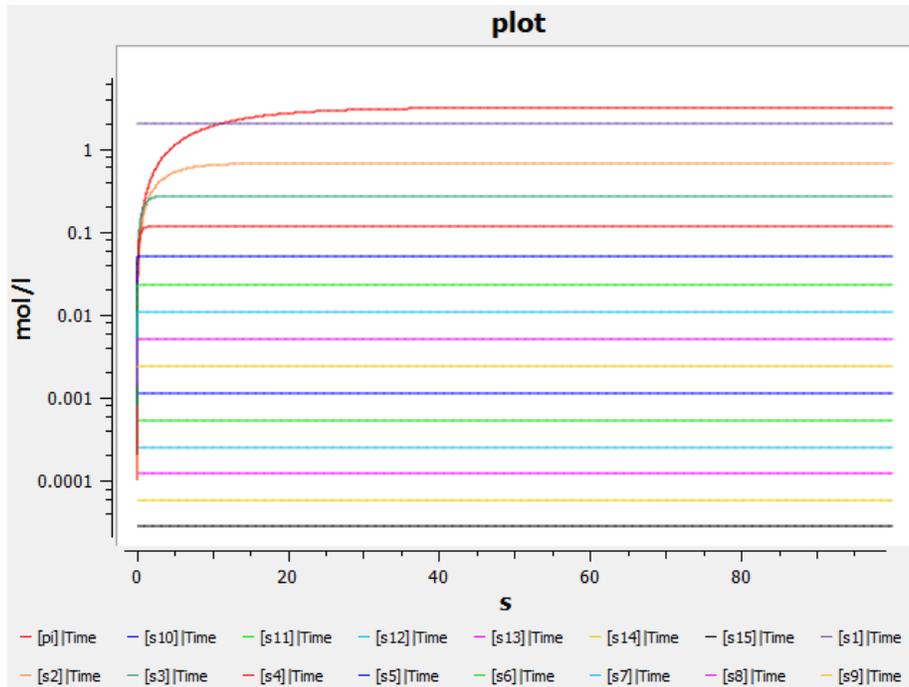


Abbildung 4: Darstellung der logarithmierten Simulationsergebnisse, wobei der Verlauf der Stoffkonzentration in  $\frac{mol}{l}$  gegenüber der Zeit in  $s$  abgebildet wird.

## 5 Fazit

In der vorangegangenen Arbeit wurde das Interesse an dem Projektthema begründet und die historischen Fortschritte kurz beschrieben. Im Anschluss wurden verschiedene Methoden vorgestellt, welche die Kreiszahl  $\pi$  bestimmen und eine gewählt die den Anforderungen des Projektes entsprach. Im folgenden Kapitel wurde die Konvergenz der Reihe 1 mit Hilfe der arctan-Funktion bewiesen. Dann wurden schematisch die Umsetzung auf einem chemischen Analogcomputer dargestellt und erläutert sowie die mit Copasi simulierten Ergebnisse vorgestellt. In der heutigen Zeit stellt sich unter Berücksichtigung der Leistungsfähigkeit natürlich die Frage, ob an chemischen Computern geforscht werden sollte. Während diese den herkömmlichen Computern bisher noch in vielen respektive beinahe allen Bereichen unterlegen sind, bieten sie jedoch einige Vorteile, die die Forschung durchaus erstrebenswert machen.

Zum einen verbrauchen chemische Computer keinen Strom, sind die notwendigen Komponenten zusammengeführt, findet die Berechnung ohne Zuführung weiterer Energie statt [4]. Während die Prozessoren an Grenzen der effizienten Taktrate stoßen, nimmt die Bedeutung von parallelisierten Algorithmen massiv zu. Nach dem Gesetz von Gustafson-Barsis nimmt die Effizienz der Parallelität

bei wachsender Problemgröße linear zu. Mit den chemischen Rechnern bietet sich hier eine Möglichkeit massiv parallele Berechnungen anzustellen. Wie man auch an der hier vorgestellten Simulation beobachten kann laufen alle Divisionen vollständig parallel ab und auch die Additionen beginnen sobald die Reaktionen der Divisionen Reaktionsprodukte liefern.

Momentan ist die Implementierung von Algorithmen noch mit einem großen Mehraufwand verbunden, da noch keine komplexen Rechenmaschinen oder sogar Universalrechner umgesetzt wurden. Auch dies lässt sich nur durch ein Mehr an Forschung beheben.

Wir haben aus diesem Projekt mitgenommen, dass sich  $\pi$  mit überschaubarem Aufwand auf viele unterschiedliche Weisen berechnen lässt. Außerdem haben wir gelernt uns in Themen einzuarbeiten, die nicht direkt in unserem Fachgebiet stammen und mit Berechnungsweisen auseinanderzusetzen die nicht dem entsprechen was wir sonst im Studium lernen.

## Abbildungsverzeichnis

|   |   |    |
|---|---|----|
| 1 | Schematische Darstellung der Berechnung . . . . . | 6  |
| 2 | Simulationsergebnisse . . . . .                   | 8  |
| 3 | Summandenwerte . . . . .                          | 9  |
| 4 | Simulationsergebnisse logarithmiert . . . . .     | 10 |

## Literatur

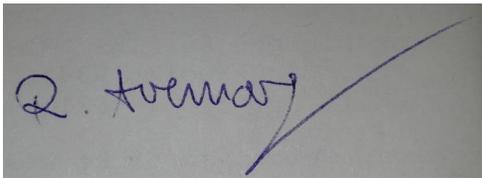
- [1] Pi - chudnovsky. <https://www.craig-wood.com/nick/articles/pi-chudnovsky/>, Oct 2011. Accessed on 15.07.2020.
- [2] blackpenredpen. Power series solution for differential equation. <https://www.youtube.com/watch?v=4Mqj1GL0ZIA>, May 2017. Accessed on 16.07.2020.
- [3] Boris Gourévitch. The world of pi. <http://www.pi314.net/eng/euler.php>, Jun 1999. Accessed on 10.07.2020.
- [4] Thomas Hinze. *Computer der Natur. Ausgewählte molekulare Prinzipien der biologisch inspirierten Informationsverarbeitung*. 07 2013.
- [5] Oliver Nickel. Kreiszahl pi mit 31,4 billionen nachkommastellen ist rekord. <https://www.golem.de/news/pi-day-kreiszahl-pi-mit-31-4-milliarden-nachkommastellen-ist-rekord-1903-140011.html>, Mar 2019. Accessed on 14.07.2020.
- [6] The Editors of Encyclopaedia Britannica. Pi. <https://www.britannica.com/science/pi-mathematics>, Mar 2020. Accessed on 16.07.2020.
- [7] Stanley Rabinowitz and Stan Wagon. *A spigot algorithm for the digits of (1995)*, pages 207–217. Jul 2016.

# Selbstständigkeitserklärung

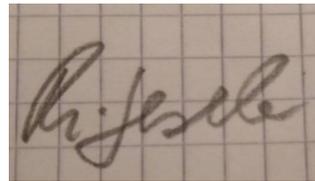
Ich erkläre, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und nur unter Verwendung der angegebenen Quellen und Hilfsmittel angefertigt habe.

Seitens des Verfassers bestehen keine Einwände die vorliegende Bachelorarbeit für die öffentliche Benutzung im Universitätsarchiv zur Verfügung zu stellen.

Jena, den 17.07.2020



Q. Foermer



R. J. Seck