

Friedrich-Schiller-Universität Jena
Fakultät für Mathematik und Informatik

Modul: Molekulare Algorithmen
Dozent: PD Dr.-Ing. habil. Thomas Hinze
Sommersemester 2022

Chemische Berechnung der Fakultätsfunktion $n!$ für $n \in \mathbb{N}$ und $n \leq 9$

Nils Scheidweiler, Alexander Hillig

20. Juli 2022

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird eine Methode vorgestellt, um die Fakultätsfunktion für natürliche Zahlen ≤ 9 mit einem chemischen Reaktionsnetzwerk zu berechnen. Für die chemische Berechnung wird ein Polynom konstruiert, welches durch die Punkte der Fakultätsfunktion für natürliche Zahlen ≤ 9 läuft. Die Funktionswerte des Polynoms können für bestimmte Eingabewerte durch die elementaren Operationen Addition, Subtraktion und Multiplikation berechnet werden. Werden die elementaren Operationen zusammengesetzt, ergibt sich ein Reaktionsnetzwerk mit 26 Spezies und 36 Reaktionen, welches die Fakultätsfunktion für die Eingabewerte berechnet. Das Netzwerk hat eine Eingabespezies und eine Ausgabespezies. Die Werte werden durch die Stoffkonzentration der jeweiligen Spezies repräsentiert. Wir simulieren das Netzwerk für alle Eingabewerte mit dem Programm COPASI und betrachten das asymptotische Verhalten der Stoffkonzentration der Ausgabespezies. Es stellt sich heraus, dass das Netzwerk für alle erwünschten Eingaben zum erwarteten Wert der Fakultätsfunktion konvergiert. Für die meisten Eingabewerte ist der Betrag des relativen Fehlers schon nach den ersten 12s kleiner als 1%.

1 Einleitung

Für die Erstellung eines chemischen Reaktionssystems für die Fakultätsfunktion aller natürlichen Zahlen ≤ 9 muss eine Berechnungsvorschrift gefunden werden, die mit Hilfe von chemischen Reaktionsgleichungen modelliert werden kann. Die Fakultätsfunktion kann rekursiv oder iterativ berechnet werden.

Iterative Berechnungsvorschrift

$$fac(x) = \prod_{k=1}^x k$$

Rekursive Berechnungsvorschrift

$$\begin{aligned} fac(0) &= 1 \\ fac(x) &= fac(x-1) \cdot x \end{aligned}$$

Die Fakultät von 5 ergibt zum Beispiel $120 = 5 \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1$. Wir haben uns entschieden keine iterativen oder rekursiven Berechnungsvorschriften zur Berechnung der Fakultätsfunktion zu verwenden. Stattdessen bestimmen wir ein Polynom, welches durch die Punkte $\{(0, 0!), (1, 1!), \dots, (9, 9!)\}$ läuft und somit genau die gesuchten Eigenschaften besitzt. Der Vorteil dieses Ansatzes ist es, dass für die Berechnung nur elementare Rechenoperationen verwendet werden müssen: Addition, Subtraktion und die Multiplikation. Ein chemisches Reaktionssystem kann in modulare Bestandteile aufgeteilt werden, die dann die einzelnen elementaren Berechnungen durchführen. Für die Berechnung eines Funktionswertes des Polynoms werden nur die eben genannten elementaren Rechenoperationen benötigt, die zusammen das gesuchte chemische Reaktionssystem ergeben.

2 Bestimmung des Polynoms

Wir wählen ein Polynom mit unbestimmten Koeffizienten vom Grad 9 der Form:

$$f(x) = \sum_{i=0}^9 c_i x^i$$

Die Koeffizienten sollen so bestimmt werden, dass die Funktion $f(x)$ an den Stellen $\{0, \dots, 9\}$ die Funktionswerte der Fakultätsfunktion annimmt. Somit muss folgendes Gleichungssystem erfüllt sein.

$$\begin{aligned}
f(0) &= \sum_{i=0}^9 c_i 0^i && = 0! = 1 \\
f(1) &= \sum_{i=0}^9 c_i 1^i && = 1! = 1 \\
f(2) &= \sum_{i=0}^9 c_i 2^i && = 2! = 2 \\
f(3) &= \sum_{i=0}^9 c_i 3^i && = 3! = 6 \\
&\dots\dots && \dots\dots \\
f(9) &= \sum_{i=0}^9 c_i 9^i && = 9! = 362880
\end{aligned}$$

Daraus ergibt sich ein lineares Gleichungssystem zur Bestimmung der Koeffizienten c_i , welches mit Hilfe des Gauß Algorithmus gelöst werden kann:

$$\left[\begin{array}{cccccccccc|c}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\
1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
1 & 2 & 4 & 8 & 16 & 32 & 64 & 128 & 256 & 512 & 2 \\
1 & 3 & 9 & 27 & 81 & 243 & 729 & 2187 & 6561 & 19683 & 6 \\
1 & 4 & 16 & 64 & 256 & 1024 & 4096 & 16384 & 65536 & 262144 & 24 \\
1 & 5 & 25 & 125 & 625 & 3125 & 15625 & 78125 & 390625 & 1953125 & 120 \\
1 & 6 & 36 & 216 & 1296 & 7776 & 46656 & 279936 & 1679616 & 10077696 & 720 \\
1 & 7 & 49 & 343 & 2401 & 16807 & 117649 & 823543 & 5764801 & 40353607 & 5040 \\
1 & 8 & 64 & 512 & 4096 & 32768 & 262144 & 2097152 & 16777216 & 134217728 & 40320 \\
1 & 9 & 81 & 729 & 6561 & 59049 & 531441 & 4782969 & 43046721 & 387420489 & 362880
\end{array} \right] \quad (1)$$

Es ergeben sich die Koeffizienten $c_0 = 1$, $c_1 = 33279551/2520$, $c_2 = -72715009/2016$, $c_3 = 3551673463/90720$, $c_4 = -43208779/1920$, $c_5 = 3281771/432$, $c_6 = -299059/192$, $c_7 = 5773699/30240$, $c_8 = -519151/40320$ und $c_9 = 16687/45360$ und somit das Polynom

$$\begin{aligned}
f(x) &= \frac{16687}{45360} x^9 - \frac{519151}{40320} x^8 + \frac{5773699}{30240} x^7 - \frac{299059}{192} x^6 + \frac{3281771}{432} x^5 \\
&\quad - \frac{43208779}{1920} x^4 + \frac{3551673463}{90720} x^3 - \frac{72715009}{2016} x^2 + \frac{33279551}{2520} x + 1
\end{aligned}$$

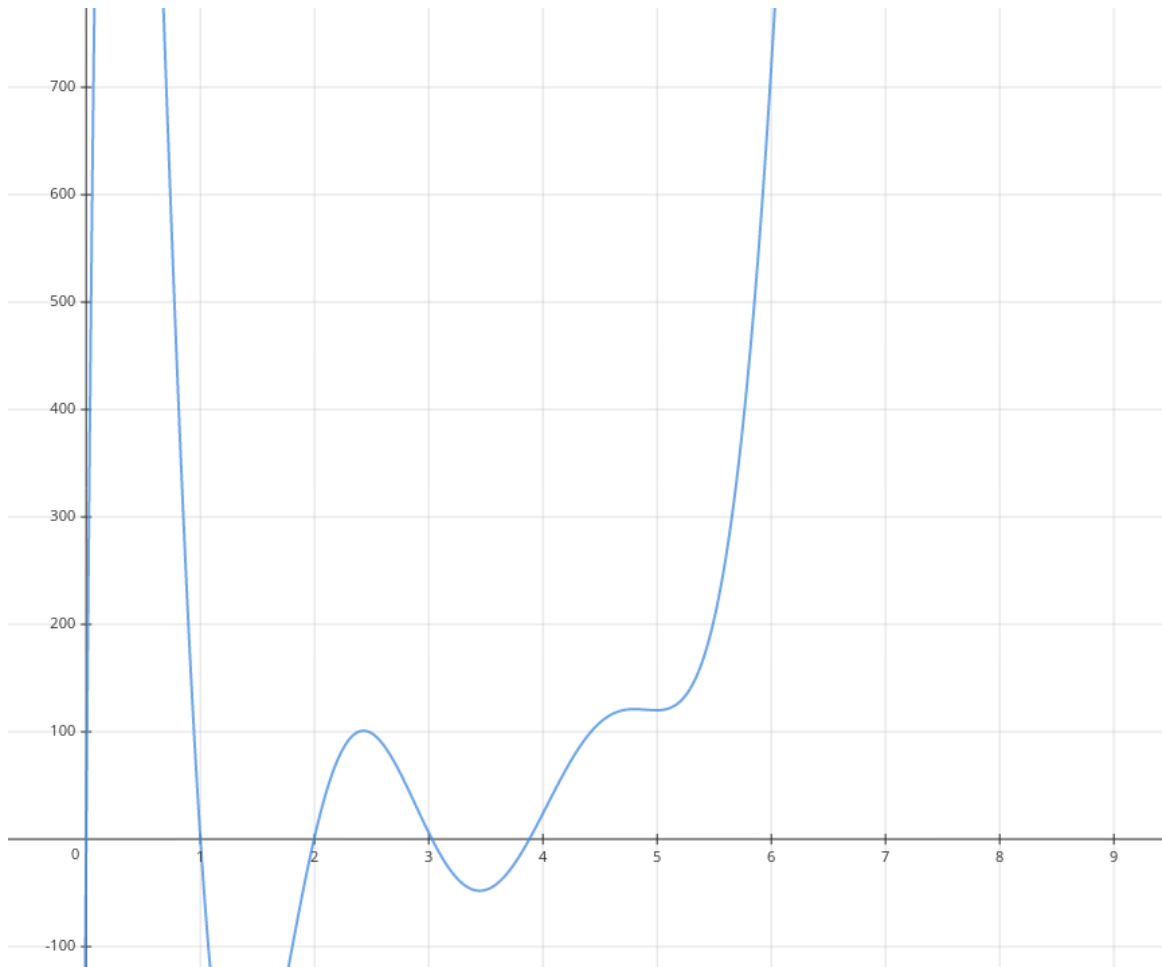


Abbildung 1: Das Polynom für die Fakultätsfunktion

3 Module

Die Berechnung mit einem chemischen Reaktionsnetzwerk wird aus verschiedenen Modulen aufgebaut, die die einzelnen elementaren Berechnungen durchführen. Für die Berechnung des Funktionswertes eines Polynoms werden Module benötigt, die die mathematischen Operatoren Addition, Subtraktion und Multiplikation durchführen.

3.1 Addition

Für die Addition zweier reeller Zahlen ≥ 0 werden drei Reaktionen, drei Spezies x_1, x_2, y und eine Müllspezies \emptyset benötigt. Das Berechnungsnetzwerk berechnet asymptotisch $[y] = [x_1] + [x_2]$, wenn die Ratenkonstante der einzelnen Reaktionen überall gleich groß ist. Dabei nimmt die Stoffkonzentration von y asymptotisch das Ergebnis $[x_1] + [x_2]$ an.

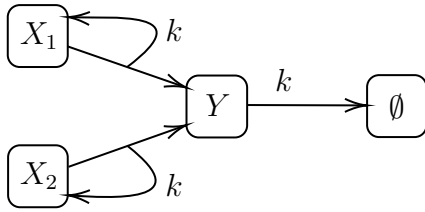


Abbildung 2: Reaktionsnetzwerk für eine Addition

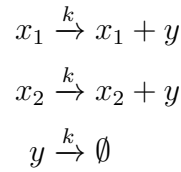


Abbildung 3: Reaktionsgleichungen für eine Addition

Das Reaktionsnetzwerk der Addition kann auf eine beliebige Anzahl von Summanden erweitert werden. Für n Summanden x_1, x_2, \dots, x_n nimmt die Stoffkonzentration von y asymptotisch den Wert $[x_1] + [x_2] + \dots + [x_n]$ an.

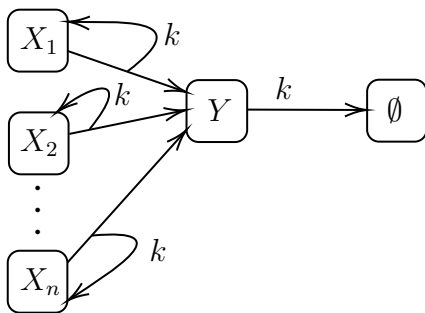


Abbildung 4: Reaktionsnetzwerk für eine Addition mit n Summanden

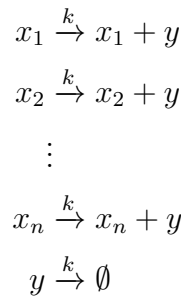


Abbildung 5: Reaktionsgleichungen für eine Addition mit n Summanden

3.2 Subtraktion

Für die nichtnegative Subtraktion zweier reeller Zahlen ≥ 0 werden vier Reaktionen, vier Spezies x_1, x_2, y, z und eine Müllspezies \emptyset benötigt. Das Berechnungsnetzwerk berechnet asymptotisch $[y] = [x_1] - [x_2]$. Dabei nimmt die Stoffkonzentration von y asymptotisch das Ergebnis $[x_1] - [x_2]$ an.

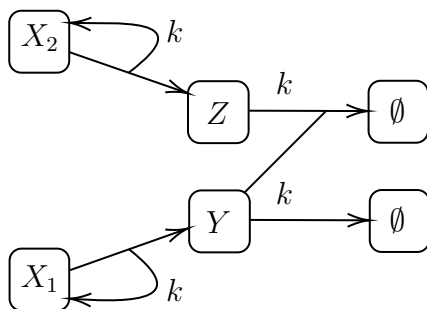


Abbildung 6: Reaktionsnetzwerk für eine Subtraktion

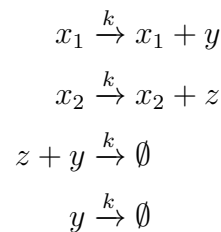


Abbildung 7: Reaktionsgleichungen für eine Subtraktion

3.3 Multiplikation

Für die Multiplikation zweier reeller Zahlen ≥ 0 werden zwei Reaktionen, drei Spezies x_1, x_2, y und eine Müllspezies \emptyset benötigt. Das Berechnungsnetzwerk berechnet asymptotisch $[y] = [x_1] \cdot [x_2]$. Dabei nimmt die Stoffkonzentration von y asymptotisch das Ergebnis $[x_1] \cdot [x_2]$ an.

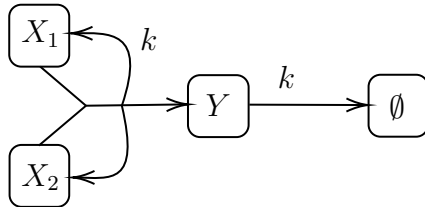


Abbildung 8: Reaktionsnetzwerk für eine Multiplikation

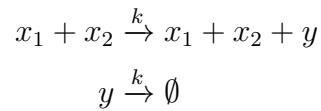


Abbildung 9: Reaktionsgleichungen für eine Multiplikation

Das Reaktionsnetzwerk der Multiplikation kann wie bei der Addition auf beliebig viele Faktoren erweitert werden. Somit lässt sich auch eine natürliche Potenz einer Zahl durch das Reaktionsnetzwerk berechnen.

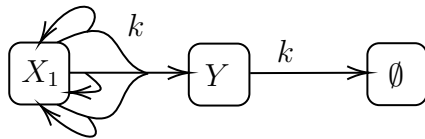


Abbildung 10: Reaktionsnetzwerk für x_1^3

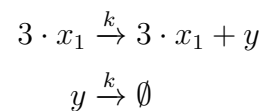


Abbildung 11: Reaktionsgleichungen für x_1^3

4 Netzwerk

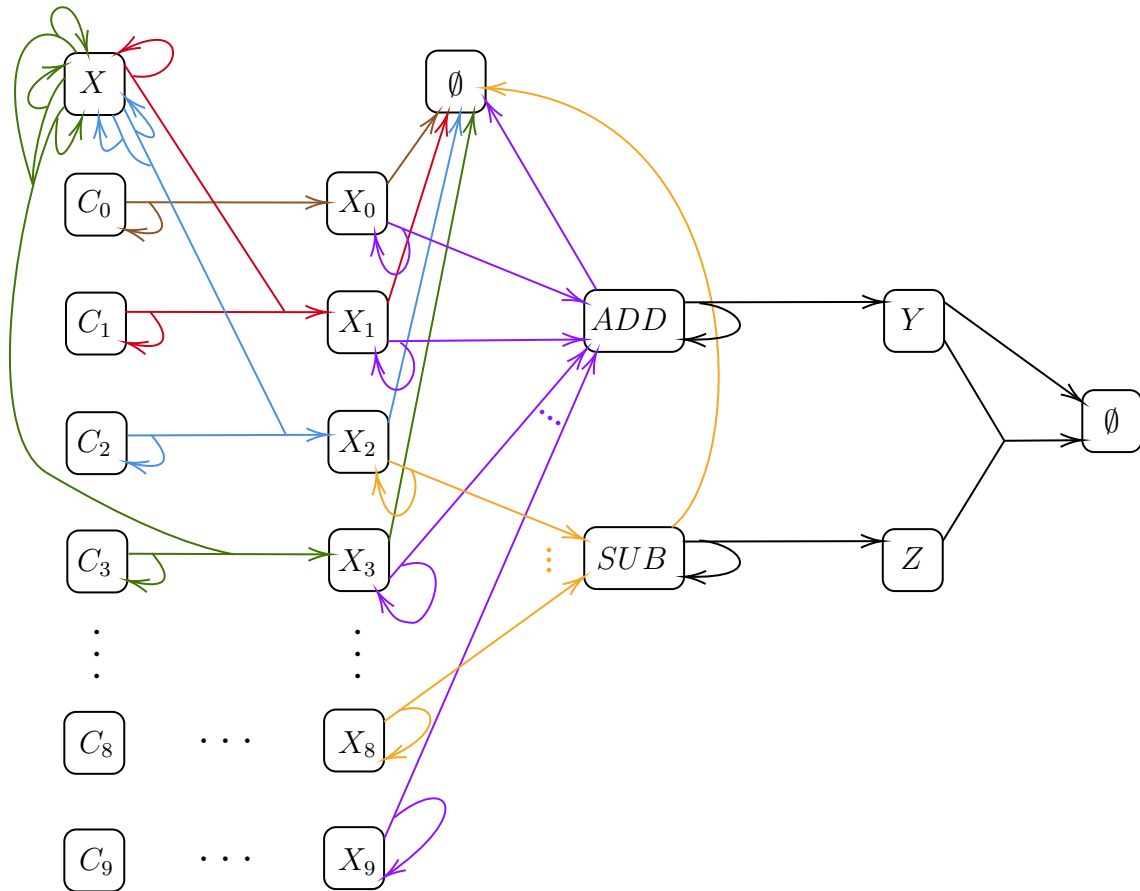


Abbildung 12: Reaktionsnetzwerk

Für das Reaktionsnetzwerk zur Berechnung der Fakultätsfunktion aller natürlichen Zahlen ≤ 9 werden die beschriebenen Module verwendet. Die Fakultätsfunktion wird in dem Netzwerk durch das Polynom dargestellt. Das Reaktionsnetzwerk besteht aus insgesamt 26 Spezies (inklusive einer Müllspezies) und 36 Reaktionen. Bei der Spezies x handelt es sich um den Eingabewert, für den die Fakultätsfunktion berechnet werden soll. Dabei wird die Eingabe durch die Stoffkonzentration von x in mol/l repräsentiert. Die Spezies c_i repräsentiert durch den Anfangswert der Stoffkonzentration den (positiven) Betrag der Konstanten vor der Potenz x^i für $i \in \{0, \dots, 9\}$. Während der Reaktion verändert sich die Stoffkonzentration der Spezies c_i nicht. Die Spezies x_i für $i \in \{0, \dots, 9\}$ speichert die Multiplikation des Betrags der Konstanten c_i mit der jeweiligen Potenz x^i . Somit nimmt die Stoffkonzentration von x_i asymptotisch den Wert $[x_i] = [c_i] \cdot [x]^i$ an. Für das Endergebnis müssen die positiven Anteile, also die Konzentrationen der Spezies $x_0, x_1, x_3, x_5, x_7, x_9$, aufeinander addiert werden und die negativen Anteile, also die Konzentrationen der Spezies x_2, x_4, x_6, x_8 davon abgezogen werden. Dazu werden die Spezies, die die positiven Anteile repräsentieren, in die Spezies add zusammenaddiert und die Spezies für die negativen Anteile in der Spezies sub . Somit nimmt add asymptotisch den Wert $[add] = [x_0] + [x_1] + [x_3] + [x_5] + [x_7] + [x_9]$ und sub asymptotisch den Wert $[sub] = [x_2] + [x_4] + [x_6] + [x_8]$ an. Das Endergebnis wird für die Spezies y berechnet,

indem die Stoffkonzentration der Spezies *sub* von der Konzentration von *add* abgezogen wird. Die Konzentration der Spezies *y* nähert sich also asymptotisch $[y] = [add] - [sub]$.

Reaktion	Reaktions- geschwindigkeit	Reaktion	Reaktions- geschwindigkeit
$c_0 \rightarrow c_0 + x_0$	10	$x_0 \rightarrow x_0 + add$	10
$x_0 \rightarrow w$	10	$x_1 \rightarrow x_1 + add$	10
$x + c_1 \rightarrow x + c_1 + x_1$	10	$x_2 \rightarrow x_2 + sub$	10
$x_1 \rightarrow w$	10	$x_3 \rightarrow x_3 + add$	10
$2 \cdot x + c_2 \rightarrow 2 \cdot x + c_2 + x_2$	10	$x_4 \rightarrow x_4 + sub$	10
$x_2 \rightarrow w$	10	$x_5 \rightarrow x_5 + add$	10
$3 \cdot x + c_3 \rightarrow 3 \cdot x + c_3 + x_3$	10	$x_6 \rightarrow x_6 + sub$	10
$x_3 \rightarrow w$	10	$x_7 \rightarrow x_7 + add$	10
$4 \cdot x + c_4 \rightarrow 4 \cdot x + c_4 + x_4$	10	$x_8 \rightarrow x_8 + sub$	10
$x_4 \rightarrow w$	10	$x_9 \rightarrow x_9 + add$	10
$5 \cdot x + c_5 \rightarrow 5 \cdot x + c_5 + x_5$	10	$add \rightarrow w$	10
$x_5 \rightarrow w$	10	$sub \rightarrow w$	10
$6 \cdot x + c_6 \rightarrow 6 \cdot x + c_6 + x_6$	10	$add \rightarrow add + y$	1000
$x_6 \rightarrow w$	10	$sub \rightarrow sub + z$	1000
$7 \cdot x + c_7 \rightarrow 7 \cdot x + c_7 + x_7$	10	$y \rightarrow w$	1000
$x_7 \rightarrow w$	10	$z + y \rightarrow w$	1000
$8 \cdot x + c_8 \rightarrow 8 \cdot x + c_8 + x_8$	10		
$x_8 \rightarrow w$	10		
$9 \cdot x + c_9 \rightarrow 9 \cdot x + c_9 + x_9$	10		
$x_9 \rightarrow w$	10		

5 Simulation und Ergebnisse

Das Reaktionsnetzwerk wird mit dem Programm COPASI simuliert. Dabei wird der Eingabewert, für den die Fakultätsfunktion berechnet werden soll, als Anfangsstoffkonzentration in *mol/l* der Spezies *x* eingegeben. Mit COPASI wird eine Simulation durchgeführt und die Stoffkonzentration der Spezies *y* über die Zeit gemessen. Die Stoffkonzentration von *y* nähert sich asymptotisch dem zu berechnenden Ergebnis der Fakultät des Eingabewerts. Die Simulation wird mit der Methode **Deterministic (LSODA)** durchgeführt. Dabei wird eine relative Toleranz von $1e^{-6}$ und eine absolute Toleranz von $1e^{-12}$ verwendet. Es werden 100000 maximale interne Schritte verwendet. Für die Simulation wird bis 1000s eine Intervallgröße von 0.001s und bis 10000s eine Intervallgröße von 1s gewählt.

$t \backslash [x]$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0s	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.1s	0.260563	14.2923	45.3129	106.812	215.41	396.345	714.601	1638.15	10502.0	94552.3
0.5s	0.959233	9.86535	30.9566	73.322	151.21	301.94	782.061	4834.34	38676.2	348086
1s	0.999495	6.47795	20.1654	47.94	100.605	214.611	729.508	5037.47	40299.7	362697.0
2s	1.0	4.44343	13.686	32.6963	70.238	163.992	720.16	5040.01	40320.0	362880.0
3s	1.0	3.63826	11.1165	26.6563	58.2885	145.806	720.009	5040.01	40320.0	362880.0
4s	1.0	3.17864	9.64673	23.2041	51.5084	136.512	720.007	5040.01	40320.0	362880.0
5s	1.0	2.87254	8.66579	20.9021	47.0214	131.045	720.007	5040.01	40320.0	362880.0
6s	1.0	2.65029	7.95196	19.2284	43.7849	127.582	720.007	5040.01	40320.0	362880.0
7s	1.0	2.47968	7.4028	17.9418	41.3176	125.29	720.007	5040.01	40320.0	362880.0
8s	1.0	2.34353	6.96353	16.9137	39.3627	123.732	720.007	5040.01	40320.0	362880.0
9s	1.0	2.23172	6.60194	16.0681	37.769	122.652	720.007	5040.01	40320.0	362880.0
10s	1.0	2.13785	6.29763	15.3572	36.4412	121.894	720.007	5040.01	40320.0	362880.0
12s	1.0	1.98812	5.81051	14.2208	34.3481	120.976	720.007	5040.01	40320.0	362880.0
15s	1.0	1.82494	5.27625	12.9774	32.1134	120.367	720.007	5040.01	40320.0	362880.0
20s	1.0	1.64358	4.67623	11.5866	29.7165	120.075	720.007	5040.01	40320.0	362880.0
30s	1.0	1.43616	3.9755	9.97517	27.169	120.006	720.007	5040.01	40320.0	362880.0
50s	1.0	1.24292	3.29131	8.42919	25.1712	120.003	720.007	5040.01	40320.0	362880.0
100s	1.0	1.08165	2.64248	7.03049	24.1298	120.003	720.007	5040.01	40320.0	362880.0
1000s	1.0	0.999996	2.00102	6.00019	24.0011	120.003	720.007	5040.01	40320.0	362880.0
10000s	1.0	0.999996	2.0	6.00014	24.0007	120.002	720.004	5040.01	40320.0	362880.0
$[x]!$	1	1	2	6	24	120	720	5040	40320	362880

Tabelle 1: Stoffkonzentration von y in mol/l zu bestimmten Zeitpunkten t und Eingabewerten $[x]$

In der Tabelle 1 ist die Stoffkonzentration der Spezies y zu bestimmten Zeitpunkten t und Eingabewerten $[x]$ angegeben. Für verschiedene Eingabewerte nähert sich die Stoffkonzentration von y der Fakultät des Eingabewerts unterschiedlich schnell an. Dabei nähert sich $[y]$ für alle Eingaben asymptotisch dem erwarteten Ergebnis. Abbildung 13 zeigt den relativen Fehler von $[y]$ zu dem erwarteten Ergebnis in Abhängigkeit zur Zeit. Die Zeit-Achse wird dabei logarithmisch zur Basis 10 dargestellt, damit die relevanten Ergebnisse besser zur Geltung kommen. Die δ_y -Achse wird symmetrisch logarithmisch dargestellt, damit auch negative Werte für δ_y dargestellt werden können. Für $|\delta_y|$ Werte kleiner als 10^{-3} wechselt die Darstellung auf dieser Achse zu einer linearen Ansicht. In der Abbildung lässt sich erkennen, dass sich der relative Fehler asymptotisch 0 annähert und somit die Stoffkonzentration von $[y]$ nach unterschiedlicher Zeit das erwünschte Ergebnis annimmt.

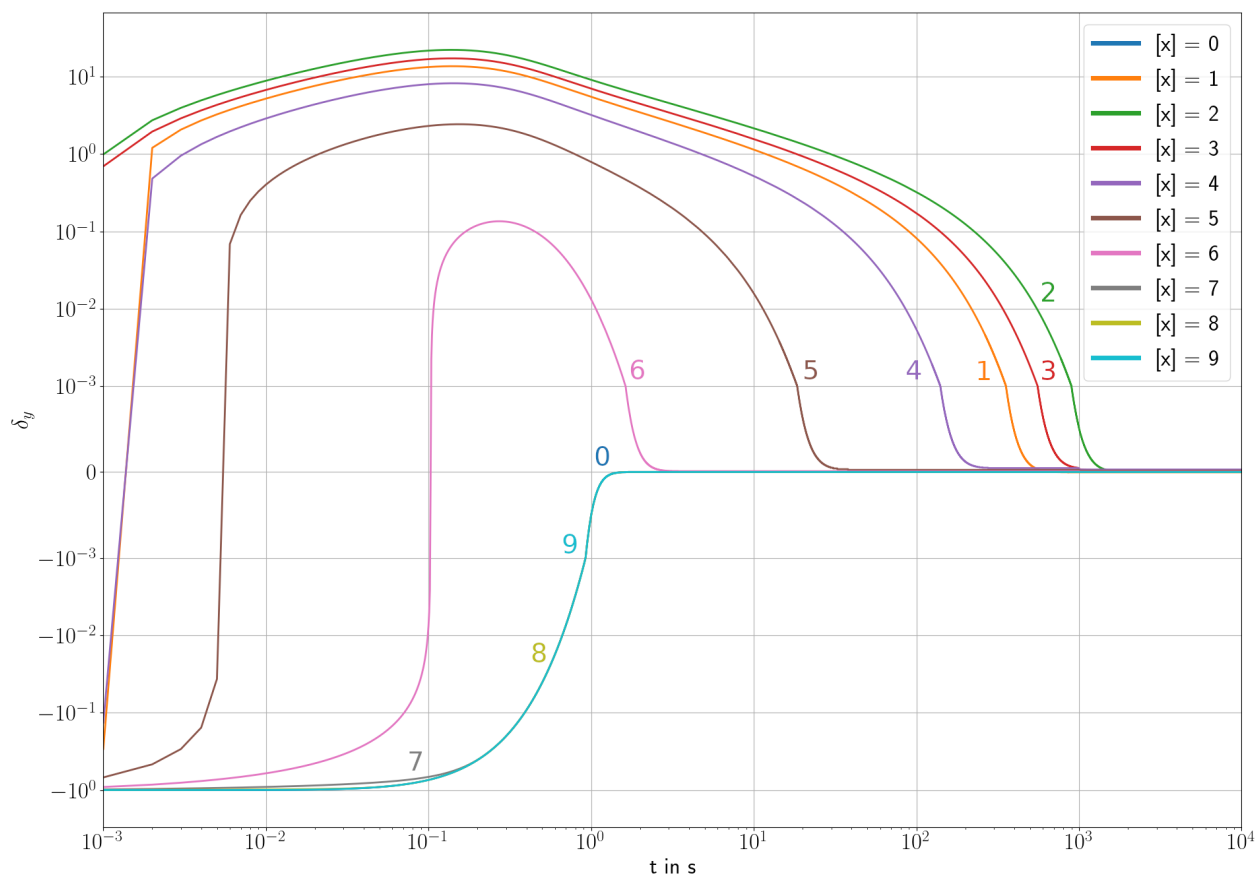


Abbildung 13: Relativer Fehler von $[y]$ zu dem erwarteten Wert $[x]!$

Tabelle 2 offenbart die Zeitpunkte in Sekunden nachdem der Betrag des relativen Fehlers eine bestimmte Schranke unterschreitet. Für die Eingabewerte 0, 5, 6, 7, 8, 9 unterschreitet der Betrag des relativen Fehlers vor 12s die 1%. Für die anderen Eingabewerte dauert es länger. Für den Eingabewert 2 unterschreitet der Betrag des relativen Fehlers erst nach 550.73s die 1%. Hier dauert es am längsten.

Es lässt sich kein Zusammenhang zwischen den Eingabewerten und dem Zeitpunkt, ab dem der Betrag des relativen Fehlers 1% unterschreitet, feststellen.

$x \backslash \delta_y $	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
< 10%	0.39	89.75	226.27	139.49	35.26	4.79	0.45	0.39	0.39	0.39
< 5%	0.48	126.04	317.89	195.96	49.48	6.65	0.66	0.48	0.48	0.48
< 1%	0.67	218.24	550.73	339.62	85.66	11.37	1.07	0.66	0.66	0.66
< 0.1%	0.92	355.15	898.24	556.66	140.47	18.50	1.63	0.92	0.92	0.92
< 0.01%	1.18	488.62	1245.00	811.45	206.56	26.33	2.21	1.17	1.18	1.18

Tabelle 2: Zeitpunkte in Sekunden ab wann der Betrag des relativen Fehlers von $[y]$ zu der Fakultät von $[x]$ eine gewisse Schranke unterschreitet und sich dann nur noch Richtung 0 bewegt

6 Fazit

Das erstellte Reaktionssystem errechnet für alle natürliche Eingabewerte ≤ 9 die Fakultätsfunktion. Die Eingabe wird durch die Anfangsstoffkonzentration der Spezies x in das Reaktionssystem gebracht. Das Ergebnis wird nach der Simulation durch die Stoffkonzentration der Spezies y ausgedrückt. Das chemische Reaktionssystem ist modular aufgebaut und somit übersichtlich und lässt sich in die Module Addition, Subtraktion und Multiplikation unterteilen. Mit unserer Methode erreicht das Reaktionssystem eine Berechnungsgenauigkeit mit einem betragsmäßig relativen Fehler kleiner als 1%. Dieser Genauigkeit wird für alle Eingabewerte unter 1000s Simulationszeit erreicht. Für die meisten Eingabewerte ist diese Genauigkeit innerhalb der ersten 12s erreicht.