

# Molekulare Algorithmen

Chemisches Analogcomputermodell (COPASI) - Berechnung nichtnegativer reeller Nullstellen eines quadratischen Polynoms

Paul Hempel

Friedrich-Schiller-Universität Jena

# Inhaltsverzeichnis

- 1 Problemstellung
- 2 Umsetzung
- 3 Ergebnisse

# Problemstellung

# Problemstellung

## Aufgabe

Gesucht sind positive, reelle Nullstellen  $x_i \in \mathbb{R}$  einer quadratischen Funktion

$$f(x) = ax^2 + bx + c$$

sodass gilt:

$$\forall x_i : f(x_i) = 0$$

## Lösungsformel

$$x_{1,2} = -\frac{p}{2} \pm \sqrt{\frac{p^2}{4} - q}$$

- $p = \frac{b}{a}$
- $q = \frac{c}{a}$

# Problemstellung

$$x_{1,2} = -\frac{p}{2} \pm \sqrt{\frac{p^2}{4} - q}$$

## Eigenschaften

- 1  $\sqrt{\frac{p^2}{4} - q} \geq 0$  (nur reelle Zahlen)
  - $\Rightarrow \frac{p^2}{4} - q \geq 0$
  - $\Rightarrow q \leq \frac{p^2}{4}$
- 2  $-\frac{p}{2} \pm \sqrt{\frac{p^2}{4} - q} \geq 0$  (nur positive Nullstellen)
  - $\Rightarrow -\frac{p}{2} \geq \sqrt{\frac{p^2}{4} - q}$
  - $\Rightarrow -\frac{p}{2} \geq 0$
  - $\Rightarrow p \leq 0$

# Problemstellung

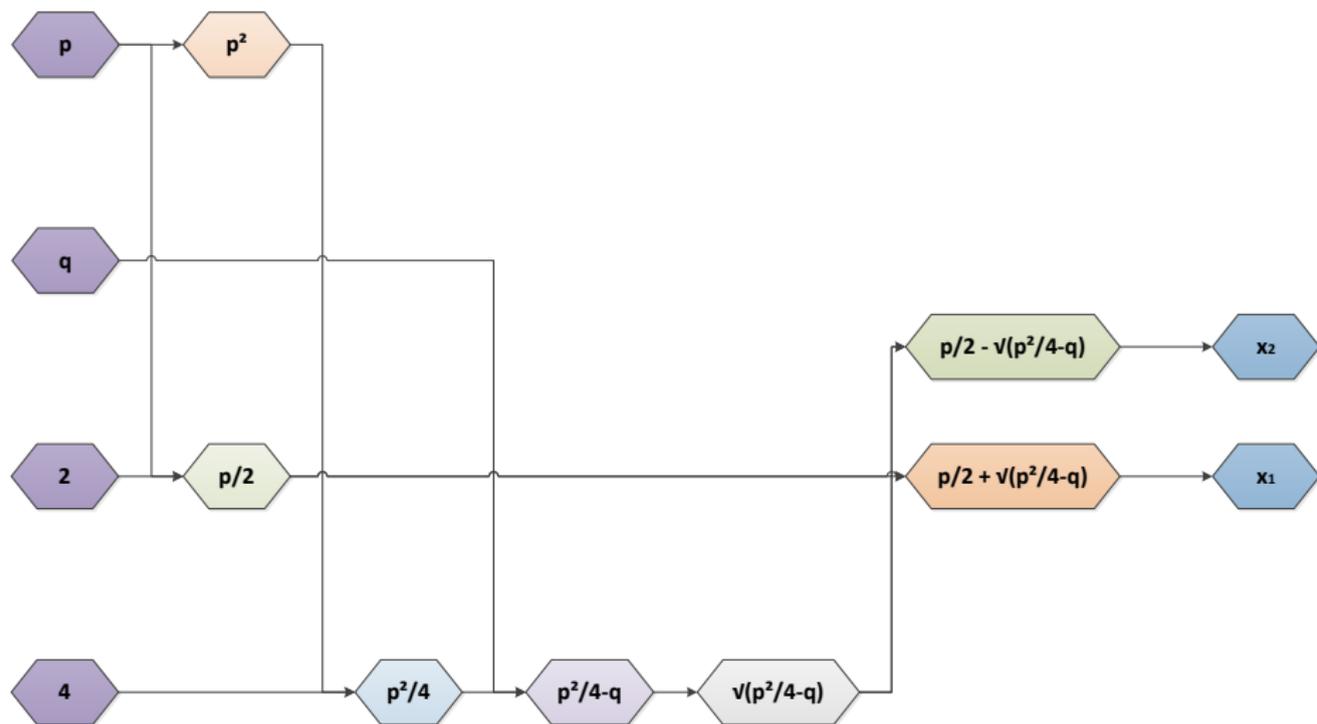
$$x_{1,2} = \frac{p}{2} \pm \sqrt{\frac{p^2}{4} - q}$$

$$\text{s.t. } p \leq 0$$

$$\text{s.t. } q \leq \frac{p^2}{4}$$

# Umsetzung

# Umsetzung

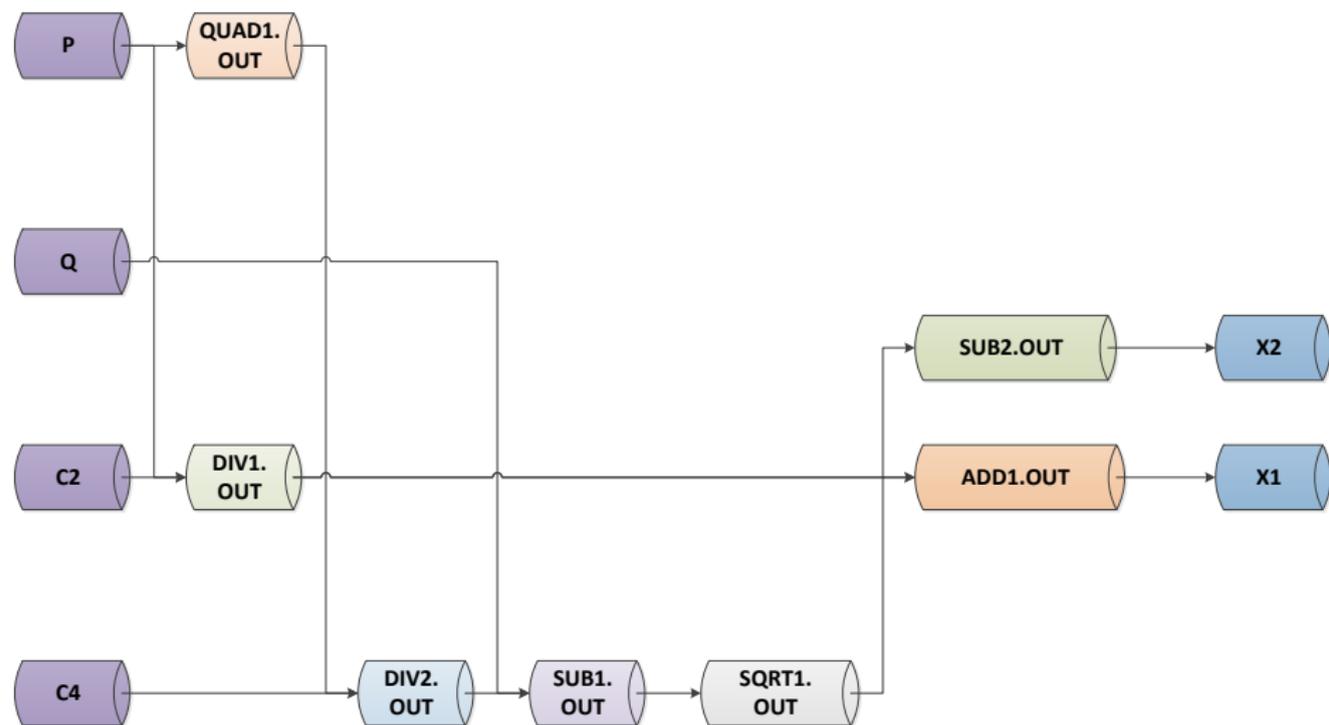


# Umsetzung

## Notwendige Spezies

	Ausdruck	Spezies
Eingabevariablen:	$p, q$	P, Q
Konstanten:	2, 4	C2, C4
Multiplikation:	$p^2 (p \cdot p)$	QUAD1.OUT
Division:	$p/2$ $p^2/4$	DIV1.OUT DIV2.OUT
Subtraktion:	$p^2/4 - q$ $p/2 - \sqrt{p^2/4 - q}$	SUB1.OUT X2
Addition:	$p/2 + \sqrt{p^2/4 - q}$	X1
Quadratwurzel:	$\sqrt{p^2/4 - q}$	SQRT1.OUT

# Umsetzung

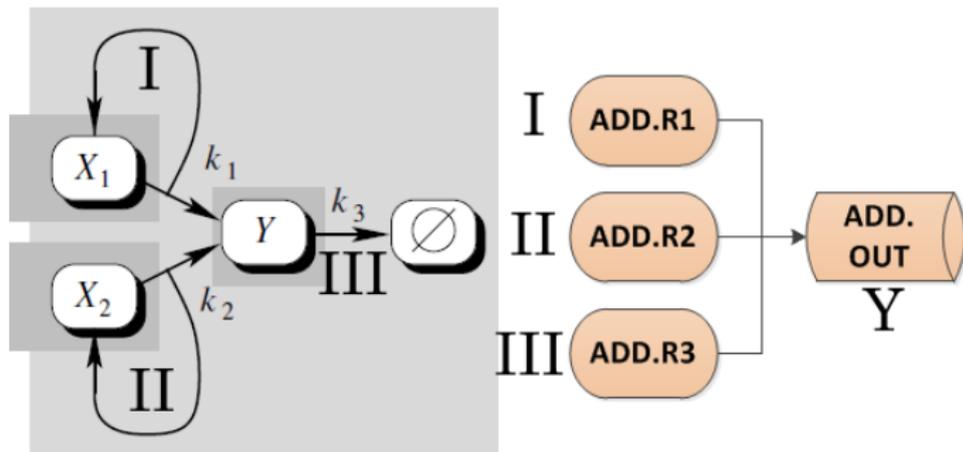


# Umsetzung

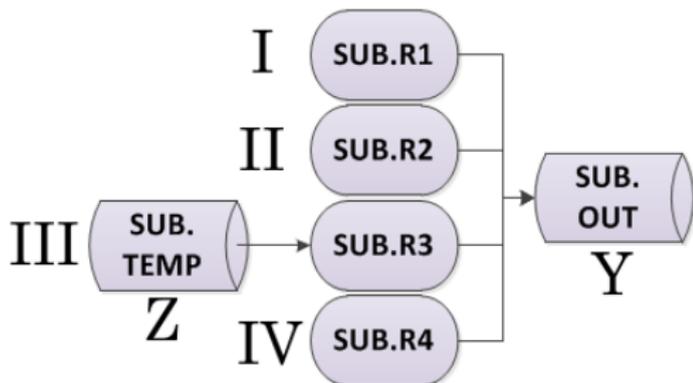
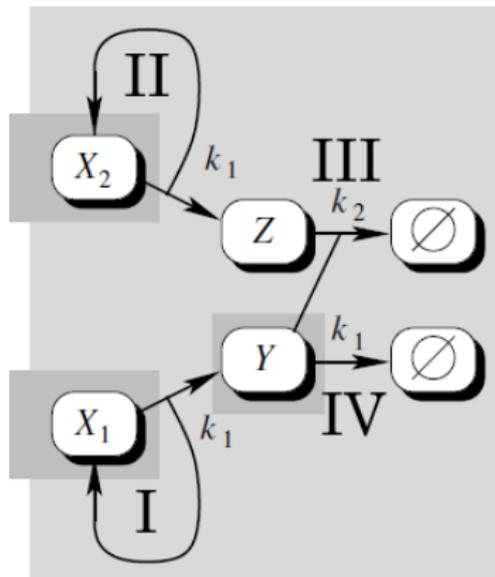
## Verwendete Rechenoperationen

- Addition
- Subtraktion
- Division
- Quadratwurzel
- Multiplikation (anstatt quadratische Potenz)

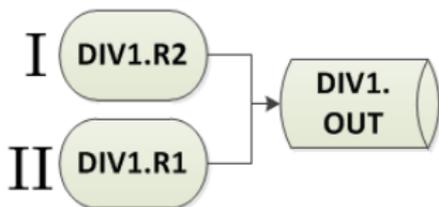
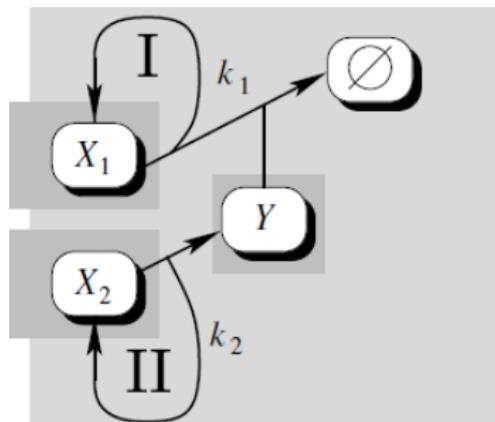
# Umsetzung - Addition



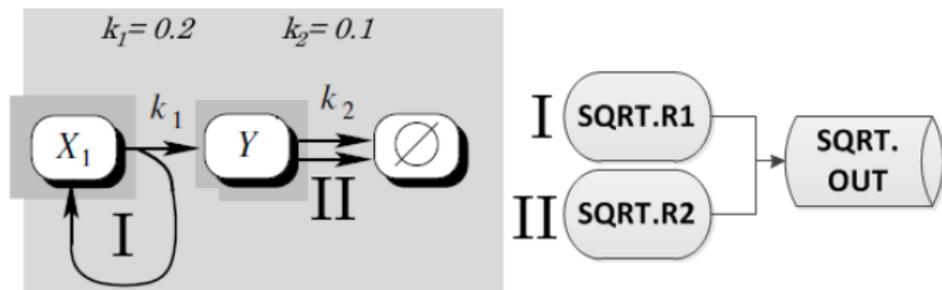
# Umsetzung - Subtraktion



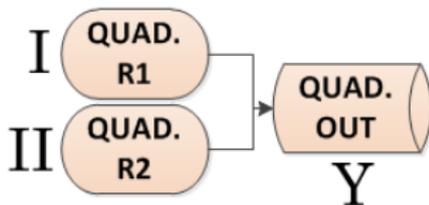
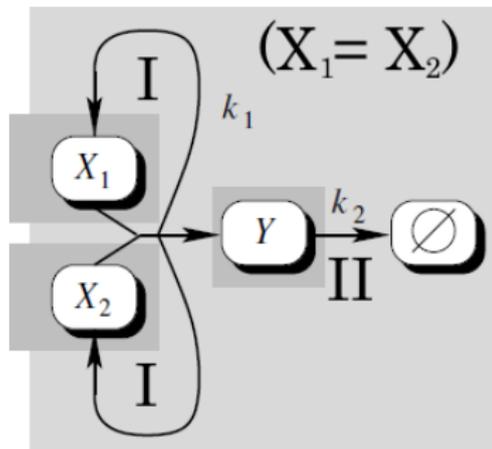
# Umsetzung - Division



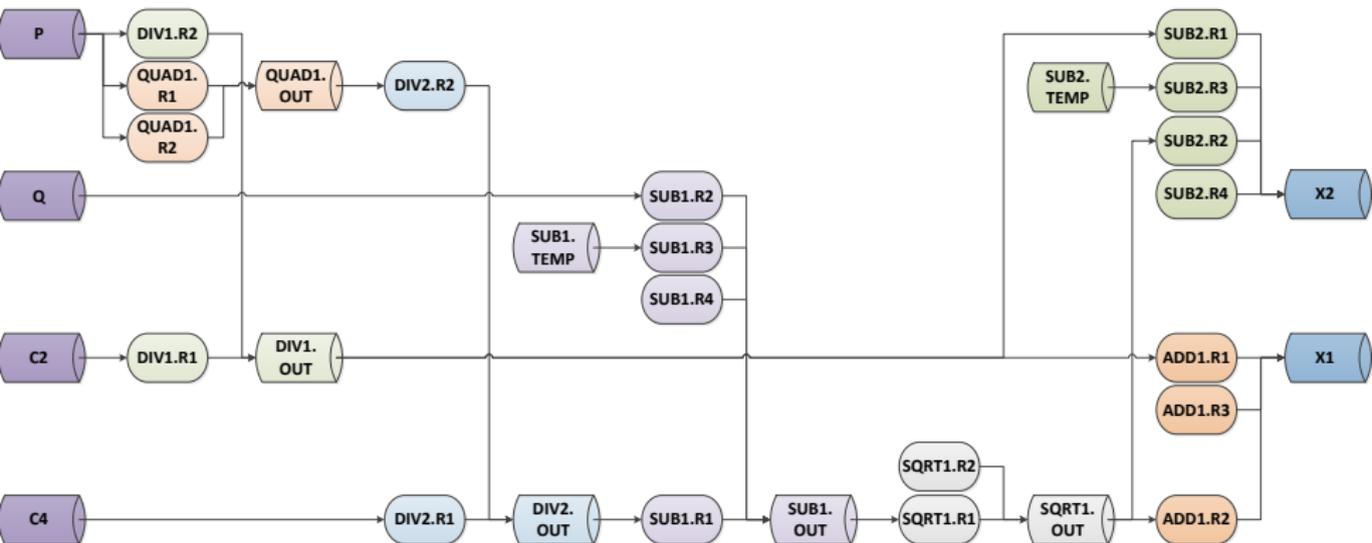
# Umsetzung - Quadratwurzel



# Umsetzung - Multiplikation (quadratische Potenz)



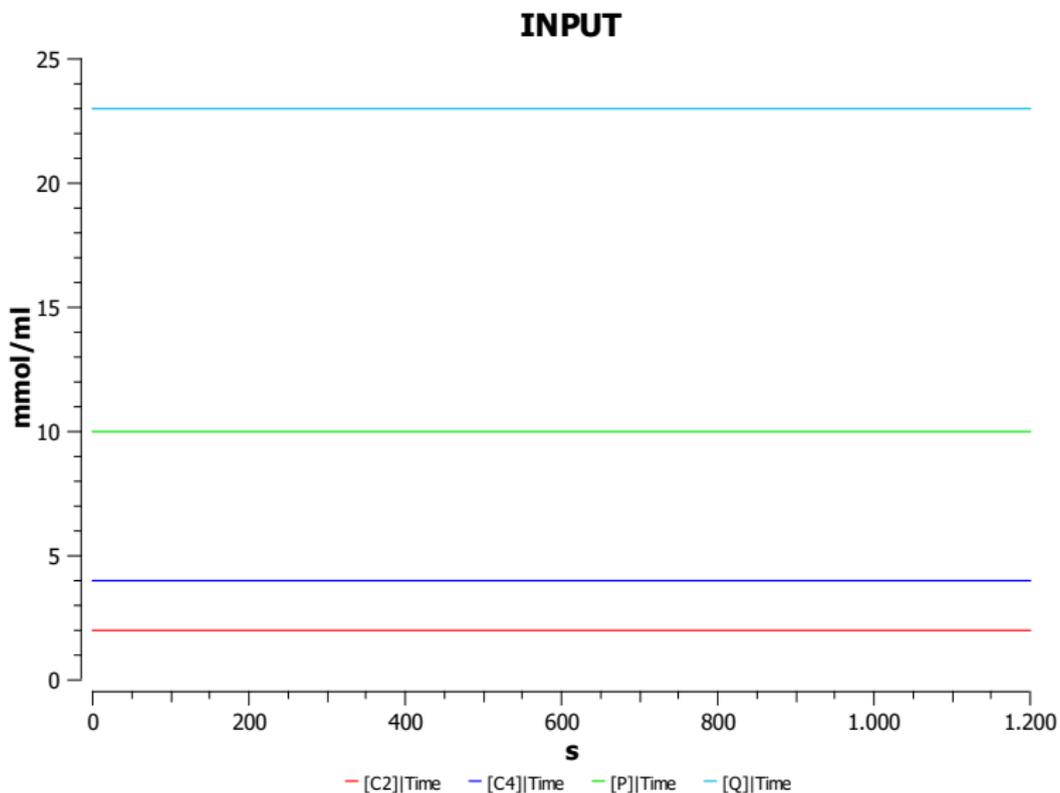
# Umsetzung

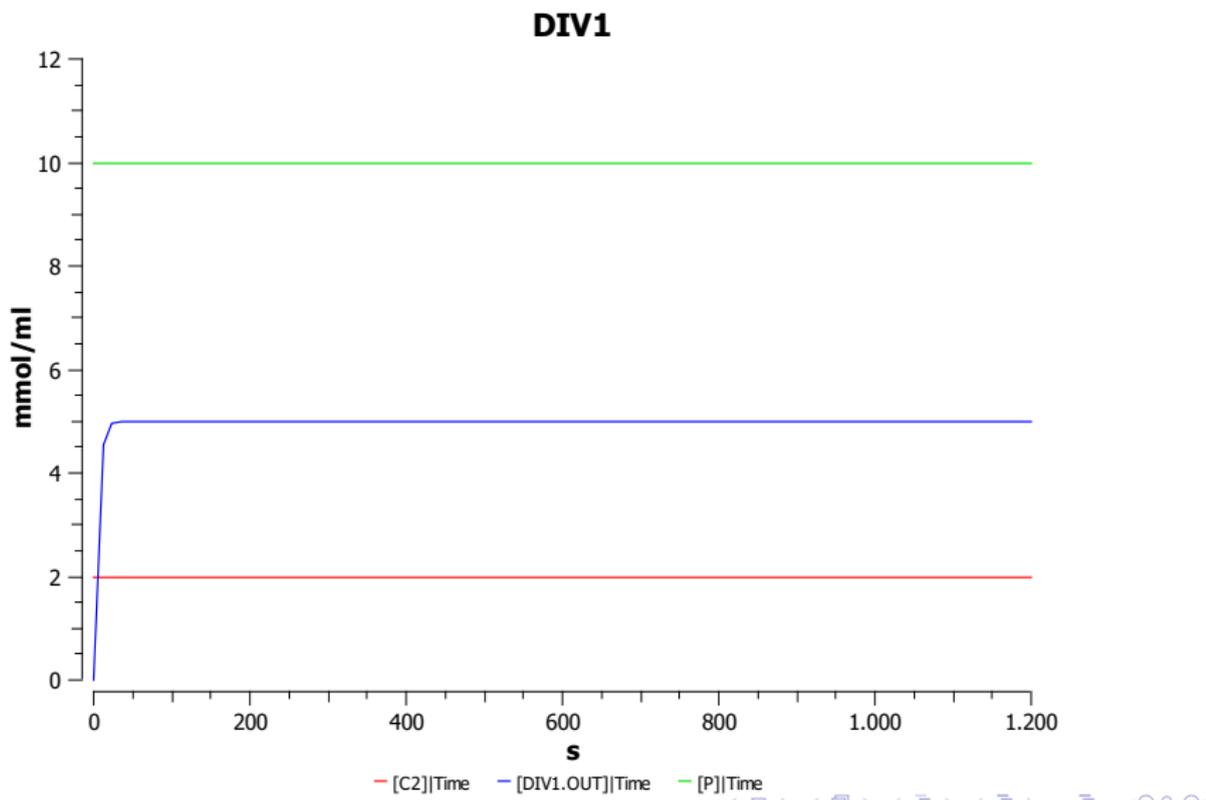


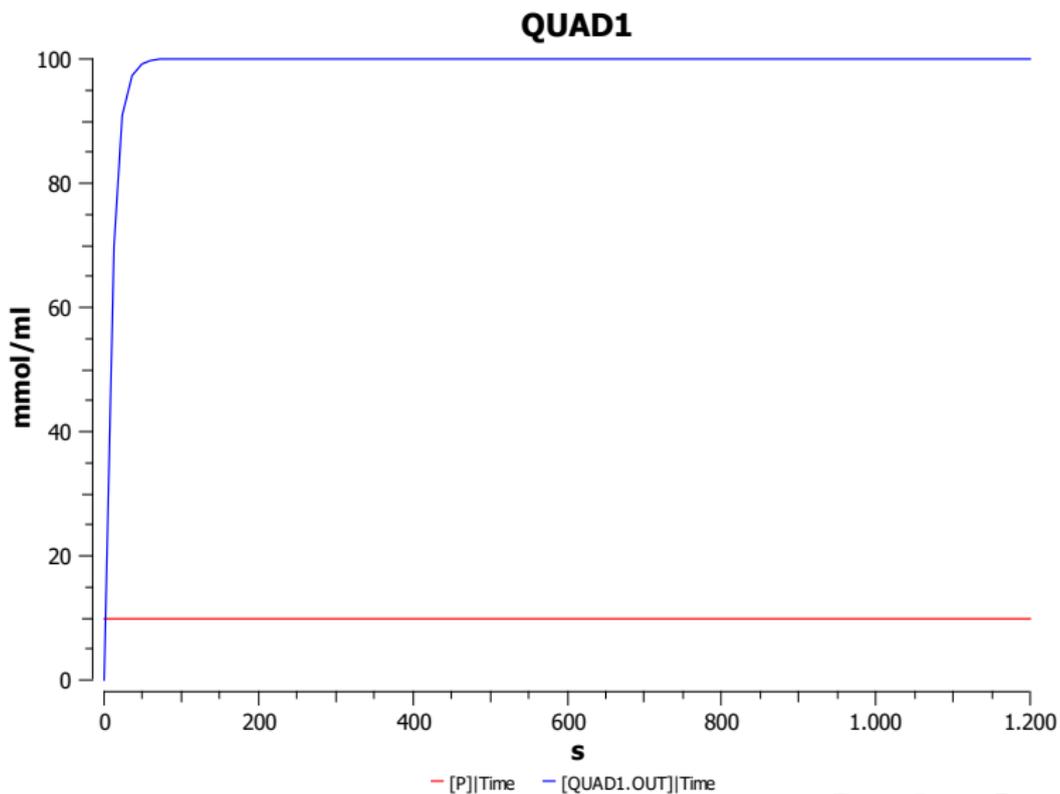
# Ergebnisse

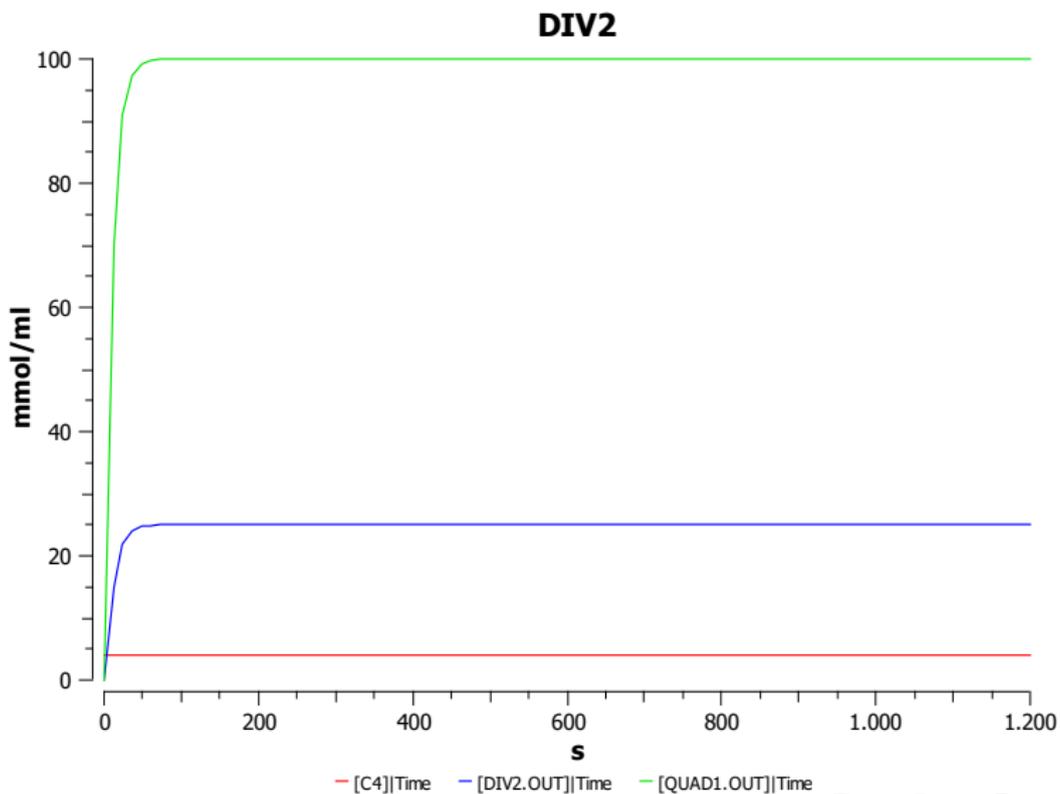
für ein Beispiel mit  $p = -10$  und  $q = 23$

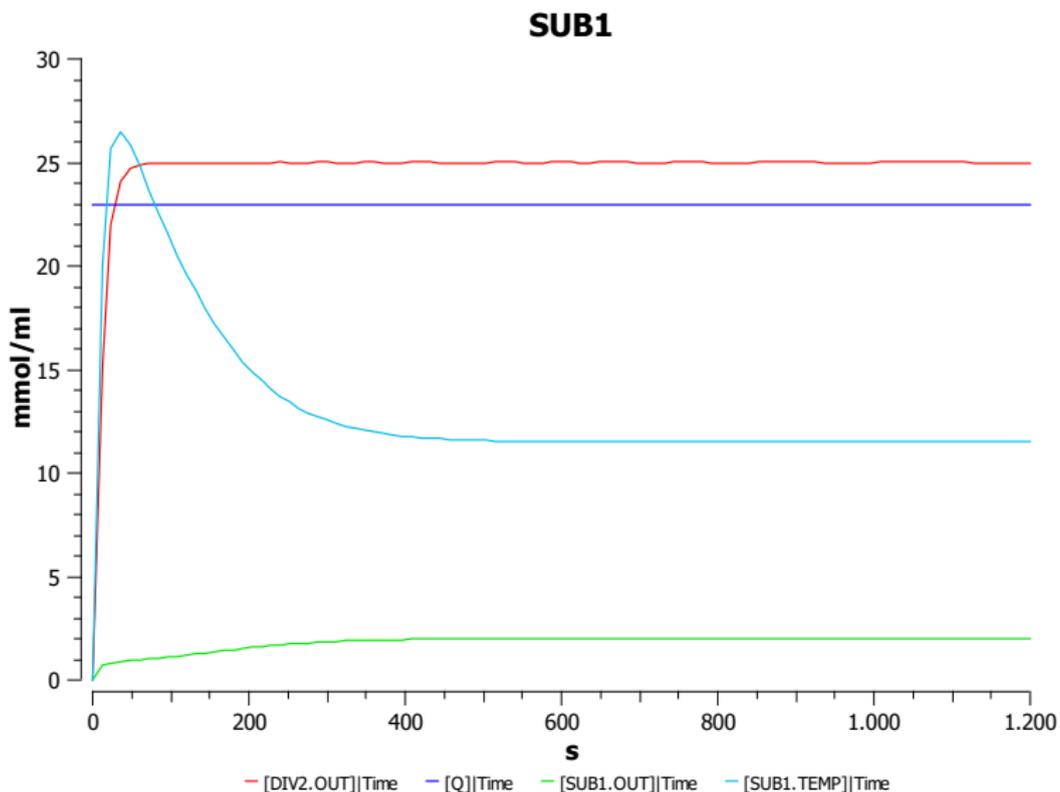
# Ergebnis - Eingabe



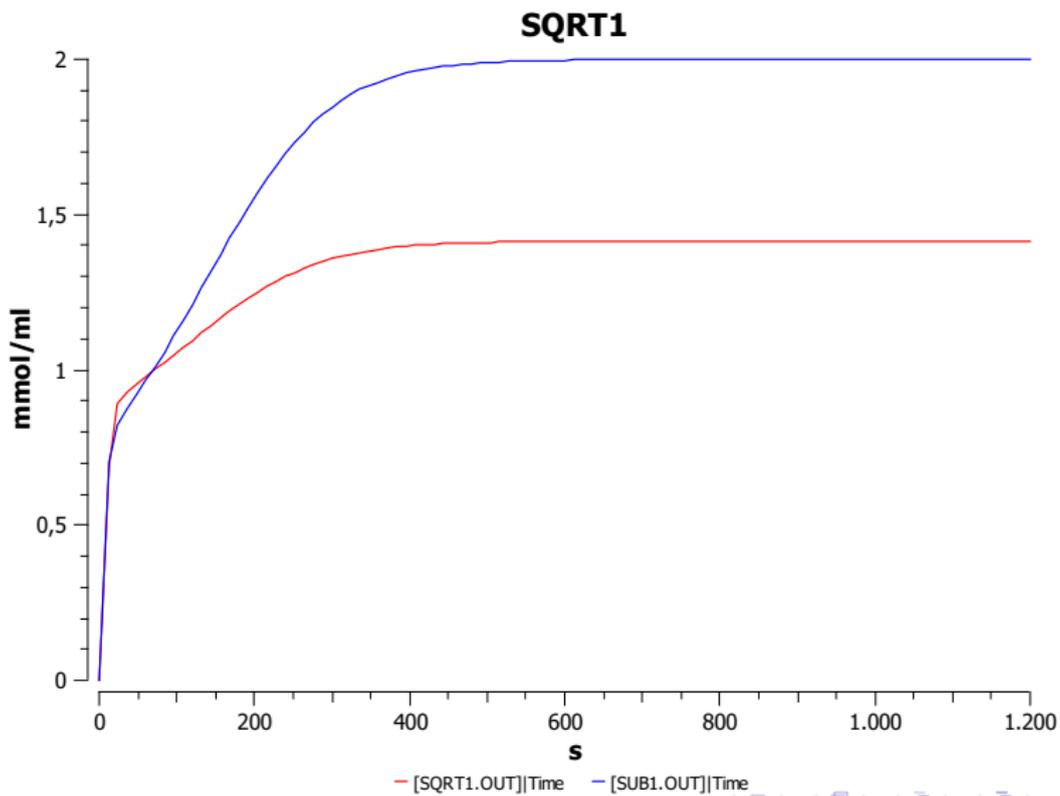
Ergebnis -  $p/2$ 

Ergebnis -  $p^2$ 

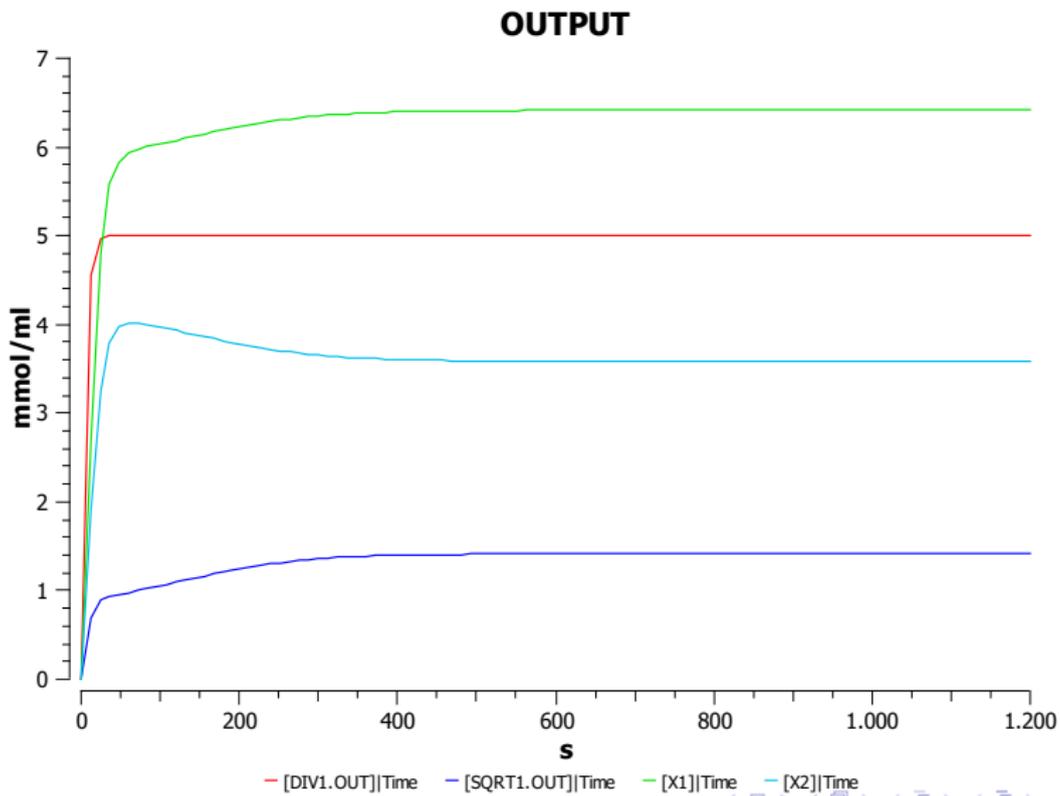
Ergebnis -  $p^2/4$ 

Ergebnis -  $p^2/4 - q$ 

Ergebnis -  $\sqrt{p^2/4 - q}$



$$\text{Ergebnis} - p/2 \pm \sqrt{p^2/4 - q}$$



# Vielen Dank für Eure Aufmerksamkeit

Gibt es noch Fragen???