

Molekulare Algorithmen

**Chemisches Analogcomputermodell für einen
Bit-Addierer mit Übertrag**

Sebastian Krautwurst

7.7.2014 - FSU Jena

Überblick

- ▶ Einführung: Bit-Volladdierer
- ▶ Chemisches Rechnen
- ▶ Boolsche Operationen
- ▶ Implementierung in Copasi
- ▶ Ergebnisse

Bits addieren

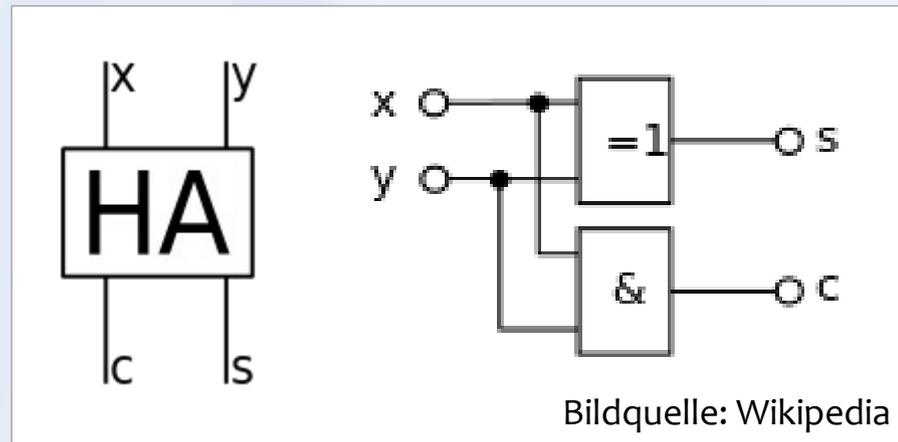
▶ $1 + 1 = 10$

Bits addieren

- ▶ $1 + 1 = 10$
- ▶ Zwei Eingänge: x und y
- ▶ Zwei Ausgänge: Summe s und Übertrag c_{out}

Bits addieren

- ▶ $1 + 1 = 10$
- ▶ Zwei Eingänge: x und y
- ▶ Zwei Ausgänge: Summe s und Übertrag c_{out}
- ▶ Sog. Halbaddierer:

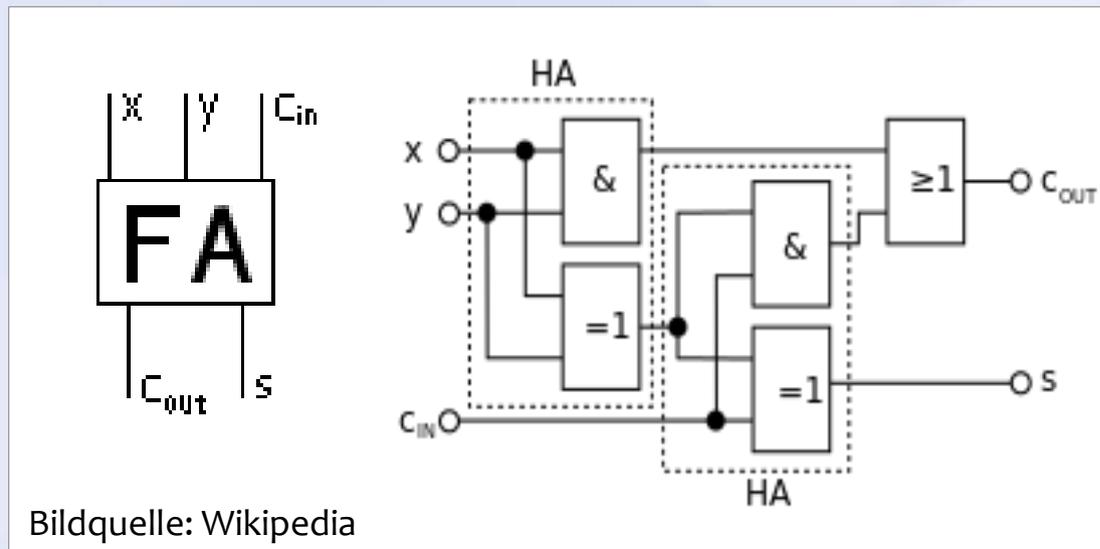


Volladdierer

- ▶ In Addierwerken: Dritter Eingang c_{in} benötigt

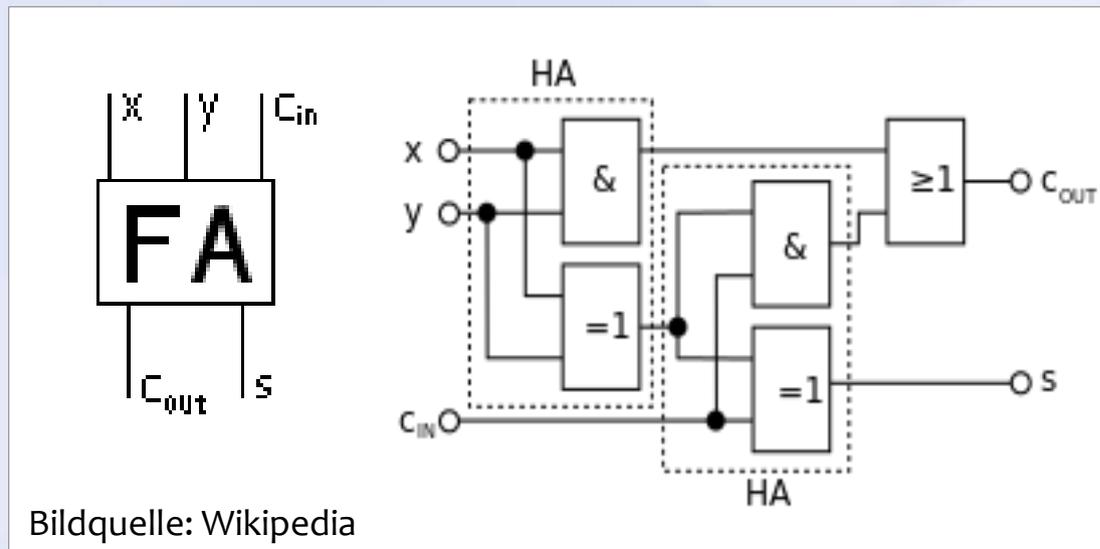
Volladdierer

- ▶ In Addierwerken: Dritter Eingang c_{in} benötigt
- ▶ Sog. Volladdierer:



Volladdierer

- ▶ In Addierwerken: Dritter Eingang c_{in} benötigt
- ▶ Sog. Volladdierer:



x	y	c_{in}	c_{out}	s
0	0	0	0	0
0	0	1	0	1
0	1	0	0	1
0	1	1	1	0
1	0	0	0	1
1	0	1	1	0
1	1	0	1	0
1	1	1	1	1

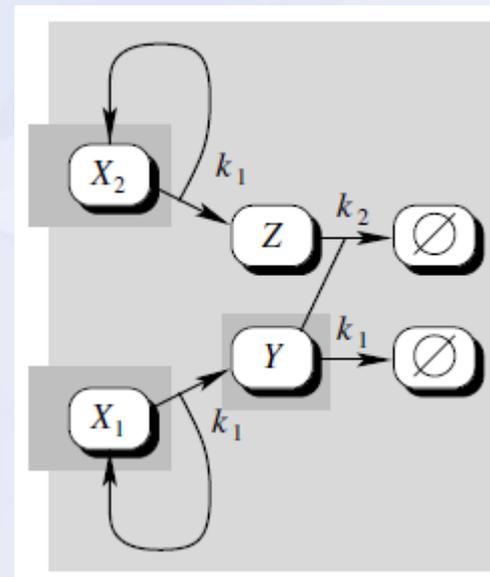
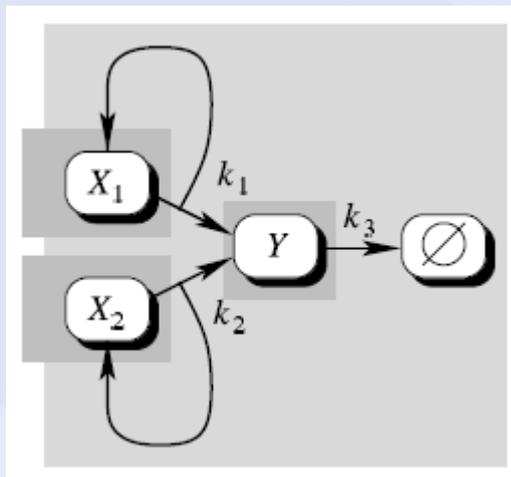
Chemisches Rechnen

- ▶ Stoffkonzentrationen entsprechen den Variablenwerten
- ▶ Meist Massenwirkungskinetik ausreichend
- ▶ Vergleiche Skript:

'Computer der Natur' – Thomas Hinze 2013

Chemisches Rechnen

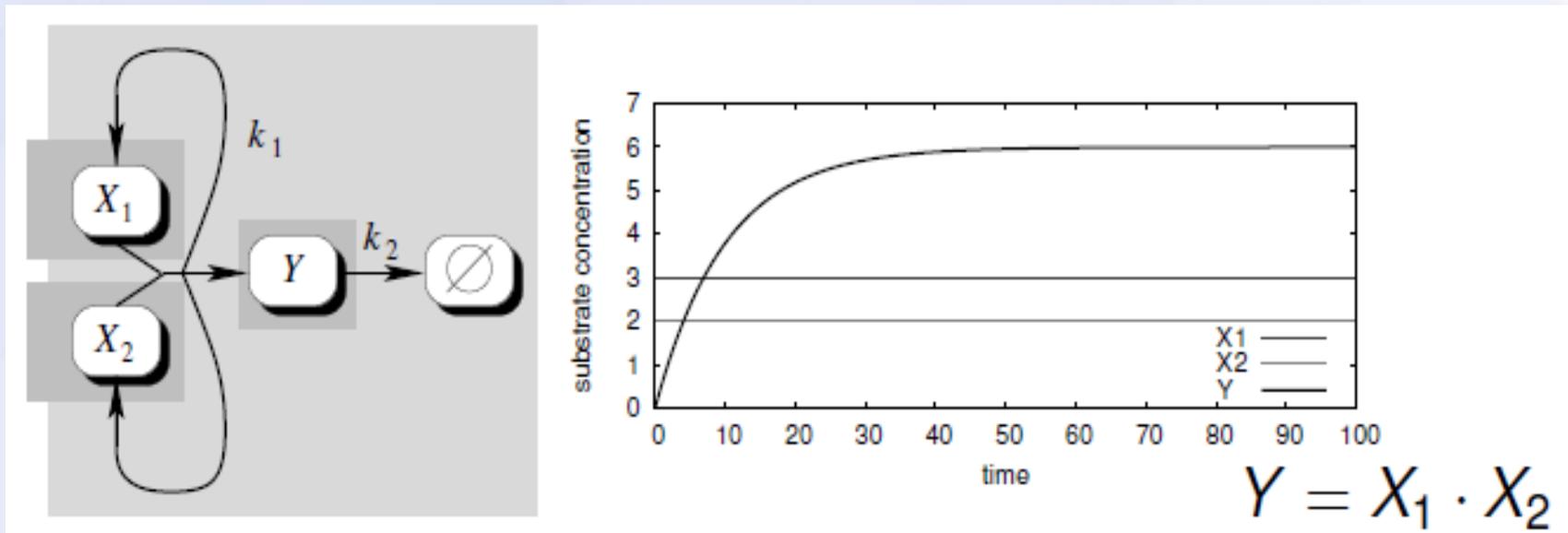
- ▶ Addition und nichtnegative Subtraktion:



Bildquelle: 'Computer der Natur' – Thomas Hinze

Chemisches Rechnen

► Multiplikation:



Bildquelle: 'Computer der Natur' – Thomas Hinze

Boolsche Operationen

- ▶ Spezieskonzentrationen im Intervall $[0, 1]$
- ▶ Nah bei $0 \rightarrow false$; Nah bei $1 \rightarrow true$

Boolsche Operationen

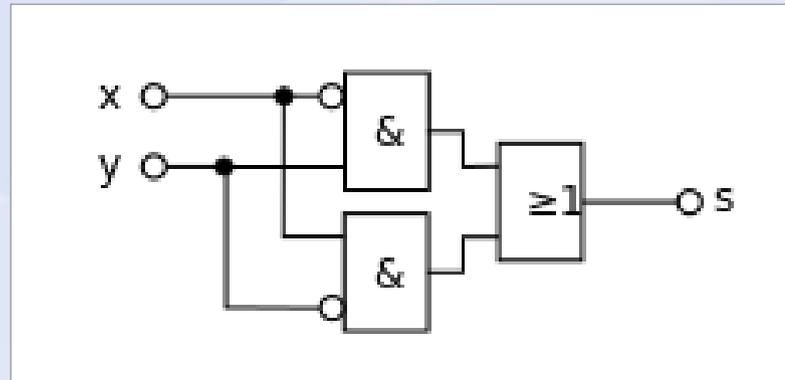
- ▶ Spezieskonzentrationen im Intervall $[0, 1]$
- ▶ Nah bei $0 \rightarrow false$; Nah bei $1 \rightarrow true$
- ▶ Zum Aufbau des Volladdierers werden logische **Gatter** benötigt:
- ▶ **AND, OR, NOT, XOR, ...**

Boolsche Operationen

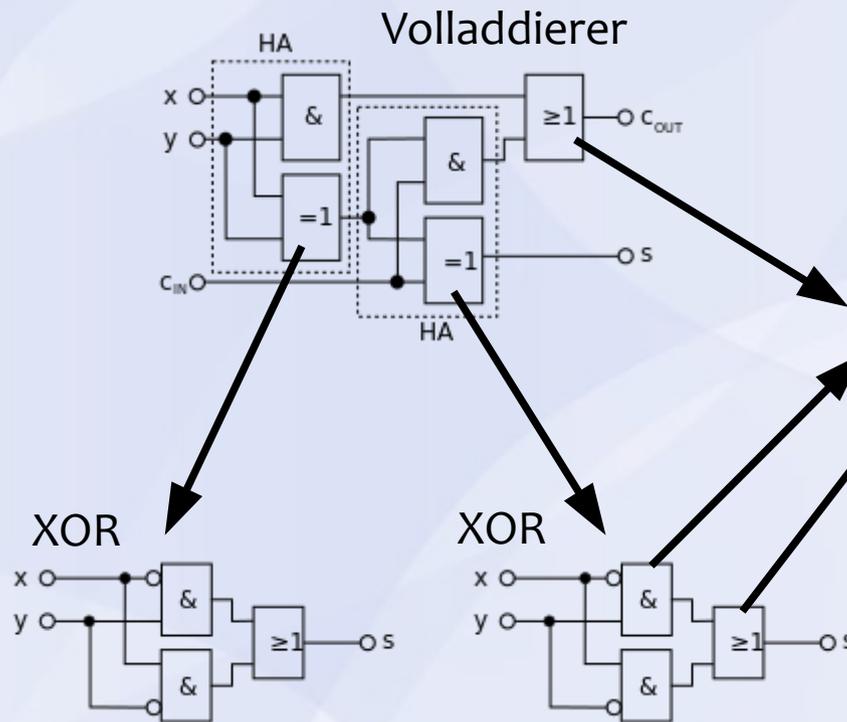
- ▶ **AND:** $x \wedge y = x \cdot y$
- ▶ **OR:** $x \vee y = x + y - x \cdot y$
- ▶ **NOT:** $\neg x = 1 - x$

Boolsche Operationen

- ▶ **AND:** $x \wedge y = x \cdot y$
- ▶ **OR:** $x \vee y = x + y - x \cdot y$
- ▶ **NOT:** $\neg x = 1 - x$
- ▶ **XOR:**



Implementierung in Copasi



- **AND:** $x \wedge y = x \cdot y$
- **OR:** $x \vee y = x + y - x \cdot y$
- **NOT:** $\neg x = 1 - x$

Implementierung in Copasi

- ▶ 33 Spezies
- ▶ 55 Reaktionen

The screenshot shows the Copasi software interface. The left pane displays a list of species and reactions. The right pane shows the details for a specific reaction, 'U1_XOR_AND1_out1'. The reaction is defined as $I_{in1neg} + Y_{input} \rightarrow U1_XOR_AND1_in1neg + Y_{input} + U1_XOR_AND1_out$. The rate law is set to 'Mass Action Kinetics 2 substrates k1=0.1'. The flux is 0 mmol/s. The symbol definition table is as follows:

Role	Name	Mapping	Value	Unit
Substrate	substrate1	U1_XOR_AND1_in1neg		mmol/ml
Substrate	substrate2	Y_input		mmol/ml

Implementierung in Copasi

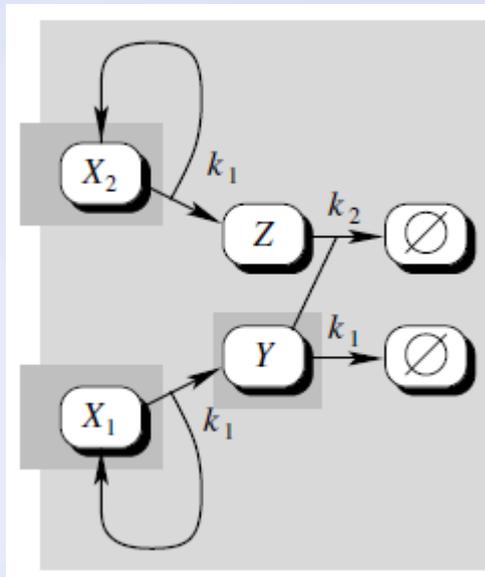
- ▶ 33 Spezies
- ▶ 55 Reaktionen
- ▶ **AND:** 1S, 2R
- ▶ **OR:** 4S, 9R
- ▶ **NOT:** 3S, 4R
- ▶ **XOR:** 12S, 21R

The screenshot shows the Copasi software interface. The left pane displays a list of species and reactions. The right pane shows the details for a specific reaction, 'U1_XOR_AND1_out1'. The reaction is defined as $I_{in1neg} + Y_{input} \rightarrow U1_XOR_AND1_in1neg + Y_{input} + U1_XOR_AND1_out1$. The rate law is set to 'Mass Action Kinetics 2 substrates k1=0.1'. The flux is 0. The symbol definition table is as follows:

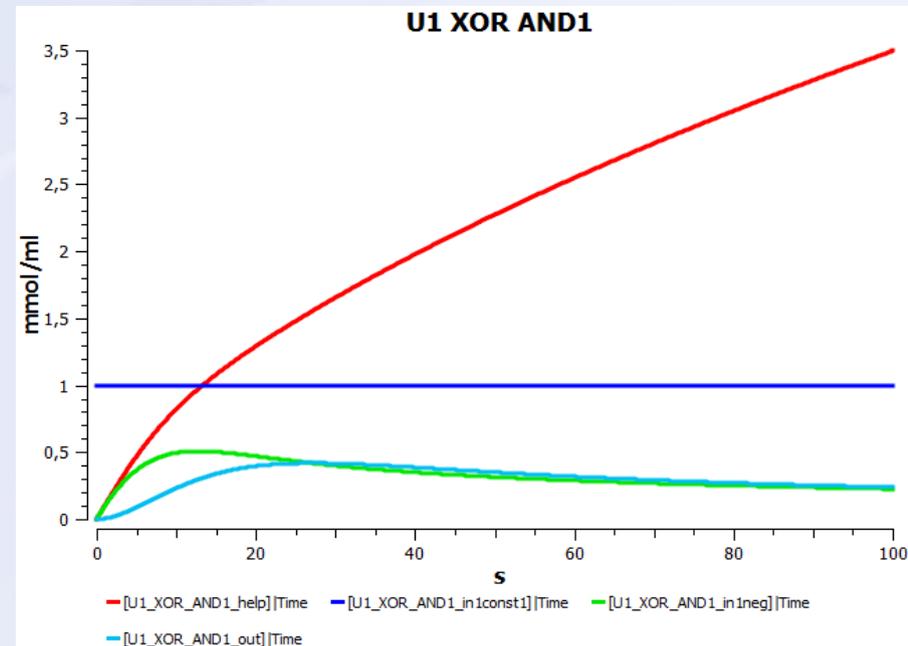
Role	Name	Mapping	Value	Unit
Substrate	substrate1	U1_XOR_AND1_in1neg		mmol/ml
Substrate	substrate2	Y_input		mmol/ml

Werkzeug und Tricks

- ▶ Alle Reak.: Massenwirkungskinetik mit $k = 0.1$
- ▶ **Außer:** Subtraktion 1 – 1 instabil

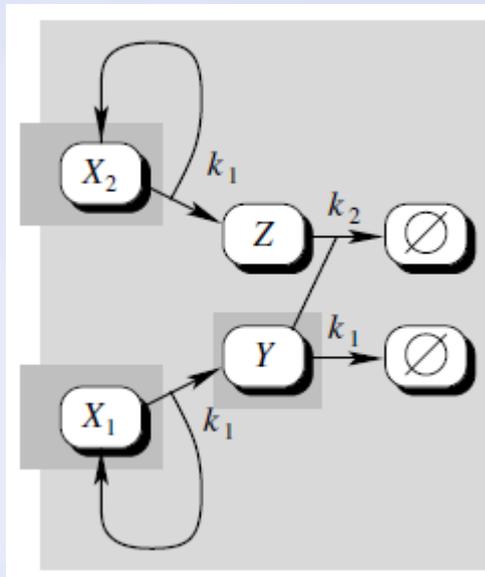


$k_1 = 0.1$
 $k_2 = 0.1$

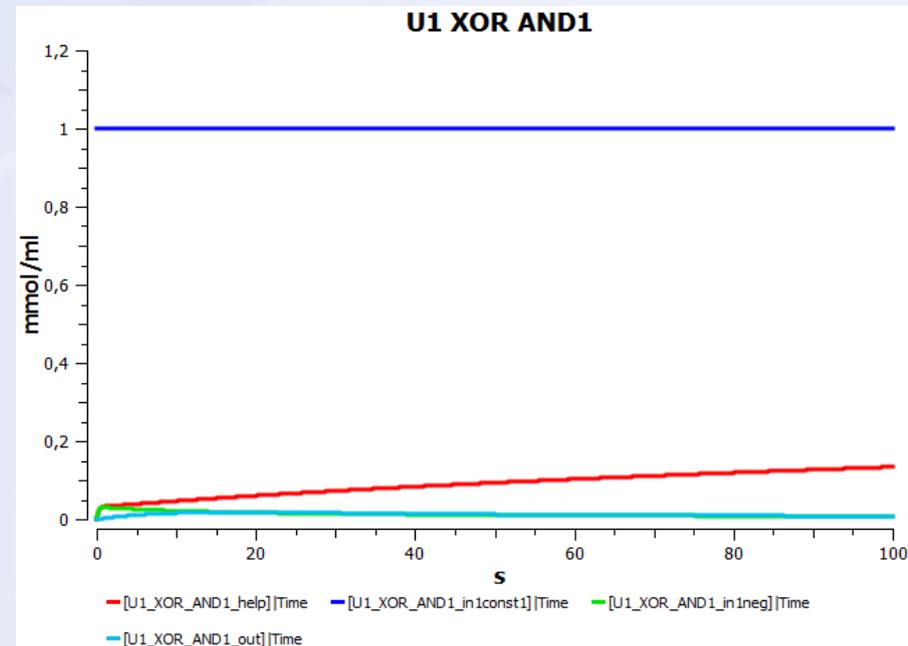


Werkzeug und Tricks

- ▶ **Außer:** Subtraktion 1 – 1 instabil
- ▶ **Trick:** k_2 vergleichsweise sehr groß



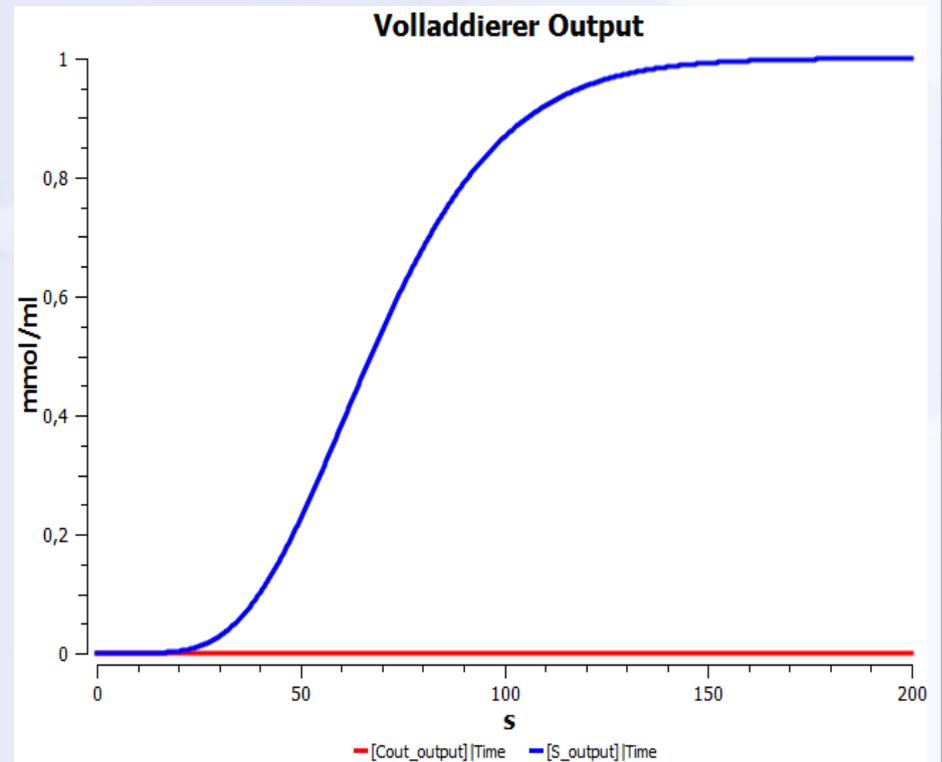
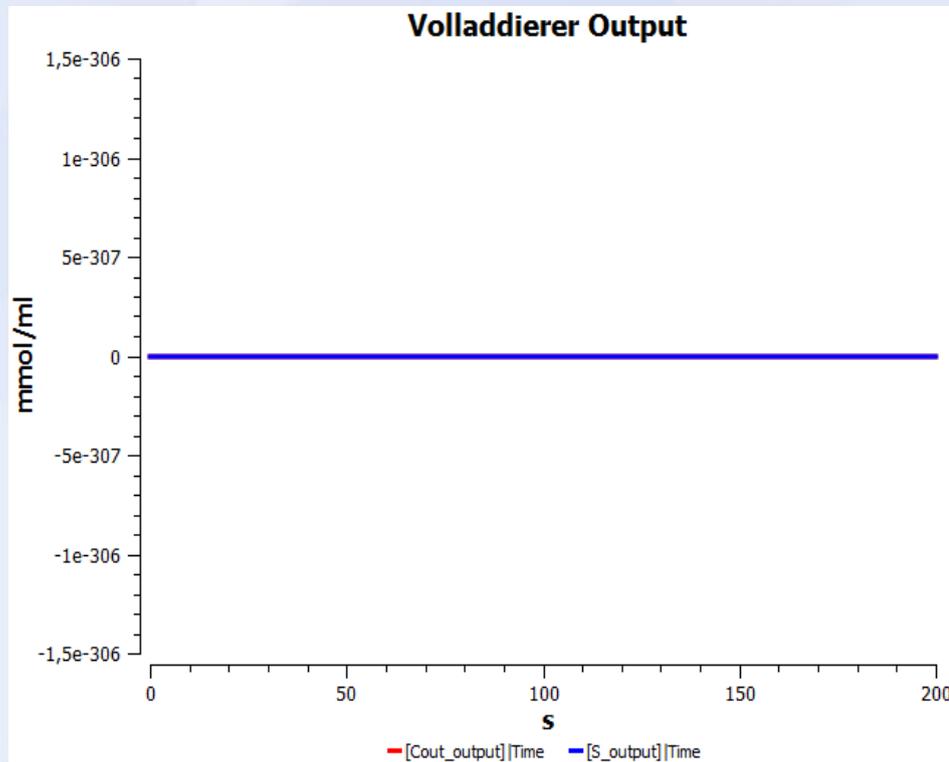
$k_1 = 0.1$
 $k_2 = 100$



Ergebnisse

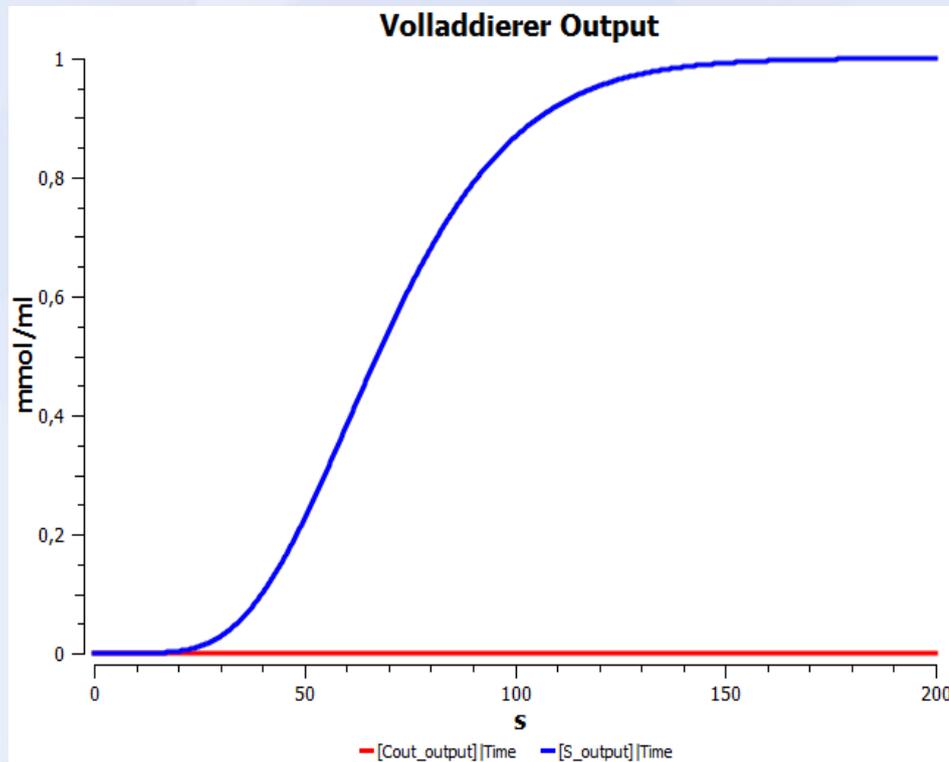
$$(x, y, c_{in}) = (0, 0, 0)$$

$$(1, 0, 0)$$

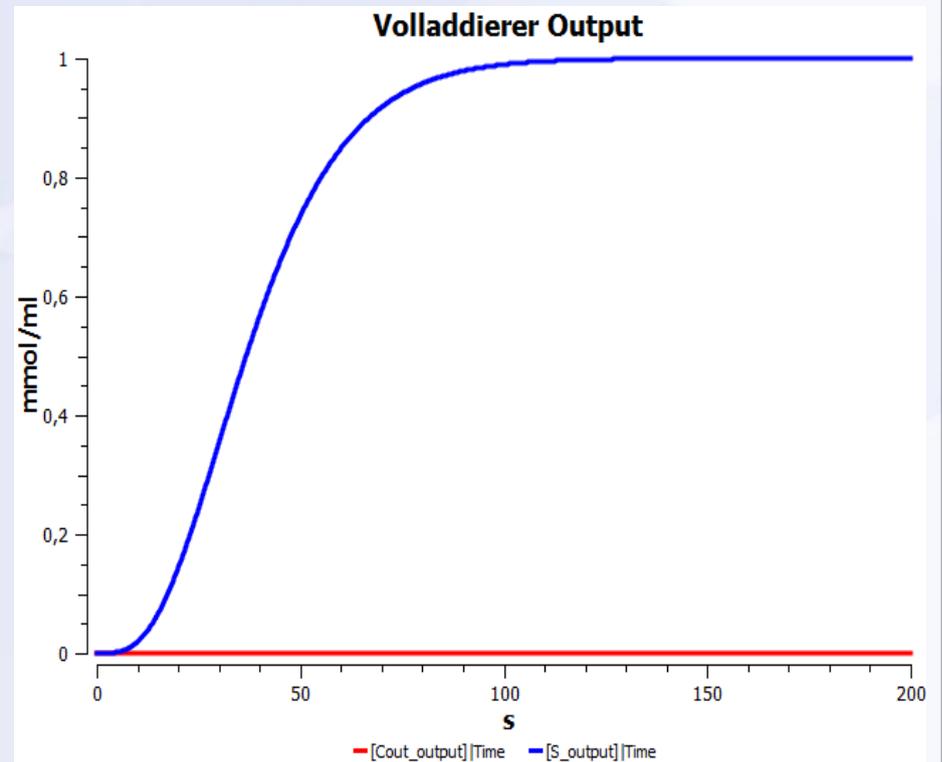


Ergebnisse

(0, 1, 0)

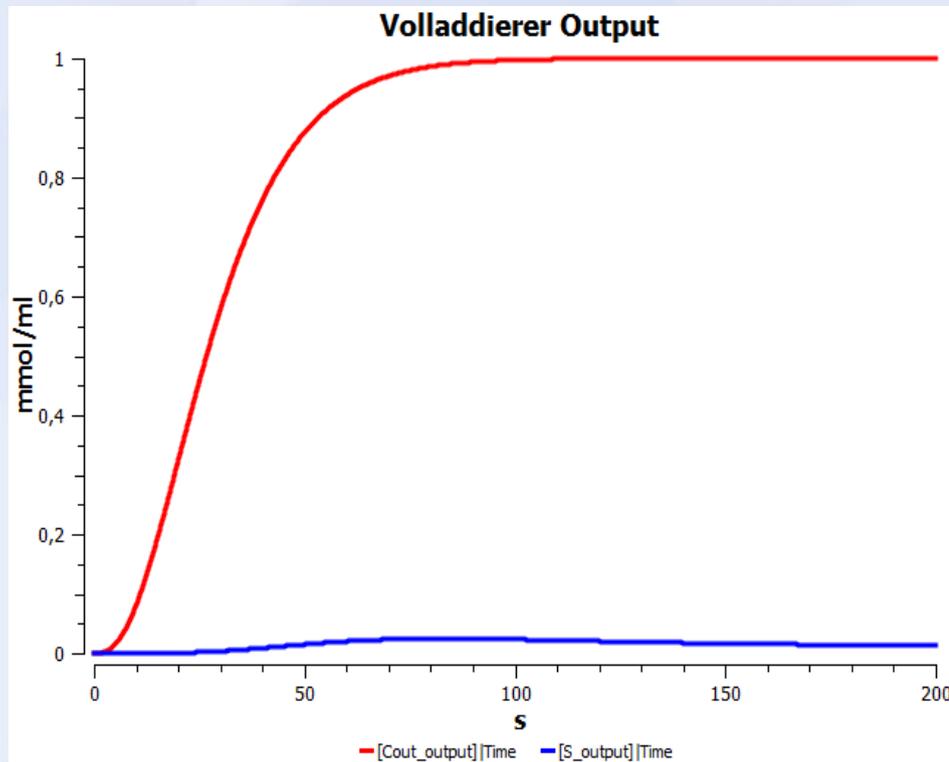


(0, 0, 1)

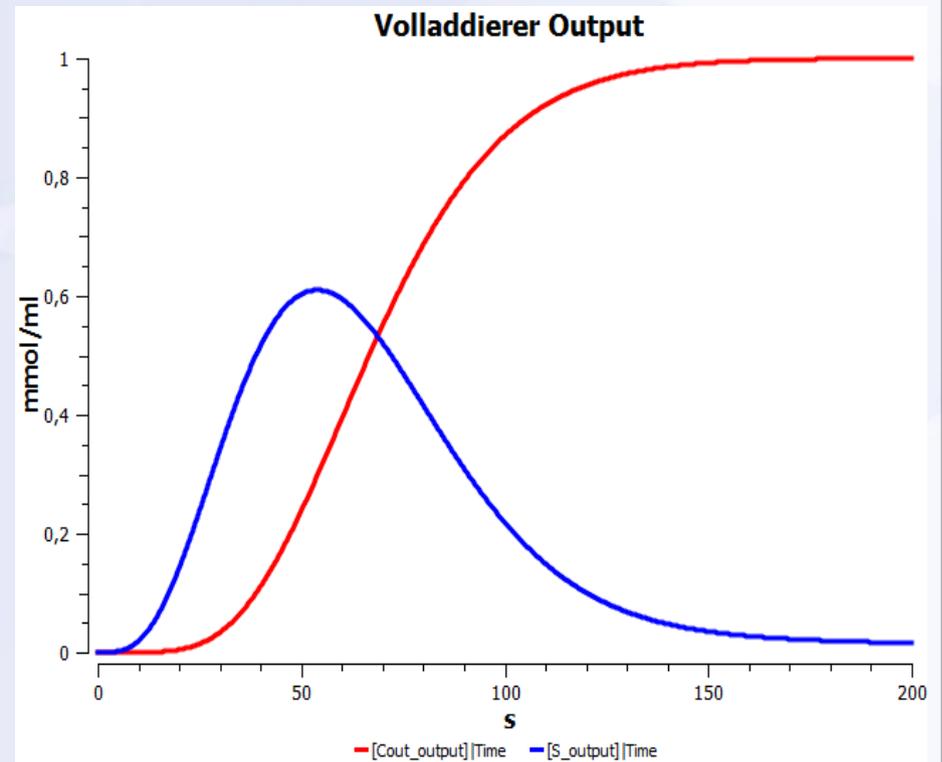


Ergebnisse

(1, 1, 0)

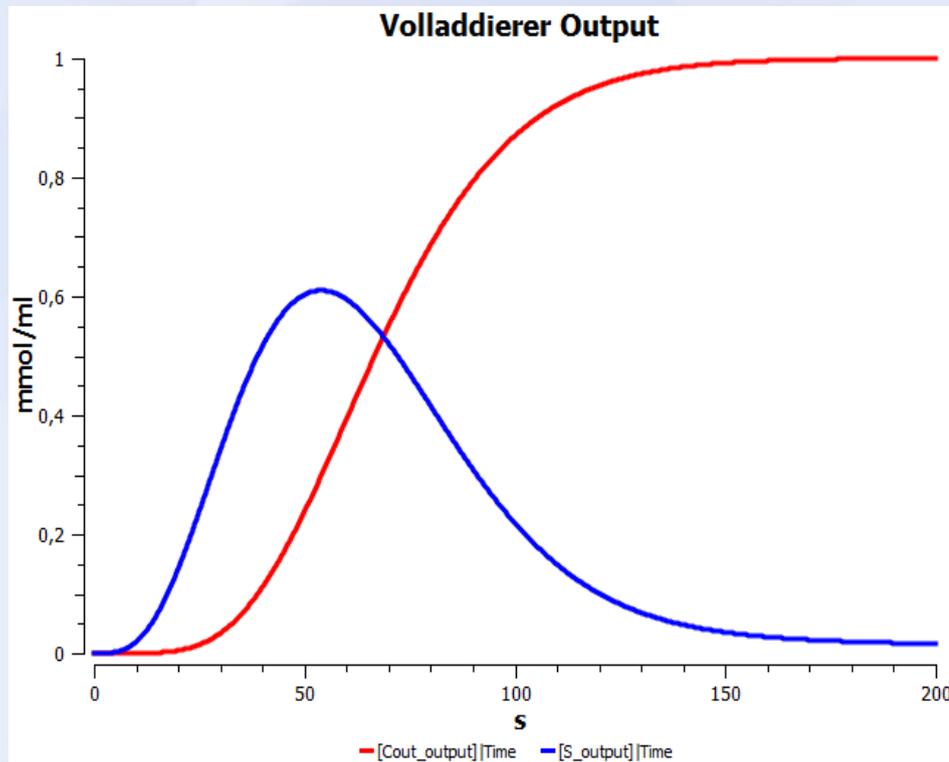


(1, 0, 1)

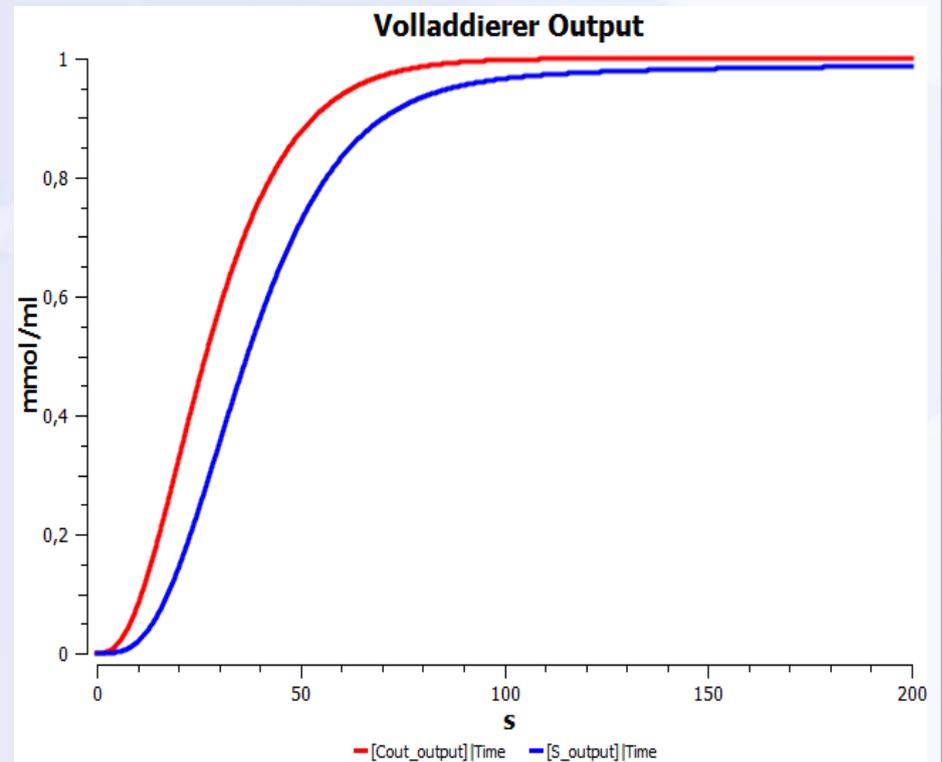


Ergebnisse

(0, 1, 1)



(1, 1, 1)



Fazit

- ▶ Wahrheitstabelle erfüllt!
- ▶ Chemische Implementierung funktioniert.

Fazit

- ▶ Wahrheitstabelle erfüllt!
- ▶ Chemische Implementierung funktioniert.

Aber:

- ▶ Instabilitäten bei Subtraktion
- ▶ Kleiner Baustein, großes Netzwerk:
- ▶ **1 Volladdierer \approx 33 Spezies + 55 Reaktionen**

Fragen?

Danke für die Aufmerksamkeit!