

Thema 8: Chem. Digitalcomputermodell modulo-Operation auf 3-Bit-Operanden

Sebastian Ebert



Übersicht

1. Aufgabenbeschreibung
2. Lösung:
 - a. Erstellen der Schaltbelegungstabelle
 - b. Ermitteln & Vereinfachen der Schaltfunktion (Quine-McCluskey-Algorithmus)
 - c. Aufstellen des Reaktionsnetzwerkes
 - d. Simulation des Netzwerkverhaltens
3. Ergebnisse
 - a. Fallstudie
 - b. 99% Genauigkeit

Aufgabenbeschreibung



Aufgabenbeschreibung

- entwerfen eines chemischen Digitalcomputermodells für die modulo-Operation auf 3-Bit-Operanden
- modulo-Operation $k \bmod n$ berechnet den Divisionsrest von $[k/n]$
- Pathologischen Fällen:
 - $k \bmod 0 = k$,
 - $k \bmod 1 = 0$,
 - $0 \bmod n = 0$
- Beispiel: $7 \bmod 4 = 3$

Lösung



Erstellen der Schaltbelegungstabelle

x2	x1	x0	x BIN	x DEC	y2	y1	y0	y BIN	y DEC	z2	z1	z0	z BIN
0	0	0	000	0	0	0	0	000	0	0	0	0	000
0	0	0	000	0	0	0	1	001	1	0	0	0	000
0	0	0	000	0	0	1	0	010	2	0	0	0	000
0	0	0	000	0	0	1	1	011	3	0	0	0	000
0	0	0	000	0	1	0	0	100	4	0	0	0	000
0	0	0	000	0	1	0	1	101	5	0	0	0	000
0	0	0	000	0	1	1	0	110	6	0	0	0	000
0	0	0	000	0	1	1	1	111	7	0	0	0	000
0	0	1	001	1	0	0	0	000	0	0	0	1	001
0	0	1	001	1	0	0	1	001	1	0	0	0	000
0	0	1	001	1	0	1	0	010	2	0	0	1	001
0	0	1	001	1	0	1	1	011	3	0	0	1	001
0	0	1	001	1	1	0	0	100	4	0	0	1	001
0	0	1	001	1	1	0	1	101	5	0	0	1	001
0	0	1	001	1	1	1	0	110	6	0	0	1	001
0	0	1	001	1	1	1	1	111	7	0	0	1	001
0	1	0	010	2	0	0	0	000	0	0	1	0	010
0	1	0	010	2	0	0	1	001	1	0	0	0	000
0	1	0	010	2	0	1	0	010	2	0	0	0	000
0	1	0	010	2	0	1	1	011	3	0	1	0	010
0	1	0	010	2	1	0	0	100	4	0	1	0	010

...

1	0	1	101	5	0	0	1	001	1	0	0	0	000
1	0	1	101	5	0	1	0	010	2	0	0	1	001
1	0	1	101	5	0	1	1	011	3	0	1	0	010
1	0	1	101	5	1	0	0	100	4	0	0	1	001
1	0	1	101	5	1	0	1	101	5	0	0	0	000
1	0	1	101	5	1	1	0	110	6	1	0	1	101
1	0	1	101	5	1	1	1	111	7	1	0	1	101
1	1	0	110	6	0	0	0	000	0	1	1	0	110
1	1	0	110	6	0	0	1	001	1	0	0	0	000
1	1	0	110	6	0	1	0	010	2	0	0	0	000
1	1	0	110	6	0	1	1	011	3	0	0	0	000
1	1	0	110	6	1	0	0	100	4	0	1	0	010
1	1	0	110	6	1	0	1	101	5	0	0	1	001
1	1	0	110	6	1	1	0	110	6	0	0	0	000
1	1	0	110	6	1	1	1	111	7	1	1	0	110
1	1	1	111	7	0	0	0	000	0	1	1	1	111
1	1	1	111	7	0	0	1	001	1	0	0	0	000
1	1	1	111	7	0	1	0	010	2	0	0	1	001
1	1	1	111	7	0	1	1	011	3	0	0	1	001
1	1	1	111	7	1	0	0	100	4	0	1	1	011
1	1	1	111	7	1	0	1	101	5	0	1	0	010
1	1	1	111	7	1	1	0	110	6	0	0	1	001
1	1	1	111	7	1	1	1	111	7	0	0	0	000



Ermitteln und vereinfachen der booleschen Schaltfunktion

- Quine-McCluskey Optimierung
- aufteilen der Schaltfunktion nach den einzelnen Ausgabe-Bits von z
 - $f = z_2$,
 - $g = z_1$,
 - $h = z_0$
- bilden der disjunktiven Normalform aus den Mintermen
- verschmelzen der Konjunktionsterme




f = z2

Minterme:

(100000, 100101, 100110, 100111,
101000, 101110, 101111, 110000,
110111, 111000)

Schaltfunktion:

$(a \wedge \neg b \wedge \neg c \wedge d \wedge f) \vee$
 $(a \wedge \neg c \wedge d \wedge e \wedge f) \vee$
 $(a \wedge \neg d \wedge \neg e \wedge \neg f) \vee$
 $(a \wedge \neg b \wedge d \wedge e)$




g = z1

Minterme:

(010000, 010011, 010100, 010101,
010110, 010111, 011000, 011100,
011101, 011110, 011111, 101011,
110000, 110100, 110111, 111000,
111100, 111101)

Schaltfunktion:

$(a \wedge \neg b \wedge c \wedge \neg d \wedge e \wedge f) \vee$
 $(\neg a \wedge b \wedge \neg c \wedge e \wedge f) \vee$
 $(b \wedge \neg c \wedge d \wedge e \wedge f) \vee$
 $(b \wedge c \wedge d \wedge \neg e) \vee$
 $(b \wedge \neg e \wedge \neg f) \vee$
 $(\neg a \wedge b \wedge d)$



h = zo

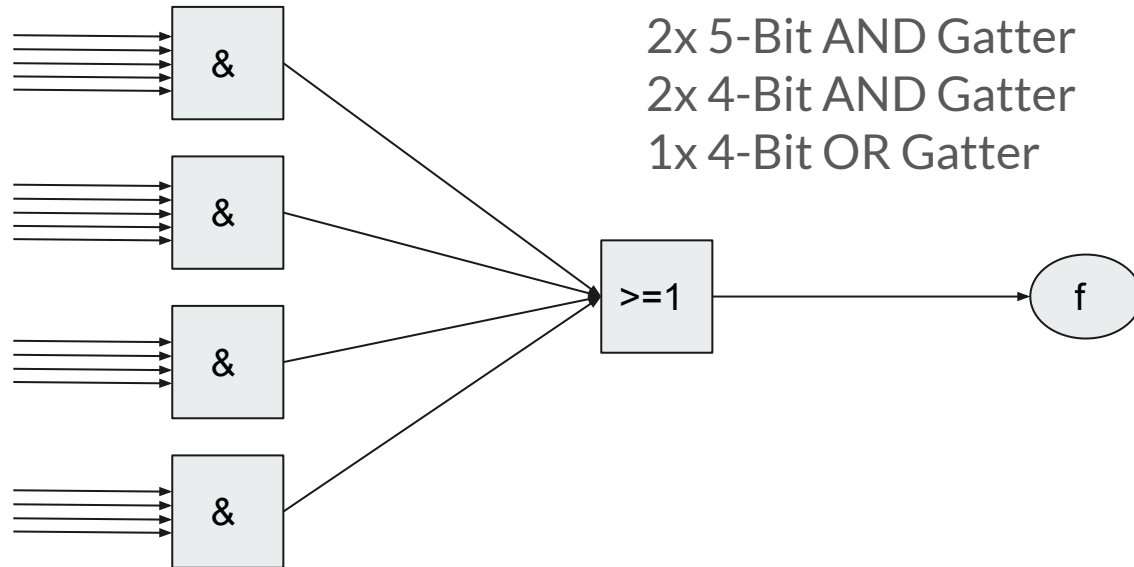
Minterme:

(001000, 001010, 001011, 001100,
001101, 001110, 001111, 011000,
011010, 011100, 011101, 011110,
011111, 100011, 101000, 101010,
101100, 101110, 101111, 110101,
111000, 111010, 111011, 111100,
111110)

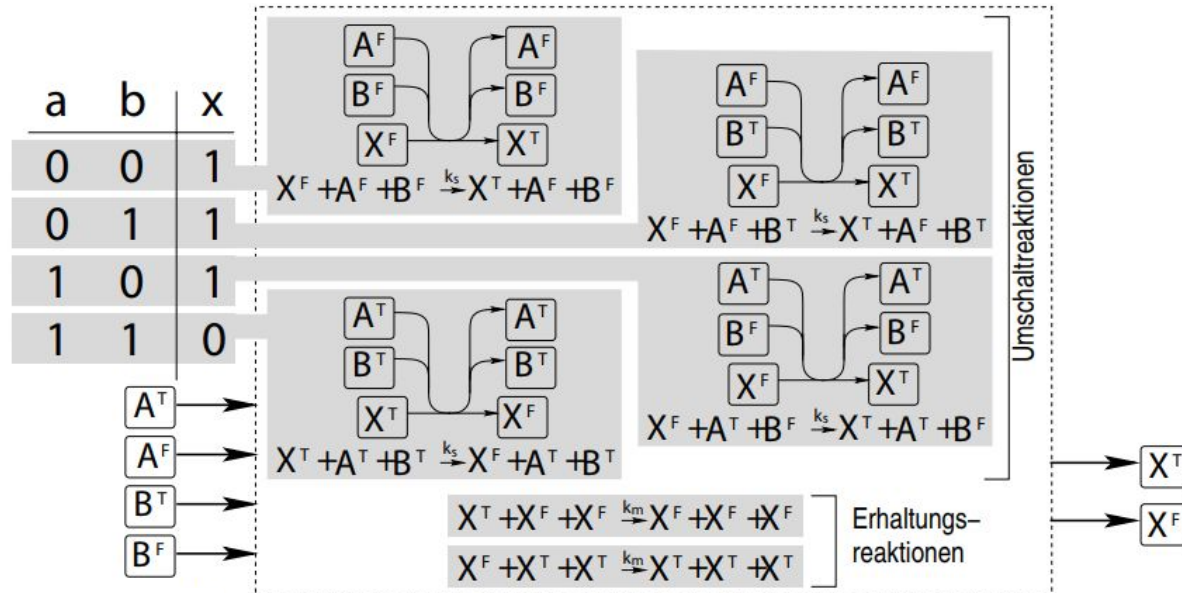
Schaltfunktion:

$(a \wedge \neg b \wedge \neg c \wedge \neg d \wedge e \wedge f) \vee$
 $(a \wedge b \wedge \neg c \wedge d \wedge \neg e \wedge f) \vee$
 $(a \wedge b \wedge c \wedge \neg d \wedge e) \vee$
 $(\neg a \wedge \neg b \wedge c \wedge e) \vee$
 $(\neg b \wedge c \wedge d \wedge e) \vee$
 $(\neg a \wedge c \wedge d \vee c \wedge \neg f)$

Schaltung für $f = z_2$



Rückblick 2-Bit NAND Gatter



Quelle: Thomas Hinze, "Computer der Natur"



4-Bit OR Gatter

$y_T + x_3F + x_2F + x_1F + x_0F \rightarrow y_F + x_3F + x_2F + x_1F + x_0F$
 $y_F + x_3F + x_2F + x_1F + x_0T \rightarrow y_T + x_3F + x_2F + x_1F + x_0T$
 $y_F + x_3F + x_2F + x_1T + x_0F \rightarrow y_T + x_3F + x_2F + x_1T + x_0F$
 $y_F + x_3F + x_2F + x_1T + x_0T \rightarrow y_T + x_3F + x_2F + x_1T + x_0T$

...

$y_F + x_3T + x_2F + x_1T + x_0T \rightarrow y_T + x_3T + x_2F + x_1T + x_0T$
 $y_F + x_3T + x_2T + x_1F + x_0F \rightarrow y_T + x_3T + x_2T + x_1F + x_0F$
 $y_F + x_3T + x_2T + x_1F + x_0T \rightarrow y_T + x_3T + x_2T + x_1F + x_0T$
 $y_F + x_3T + x_2T + x_1T + x_0F \rightarrow y_T + x_3T + x_2T + x_1T + x_0F$
 $y_F + x_3T + x_2T + x_1T + x_0T \rightarrow y_T + x_3T + x_2T + x_1T + x_0T$














Umsetzung Reaktionsnetzwerk - Idee !

- alle Gatter mit Copasi modellieren
- mit Jig Cell Model Connector modulare Modells zusammenfügen
- zusammengefügtes Modell exportieren und wieder in Copasi importieren --> Simulation



Aufgabe: alle Gatter mit Copasi modellieren

-  JigCell
-  and3BitGatter.cps
-  and4BitGatter.cps
-  and5BitGatter.cps
-  and6BitGatter.cps
-  f.cps
-  functionCanvas.cps
-  g.cps
-  h.cps
-  or4BitGatter.cps
-  or6BitGatter.cps

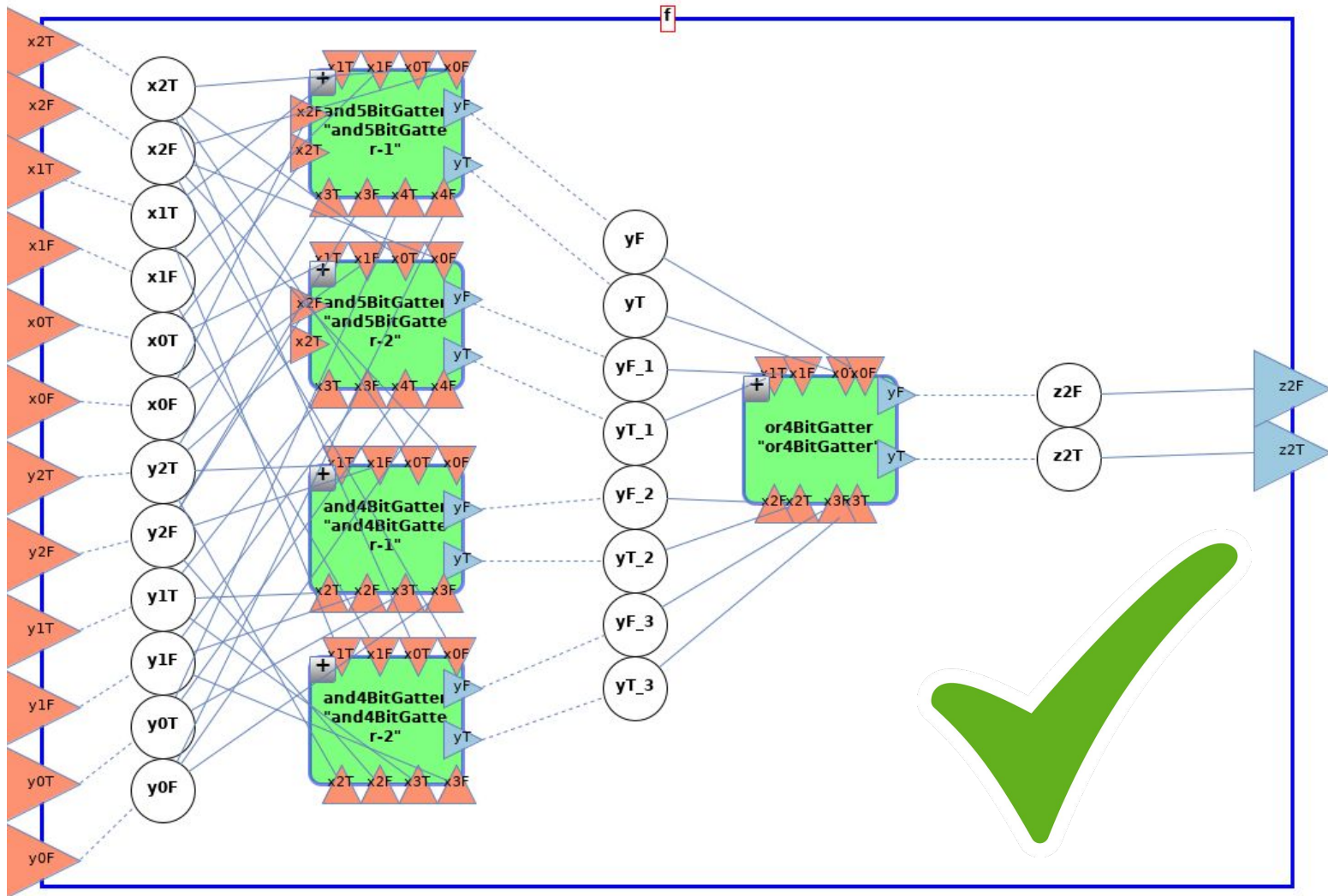




Umsetzung Reaktionsnetzwerk - Umsetzung !

- alle Gatter mit Copasi modellieren
- mit Jig Cell Model Connector modulare Modells zusammenfügen
- zusammengefügtes Modell exportieren und wieder in Copasi importieren --> Simulation



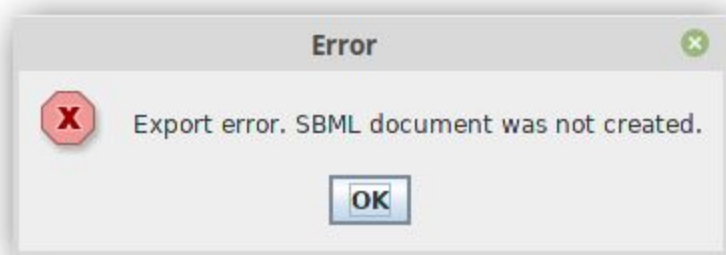




Umsetzung Reaktionsnetzwerk - Umsetzung !

- alle Gatter mit Copasi modellieren
- mit Jig Cell Model Connector modulare Modells zusammenfügen
- zusammengefügtes Modell exportieren und wieder in Copasi importieren --> Simulation





seb@seb-VirtualBox: ~/JCMC

File Edit View Search Terminal Help

```
SBMLParser.exportSBML(): Encountered errors while reading the file.  
Please correct the following errors and try again.  
line 1: (comp-90106 [Warning]) Due to the need to instantiate models, modelDefinitions, submodels etc. for the purposes of validation it is problematic to reliably report line numbers when performing validation on models using the Hierarchical Model Composition package.  
  
line 1: (comp-90104 [Error]) Errors arose during the attempt to flatten the model. The subsequent errors are from this attempt.  
  
line 1: (comp-20607 [Error]) A <submodel> object must have the attributes 'comp:id' and 'comp:modelRef' because they are required, and may also have the optional attributes 'comp:name', 'comp:timeConversionFactor, and/or 'comp:extentConversionFactor'. No other attributes from the Hierarchical Model Composition namespace are permitted on a <submodel> object.  
Reference: L3V1 Comp V1 Section 3.5  
Instantiation error in Submodel::instantiate: A submodel in model 'Module_10' does not have an 'id' attribute.
```

seb@seb-VirtualBox: ~/JCMC

File Edit View Search Terminal Help

SBMLParser.exportSBML(): Encountered errors while reading the file.
Please correct the following errors and try again.

line 1: (comp-90106 [Warning]) Due to the need to instantiate models, modelDefinitions, submodels etc. for the purposes of validation it is problematic to reliably report line numbers when performing validation on models using the Hierarchical Model Composition package.

line 1: (comp-90104 [Error]) Errors arose during the attempt to flatten the model. The subsequent errors are from this attempt.

line 1: (comp-20607 [Error]) A <submodel> object must have the attributes 'comp:id' and 'comp:modelRef' because they are required, and may also have the optional attributes 'comp:name', 'comp:timeConversionFactor, and/or 'comp:extentConversionFactor'. No other attributes from the Hierarchical Model Composition namespace are permitted on a <submodel> object.

Reference: L3V1 Comp V1 Section 3.5

Instantiation error in Submodel::instantiate: A submodel in model 'Module_10' does not have an 'id' attribute.

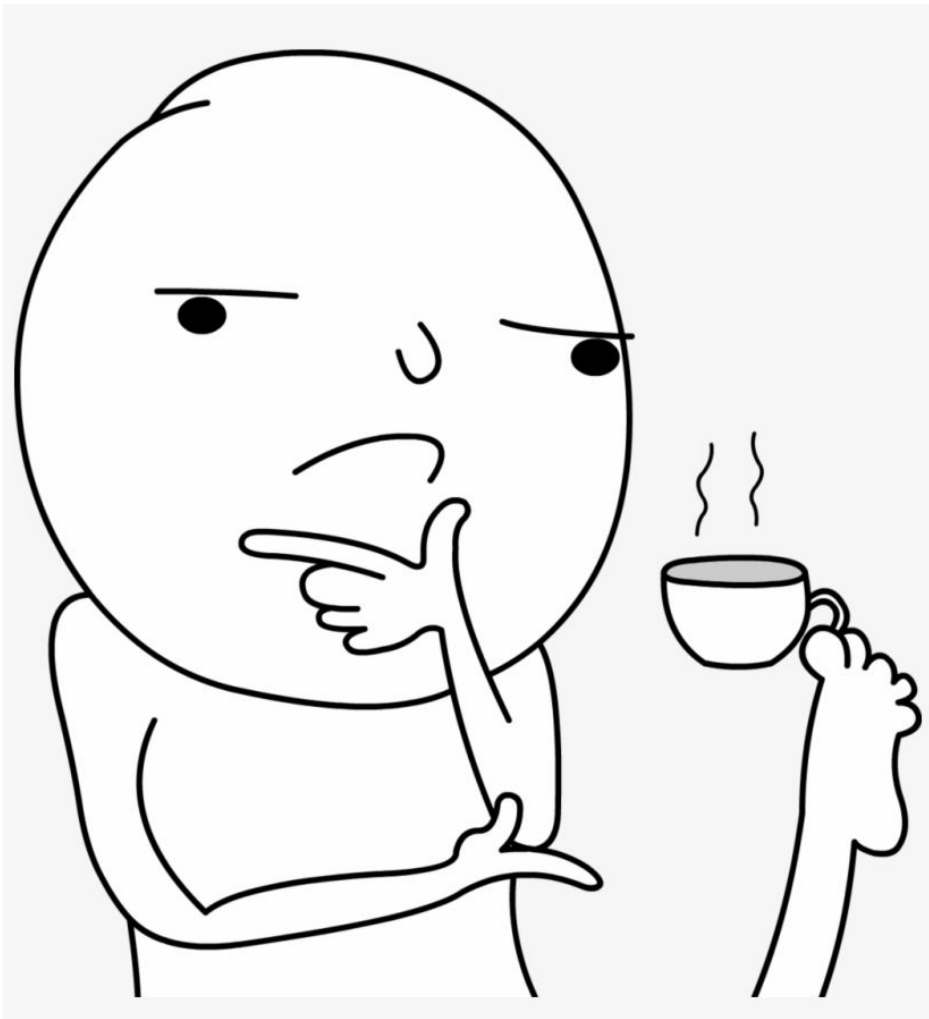


Umsetzung Reaktionsnetzwerk - Umsetzung !

- alle Gatter mit Copasi modellieren
- mit Jig Cell Model Connector modulare Modells zusammenfügen
- zusammengefügtes Modell exportieren und wieder in Copasi importieren
Simulation



-->





Lösungsansatz V2

- Erstellen der Schaltbelegungstabelle
- Ermitteln ~~& Vereinfachen~~ der Schaltfunktion
- Aufstellen des Reaktionsnetzwerkes
 - ~~alle Gatter mit Copasi modellieren~~
 - ~~mit Jig Cell Model Connector modulare Modells zusammenfügen~~
 - ~~zusammengefügtes Modell exportieren und wieder in Copasi importieren~~
- Simulation des Netzwerkverhaltens

Ergebnisse

Fallstudie ($000 \bmod 011 = 000$)

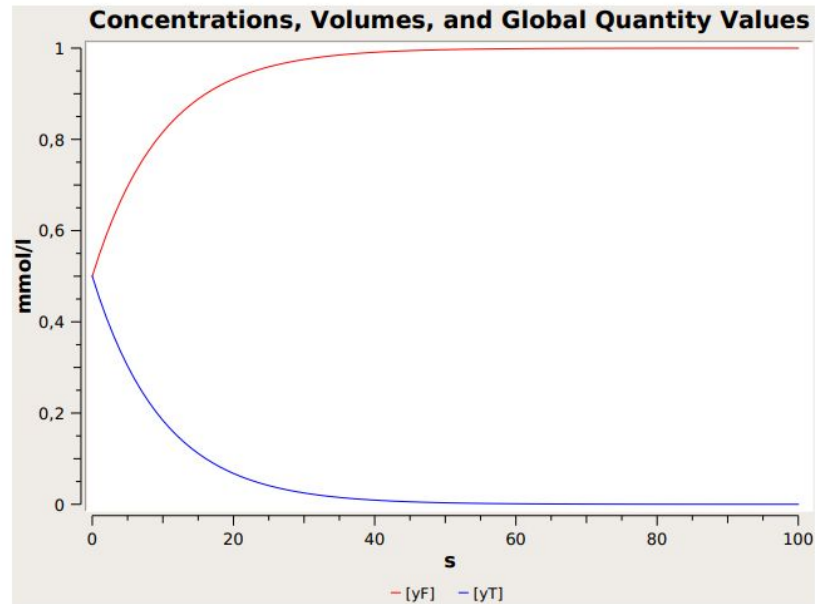
—



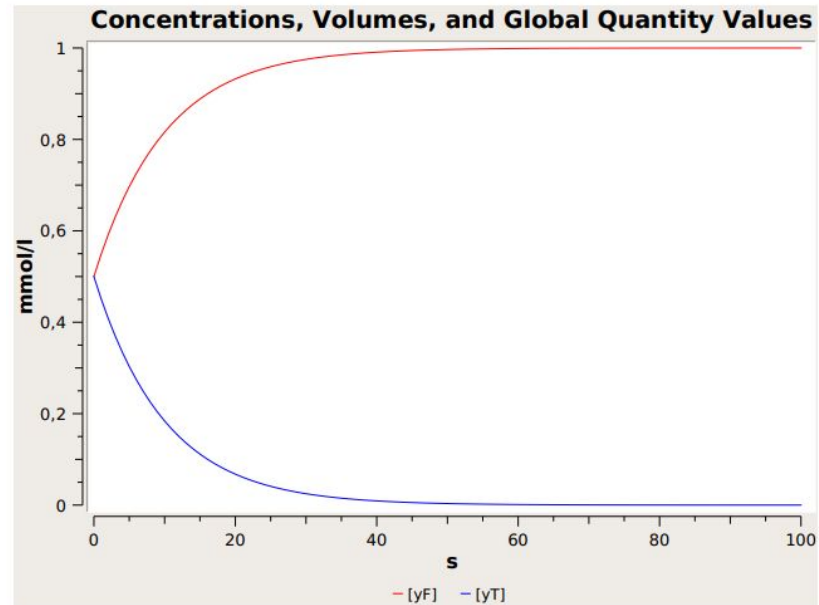
Parameter Setting (000 mod 011 = 000)

# ▾	Name	Compartment	Type	Unit	Initial Concentration [Unit]
1	x0F	compartment	reactions	mmol/l	0
2	x1F	compartment	reactions	mmol/l	0
3	x2F	compartment	reactions	mmol/l	1
4	x3F	compartment	reactions	mmol/l	1
5	x4F	compartment	reactions	mmol/l	1
6	x5F	compartment	reactions	mmol/l	1
7	yF	compartment	reactions	mmol/l	0,5
8	yT	compartment	reactions	mmol/l	0,5
9	x0T	compartment	reactions	mmol/l	1
10	x1T	compartment	reactions	mmol/l	1
11	x2T	compartment	reactions	mmol/l	0
12	x3T	compartment	reactions	mmol/l	0
13	x4T	compartment	reactions	mmol/l	0
14	x5T	compartment	reactions	mmol/l	0

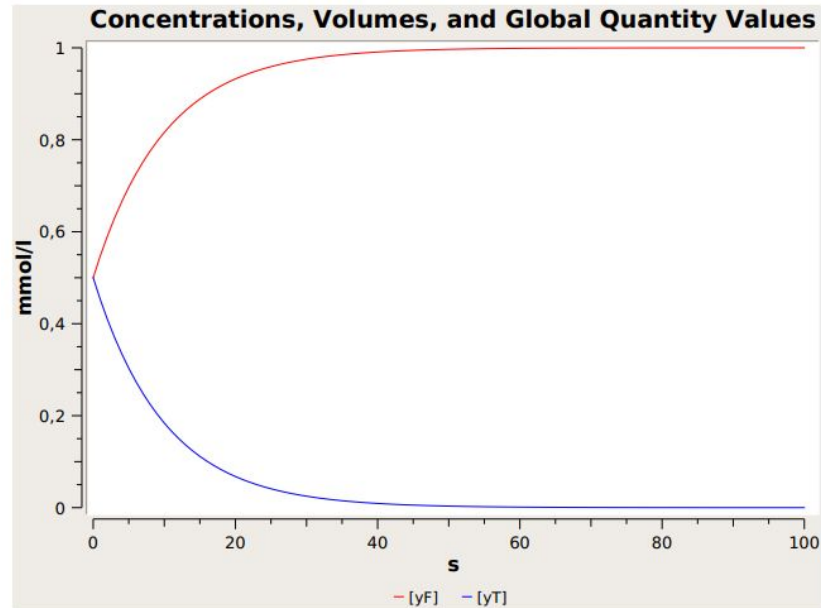
000 mod 011 = 000 ($z_2=0$)



000 mod 011 = 000 ($z_1=0$)



000 mod 011 = 000 ($z_0=0$)



**99%-Genauigkeit
für $000 \bmod 011 = 000$**



Worst case: $f=z_2$

Time	yF	yT
0	0.5	0.5
1	0.5475812947	0.4524187053
...		
36	0.9863381748	0.0136618252
37	0.9876382708	0.01236172917
38	0.9888146457	0.01118535427
39	0.9898790748	0.01012092515
40	0.9908422083	0.009157791662
41	0.9917136889	0.008286311055
42	0.9925022357	0.007497764335
43	0.9932157437	0.006784256314



EOF

—