

Molekulare Algorithmen

Modellierungskonzept eines chemischen Analogcomputers, der auch negative Zahlen verarbeitet

Hendrik Happe

Friedrich-Schiller-Universität-Jena
Fakultät für Biowissenschaften

25. Juni 2018

Problemstellung

Vorzeichen-Betrag-Darstellung

Bi-Konzentrationsdarstellung

Vergleich der Methoden



Problemstellung

- bisher:



Problemstellung

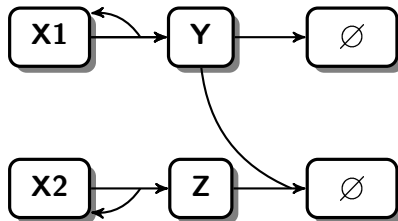
- bisher:
- $+$, $-$, $*$, $/$

Problemstellung

- bisher:
- $+$, \div , $*$, $/$
- $[X1] \div [X2]$

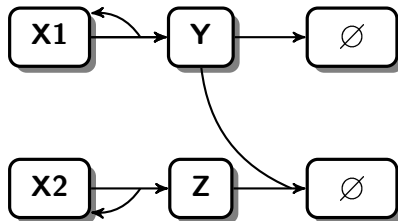
Problemstellung

- bisher:
- $+$, \div , $*$, $/$
- $[X1] \div [X2]$



Problemstellung

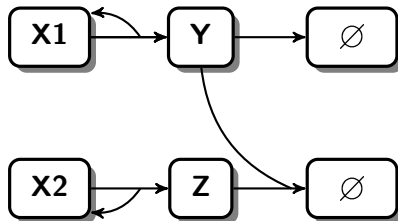
- bisher:
- $+$, \div , $*$, $/$
- $[X1] \div [X2]$



- Dabei muss aber $[X1] \geq [X2]$

Problemstellung

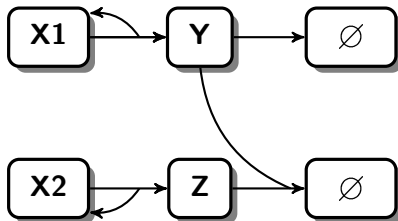
- bisher:
- $+$, \div , $*$, $/$
- $[X1] \div [X2]$



- Dabei muss aber $[X1] \geq [X2]$
- Problem:

Problemstellung

- bisher:
- $+$, \div , $*$, $/$
- $[X1] \div [X2]$



- Dabei muss aber $[X1] \geq [X2]$
- Problem:
 - Berechnung von $[Y] = [X1] - [X2]$, mit $[X1] < [X2]$

Vorzeichen-Betrag-Darstellung

Idee:

Vorzeichen-Betrag-Darstellung

Idee:

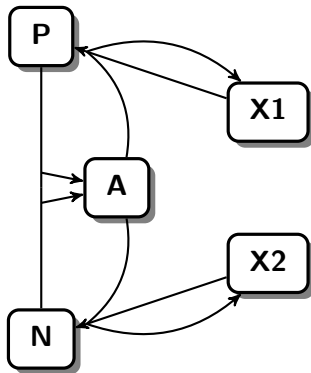
- Zwei Substanzen (P/N) als Vorzeichen

Vorzeichen-Betrag-Darstellung

Idee:

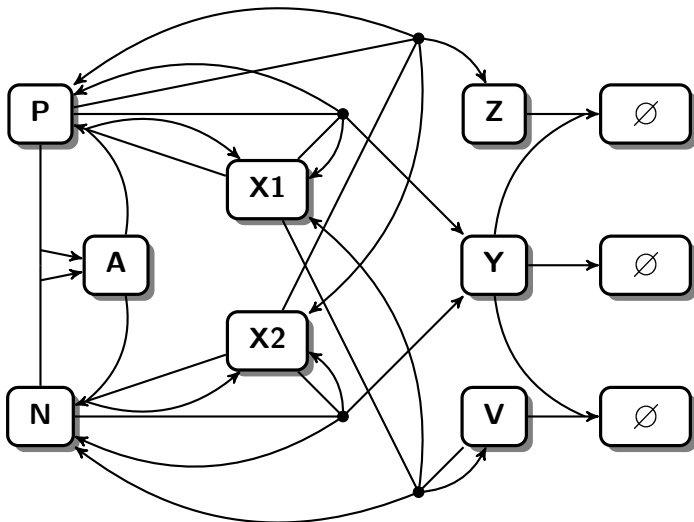
- Zwei Substanzen (P/N) als Vorzeichen
- Weitere Substanz (Y) als Betrag

Vorzeichen-Betrag-Darstellung: Reaktionsnetz



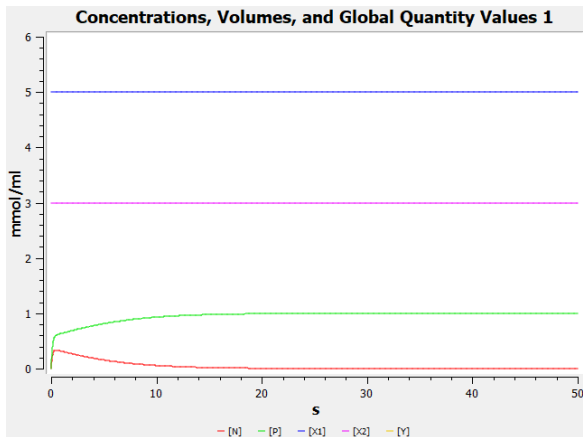
$$[A](0) = 1$$

Vorzeichen-Betrag-Darstellung: Reaktionsnetz



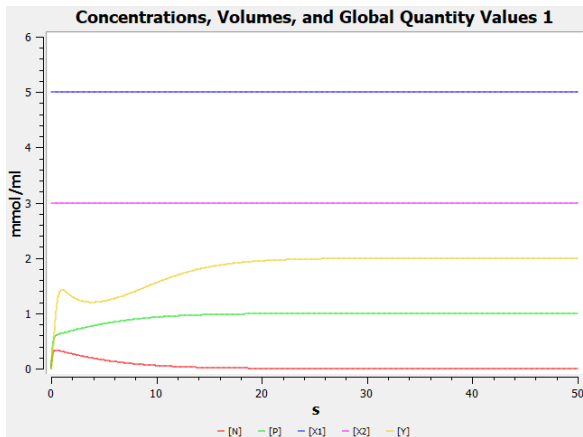
$$[A](0) = 1$$

Vorzeichen-Betrag-Darstellung: Beispiele



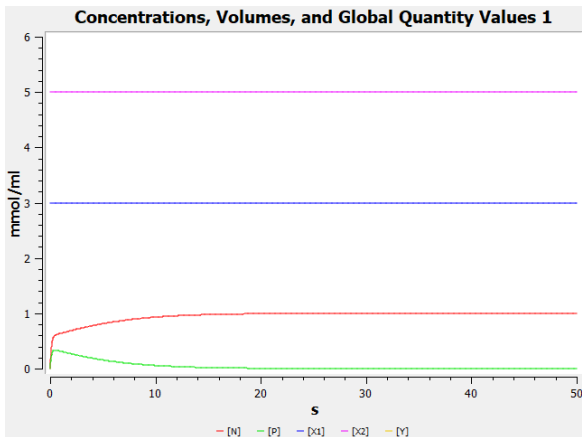
$$[X1] = 5 \quad [X2] = 3$$

Vorzeichen-Betrag-Darstellung: Beispiele



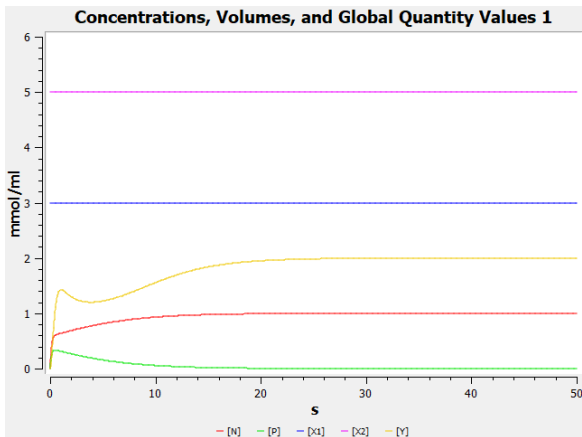
$$[X1] = 5 \quad [X2] = 3$$

Vorzeichen-Betrag-Darstellung: Beispiele



$$[X1] = 3 \quad [X2] = 5$$

Vorzeichen-Betrag-Darstellung: Beispiele



$$[X1] = 3 \quad [X2] = 5$$

Vorzeichen-Betrag-Darstellung: Addition

Eingabe : $X_1 = ([X1], [X1P], [X1N]),$

$X_2 = ([X2], [X2P], [X2N])$

Ausgabe: $Y = ([Y], [YP], [YN]) = X_1 + X_2$

if $[X1P]$ *AND* $[X2P]$ **then**

| $[Y] = [X1] + [X2], [YP] = 1, [YN] = 0$

end

if $[X1N]$ *AND* $[X2N]$ **then**

| $[Y] = [X1] + [X2], [YP] = 0, [YN] = 1$

end

if $[X1P]$ *AND* $[X2N]$ **then**

| $[Y], [YP], [YN] = [X1] - [X2]$

end

if $[X1N]$ *AND* $[X2P]$ **then**

| $[Y], [YN], [YP] = [X2] - [X1]$

end

return $[Y], [YP], [YN]$

Vorzeichen-Betrag-Darstellung: Subtraktion

Eingabe : $X_1 = ([X1], [X1P], [X1M]),$

$X_2 = ([X2], [X2P], [X2M])$

Ausgabe: $Y = ([Y], [YP], [YN]) = X_1 - X_2$

if $[X1P]$ **AND** $[X2P]$ **then**

| $[Y], [YP], [YN] = [X1] - [X2]$

end

if $[X1N]$ **AND** $[X2N]$ **then**

| $[Y], [YN], [YP] = [X2] - [X1]$

end

if $[X1P]$ **AND** $[X2N]$ **then**

| $[Y] = [X1] + [X2], [YP] = 1, [YN] = 0$

end

if $[X1N]$ **AND** $[X2P]$ **then**

| $[Y] = [X1] + [X2], [YP] = 0, [YN] = 1$

end

return $[Y], [YP], [YN]$

Vorzeichen-Betrag-Darstellung: Multiplikation

Eingabe : $X_1 = ([X1], [X1P], [X1N]),$

$X_2 = ([X2], [X2P], [X2N])$

Ausgabe: $Y = ([Y], [YP], [YN]) = X_1 * X_2$

$[Y] = [X1] * [X2]$

$[YP] = [X1P] * [X2P] + [X1N] * [X2N]$

$[YN] = [X1P] * [X2N] + [X1N] * [X2P]$

return $[Y], [YP], [YN]$

Vorzeichen-Betrag-Darstellung: Division

Eingabe : $X_1 = ([X1], [X1P], [X1N]),$

$X_2 = ([X2], [X2P], [X2N])$

Ausgabe: $Y = ([Y], [YP], [YN]) = X_1/X_2$

$[Y] = [X1]/[X2]$

$[YP] = [X1P] * [X2P] + [X1N] * [X2N]$

$[YN] = [X1P] * [X2N] + [X1N] * [X2P]$

return $[Y], [YP], [YN]$

Bi-Konzentrationsdarstellung

Idee:

Bi-Konzentrationsdarstellung

Idee:

- Eine Substanz (YP) als positiver Teil

Bi-Konzentrationsdarstellung

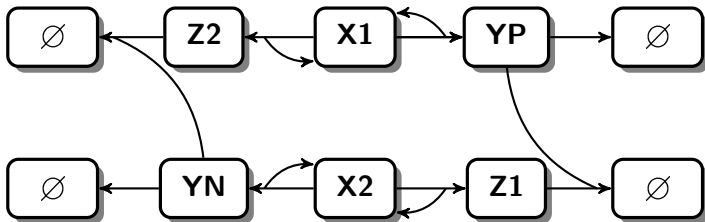
Idee:

- Eine Substanz (YP) als positiver Teil
- Eine Substanz (YN) als negativen Teil

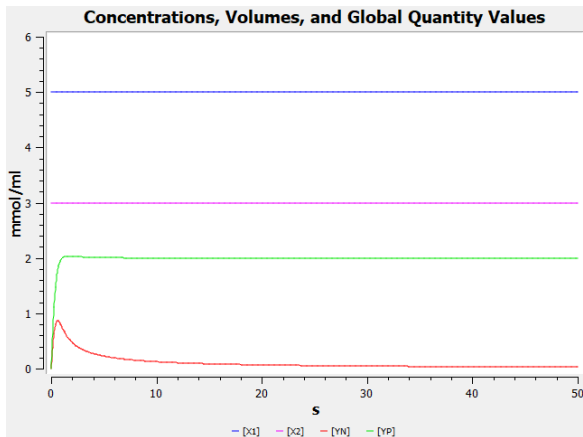
Bi-Konzentrationsdarstellung

Idee:

- Eine Substanz (YP) als positiver Teil
- Eine Substanz (YN) als negativen Teil

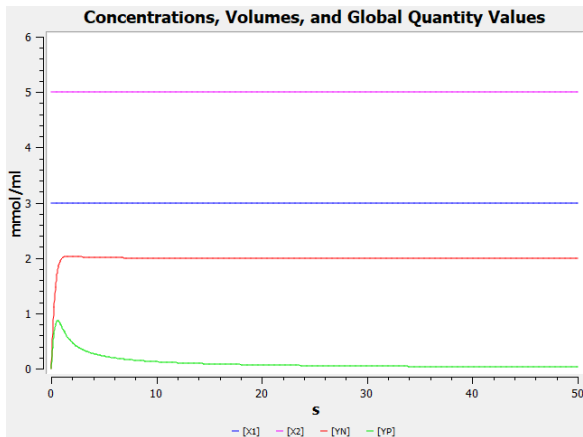


Bi-Konzentrationsdarstellung: Beispiele



$$[X1] = 5 \quad [X2] = 3$$

Bi-Konzentrationsdarstellung: Beispiele



$$[X1] = 3 \quad [X2] = 5$$

Bi-Konzentrationsdarstellung: Addition

Eingabe : $X_1 = ([X1P], [X1N]),$

$X_2 = ([X2P], [X2N])$

Ausgabe: $Y = ([YP], [YN]) = X_1 + X_2$

$[YP], [YN] = ([X1P] + [X2P]) - ([X1N] + [X2N])$

return $[YP], [YN]$

Bi-Konzentrationsdarstellung: Subtraktion

Eingabe : $X_1 = ([X1P], [X1N]),$
 $X_2 = ([X2P], [X2N])$

Ausgabe: $Y = ([YP], [YN]) = X_1 - X_2$

$[YP], [YN] = ([X1P] + [X2N]) - ([X1N] + [X2P])$
return $[YP], [YN]$

Bi-Konzentrationsdarstellung: Multiplikation

Eingabe : $X_1 = ([X1P], [X1N]),$
 $X_2 = ([X2P], [X2N])$

Ausgabe: $Y = ([YP], [YN]) = X_1 * X_2$

$[YP] = [X1P] * [X2P] + [X1N] * [X2N]$

$[YN] = [X1P] * [X2N] + [X1N] * [X2P]$

return $[YP], [YN]$

Bi-Konzentrationsdarstellung: Division

Eingabe : $X_1 = ([X1P], [X1M]),$

$X_2 = ([X2P], [X2M])$

Ausgabe: $Y = ([YP], [YN]) = X_1/X_2$

$[Z] = ([X1P] + [X1M])/([X2P] + [X2M])$

if $([X1P] * [X2P] + [X1M] * [X2M]) > 0$ **then**

| $[YP] = [Z]$

else

| $[YN] = [Z]$

end

return $[YP], [YN]$

Vergleich der Methoden

Kriterium

Vorzeichen-Betrag

Bi-Konzentrationen

Vergleich der Methoden

Kriterium	Vorzeichen-Betrag	Bi-Konzentrationen
Geschwindigkeit	Abhängig von Konzentration, Verhältnis	2-3 mal Schneller

Vergleich der Methoden

Kriterium	Vorzeichen-Betrag	Bi-Konzentrationen
Geschwindigkeit	Abhängig von Konzentration, Verhältnis	2-3 mal Schneller
Ergebnis fast 0	Sehr langsam	Sehr langsam

Vergleich der Methoden

Kriterium	Vorzeichen-Betrag	Bi-Konzentrationen
Geschwindigkeit	Abhängig von Konzentration, Verhältnis	2-3 mal Schneller
Ergebnis fast 0	Sehr langsam	Sehr langsam
Ergebnis von 0	Sehr Schlecht (Vorzeichen als Indikator)	Sehr Schlecht ($[VP] == [VN]$ als Indikator)

Vergleich der Methoden

Kriterium	Vorzeichen-Betrag	Bi-Konzentrationen
Geschwindigkeit	Abhängig von Konzentration, Verhältnis	2-3 mal Schneller
Ergebnis fast 0	Sehr langsam	Sehr langsam
Ergebnis von 0	Sehr Schlecht (Vorzeichen als Indikator)	Sehr Schlecht ($[VP] == [VN]$ als Indikator)
Rechenoperationen	Addition und Subtraktion, komplex, Multiplikation und Division simpel	Addition, Subtraktion und Multiplikation simple, Division komplex