

Thema 12: Modell eines chemischen Digital-Analog-Wandlers

1 Einleitung

Digital-Analog-Wandler (DAW) bilden eine zentrale Schnittstelle zwischen digitalen Computersystemen und der analogen Umwelt. Während digitale Systeme Informationen in Form diskreter Binärwerte verarbeiten, beruhen viele physikalische, biologische und chemische Prozesse auf kontinuierlichen Größen. Um digitale Informationen für solche Systeme nutzbar zu machen, müssen sie daher in analoge Signale überführt werden. [1]

Ein klassischer Digital-Analog-Wandler ordnet einer binären Eingabe einen entsprechenden kontinuierlichen Ausgangswert zu und findet Anwendung in zahlreichen Bereichen der Signalverarbeitung, Mess- und Regelungstechnik sowie in eingebetteten Systemen. Das zugrunde liegende Prinzip lässt sich jedoch nicht nur elektronisch, sondern auch mithilfe chemischer Reaktionsnetzwerke realisieren.

Im Rahmen molekularer Algorithmen werden chemische Reaktionen als informationstragende Prozesse betrachtet. Dabei übernehmen Stoffkonzentrationen die Rolle analoger Signale, während geeignete chemische Mechanismen digitale Zustände und logische Operationen nachbilden können. Dadurch wird es möglich, klassische Rechenmodelle in chemischen Systemen zu implementieren und ihr dynamisches Verhalten zu untersuchen [2]. Ziel dieser Projektarbeit ist die Entwicklung eines chemischen Digitalcomputermodells eines 4-Bit-Digital-Analog-Wandlers. Das Modell soll vier binäre Eingangssignale in eine analoge Stoffkonzentration zwischen 0 und 15 umwandeln. Zusätzlich soll berücksichtigt werden, dass sich die Ausgangskonzentration aufgrund der chemischen Reaktionskinetik zeitlich aufbaut und erst nach Erreichen von mindestens 99 % des Zielwertes durch ein `valid`-Signal als gültig gekennzeichnet wird. Abschließend wird das Modell in COPASI implementiert und anhand mehrerer Simulationsstudien untersucht.

2 Grundlagen

2.1 Digitale und analoge Signale

Informationen können grundsätzlich in Form analoger oder digitaler Signale dargestellt werden. Analoge Signale besitzen einen kontinuierlichen Wertebereich und können sich zeitlich kontinuierlich verändern. Beispiele hierfür sind Temperatur, Druck, elektrische Spannung oder chemische Stoffkonzentrationen. [2]

Digitale Signale hingegen bestehen aus einer endlichen Anzahl diskreter Zustände. In Computersystemen werden Informationen üblicherweise binär codiert, wobei die beiden Zustände 0 und 1 durch unterschiedliche Spannungsbereiche repräsentiert werden. Digitale Systeme zeichnen sich durch ihre Robustheit gegenüber Störungen aus, da kleine Signaländerungen den logischen Zustand nicht unmittelbar verändern. [2]

Da viele natürliche Prozesse kontinuierlich verlaufen, während Computer überwiegend digitale Informationen verarbeiten, werden Verfahren benötigt, welche beide Darstellungsformen miteinander verbinden. Hierzu dienen Analog-Digital-Wandler (ADW) sowie Digital-Analog-Wandler (DAW). [3]

2.2 Digital-Analog-Wandler

Ein Digital-Analog-Wandler (DAW) wandelt einen digitalen Eingabewert in ein entsprechendes analoges Ausgangssignal um. Jeder Binärkombination wird dabei ein eindeutiger analoger Wert zugeordnet. Solche Wandler werden unter anderem in Audio-Systemen, Messgeräten, Sensoren und eingebetteten Systemen eingesetzt. Ein einfaches Beispiel zur Unterscheidung beider Arten ist das Hören von Musik von einer CD. Dabei entstehen Veränderungen im Luftdruck, verursacht durch die Schwingung der Lautsprechermembran. Dieses Signal ist analog, da die Druckänderung eine kontinuierliche Zeitfunktion darstellt. Die Information, die auf der CD gespeichert ist, liegt jedoch in digitaler Form vor. Um Musik hörbar zu machen, wird diese in eine analoge Form umgewandelt. [3]

Im Rahmen dieser Projektarbeit besitzt der DAW vier binäre Eingänge (x_3, x_2, x_1, x_0). Jedes Bit besitzt eine unterschiedliche Wertigkeit. Dadurch können insgesamt 16 verschiedene Werte zwischen 0 und 15 dargestellt werden. Im Gegensatz zu einem elektronischen DAW wird dieser Zusammenhang im weiteren Verlauf nicht durch elektrische Schaltungen, sondern durch chemische Reaktionsnetzwerke realisiert.

2.3 Chemische Digitalcomputermodelle

Chemische Digitalcomputermodelle verfolgen das Ziel, klassische Berechnungen mithilfe chemischer Reaktionen nachzubilden. Dabei übernehmen chemische Spezies die Rolle von Informationsträgern, während chemische Reaktionen logische Operationen und Zustandsänderungen realisieren [2].

In biologischen Zellen erfolgt Informationsverarbeitung häufig über Konzentrationen von Proteinen oder anderen Botenstoffen [2]. Obwohl diese Konzentrationen kontinuierlich sind, können sie durch geeignete Schwellenwerte digitale Zustände repräsentieren. Dieses Prinzip bildet die Grundlage chemischer Digitalcomputermodelle.

Chemische Digitalcomputermodelle können sowohl digitale als auch analoge Aspekte der Informationsverarbeitung miteinander verbinden. Die binären Eingangssignale bestimmen zunächst digital den Sollwert der Ausgangskonzentration. Anschließend beschreibt ein kontinuierliches chemisches Modell den zeitlichen Aufbau dieser Konzentration.

2.4 Chemische Spezies und Reaktionen

Chemische Spezies bezeichnen die einzelnen Bestandteile eines Reaktionsnetzwerks, beispielsweise Moleküle, Ionen oder Proteine [2]. Jede Spezies besitzt eine Konzentration, die sich infolge chemischer Reaktionen zeitlich verändert.

Chemische Reaktionen beschreiben die Umwandlung von Edukten in Produkte. Die Geschwindigkeit dieser Umwandlung hängt unter anderem von den Konzentrationen der beteiligten Spezies sowie von den jeweiligen Reaktionsparametern ab. Durch die gezielte Kombination mehrerer Reaktionen können komplexe Netzwerke aufgebaut werden, welche logische Funktionen oder vollständige Rechenmodelle nachbilden.

2.5 Simulation mit COPASI

Die Implementierung und Simulation des chemischen Modells erfolgt mithilfe der Software COPASI (Complex Pathway Simulator). COPASI ermöglicht die Modellierung biochemischer Reaktionsnetzwerke auf Grundlage gewöhnlicher Differentialgleichungen sowie verschiedener kinetischer Modelle [4].

Neben der Definition chemischer Spezies und Reaktionen bietet COPASI umfangreiche Möglichkeiten zur Simulation zeitlicher Konzentrationsverläufe, zur Analyse dynamischer Systeme sowie zur Durchführung von Parameter- und Sensitivitätsstudien [4]. Im Rahmen dieser Arbeit wird COPASI verwendet, um das Verhalten des entwickelten chemischen Digital-Analog-Wandlers zu simulieren und anhand verschiedener Eingangskombinationen zu analysieren.

3 Entwurf eines chemischen Digital-Analog-Wandlers

Es soll ein konkretes Modell für einen chemischen Digital-Analog-Wandler erstellt und simuliert werden. Dieser soll eine 4-Bit binärkodierte natürliche Zahl als Signaleingang erhalten und anhand dessen eine analoge Stoffkonzentration zwischen 0 und 15 berechnen und ausgeben.

Das Wachstum der Stoffkonzentration entspricht hierbei einer Sättigungskurve, die zu Beginn eine hohe Steigung hat und zum Ende hin sich asymptotisch ihrem Zielwert nähert. Beim Konzentrationsaufbau verstreicht eine sogenannte Latenzzeit, bei welcher mittels eines `valid`-Signals überprüft werden soll ob 99% der Zielkonzentration erreicht wurde.

3.1 Formalia des Modells

Eingänge:

- 4 binäre Eingänge (x_0, x_1, x_2, x_3)
- entspricht den Zahlen 0-15 im Dezimalsystem

Ausgang:

- die Konzentration des Stoffes y soll am Ende dem Dezimalwertes der Binärzahl entsprechen

Mathematische Grundlage

Ein 4-bit Binärwert $x_3x_2x_1x_0$ repräsentiert eine natürliche Zahl V :

$$V = 8 \cdot x_3 + 4 \cdot x_2 + 4 \cdot x_1 + 1 \cdot x_0$$

Da die Eingänge x_i als Stoffkonzentrationen von entweder 0 oder 1 vorliegen, muss das System so entworfen werden, dass die Endkonzentration des Ausgangsstoffes genau dieser Summe entspricht.

3.2 Das chemisches Reaktionsmodell

Reaktion zur Erzeugung von y

Eingangs-Spezies x_i wirken als Katalysatoren für die Erzeugung von y entsprechend der Wertigkeit des jeweiligen Bit.



Erreichen eines *steady state*

Damit das System ein Gleichgewicht erreicht und nicht unendlich viel Produkt aufbaut, ist ein linearer Abbau des Produktes y notwendig, welches über folgende Gleichung formalisiert wird.



Mathematische Modellierung des dynamischen Systems

Um zu Beweisen, dass eine Modellierung nach den oben vorgestellten Kriterien realisierbar ist, muss zunächst bewiesen werden, dass die Konzentration von y exakt dem binären

Wert der Eingänge entspricht. Zunächst wird die zeitliche Änderung der Ausgangskonzentration mittels einer Bilanzgleichung betrachtet. Die Produktion erfolgt gewichtet durch die Binäreingänge mit einer Basisrate k . Der Abbau erfolgt einer Kinetik erster Ordnung mit einer Abbaukonstante k und kann mittels des Massenwirkungsgesetzes formalisiert werden.

$$\ddot{Änderungsrate} = \text{Produktionsgeschwindigkeit} - \text{Abbaugeschwindigkeit}$$

1. Produktion

$$\text{Produkt} = k \cdot [x_0] + 2k \cdot [x_1] + 4k \cdot [x_2] + 8k \cdot [x_3]$$

2. Abbau

$$\text{Abbau} = k \cdot [y]$$

3. Änderungsrate

$$\frac{dy}{dt} = (k \cdot [x_0] + 2k \cdot [x_1] + 4k \cdot [x_2] + 8k \cdot [x_3]) - k \cdot [y]$$

Herleitung der Endkonzentration

Nach einer Systembedingten Latenzzeit erreicht das System einen stabilen Endzustand, dem 'steady state'. Da sich die Konzentration ab diesem Zeitpunkt nicht mehr ändert, können wir die Differentialgleichung Null setzen.

$$(k \cdot [x_0] + 2k \cdot [x_1] + 4k \cdot [x_2] + 8k \cdot [x_3]) - k \cdot [y] = 0 \quad | + k \cdot [y] \quad (5)$$

$$(k \cdot [x_0] + 2k \cdot [x_1] + 4k \cdot [x_2] + 8k \cdot [x_3]) = k \cdot [y] \quad (6)$$

$$\cancel{k} \cdot (1 \cdot [x_0] + 2 \cdot [x_1] + 3 \cdot [x_2] + 4 \cdot [x_3]) = \cancel{k} \cdot [y] \quad (7)$$

und wir erhalten damit die Konzentration unserer Zielkonstante y

$$[y] = (1 \cdot [x_0] + 2 \cdot [x_1] + 4 \cdot [x_2] + 8 \cdot [x_3]) \quad (8)$$

Dadurch, dass sich die Konstante k kürzen lässt, wird der kinetische Einfluss eliminiert. In der Praxis bedeutet es, dass die Endkonzentration y unabhängig vom Parameter k ist. Damit wurde mathematisch bewiesen, dass es sich hierbei um einen robusten Digital-Analog-Wandler handelt. Die Konstante k beeinflusst lediglich wie schnell das System in einen *steady state* läuft, nicht jedoch das Ergebnis der Konzentration.

3.3 Realisierung des valid-Signals

Das **valid**-Signal soll eine Aussage darüber geben, ab welchem Zeitpunkt das Signal des Digital-Analog-Wandlers gültig ist. Hierfür ist der erste Schritt die Überprüfung der Eingabewerte der einzelnen Bits (x_0 , x_1 , x_2 und x_3). Eine weitere Überprüfung gibt Aussage darüber, ob das Ausgabesignal 99% seiner Zielkonzentration erreicht hat. Erst wenn beide Bedingungen erfüllt sind, gilt das simulierte Signal als **valid** und springt auf die Zahl 1. Für die Modellierung heißt das konkret:

1. Überprüfung der Eingabewerte, ob es sich um einen gültigen Bit-Operator handelt (Eingabe von 0 oder 1)
2. Überprüfung, ob das Signal y mindestens 99% seines Zielwertes erreicht hat

4 Implementierung in COPASI

Parametereinstellung

Für eine Implementierung in COPASI wurden zuerst die Eingangsvariablen x_0, x_1, x_2, x_3 und die Zielkonzentration y angelegt, welche alle eine initiale Konzentration von 0 erhielten. Im nächsten Schritt wurde jeder Variable ihre individuelle Reaktionsgleichung gemäß den Gleichungen 1-4 in Kapitel 3. Im Zuge dessen wurden allen Reaktionsgleichungen ihre individuelle 'rate law' zugewiesen, welche ebenfalls aus den Formeln 1-4 herauszulesen sind.

Umsetzung des valid-Signals

Für die Realisierung des valid Signals, wurde zunächst eine 'global quantity' erstellt, welche die Werte der Eingabebits prüft. Da COPASI den Datentyp float verwendet, konnte nicht nach den konkreten Eingabewerten 0 oder 1 gefragt werden, sondern es wird überprüft ob die Eingabewerte kleiner als 0.1 oder größer als 0.9 sind. Dem entsprechend wurde in COPASI folgender Pseudocode implementiert.

```
IF (x0 <= 0.1 OR x0 >= 0.9) AND
  (x1 <= 0.1 OR x1 >= 0.9) AND
  (x2 <= 0.1 OR x2 >= 0.9) AND
  (x3 <= 0.1 OR x3 >= 0.9) THEN
  input_stable := 1;
ELSE
  input_stable := 0;
```

Die nächste Abfrage bezieht sich darauf, ob die 99% der Zielkonzentration erreicht wurden oder nicht. Dafür wird mittels einer IF-Abfrage überprüft, ob die Eingabeüberprüfung aus dem Code oben den Wert TRUE bzw. 1 zurückliefert. Ist dies der Fall ist, dann wird geschaut ob y das 0.99-fache seiner analog berechneten Zielkonzentration ist.

```
IF (input_stable == 1) AND
  (y >= 0.99 * (8*x3 + 4*x2 + 2*x1 + x0)) THEN
  valid := 1;
ELSE
  valid := 0;
```

Durchführen einer Simulation

Für die Durchführung einer Simulation wurden dem Programm vier individuelle Events zugewiesen. Je nach Simulations-Szenario wurden hierbei zu einem bestimmten Zeitpunkt t verschiedene Bits geflippt um das Verhalten der Kurve zu beobachten. Es wurde sich entschieden die Simulation für 50 Sekunden unter Initialbedingungen laufen zu lassen und anschließend bei $t = 50s$ einzelne Bits zu flippen. Um den gesamten Kurvenverlauf abzubilden wurden alle Simulationen 120 Sekunden laufen gelassen.

5 Simulationsergebnisse

Zur Dokumentation des dynamischen Verhaltens des chemischen Digital-Analog-Wandlers werden im Folgenden die Ergebnisse von drei Simulationsstudien dargelegt, welche die Zeitverläufe der Produktkonzentration y sowie des binären Gültigkeitssignals **valid** bei unterschiedlichen Eingangskonfigurationen abbilden. Es wurde sich hierbei dafür entschieden einen üblichen Fall im mittleren Konzentrationsbereich, einen Grenzfall mit höchster Konzentration und einen Fehlerfall mit ungültigen Eingabewerten zu testen.

5.1 Simulation 1001

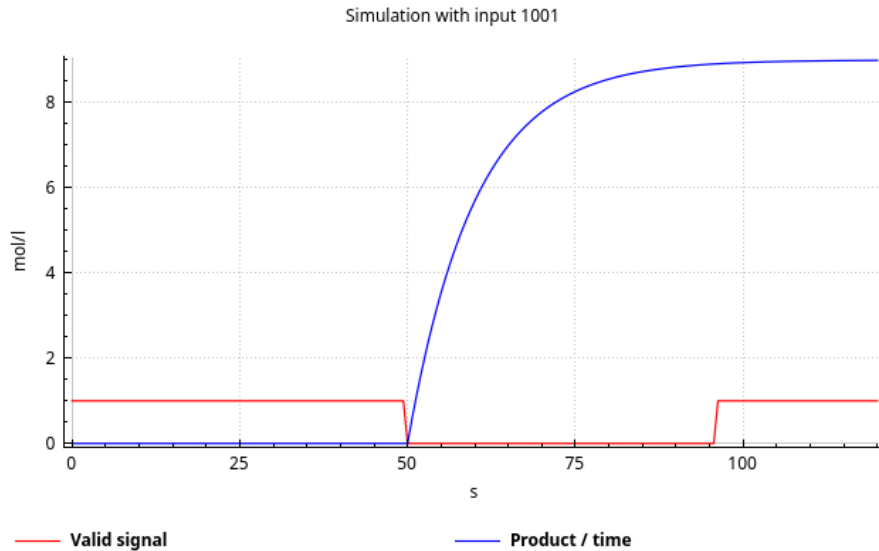


Abbildung 1: Simulationsergebnis des chemischen Digital-Analog-Wandlers bei einer binären Eingabekombination von 1001, welches dem Dezimalwert 9 entspricht.

Time [sek]	Product [mol/L]	x_0	x_1	x_2	x_3	valid-Signal
0	0	0	0	0	0	1
50	0	1	0	0	1	0
60	5.69	1	0	0	1	0
96.25	8.91	1	0	0	1	1
120	8.99	1	0	0	1	1

Tabelle 1: Analytische Simulationsergebnisse des chemischen Digital-Analog-Wandlers bei einer binären Eingabekombination von 1001, welches dem Dezimalwert 9 entspricht. Ausgewählt wurden kritische Simulationszeitpunkte, die das Verhalten der Kurve repräsentativ beschreiben.

Bei der ersten durchgeführte Simulation, wurden zu einem bestimmten Zeitpunkt die Eingabe-Bits von 0000 auf 1001 geflippt. Diese Simulation untersucht einen normalen Fall, bei dem die Stoffkonzentration asymptotisch gegen den Dezimalwert 9 laufen soll. In Abbildung 1 ist der zeitliche Verlauf der analogen Produktkonzentration y (in blau in mol/L) sowie das binäre **valid**-Signal (in rot) dargestellt. Von Sekunde 0 bis Sekunde 50, liegen alle Eingabewerte der Bits bei ihrem Initialisierungswert auf 0. Zu Beginn der Simulation liegt eine Gerade mit einer Konzentration von 0 mol/L vor. Bei Zeitpunkt $t = 50s$ erfolgt ein ereignisgesteuerter Bit-Wechsel, bei denen die Bits x_0 und x_3 beide den Wert 1 annehmen, während die Bits x_2 und x_3 ihren initialen Wert 0 beibehalten. Die Kurve weist ab diesem Zeitpunkt einen asymptotischen Konzentrationsanstieg auf, der

gegen einen *steady-state*-Wert von 9 mol/L konvergiert. Der Dezimalwert der Eingangsbitkombination 1001 (x_0, x_1, x_2, x_3), entspricht dem Dezimalwert 9. Zu sehen ist, dass das binäre Validierungssignal zu Beginn aktiviert ist und ab dem Zeitpunkt des Bit-flips auf 0 wechselt. Erst ab einem Zeitpunkt von $t = 96.25\text{s}$ und einer Konzentration von 8.91 mol/L nimmt dieser erneut den Zustand *gültig* ([1]) an.

5.2 Simulation 1111

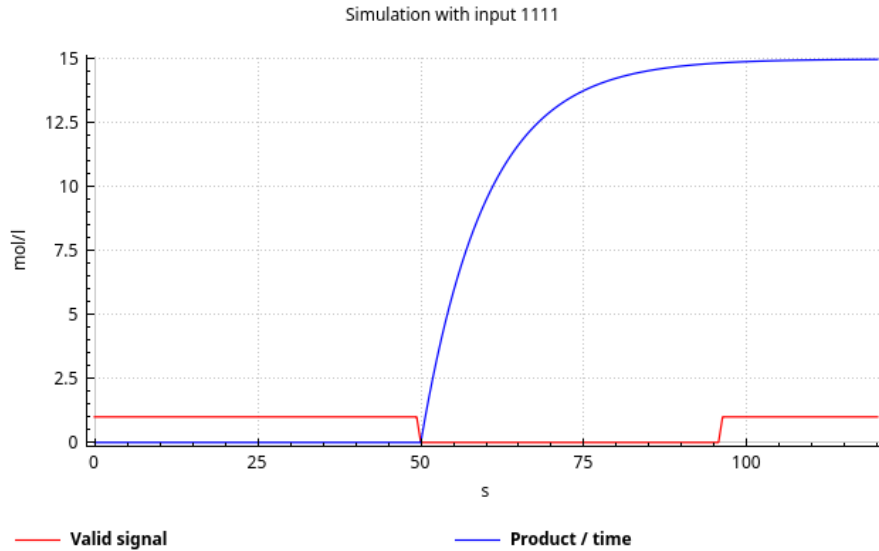


Abbildung 2: Simulationsergebnis des chemischen Digital-Analog-Wandlers bei einer binären Eingabekombination des Grenzfalles 1111, welches dem Dezimalwert 15 entspricht.

Time [sek]	Product [mol/L]	x_0	x_1	x_2	x_3	valid-Signal
0	0	0	0	0	0	1
50	0	1	1	1	1	0
70	12.97	1	1	1	1	0
96.25	14.85	1	1	1	1	1
120	14.99	1	1	1	1	1

Tabelle 2: Analytische Simulationsergebnisse des chemischen Digital-Analog-Wandlers bei einer binären Eingabekombination von 1111, welches dem Dezimalwert 15 entspricht. Ausgewählt wurden kritische Simulationszeitpunkte, die das Verhalten der Kurve repräsentativ beschreiben.

Die zweite Simulation soll einen Grenzfall untersuchen, indem die Eingabe-Bits von 0000 auf 1111 geflippt werden. Hierbei ist erwartet, dass die vorhergesagte Stoffkonzentration asymptotisch den Dezimalwert 15 anstrebt. Es ist daher ein Grenzfall, da es der Maximalkapazität des 4-Bit-Wandlers entspricht.

In Abbildung 2 ist ebenfalls die Konzentration in mol/L gegen die Zeit in Sekunden dargestellt. Zu Beobachten ist, dass von Sekunde 0 bis 50, die Konzentration 0 mol/L beträgt und das *valid*-Signal als gültig vorliegt. Beim Zeitpunkt $t = 50\text{s}$ kommt es zu einem Bit-Wechsel und die Bits x_0, x_1, x_2, x_3 nehmen eine Konstellation von 1111 an. Hierbei ist zu sehen, dass das *valid*-Signal den binären Wert 0 annimmt und es zu einem steilen Anstieg der Produktkonzentration kommt, welche beim Zeitpunkt $t = 96.25\text{s}$ und einer Konzentration von 14.85 mol/L abflacht. Dies ist ebenfalls dadurch bestätigt, dass es zu diesem Zeitpunkt zu einer Aktivierung des *valid*-Signals kommt und damit gezeigt wird, dass 99% der Zielkonzentration von y erreicht sind. Im Vergleich zu den Simulationser-

gebnissen in Abbildung 1 ist auffallend, dass die Anstiegsgeschwindigkeit der Kurve bei $t = 50s$ deutlich höher ist.

5.3 Simulation .5 .5 .5 .5

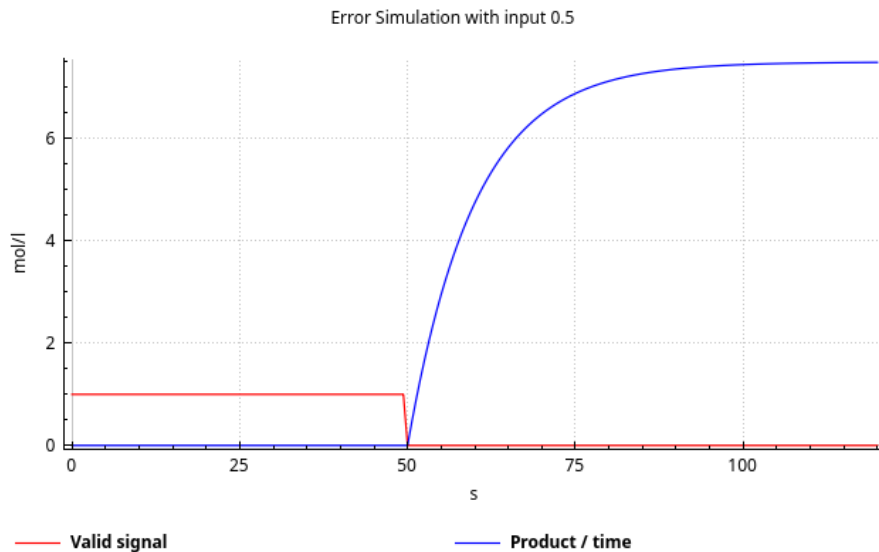


Abbildung 3: Simulationsergebnis des chemischen Digital-Analog-Wandlers bei einer binären Eingabekombination des Fehlerfalls $\{0.5, 0.5, 0.5, 0.5\}$, welches laut Berechnung einen Zielwert von 7.5 anstrebt, aber keiner gültigen binärwertigen Eingabe entspricht.

Time [sek]	Product [mol/L]	x_0	x_1	x_2	x_3	valid-Signal
0	0	0	0	0	0	1
50	0	0.5	0.5	0.5	0.5	0
60	4.74	0.5	0.5	0.5	0.5	0
70	6.48	0.5	0.5	0.5	0.5	0
103.75	7.47	0.5	0.5	0.5	0.5	0
107.5	7.48	0.5	0.5	0.5	0.5	0
120	7.49	0.5	0.5	0.5	0.5	0

Tabelle 3: Analytische Simulationsergebnisse des chemischen Digital-Analog-Wandlers bei einer binären Eingabekombination von .5 .5 .5 .5, welches analytisch dem Dezimalwert 7.5 entspricht. Ausgewählt wurden analog zu den Simulationen 1001 und 1111 kritische Simulationszeitpunkte, die das Verhalten der Kurve repräsentativ beschreiben.

In der letzten Simulation geht es um die Testung eines Fehlerfalles. Hierfür werden zu einem bestimmten Zeitpunkt alle Eingabe-Bits von 0 auf 0.5 geflippt. Da es sich um einen Bit-Digital-Analog Wandler handelt, werden auch nur binärkodierte natürliche Zahlen erwartet. Da die Eingabe 0.5 logisch weder als 0 noch logisch als 1 interpretiert werden kann, soll geprüft werden wie sich das Modell in diesem Falle verhält.

Abbildung 3 scheint auf den ersten Blick sehr ähnlich zu sein zu den vorherigen Simulationen. Es ist ebenfalls die Konzentration in mol/L gegen die Zeit (in Sekunden) aufgeführt. Von Sekunde 0 bis Sekunde 50 ist die Kurve der Produktkonzentration auf 0 mol/L und es liegt ein aktiviertes `valid`-Signal vor. Beim Zeitpunkt $t = 50s$ gibt es einen ereignisgesteuerten Bit-Wechsel, bei dem alle Eingabebits (x_0, x_1, x_2, x_3) von 0 auf den Wert 0.5 springen. Laut den berechneten Formeln für die Zielkonzentration, entspricht eine derartige Eingabekombination einem Dezimalwert von 7.5. Der Kurve verhält sich gleich der anderen Simulationen indem sie einen asymptotischen Konzentrationsanstieg aufzeigt, der

gegen einen *steady-state*-Wert von 7.5 mol/L strebt. Besonders auffallend ist jedoch, dass trotz der Konvergenz gegen die Zielkonzentration, das `valid`-Signal deaktiviert bleibt.

6 Interpretation und Diskussion

Das Ziel dieser Projektarbeit war es, ein Modell für einen chemischen-Digital-Analog-Wandler zu entwerfen, der eine 4-Bit binärkodierte natürliche Zahl als Eingabe bekommt und diese analog in eine entsprechende Stoffkonzentration zwischen 0 und 15 als Ausgangsgröße y umwandelt. Die Stoffkonzentrationen an den Binäreingängen sollten hierbei entweder 0 oder 1 sein. Da sich die Zielkonzentration y erst aufbauen muss und dadurch eine gewisse Latenzzeit verstreicht, sollte zusätzlich noch ein Signal realisiert werden, welches eine Aussage darüber liefert, ob 99% der Zielkonzentration erreicht sind und die Eingabeparameter den logischen Binärwerten 0 oder 1 entsprechen.

Setzen wir die Zustände der Simulationen 1001 und 1111 in unsere hergeleitete Formel 8 ($[y] = (1 \cdot [x_0] + 2 \cdot [x_1] + 4 \cdot [x_2] + 8 \cdot [x_3])$) ein, so wird für die Simulation 1001 eine Zielkonzentration von 9 mol/L und für Simulation 1111 eine Zielkonzentration von 15 mol/L erwartet. In den jeweiligen Abbildungen der Simulationen konvergiert der Wandler zuverlässig für 1001 gegen 9 mol/L und für den Grenzfall 1111 gegen 15 mol/L . Damit wird gezeigt, dass die Simulationen aus 1 und 2 beide die Umwandlung einer 4-Bit-Zahl in eine analoge Stoffkonzentration y mathematisch und chemisch präzise umsetzen.

In biologischen Systemen fluktuieren Konzentrationen ständig [5] und sind abhängig von vielen Einflussfaktoren wie zum Beispiel Temperatur, Volumen oder pH-Wert [6]. Für eine Modellierbarkeit und damit eine zuverlässige Vorhersage, muss das Modell ein deterministisches Ergebnis liefern [2]. Mathematisch konnte gezeigt werden, dass die stationäre Endkonzentration ausschließlich von der logischen Verschaltung und Gewichtung der Eingabe abhängt, nicht jedoch von der Reaktionsgeschwindigkeit. Diese Schlussfolgerung folgt dem mathematischen Beweis durch das Nullsetzen der Differentialgleichung im *steady-state* (Formeln 5-7). Das System zeigt damit inhärente Robustheit gegenüber thermischen und kinetischen Schwankungen. Die Simulationsergebnisse aus den Abbildungen 1 und 2 verifizieren die mathematische Robustheit des Systems. Obwohl der Kurvenverlauf durch die Differentialgleichung dynamisch gesteuert wird, konvergiert die Konzentration im *steady-state* asymptotisch exakt gegen die erwartete Zielkonzentration. Dies zeigt, dass das System unempfindlich gegenüber transienten Geschwindigkeitsänderungen ist. Sobald das Fließgleichgewicht erreicht ist, kompensiert der Abbau die Produktsynthese, wodurch ein präziser Analogwert garantiert wird.

Der asymptotische Kurvenverlauf aller drei Simulationen entspricht einer typischen Reaktion 1. Ordnung, welche auch Sättigungskinetik genannt wird [7]. Das bedeutet, dass die Steigung zu Beginn maximal ist, da noch kein Abbau stattfindet, und mit zunehmender Produktkonzentration abflacht, bis sich ein Fließgleichgewicht zwischen Synthese und Abbau eingestellt hat [8]. Da ein Digital-Analog-Wandler die Zustände kontinuierlich einliest, befindet sich das System unmittelbar nach einem ereignisgesteuerten Bit-Wechsel in einem Übergangszustand, in der der Ausgangswert noch nicht als vollständig angesehen werden kann. Diese Zeit in der sich noch kein Gleichgewicht eingestellt hat wird Latenzzeit genannt [9]. Um die Stabilität des Systems zu repräsentieren wurde ein `valid`-Signal eingeführt. Dieses Signal ist binärkodierte und liefert eine Aussage darüber ob sich das System in einem stabilen Zustand befindet, indem es zwischen den Zuständen 0 (instabiler Zustand des Systems) und 1 (stabiler Zustand des Systems) hin und her springen kann. Dies wird in den Abbildungen 1 und 2 und den dazugehörigen Tabellen repräsentiert. Sofort nach den Zustandsveränderungen der Eingänge zum Zeitpunkt $t = 50\text{s}$ springt das zuvor aktivierte `valid`-Signal ([1]) auf 0 um und zeigt somit, dass das System sich in einem instabilen Zustand befindet. Eine erneute Aktivierung findet jeweils beim Erreichen von mindestens 99% statt. Dies findet bei Simulation 1 bei einer Bitkonstellation von 1001

zum Zeitpunkt $t = 96.25s$ und einer Konzentration von 8.91 mol/L und bei Simulation 2 bei einer Bitkonstellation von 1111 zum Zeitpunkt $t = 96.25s$ und einer Konzentration von 14.85 mol/L statt (siehe Tabellen 1 und 2). Dies zeigt, dass das Modell in jedem Szenario den Übergangszustand einwandfrei isoliert, bevor das Signal freigegeben wird. In biologischen Systemen die mit Konzentrationen arbeiten, sind Kaskaden oder Signalweiterleitungen häufig an Schwellenwerte gekoppelt [10]. Bei dem Versuch ein biologisches System analog zu simulieren, muss eine äquivalente Filterfunktion emuliert werden. Dies ist eine weitere Funktion des `valid`-Signals, welche in der Simulation des Fehlerfalls (.5 .5 .5 .5) verdeutlicht werden soll. Die zugrundeliegende chemische Reaktion läuft rein analog ab. Wie Abbildung 3 veranschaulicht, läuft die Konzentration von y analog zu ihren Eingabewerten von jeweils 0.5 mol/L gegen einen Zielkonzentration von 7.5 mol/L . Die logische Kontrollstruktur des `valid`-Signals fängt diesen Fehler vollständig ab. Wie in Abbildung 3 zu sehen ist, wird das `valid`-Signal zum Zeitpunkt des Bit-Wechsels $t = 50s$ deaktiviert und trotz einstellen eines Gleichgewichtes um die 7.49 mol/L nicht wieder aktiviert. Dies zeigt eine Robustheit des Systems nicht nur gegenüber der Unterscheidung eines stabilen oder instabilen Zustands, sondern ebenfalls eine qualitative Unterscheidung, welche das System robust gegenüber Formatfehlern macht.

Um einen tieferen Einblick in die systemische Flexibilität und Skalierbarkeit des 4-Bit-Digital-Analog-Wandlers zu bekommen, erfolgt ein direkter Vergleich der Simulationsszenarien 1001 und 1111. Während beide Abbildungen sich durch einen gleichen Kurventyp, gleiche Ereignisabfolge und gleichem Systemendzustand, qualitativ sehr ähnlich verhalten, weist ein direkter Vergleich jedoch Unterschiede in der quantitativen Dynamik auf. Bei einer genaueren Betrachtung unmittelbar nach dem ereignisgesteuerten Event zum Zeitpunkt $t = 50s$, lässt sich ein klarer Unterschied in der Kinetik beider Simulationen beobachten. Mathematisch lässt sich diese Beobachtung über die hergeleitete Produktionsrate $\frac{dy}{dt}$ erklären. Bei der Simulation aus Abbildung 2 (1111) befinden sich alle vier binären Eingangsspezies (x_0, x_1, x_2, x_3) im Zustand 1. Entsprechend ihrer Wertigkeit ergibt dies den Dezimalwert 15, welcher mit der Ratenkonstante $k = 1$ multipliziert wird. Für die Simulation aus Abbildung 1 sind jedoch nur die Bits x_0 und x_3 aktiviert, woraus sich lediglich eine Wertigkeit von 9 ergibt. Da die Ratenkonstante bei allen 3 Simulationen gleich ist, hängt die Produktionsgeschwindigkeit allein von der Summe der Wertigkeit der entsprechenden Bits ab. Dies ist durch den unterschiedlich starken Anstieg in den jeweiligen Simulationsabbildungen 1 und 2 sichtlich erkennbar. Diesen Unterschied in der Kinetik erklärt auch, dass trotz unterschiedlicher Stoffmengen, das `valid`-Signal bei beiden Simulationszenarien nach exakt der selben Zeitdauer $t = 96.25s$ auf gültig umschlägt. Dies ist ein Beweis für die mathematische Skalierbarkeit des Systems, da die relative Latenzzeit unabhängig ist von der Zielkonzentration. Es braucht beide Simulationen genau $46.25s$ nach einer Veränderung einen neuen stabilen Zustand zu erreichen.

Ein Modell wie dieser Digital-Analog-Wandler ist ein entscheidendes Bindeglied in der biologischen Informatik, da es abstrakte und digital arbeitende Systeme wie Registermaschinen oder deterministische endliche Automaten (DAE's) mit der analogen biochemischen Realität verknüpft [2]. Während die interne Logik der Rechner binärkodiert ist, ermöglicht ein chemischer Digital-Analog-Wandler die Rückübersetzung dieser Informationen in eine kontinuierliche Messgröße wie die Konzentrationsgröße y [2].

Es konnte konstruktiv nachgewiesen werden, dass chemische Reaktionsnetzwerke durch die Emulation von Registermaschinen die Berechnungsstärke von Turingmaschinen besitzen [2]. Ein funktionsfähiger Computer benötigt jedoch neben der Steuereinheit eine verlässliche Ausgabekomponente [2]. Das hier präsentierte Modell liefert genau diese Komponente, indem es den berechneten digitalen Status in eine präzise, physikalisch wirksame Stoffkonzentration überführt.

Ein wesentlicher Vorteil gegenüber rein analogen Rechenverfahren ist die hohe Robustheit

gegenüber Signalstörungen, die durch die zusätzliche Interpretationsebene erreicht wird. In der COPASI-Implementierung wurde über die Abfrage des `valid`-Signals eine redundante Zusammenfassung von Signalwerten zu logischen Bereichen durchgeführt, was eine Absicherung liefert, dass das System auch in störanfälligen chemischen Medien verlässlich bleibt und Fehlinterpretationen im 'verbotenen Bereich' ausgeschlossen werden.

Da chemische Signale ihre Zielkonzentrationen nur asymptotisch erreichen, stellt das Modell eine Lösung für das Problem der Latenzzeit dar. Die 99%-Regel des `valid`-Signals garantiert, dass erst bei minimalem Approximationsfehler eine nachfolgende Reaktion ausgelöst werden würde, was für die präzise Steuerung zellulärer Prozesse oder gezielte Wirkstofffreisetzungen essenziell ist. Die Implementierung folgt dem Vorbild der Zellsignalverarbeitung, bei der beispielsweise Proteine durch schrittweise Aktivierung komplexe Zustände annehmen, die einer Bitkette ähneln. Dieses Modell ist ein gutes und kleines Beispiel dafür um zu zeigen, wie solche natürlichen Schaltprinzipien technisiert werden können, um digitale Befehlsketten in gezielte, analoge biochemische Antworten zu übersetzen.

Literatur

1. PLASSMANN, Wilfried; SCHULZ, Detlef. *Handbuch Elektrotechnik: Grundlagen und Anwendungen für Elektrotechniker*. Springer-Verlag, 2016.
2. HINZE, Thomas. *Chemische Digitalcomputermodelle für endliche Automaten und Registermaschinen sowie praktische Anwendungen*. 2026. Molekulare Algorithmen.
3. AMBARDAR, Ashok et al. *Analog and digital signal processing*. PWS Boston, MA, USA, 1995.
4. COPASI DEVELOPMENT TEAM. *COPASI: Complex Pathway Simulator*. 2024. Zugriff am: 2024-06-01.
5. BERG, Otto G.; PAULSSON, Johan et al. Fluctuations and Quality of Control in Biological Cells: Zero-Order Ultrasensitivity Reinvestigated. *Biophysical Journal*. 2000, Jg. 79, Nr. 3, S. 1228–1236.
6. ARROYO, José Ignacio; DÍEZ, Beatriz et al. A general theory for temperature dependence in biology. *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2022, Jg. 119, Nr. 30.
7. LI, Zesheng; YU, Changlin. Physicochemical basics and paradigms of nanomaterials. In: *Nanostructured Materials*. Elsevier, 2024, S. 93–143.
8. Saturation Kinetics. In: *Dictionary of Toxicology*. Springer Nature Singapore, 2024, S. 906–906.
9. HÄFLIGER, Markus. *Was ist Latenzzeit eigentlich genau*. 2023. <https://www.iway.ch>.
10. TIBELL, Lena A. E.; HARMS, Ute. Biological Principles and Threshold Concepts for Understanding Natural Selection: Implications for Developing Visualizations as a Pedagogic Tool. *Science amp; Education*. 2017, Jg. 26, Nr. 7-9, S. 953–973.

7 Anhang

Zusatzmaterial für Simulation 1001

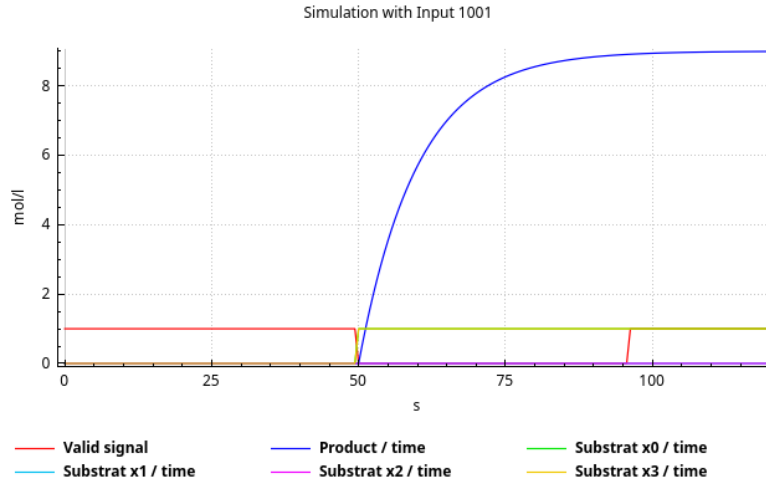


Abbildung 4: Dargestellt ist der zeitliche Verlauf der Stoffkonzentrationen von Produkt y (blau) und des binären Gültigkeitssignals **valid** (rot). Zum Zeitpunkt $t = 50 \text{ s}$ erfolgt eine sprunghafte Änderung der Eingangskonzentrationen von Bit x_0 und x_3 auf 1 mol/L , während x_1 und x_2 bei 0 mol/L verbleiben. Die Konzentration von y weist einen asymptotischen Anstieg gegen den theoretischen *steady-state*-Wert von 9 mol/L auf. Das **valid**-Signal deaktiviert sich unmittelbar mit der Änderung der Eingangsgrößen und schaltet erst nach einer systembedingten Latenzzeit bei Erreichen von 99% des Zielwertes ($t \approx 96 \text{ s}$) wieder auf logisch 1 um

Zusatzmaterial für Simulation 1111

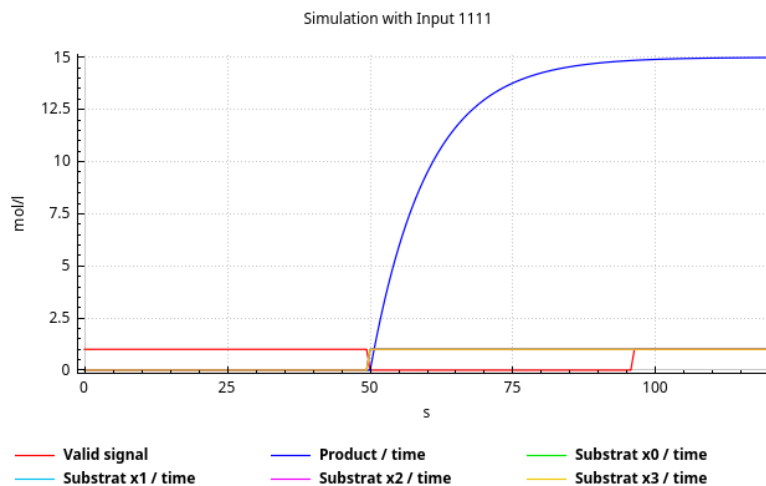


Abbildung 5: Die Abbildung illustriert die Konvergenz des Wandlers gegen den Maximalwert von 15 mol/L nach Aktivierung aller vier Eingangsbits ($x_0, x_1, x_2, x_3 = 1 \text{ mol/L}$) bei $t = 50 \text{ s}$. Das **valid**-Signal (rot) dient als Schutzmechanismus zur Überbrückung der Latenzphase und markiert den resultierenden Analogwert erst nach Überschreiten des Schwellenwerts von $14,85 \text{ mol/L}$ (99%-Regel) als stabil und für nachfolgende Rechenoperationen verfügbar.

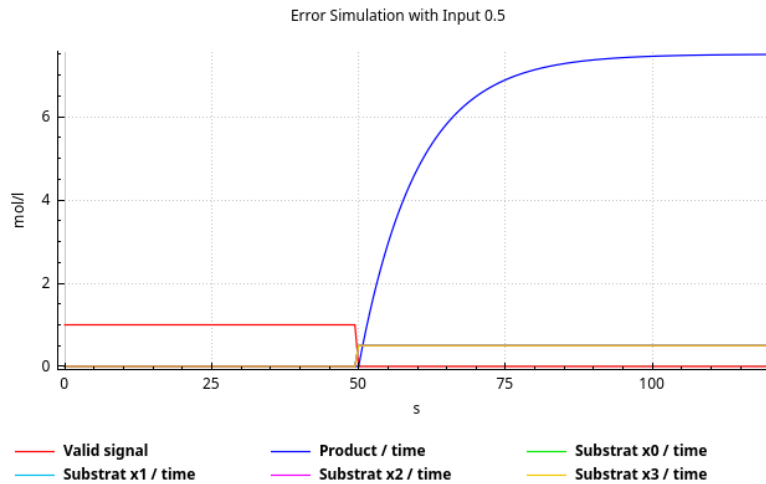


Abbildung 6: Dargestellt ist die Reaktion des Systems auf einen Eingangswert von 0.5 mol/L für alle Bits (x_0, x_1, x_2, x_3). Obwohl die chemische Reaktion gegen ein stabiles Plateau von $7,5 \text{ mol/L}$ konvergiert, bleibt das `valid`-Signal nach dem Abfall zum Zeitpunkt $t = 50 \text{ s}$ dauerhaft auf dem Wert 0. Dies belegt die Robustheit der logischen Interpretationsebene, welche Werte im zwischen logisch 0 und logisch 1 identifiziert und die Validierung des fehlerhaften Analogwerts unterbindet.