4. Soliton-Automaten

Naturwissenschaftlich motivierte formale Modelle

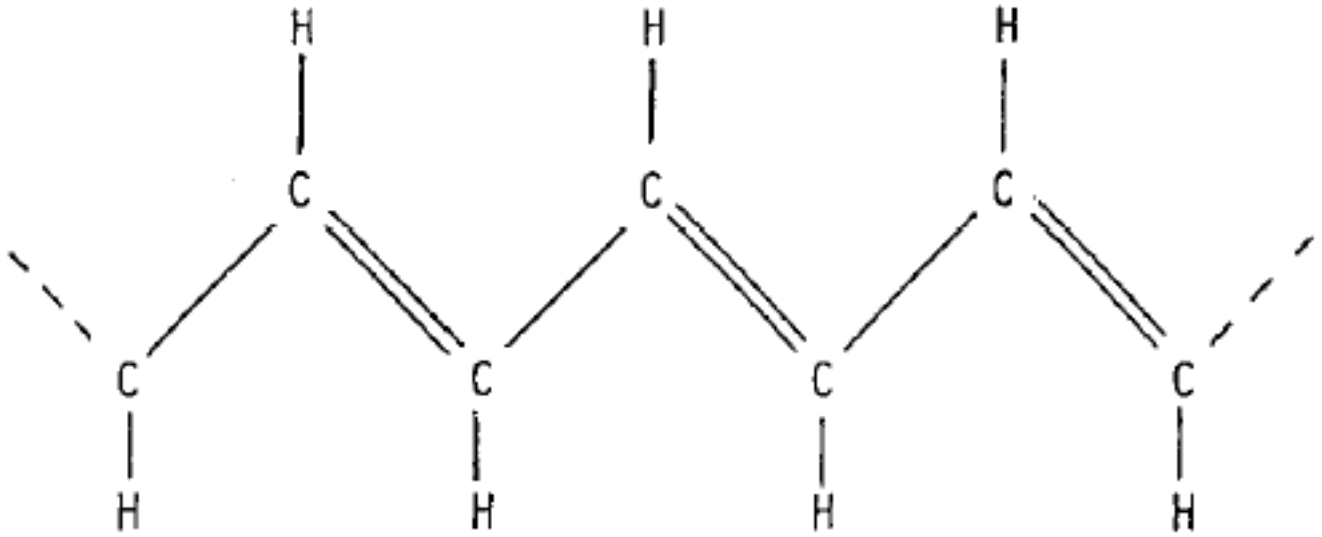
Henning Bordihn

Soliton

- Wellenpaket in einem dispersiven, nicht-linearen Medium ohne Änderung der Wellenform
- Beispiele:
  - Signalübertragung durch energiearme, sehr kurze Lichtimpulse
  - Amazonas-Wellen (den Amazonas hinauflaufende Tidenwellen)
  - Ausbreitung einer Störung (Ladung) in Polyazetylen-Ketten

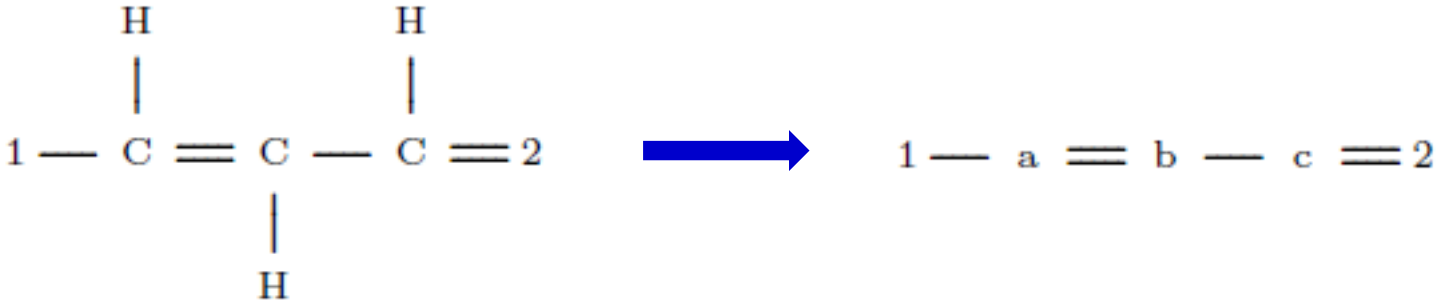
Polyacetylen-Ketten

- C-H-Ketten mit Anbindung weiterer Moleküle
- alternierende Bindungswerte der C-Atome



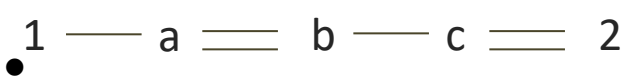
Abstrakte Repräsentation

- Abstraktion von H- und „*externen*“ Molekülen
- ungerichteter Graph mit speziellen Eigenschaften



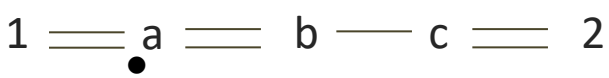
Solitonwelle in Polyacetylen-Molekülen

- Entstehung:
  - Ladungsänderung an einzelnen Atomen
  - z.B. durch Oxidationseffekte
  - z.B. durch Lichteinwirkung mit bestimmter Frequenz
- Ausbreitung
  - Traversieren von C-Atom zu C-Atom entlang der Bindungen
  - Änderung der Bindungswerte



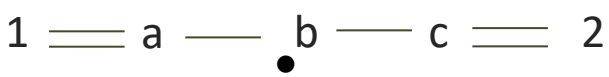
Solitonwelle in Polyacetylen-Molekülen

- Entstehung:
  - Ladungsänderung an einzelnen Atomen
  - z.B. durch Oxidationseffekte
  - z.B. durch Lichteinwirkung mit bestimmter Frequenz
- Ausbreitung
  - Traversieren von C-Atom zu C-Atom entlang der Bindungen
  - Änderung der Bindungswerte



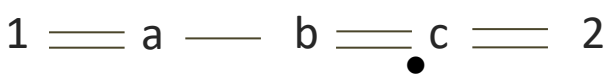
Solitonwelle in Polyacetylen-Molekülen

- Entstehung:
  - Ladungsänderung an einzelnen Atomen
  - z.B. durch Oxidationseffekte
  - z.B. durch Lichteinwirkung mit bestimmter Frequenz
- Ausbreitung
  - Traversieren von C-Atom zu C-Atom entlang der Bindungen
  - Änderung der Bindungswerte



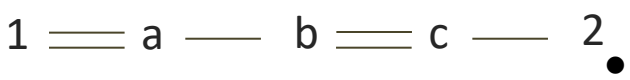
Solitonwelle in Polyacetylen-Molekülen

- Entstehung:
  - Ladungsänderung an einzelnen Atomen
  - z.B. durch Oxidationseffekte
  - z.B. durch Lichteinwirkung mit bestimmter Frequenz
- Ausbreitung
  - Traversieren von C-Atom zu C-Atom entlang der Bindungen
  - Änderung der Bindungswerte



Solitonwelle in Polyacetylen-Molekülen

- Entstehung:
  - Ladungsänderung an einzelnen Atomen
  - z.B. durch Oxidationseffekte
  - z.B. durch Lichteinwirkung mit bestimmter Frequenz
- Ausbreitung
  - Traversieren von C-Atom zu C-Atom entlang der Bindungen
  - Änderung der Bindungswerte

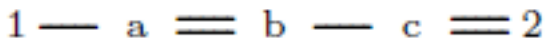


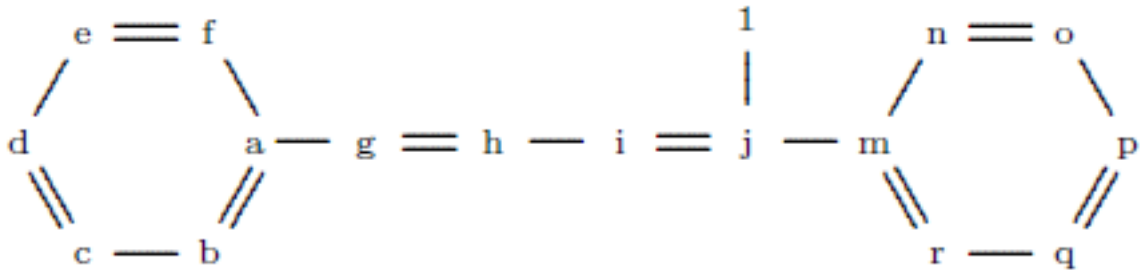
Zustandsänderung durch Solitonwelle

- vollständiges Traversieren des Solitons führt zu neuer Molekülkette mit „gültiger“ Bindungsstruktur

Solitongraph, informal

- ungerichtet, schlingenfrei
- Knotengrade zwischen 1 und 3
- Bindungen als Kantengewichte (1 oder 2)
- innere Knoten mit je genau einer Doppelbindung





Solitongraph, formal

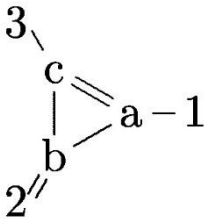
gewichteter Graph $G = (N, E, w)$:

1. N endliche, nicht leere Menge der Knoten
2. $E \subseteq N \times N$ mit $(n,n') \in E$ impliziert $(n',n) \in E$
3. Für jeden Knoten $n \in N$ gilt:
   a. $(n,n) \notin E$
   b. $1 \leq d(n) \leq 3$ (Kontengrad)
   c. $w(n) \in \{1,2\}$, falls n äußerer Knoten und
      $w(n) = d(n) + 1$, falls n innerer Knoten
4. Jede Komponente hat mindestens einen externen Knoten (also mit Grad 1).

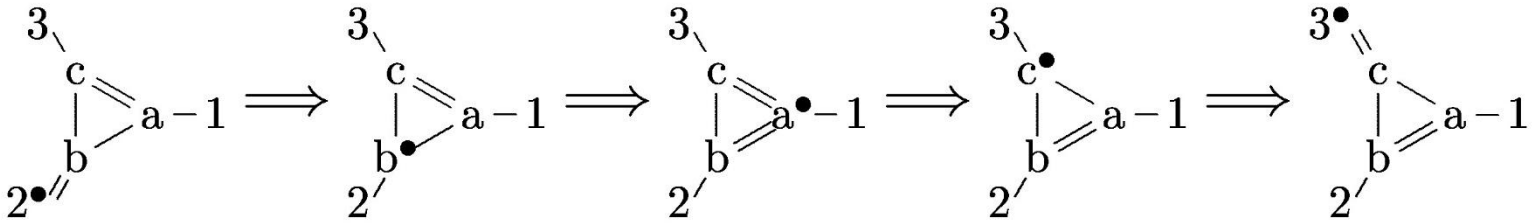
Solitonpfad und Graph-Folge

(totaler) Solitonpfad: Pfad (Folge von Knoten),
den ein Soliton zwischen zwei externen Knoten nehmen kann,
so dass am Ende wieder ein Solitongraph entsteht

Solitongraph:



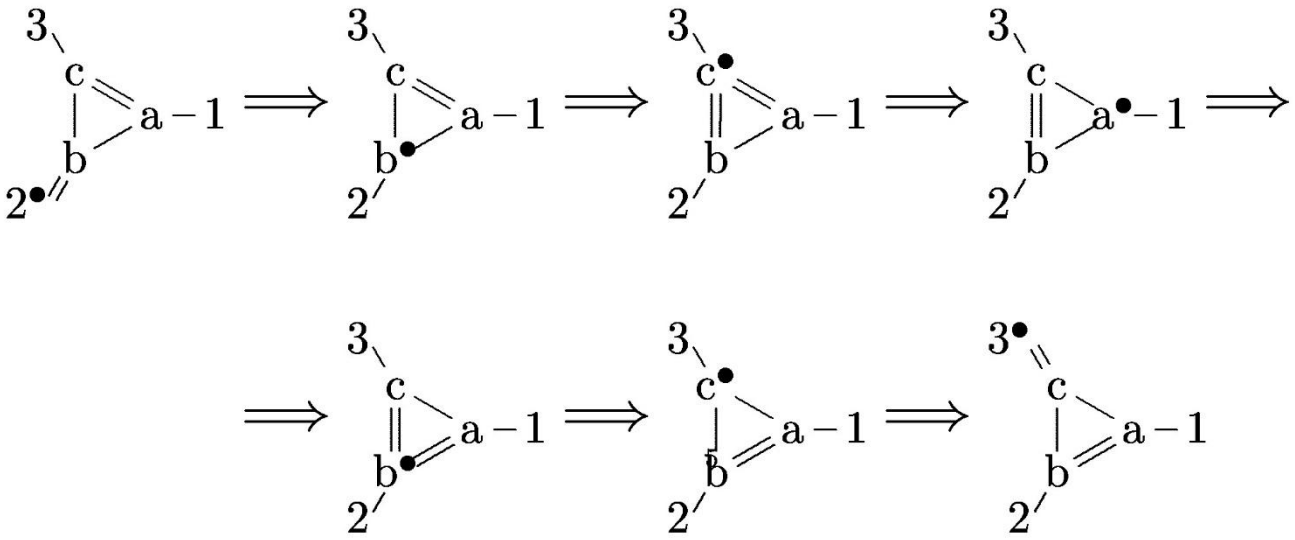
Solitonpfad: 2, b, a, c, 3



Die entsprechende Graph-Folge für den Solitonpfad.

Solitonpfad und Graph-Folge

Ein weiterer Solitonpfad von 2 nach 3:
2, b, c, a, b, c, 3



Solitonpfad, formal

Ein Pfad $n_0, n_1, \ldots, n_k$ eines Solitongraphen $G = (N, E, w)$ heißt **partieller Solitonpfad** in G *gdw.*

1. n_0 ist äußerer Knoten, $n_1, n_2, \ldots, n_{k-1}$ sind innere Knoten;
2. es gibt eine Folge gewichteter Graphen $G_0, G_1, \ldots, G_k$ mit $G_0 = G$ und $G_{i+1} = (N, E, w_{i+1})$ existiert, $0 \leq i < k$, falls

   - $G_i = (N, E, w_i)$ existiert,
   - $$w_{i+1}(n,n') = \begin{cases} w_i(n,n') & \text{falls } (n,n') \neq (n_i,n_{i+1}) \\ 3 - w_i(n,n') & \text{falls } (n,n') = (n_i,n_{i+1}) \end{cases} \quad \text{für alle } n, n' \in N$$
   - und, falls $i+1 < k$, $|w_i(n_i,n_{i+1}) - w_i(n_{i+1},n_{i+2})| = 1$.

Ein partieller Solitonpfad heißt **total** falls n_k ein äußerer Knoten ist.

Solitonautomat, informal

- Gegeben ein Solitongraph *G*
- von *G* induzierter (*Semi*-) Automat ***A*(*G*)** :
  - Zustandsraum ***S*(*G*)**: Menge aller durch totale Solitonpfade erreichbarer Solitongraphen
  - Zustandsübergänge durch totale Solitonpfade (*vollständiges Traversieren eines Solitons von einem externen Knoten zu einem externen Knoten*)
  - Eingabesymbole: Paare von externen Knoten

Solitonautomat, formal (1)

Seien G Solitongraph und n, n' äußere Knoten von G.

- ***S*(*G*,*n*,*n*')**: Menge aller gewichteten Graphen G', für die ein totaler Solitonpfad $n_0, n_1, \ldots, n_k$ in G mit $G_k = G'$ existiert.
  → *G' wird aus G erzeugt*

➢ Alle Elemente aus $S(G,n,n')$ sind Solitongraphen.

➢ Falls $G' \in S(G,n,n')$, dann $G \in S(G',n',n)$.

- $\mathfrak{G}_0, \mathfrak{G}_1, \mathfrak{G}_2, \ldots$ Folge von Mengen von Solitongraphen, wobei $\mathfrak{G}_{i+1}$ ist Vereinigung von $\mathfrak{G}_i$ mit Menge der Graphen, die aus einem Graphen in $\mathfrak{G}_i$ erzeugt werden ($i \geq 0$).
- ***S*(*G*)**: Vereinigung aller $\mathfrak{G}_i$ bei $\mathfrak{G}_0 = \{G\}$

➢ Falls $G' \in S(G)$, dann $G \in S(G')$.

Solitonautomat, formal (2)

Seien *G* Solitongraph und *X* die Menge seiner äußeren Knoten.

Der auf *G* basierende Solitonautomat ist der nichtdeterministische Semiautomat

$$A(G) = (S(G), X \times X, \delta)$$

wobei

$$\delta : S(G) \times X \times X \longrightarrow 2^{S(G)}$$

mit

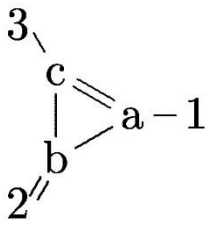
$$\delta(G',n,n') = \begin{cases} S(G',n,n') & \text{falls } S(G',n,n') \neq \emptyset \\ \{G'\} & \text{sonst} \end{cases}$$

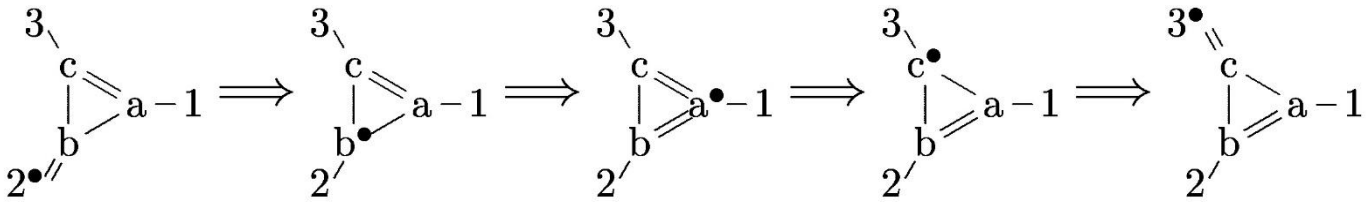
Determinismus

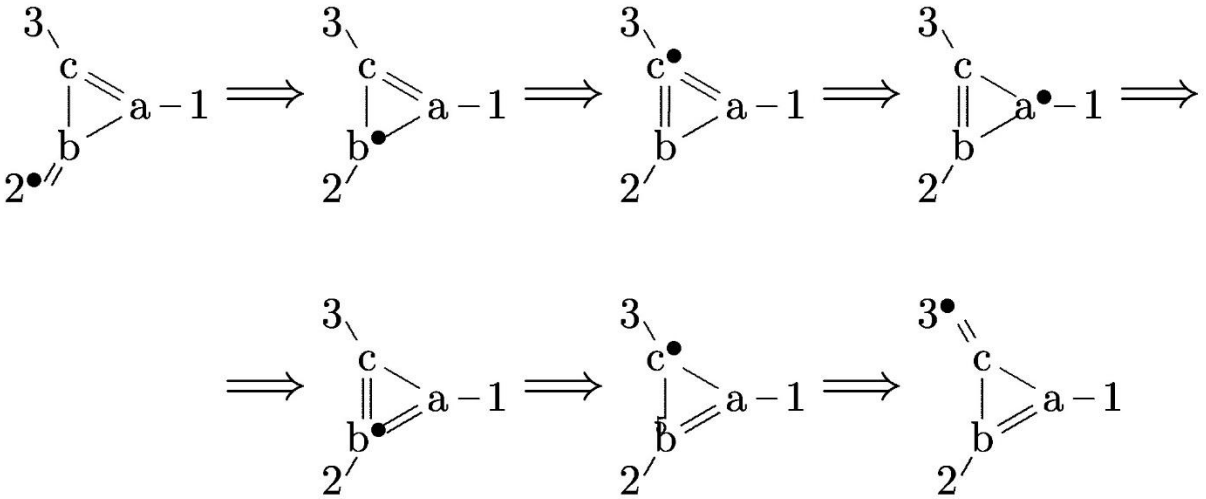
Der vom Solitongraphen G induzierte Solitonautomat ist

- **deterministisch** falls $\#S(G', n, n') \leq 1$ für alle $G' \in S(G)$ und $(n, n') \in X \times X$;
- **stark deterministisch** falls es höchstens einen Solitonpfad von n nach n' gibt, für alle $(n, n') \in X \times X$ in allen $G' \in S(G)$.

Determinismus, Beispiel

Der durch  induzierte Automat ist deterministisch aber nicht stark deterministisch.



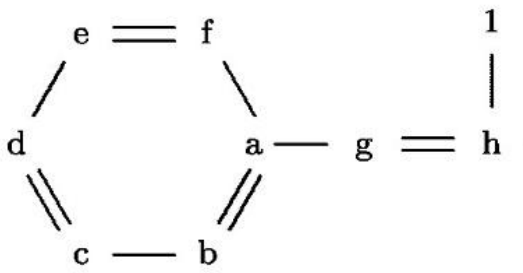


Determinismus, ein Resultat

[Dassow, Jürgensen 90]

- *A*(*G*) ist stark deterministisch gdw. *G* eine Kastanie oder ein Baum ist.

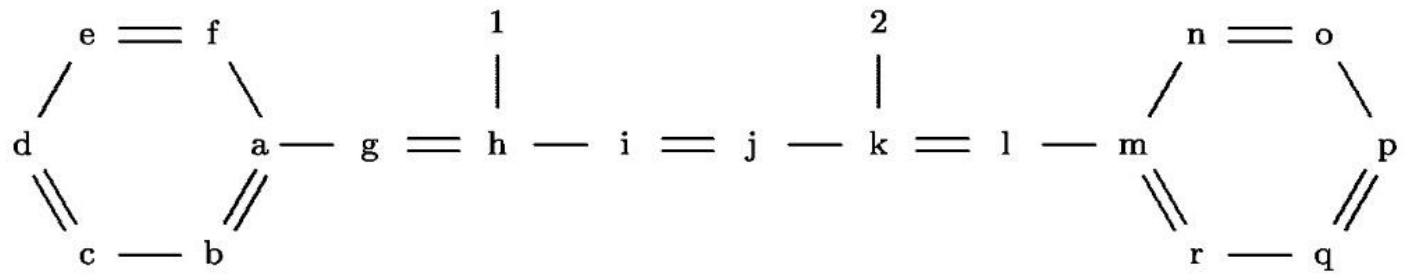
  Kastanie: Solitongraph, der aus einem einzigen Kreis gerader Länge und einigen Pfaden besteht, die zu diesem Kreis führen. Die Knoten des Kreises, die mit den Pfaden verbunden sind, haben geraden Abstand zueinander.
  "Schnittpunkte" von Pfaden haben gerade Abstände vom Kreis.



Jeder Solitonpfad ändert die Bindungsstruktur im Kreis.
→ zwei Zustände

Undurchlässige Pfade

- sind nicht Teil eines Solitonpfads
- Beispiel: **h, i, j, k** in



- können aus *G* entfernt werden, ohne das Zustandsverhalten zu ändern

Der Fall mehrfacher Wellen

- mehrere Solitone gleichzeitig im Graph
- Mehrwellenmodell konsistent mit Einwellenmodell
- Injektion mehrere Solitone zu verschiedenen Zeiten
- Modellierung des Verhaltens beim Zusammentreffen
- Abstraktion von physikalischen und chemischen Details, aber Berücksichtigung folgender Fakten:
  - Solitone bewegen sich mit einheitlicher und konstanter Geschwindigkeit.
  - Solitone können nicht spontan umkehren.
  - Höchstens ein Soliton kann eine Kante zu einer Zeit passieren.

Kollisionen

- direkte Kollision

- Blockade

- weitere Situationen, wenn sich mehrere Solitone einem Knoten mit Grad 3 nähern

Modellierung der Eingabe

Sei S ein endliches, nicht leeres Alphabet, das weder die Symbole || und $\perp$ noch Zahlen enthält.
Ein **Burst über *S*** ist ein Wort der Form

$$s_1 \|_{k_1} s_2 \|_{k_2} \ldots s_{m-1} \|_{k_{m-1}} s_m \perp$$

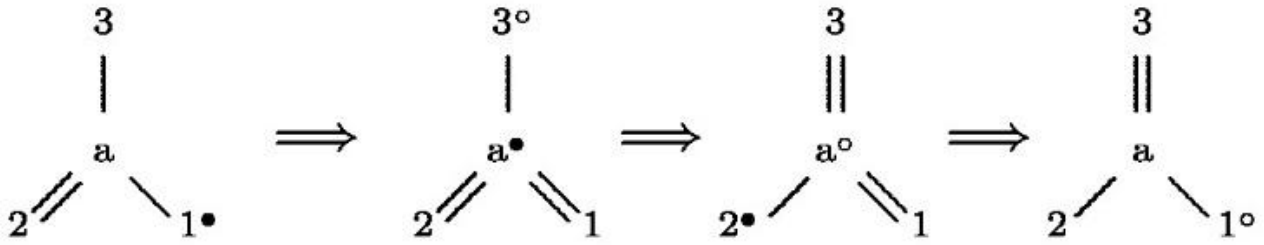
mit

1. $m > 0$,
2. $s_i \in S$, für $1 \le i \le m$,
3. $k_i \ge 0$, für $1 \le i \le m\text{-}1$.

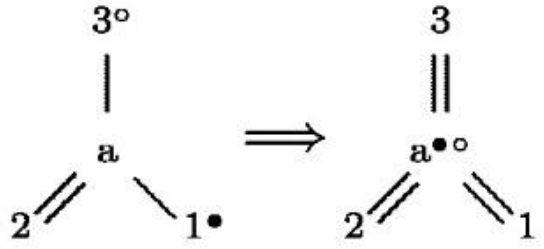
Typisch: $S = X$ oder $S = X \times X$, d.h. $s_i = (n_i, n_i')$

Beispiel

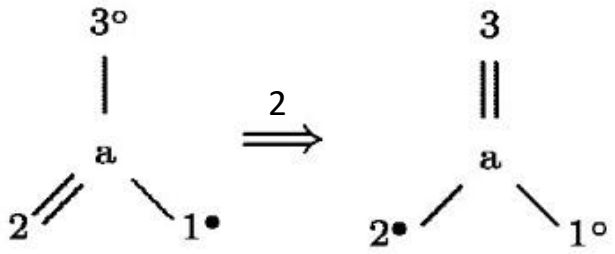
Eingabe **(1,2) $\|_1$ (3,1) $\perp$**



Eingabe **(1,2) $\|_0$ (3,2) $\perp$**



Eingabe **(1,2) $\|_0$ (3,1) $\perp$**

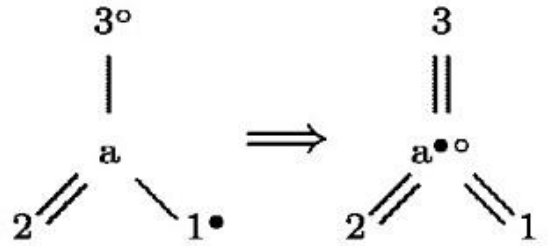


„Zukunft“ *versus* „Vergangenheit“

- **“Zukunftsbedingung”** (wie in der ursprünglichen Definition)**:**
  Ein Soliton kann eine Kante (zu einem inneren Knoten) nur dann passieren, wenn es eine Folge-Kante mit verschiedenem Gewicht gibt.

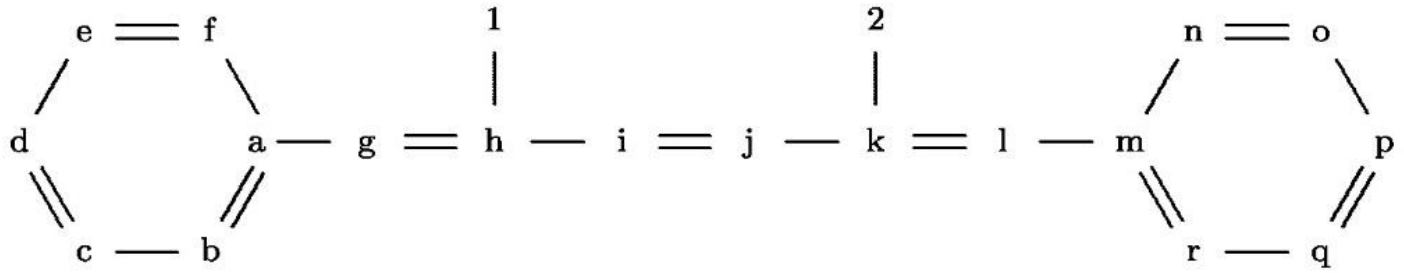
- **“Vergangenheitsbedingung”:**
  Ein Soliton kann eine Kante (von einem inneren Knoten) nur dann passieren, wenn es direkt zuvor eine Kante mit verschiedenem Gewicht passiert hat.

- Die Bedingungen sind im Einwellen-Fall äquivalent, aber nicht hier.



Beobachtungen

- Die „**Vergangenheitsbedingung**“ scheint für den Fall mit mehreren Wellen besser zu passen.
- **Undurchlässige Pfade** können durchlässig werden, z.B., **h, i, j, k** in



- **Nichtdeterminismus** kann durch das Vorhandensein mehrerer Solitone verursacht werden.

Konfiguration

Eine Konfiguration eines Graphen $G=(N,E,w)$ mit m Solitonen ist eine Abbildung

$$\{1,2,\ldots,m\} \longrightarrow N \cup \mathbb{N}_0$$

Wenn schon in G: seine Position an einem Knoten

Wenn noch nicht in G: Anzahl der Zeiteinheiten bis zu seinem Eintritt oder 0 wenn es G bereits verlassen hat

Transitionen und Resultat

- Transition von Konfigurationen in Nachfolger-Konfigurationen durch totale Solitonpfade
- **Anfangskonfiguration**: Repräsentation eines Burst
- **Endkonfiguration:** alle Werte der Konfiguration sind 0
- Sei *G ein S*olitongraph und *b* ein Burst.
  Result(*G*,*b*) = {*G*‘ | *b* kann *G* in *G*‘ durch Transitionen überführen und erreicht eine Endkonfiguration}
- **Satz:** Jeder Graph in Result(*G*,*b*) ist ein Solitongraph.

Modellkonsistenz

Satz: Seien G ein Solitongraph, n und n' externe Knoten von G und $b = (n,n')\perp$.

Dann gilt

$$\text{Result}(G,b) = S(G,n,n')$$

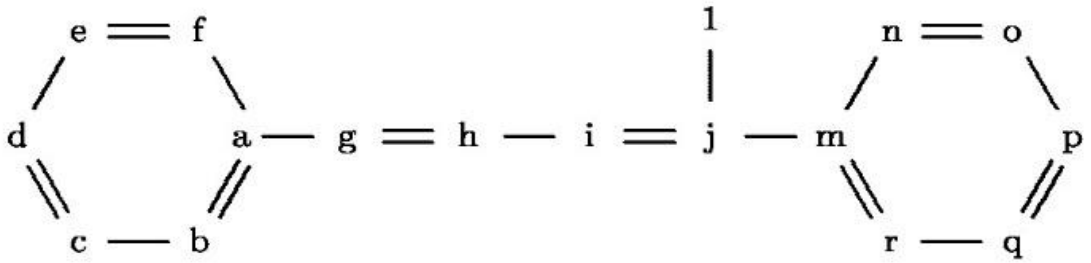
mit genau derselben Folge von „Zwischengraphen“.

Modellerweiterung

Satz: Es gibt einen Solitongraphen G mit

$$\text{Result}(G,b_1) \neq \text{Result}(G,b_2),$$

wobei b_1 und b_2 Bursts mit ein bzw. zwei Solitonen sind.



- mit b_1: zwei Zustände
- mit b_2: vier Zustände

Referenzen

[C82] F. L. Carter: Conformational switching at the molecular level. In F. L. Carter (ed.): *Molecular Electronic Devices*. 51–71, Marcel Dekker, New York, 1982

[DJ90] J. Dassow, H. Jürgensen: Soliton automata. *J. Comput. System Sci.* 40 (1990), 158–181

[BJR14] H. Bordihn, H. Jürgensen, H. Ritter: Soliton automata with multiple waves. In C.S. Calude, R. Freivalds, I. Kazuo (eds.): *Computing with New Resources*. LNCS 8808, 32—48, Springer-Verlag, 2014.

[BJR16] H. Bordihn, H. Jürgensen: Multi-wave soliton automata. *J. Autom. Lang. Comb.*, akzeptiert 2021.