

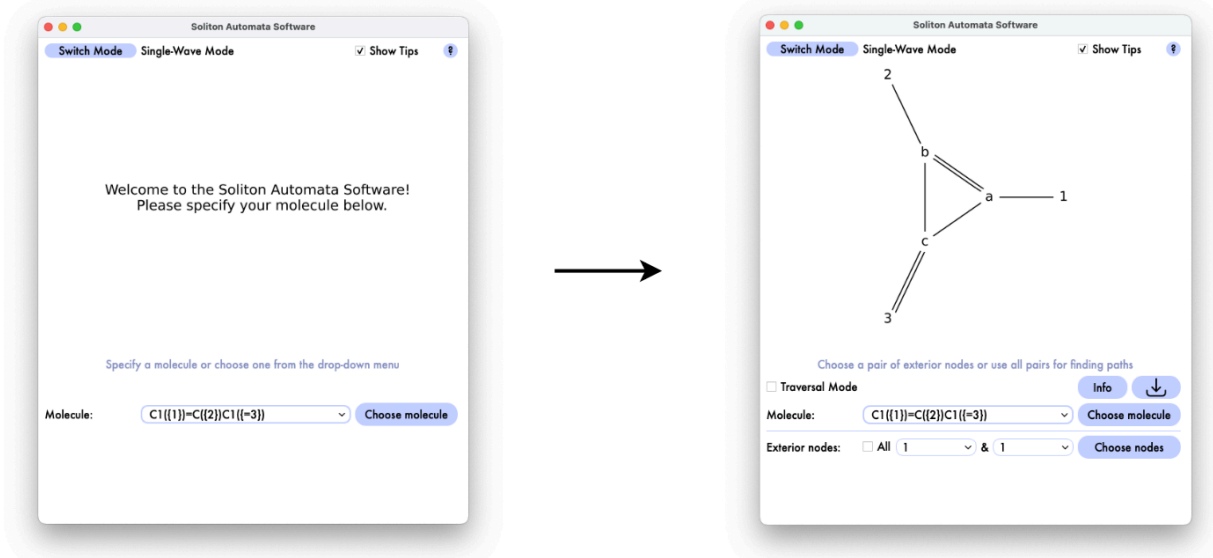
Handbuch - Soliton Automata Software

Mithilfe der Soliton Automata Software lassen sich Einwellen- und Mehrwellen-Soliton-Automaten erzeugen und ihre Eigenschaften untersuchen. Außerdem zeigt sie Visualisierungen des Soliton-Graphs und Animationen der Soliton-Pfade/ totalen legalen Konfigurationsfolgen eines Automaten. Unter <https://github.com/schulz-helena/soliton-implementation> befindet sich das Repository zur Software.

Bedienungsanleitung: Einwellen-Modus:

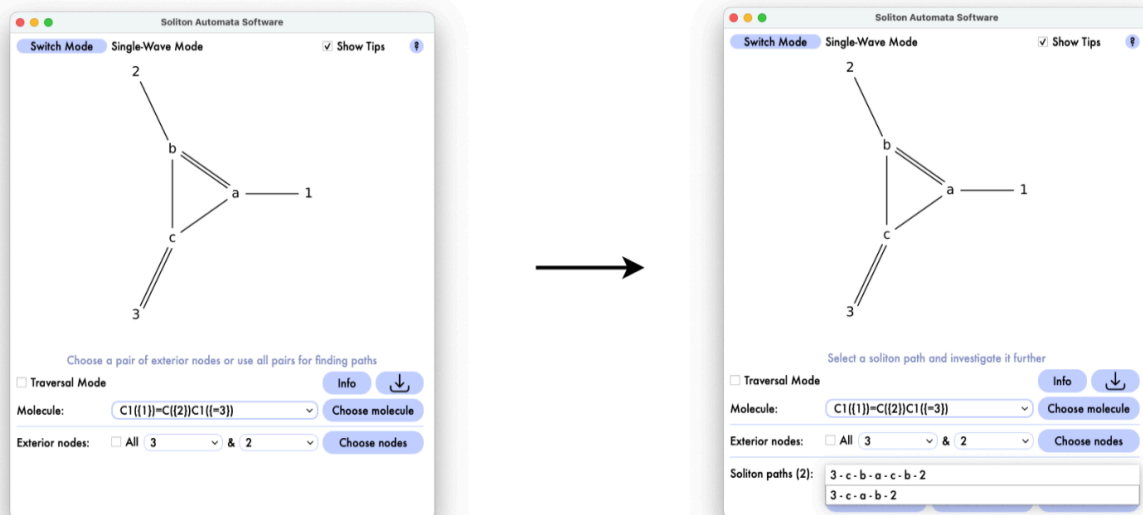
Standardmäßig öffnet sich die Applikation im Einwellen-Modus. Mit "Switch Mode" kann zum Mehrwellen-Modus gewechselt werden. In der oberen rechten Ecke des Fensters befinden sich außerdem die Checkbox "Show Tips" und der "?"-Button. Ist "Show-Tips" aktiviert, so werden kurze Tipps angezeigt, die den nächsten Eingabeschritt beschreiben. Mit "?" lässt sich eine ausführlichere Beschreibung dieses Eingabeschritts ausgeben.

Nach dem Starten der Software ist zunächst im verfügbaren Eingabefeld das Molekül anzugeben, welches in einen Soliton-Graphen umgewandelt und als Basis für den Einwellen-Soliton-Automaten verwendet werden soll. Die Spezifizierung eines Moleküls folgt einer bestimmten Syntax (siehe Abschnitt „Input-Syntax, Spezifizierung eines Moleküls“). Alternativ lässt sich mit der Pfeilspitze auf der rechten Seite des Eingabefelds ein Drop-Down Menü öffnen, das alle bereits verwendeten Moleküle enthält und es ermöglicht, eines dieser Moleküle auszuwählen. Mit „Choose molecule“ kann die Eingabe bestätigt werden. Sollte die Eingabe syntaktisch nicht korrekt sein, wird eine entsprechende Fehlermeldung angezeigt und eine Kurzversion der Erklärung der Syntax kann ausgeklappt werden. Ansonsten wird nun im oberen Bereich der Benutzeroberfläche der entsprechende Graph angezeigt. In der Visualisierung sind innere Knoten als Buchstaben und externe Knoten als Zahlen gekennzeichnet. Repräsentiert die Eingabe keinen validen Soliton-Graphen, wird eine Fehlermeldung angezeigt. In diesem Fall ist es möglich, sich alle Gründe für die Invalidität anzeigen zu lassen. Ist der Soliton-Graph valide, so wird ein auf ihm basierender Soliton-Automat erzeugt. Die Software befindet sich von nun an immer in einem Zustand des Automaten. Der Anfangszustand ist der spezifizierte Soliton-Graph. In einem späteren Abschnitt folgt eine Erklärung dazu, wie der Zustand gewechselt werden kann. Nun kann der Graph mit dem Speicher-Button als PNG-, JPG- oder JPEG-Datei gespeichert werden. Ein Click auf den Button "Info" öffnet ein Fenster mit Informationen zum erzeugten Soliton-Automaten. Hier lässt sich einsehen, ob der Automat deterministisch, stark deterministisch und erreichbarkeits-deterministisch ist, welches der Grad des Nicht-Determinismus ist und welche undurchlässigen Pfade es gibt.

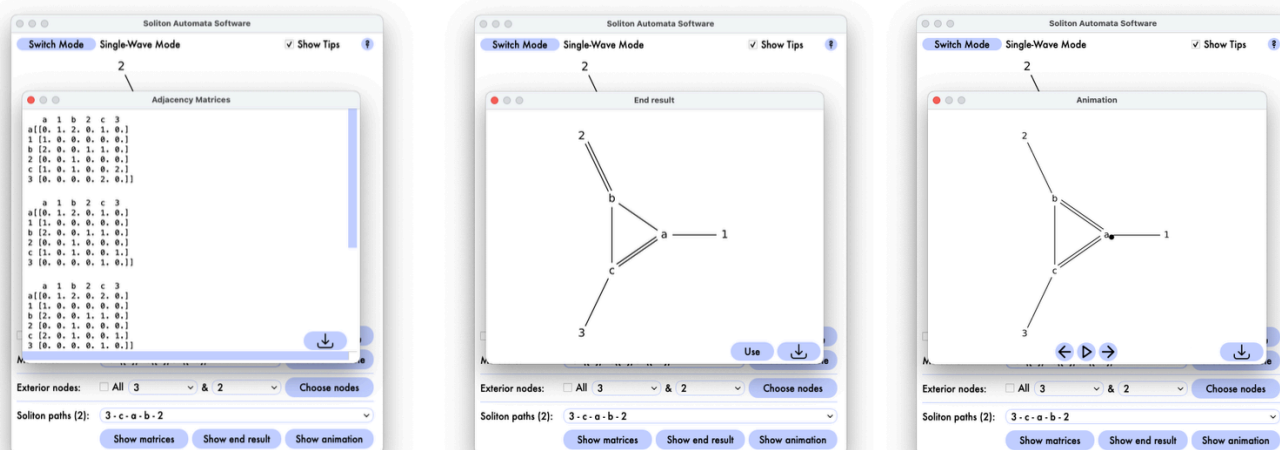


Nun lässt sich spezifizieren, welche Soliton-Pfade angezeigt werden sollen. Es können aus allen externen Knoten des Soliton-Graphs zwei externe Knoten ausgewählt werden. Im ersten

ausgewählten Knoten betritt das Soliton den Soliton-Graphen und im zweiten verlässt es ihn wieder. Alternativ können mit dem Anwählen von „All“ automatisch alle Paare von externen Knoten verwendet werden. Ist diese Eingabe mit dem „Choose nodes“-Button direkt hinter der Knotenauswahl bestätigt worden, werden alle möglichen Soliton-Pfade zwischen den beiden externen Knoten, beziehungsweise zwischen allen Knotenpaaren, ausgegeben. Gibt es zwischen den gewählten Knoten keine Soliton-Pfade, so erscheint eine entsprechende Warnung.

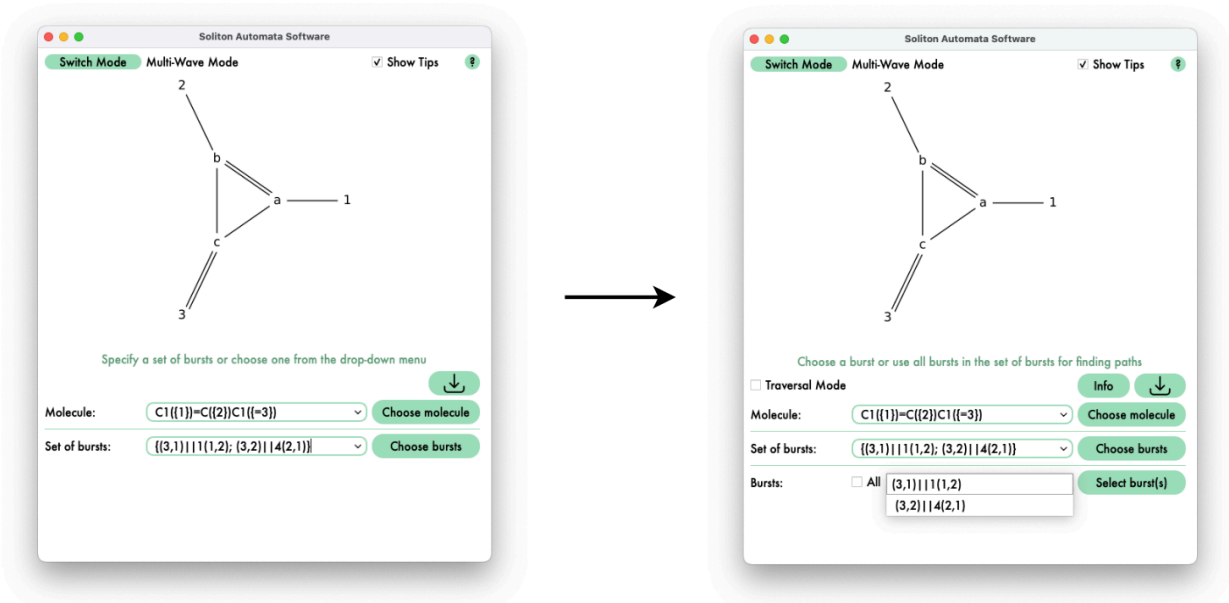


Ansonsten kann nun einer der berechneten Pfade, dargestellt als eine Abfolge von Knotenbezeichnungen, ausgewählt werden. Mit „Show matrices“ öffnet sich ein Fenster mit den Adjazenzmatrizen des Soliton-Graphs zu jedem Zeitpunkt des Durchlaufens des Soliton-Pfades. Mit dem Speicher-Button kann ein Textdokument heruntergeladen werden, was diese Adjazenzmatrizen, das spezifizierte Molekül und den ausgewählten Soliton-Pfad enthält. „Show end result“ öffnet ein Fenster, in dem der resultierende Soliton-Graph (nachdem das Soliton den Pfad durchlaufen hat) angezeigt wird. Auch diese Visualisierung ist herunterladbar. Außerdem kann der resultierende Soliton-Graph, welcher ein weiterer Zustand des Automaten ist, durch das Verwenden des Buttons „Use“ als neuer aktueller Zustand übernommen werden. Dadurch schaltet die Software in den „Traversal Mode“, in dem sich das Original-Molekül nicht mehr editieren lässt. Nun können alle Soliton-Pfade, die in diesem neuen Zustand gefunden werden können, ausgegeben werden. Diese Funktionalität erlaubt ein schrittweises „Traversieren“ des gesamten Soliton-Automaten. Bleiben wir bei dem vorherigen Zustand, so gibt es noch einen dritten Button in der unteren Reihe des Interfaces. Dieser Button, „Show Animation“, öffnet ein Fenster, welches eine Animation zeigt, in dem das Soliton den ausgewählten Pfad durchläuft. Diese kann entweder schrittweise per Button-Click vorwärts oder rückwärts durchgeschaltet werden oder als fortlaufende Animation abgespielt werden. In diesem Fenster gibt es die Möglichkeit, die Animation als GIF abzuspeichern.

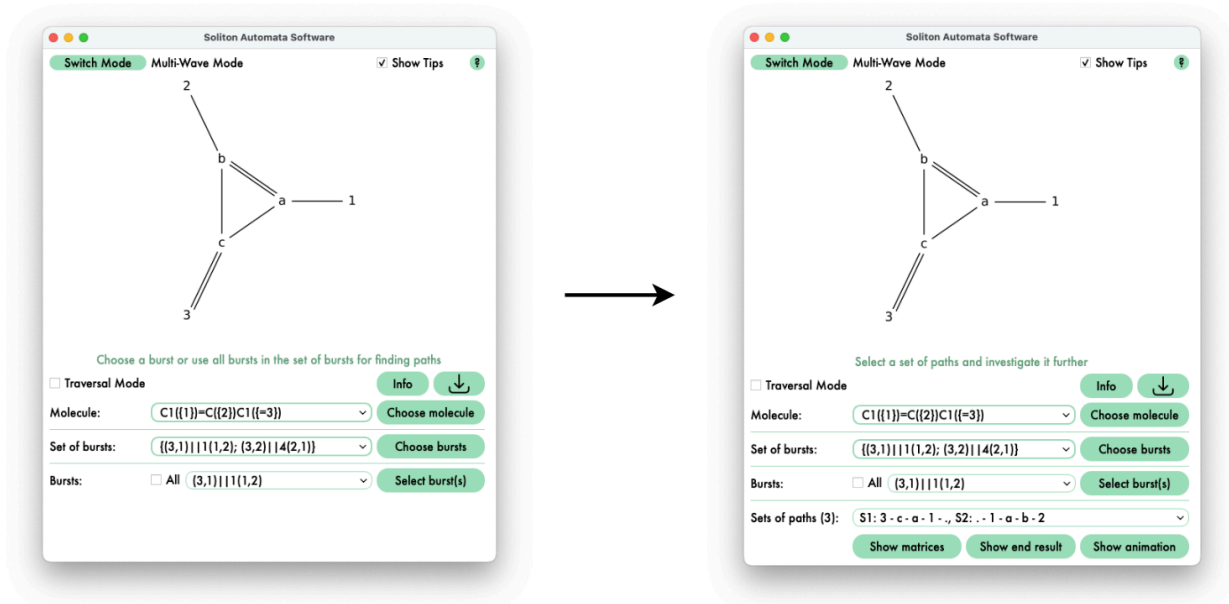


Mehrwellen-Modus:

Die Molekül-Eingabe gleicht der Eingabe im Einwellen-Modus. Ist ein gültiger Soliton-Graph erzeugt worden, erfolgt im Mehrwellen-Modus allerdings ein anderer Schritt. Ein Mehrwellen-Soliton-Automat benötigt zur Erzeugung neben einem Graphen auch eine Menge von Bursts. Diese soll im nun erschienenen Eingabefeld spezifiziert werden (wie im Abschnitt „Input-Syntax, Spezifizierung einer Menge von Bursts“). Ähnlich wie bei der Molekül-Eingabe werden die bereits für den aktuellen Soliton-Graphen verwendeten Burstmengen gespeichert und in einem Drop-Down Menü zur Auswahl bereitgestellt. Bestätigt wird die Eingabe dann mit “Choose bursts”. Ist die verwendete Syntax falsch, so wird eine entsprechende Fehlermeldung, inklusive einer ausklappbaren Erklärung der Syntax, ausgegeben. Ist sie korrekt, wird nun ein Mehrwellen-Soliton-Automat erzeugt.



In diesem Fall erscheint der bereits aus dem Einwellen-Modus bekannte “Info”-Button. Ebenfalls ähnlich ist der nächste Eingabeschritt, der bestimmt, welche totalen legalen Konfigurationsfolgen ausgegeben werden soll. Es können entweder alle Burst oder ein einzelner Burst der Burstmenge ausgewählt werden und mit “Select burst(s)” bestätigt werden. Gibt es für den gewählten Burst keine totale legale Konfigurationsfolge, so erscheint eine entsprechende Warnung.



Ansonsten werden anschließend die gefundenen Konfigurationsfolgen zur Auswahl bereitgestellt. Eine Konfigurationsfolge wird als eine Liste von Pfaden dargestellt. Die ID am Anfang des Pfades markiert die Zugehörigkeit zu einem Soliton ("S1" für Soliton 1, usw.). Ein "." in einem Pfad bedeutet, dass das Soliton sich zu diesem Zeitschritt nicht im Graphen befindet. Eine Knotenbezeichnung bedeutet, genau wie im Einwellen-Fall, dass sich das Soliton zu diesem Zeitschritt an diesem Knoten befindet. Für eine ausgewählte Konfigurationsfolge stehen die aus dem Einwellen-Modus bekannten Buttons mit den gleichen Funktionalitäten zur Verfügung.

Input-Syntax:

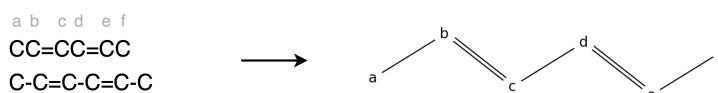
Spezifizierung eines Moleküls:

Die Input-Syntax basiert auf dem Simplified Molecular Input Line Entry Specification (SMILES) Strukturcode, mit dem Moleküle als Strings dargestellt werden können. Diese SMILES-Repräsentation wird um eine Regel zum Spezifizieren von externen Knoten erweitert.

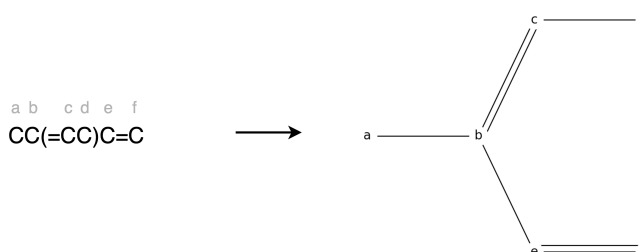
Kohlenstoffatome werden als C dargestellt.



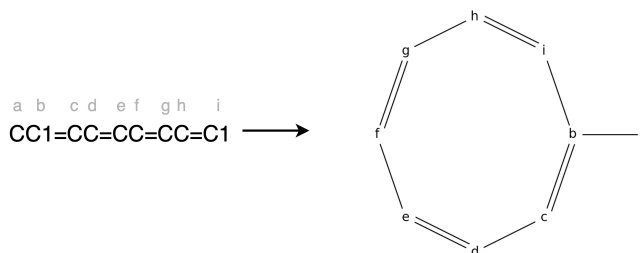
Einfachbindungen werden durch ein - oder gar kein Zeichen markiert (C-C entspricht CC). Doppelbindungen werden durch ein = markiert.



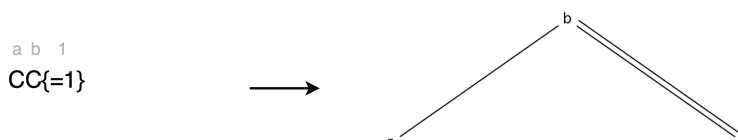
Gibt es eine Abzweigung, also führen aus einem Atom insgesamt drei Bindungen heraus, so muss diese Abzweigung (eine der Bindungen und alle ihr nachfolgenden Atome und Bindungen) in runde Klammern geschrieben werden. Die andere Bindung und alle ihr nachfolgenden Atome und Bindungen folgen nach den runden Klammern.



Bei einem Ring werden die Atome an der Stelle, an der der Ring geschlossen wird, mit der gleichen Nummer markiert (z.B. C1 und C1). Zwischen diesen beiden Atomen wird eine Einfachbindung gezogen.

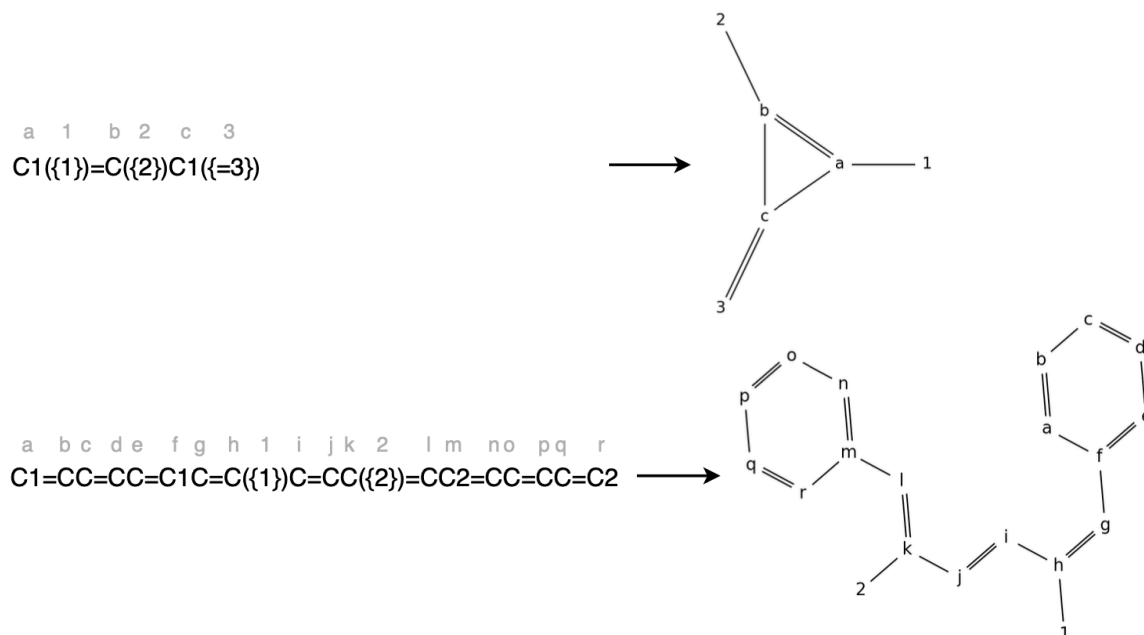


Externe Knoten werden als eine Bindung und eine Zahl in einer geschweiften Klammer dargestellt.



Wichtig bei der Benutzung von Klammern ($()$ bei einer Abzweigung oder $\{\}$ bei einem externen Knoten) ist, dass die Bindung zwischen dem Atom vor der öffnenden Klammer und dem Atom hinter der öffnenden Klammer immer in die Klammer geschrieben wird (z.B. $C(=C)$ statt $C=(C)$).

Beispiele für Soliton-Graphen:



Spezifizierung einer Menge von Bursts:

Für jedes Soliton müssen der Eintrittszeitpunkt und die beiden externen Knoten angegeben werden, über die das Soliton den Soliton-Graphen betreten beziehungsweise verlassen soll. Die Angaben für die einzelnen Soliton werden durch das Zeichen “||” getrennt. Direkt hinter dem Trennzeichen muss eine Zahl erfolgen, die angibt, wie viele Zeitschritte dieses Soliton nach Betreten des vorherigen Soliton warten muss. Das erste Soliton benötigt keine solche Angabe und erhält immer einen Eintrittszeitpunkt von 0. Danach werden der Start- und Endknoten als Paar angegeben. Um eine Menge von Bursts anzugeben, müssen die einzelnen Bursts mit Semikola getrennt in geschweifte Klammern geschrieben werden.

Beispiel:

Burst 1	Burst 2		Burst 1			Burst 2			
{(3,1) 1(2,1);(3,2) 4(2,1) 0(1,1)}			Soliton	1	2	Soliton	1	2	3
			Eintrittszeitpunkt	0	1	Eintrittszeitpunkt	0	4	4
			Startknoten	3	2	Startknoten	3	2	1
			Endknoten	1	1	Endknoten	2	1	1

Installation und Starten der Software:

Um die Software benutzen zu können, wird Python benötigt. Auf dem Zielrechner, bzw. der Zielumgebung sollte Python 3.9 oder höher installiert sein. Auch der Python Package Installer pip und Git werden benötigt. Sind diese Voraussetzungen erfüllt, kann die Soliton Automata Software folgendermaßen mittels pip von GitHub heruntergeladen werden:

Mit dem Kommandozeilenbefehl

```
pip install git+https://github.com/schulz-helena/soliton-implementation
```

wird die Software als Python Package heruntergeladen.

Nun kann sie mittels
solitons
gestartet werden.