

8-7-2020

## Research of Diffusion-based Molecular Oscillation and Synchronization in Nanonetworks

Feiyan Li

*School of Mechatronic Engineering and Automation, Shanghai University, Shanghai 200072, China;*

Lin Lin

*School of Mechatronic Engineering and Automation, Shanghai University, Shanghai 200072, China;*

Shiwei Ma

*School of Mechatronic Engineering and Automation, Shanghai University, Shanghai 200072, China;*

Follow this and additional works at: <https://dc-china-simulation.researchcommons.org/journal>



Part of the Artificial Intelligence and Robotics Commons, Computer Engineering Commons, Numerical Analysis and Scientific Computing Commons, Operations Research, Systems Engineering and Industrial Engineering Commons, and the Systems Science Commons

---

This Paper is brought to you for free and open access by Journal of System Simulation. It has been accepted for inclusion in Journal of System Simulation by an authorized editor of Journal of System Simulation.

---

## Research of Diffusion-based Molecular Oscillation and Synchronization in Nanonetworks

### Abstract

**Abstract:** Nanonetworks, the interconnection among nanomachines at nanoscale, is a novel kind of communication and information sharing interdisciplinary technology, and have huge potential prospects in the application of biomedical engineering, environmental monitoring, industrial production and military. Nanomachine is considered to be the basic functional unit, and clock period caused by oscillators is a prerequisite for nanomachines to work. *A mathematical model was developed to describe the molecular diffusion characteristics giving the oscillation period expression by theoretical deviation.* Research on oscillation and synchronization in nanonetworks is very limited so far, so the study is of great significance to the development and application of nanonetworks.

### Keywords

molecular communication, nanonetwork, oscillation and synchronization, oscillation period

### Recommended Citation

Li Feiyan, Lin Lin, Ma Shiwei. Research of Diffusion-based Molecular Oscillation and Synchronization in Nanonetworks[J]. Journal of System Simulation, 2015, 27(9): 1960-1966.

# 纳米网络中基于分子扩散的振荡同步研究

李飞燕, 林林, 马世伟

(上海大学机电工程及其自动化学院, 上海 200072)

**摘要:** 纳米网络是在纳米尺度上连接纳米机器并实现他们之间相互通信以及信息共享的一种新型跨学科的网络通信方式, 在生物医学、环境监测、工业生产和军事研究领域有着广泛的应用前景。纳米机器被认为是纳米尺度上最基本的功能设备, 由振荡器产生的时钟周期是维持纳米机器正常工作的前提。通过建立数学模型描述分子扩散, 理论推导计算出振荡周期的表达式, 分析了不同维度下分子扩散的特点。目前在该领域, 对纳米网络同步振荡的研究十分有限, 故该课题的研究对今后纳米网络的发展及应用是非常有意义的。

**关键词:** 分子通信; 纳米网络; 同步振荡; 振荡周期

中图分类号: TP391.9 文献标识码: A 文章编号: 1004-731X(2015)09-1960-07

## Research of Diffusion-based Molecular Oscillation and Synchronization in Nanonetworks

Li Feiyan, Lin Lin, Ma Shiwei

(School of Mechatronic Engineering and Automation, Shanghai University, Shanghai 200072, China)

**Abstract:** Nanonetworks, the interconnection among nanomachines at nanoscale, is a novel kind of communication and information sharing interdisciplinary technology, and have huge potential prospects in the application of biomedical engineering, environmental monitoring, industrial production and military. Nanomachine is considered to be the basic functional unit, and clock period caused by oscillators is a prerequisite for nanomachines to work. A mathematical model was developed to describe the molecular diffusion characteristics giving the oscillation period expression by theoretical deviation. Research on oscillation and synchronization in nanonetworks is very limited so far, so the study is of great significance to the development and application of nanonetworks.

**Keywords:** molecular communication; nanonetwork; oscillation and synchronization; oscillation period

## 引言

近年来, 纳米技术的发展为工程领域研究与开发纳米尺度尺寸的设备提供了有力的工具。由纳米尺度尺寸的组件组成、整体尺寸在纳米尺度或微米尺度范围内, 能够执行计算、数据存储、感知和驱动等任务的设备称为纳米机器。由于个体纳米机器

仅能在有限的空间范围内执行非常简单的任务, 因此为了能够在更大的范围上完成更复杂的任务, 需要纳米机器之间通过信息共享, 以合作的方式组成分布式的纳米网络<sup>[1]</sup>。纳米网络是在纳米等级上连接纳米机器并实现他们之间互相通信、信息共享的一种新型的跨学科的网络通信方式, 在生物医学、环境监测、工业生产和军事研究领域有着广泛的前景, 纳米网络技术的发展将奠定未来研究与开发纳米尺度互联网和纳米物联网的基础<sup>[2]</sup>。

目前, 纳米通信主要是 2 种方式, 即纳米电磁通信(基于新型纳米材料的辐射信息发射和接收)



收稿日期: 2015-06-15 修回日期: 2015-07-30;  
基金项目: 教育部留学回国人员科研启动资金(37010914202);  
李飞燕(1991-), 女, 山东青岛, 硕士生, 研究方向为纳米传感网络; 林林(1982-), 男, 辽宁抚顺, 硕导, 研究方向为无线传感器网络、纳米传感器网络; 马世伟(1965-), 男, 甘肃嘉峪关, 博导, 研究方向为无线传感器网络、数字信号处理、模式识别与智能系统。

<http://www.china-simulation.com>

• 1960 •

和分子通信(分子尺度上的编码通信)。纳米电磁通信是由纳米材料产生的电磁信号从发送端传输到接收端的通信技术。其中, 纳米材料通过给定的输入信号决定了电磁通信的带宽、传输的时间延迟、幅值等。目前, 比较常见的电磁纳米元件有纳米电池、纳米芯片、纳米级逻辑电路和纳米天线等。分子通信是将生物化学分子作为信息载体从发送端发送到信道中, 经过扩散作用到达接收端的通信技术。分子发送端(纳米机器)产生特定的信息分子作为信息指令释放到发送端的感受器, 执行一系列的信息发送指令命令。释放的分子在信道中介质通过主动或被动传输到达分子接受端(纳米机器)。

传统的通信技术(例如电磁波或声波)由于受到收发器体积和能耗等因素的制约而无法直接应用于纳米机器<sup>[3]</sup>, 而自然界中目前存在着各种数量巨大的“生物纳米机器”(例如细胞), 它们能够通过传输分子的方式实现信息交换, 合作地组成稳定高效的生物纳米网络, 这为工程领域设计和开发纳米机器与纳米网络提供了参考模型, 其中细菌的群体效应就是有效的参考方向。分子通信与传统通信方式存在许多差异, 如信息载体、信号类型、传输介质、噪声源、传输速度和传输距离, 还具有随机性、信息承载量大、生物兼容性和高性能。基于生物分子扩散的启示, 组成具有高效协作能力的生物纳米机器, 进而生成纳米网络。适用于许多特定的环境比如人体内, 传统通信与分子通信方式的对比如表 1 所示<sup>[3]</sup>。

表 1 分子通信与传统通信技术的特性对比

通信特性	分子通信	传统通信
信息载体	分子	电磁波或声波
信号类型	化学信号	电磁或声信号
传输介质	液体或气体	空间或线缆
噪声源	介质中的粒子或化学反应	电磁场或其他信号
信息内容	化学状态或数学信息	文本视频或音频
通信能耗	低	高

群体效应是近来得到广泛关注与应用的一种细菌行为调控机制。很多细菌能自发产生并释放一

些特定的信号分子, 即自诱导剂分子, 通过感知其浓度变化来调节菌体的群体行为。这一感应现象只有在细菌密度达到一定阈值后才会发生, 故该现象称为细胞密度依赖的基因表达。不同类型的细菌具有不同的群体效应调节系统, 很多细菌通过分泌同一种自诱导剂来调控不同细菌间的行为。例如, 费氏弧菌是最早发现并进行群体效应系统研究的革兰阴性菌, 虽然每种革兰阴性菌所产生的群体感应机制不同, 但其调控蛋白具有高度同源性, 目前研究的大多数革兰阴性菌都存在与之相同的群体效应系统<sup>[4]</sup>。作为革兰阴性菌特有的自诱导剂, 即 AHL, 可自由出入于细胞内外, 随着细菌密度的增加, 当细胞外部环境中的 AHL 集聚到一定程度阈值时, 可与细胞质中的作为受体的 LuxR 蛋白的氨基残端结合, 激活所调控的基因表达。

纳米机器被认为是纳米尺度上最基本的功能单位<sup>[5]</sup>, 由振荡器产生的时钟周期是维持纳米机器正常工作的前提, 本文主要通过基于分子扩散的通信技术来同步纳米机器, 纳米机器周期性增加或减少分子会导致分子浓度随时间振荡。在本文中的振荡器模型中, 假设分子释放一次使得峰值浓度增加, 分子由于扩散到环境中而减少, 当分子的浓度降低到一个特定阈值  $T$  时, 纳米机器释放下一个的分子脉冲<sup>[6]</sup>。在对纳米网络中基于分子扩散的振荡器设计的研究中, 通过建立数学模型描述分子扩散特征, 理论推导计算出振荡周期的表达式。

## 1 基于群体效应系统模型

群体感应现象在细菌中无处不在, 在菌群生长过程中, 细菌不断产生一些化学信号分子, 并分泌到周围环境中, 通过感应这些信号分子的浓度, 监测周围细菌的数量。当种群密度达到一定阈值时, 细菌在群体范围内调控一些相关基因的表达, 如抗生素产生的调控、生物发光、固氮基因调控、Ti 质粒的接合转移、毒性基因的表达、色素产生、细菌的群游和生物膜的形成等, 称细菌之间的这种“语言”为群体感应<sup>[7]</sup>。

## 1.1 扩散过程

在本部分中,我们建立了一个物理模型来解释纳米网络中分子的扩散过程,分子扩散适用于分子发送过程和接收过程。在分子通信系统中,有两个组件:纳米机器发射机(TN)和纳米机器接收机(RN)。假设有多个纳米机器,每个纳米机器可以控制分子的释放并检测不同位置的分子浓度。为了简化模型,我们假设每个纳米机器可以检测到自己释放的分子,并将纳米机器看成空间中的一个点,每个纳米机器检测到的分子浓度是这个点处分子的浓度<sup>[8]</sup>。每个纳米机器释放的分子做布朗运动<sup>[9]</sup>,因为每个分子都独立运动,分子扩散可以依据菲克扩散定律来建立模型<sup>[10]</sup>。我们假设自诱导剂分子的浓度远远低于液体分子的浓度,所以自诱导剂分子之间的相互碰撞可以忽略。如果空间中同时存在多个纳米机器,那么每个纳米机器检测到的分子浓度为所有纳米机器释放的分子在该点的浓度叠加之和<sup>[11]</sup>。

## 1.2 群体效应模型

假设空间无限大,纳米机器每次释放的分子个数为  $Q$ ,  $C(r,t)$  描述了与释放点位置距离为  $r$ 、时间为  $t$  时的分子浓度,其中  $D$  表示扩散系数,仅与流体介质有关, $d$  代表空间维度。公式 1 描述了分子浓度与时间的关系<sup>[12]</sup>:

$$C(r,t) = \frac{Q}{(4\pi Dt)^{d/2}} e^{-\frac{r^2}{4Dt}} \quad (1)$$

对于释放分子的节点本身,其探测到的自己释放的分子浓度为:

$$C(r,t) = \frac{Q}{(4\pi Dt)^{d/2}} \quad (2)$$

由于每次释放的分子浓度在扩散中随时间和距离的增大而减少,且纳米机器检测到的分子浓度为不同时刻释放的分子残余浓度的叠加之和,因此,某时刻空间的分子浓度应为:

$$C(r,t) = \sum_{i=1}^k C(r_i, t - t_i) \quad (3)$$

其中:  $k$  为空间中节点总数;  $r_i$  为任一节点到参考节点的距离;  $t_i$  为时间延迟。

若分子浓度高于设定的阈值,纳米机器不释放分子,由于扩散,分子浓度将随时间逐渐减小。一旦纳米机器检测到的分子浓度小于设定的阈值时,纳米机器将重新释放分子脉冲。

本文模型所用算法如表 2 所示。

表 2 模型算法

算法 1 群体效应中分子扩散算法

- (a) 在仿真空间中设置  $k$  个纳米机器,记录任意两个纳米机器之间的距离。
- (b) 所有纳米机器在相应时间释放自诱导剂分子,并且一直处于感知分子浓度的状态。
- (c) 一旦任一个纳米机器所感知到的自诱导剂分子浓度小于或等于激活阈值,那么这个纳米机器将释放下一个分子脉冲。

因此,振荡周期与分子浓度有密切关系,根据 MATLAB 对单个纳米机器在三维空间所释放的分子浓度曲线变化可知,单个节点在三维空间振荡周期恒定,故可利用分子浓度确定振荡器的周期<sup>[10]</sup>。

## 1.3 对三维空间任一点振荡周期与浓度的关系的理论分析与推导

设第  $i$  次释放的分子在  $r$  处的浓度为  $C_i$ ,第  $i+1$  次释放的分子在  $r$  处的浓度为  $C_{i+1}$ 。若满足  $C_{i+1}=C_i$  可理解为第  $i$  次释放时刻的节点所处空间的分子浓度与第  $i+1$  时刻节点所处空间的分子浓度相同,则释放间隔周期也应相同,即振荡周期同步。

分析:

1.若  $C_{i+1}>C_i$ ,即随着时间的增加,该节点所处空间分子浓度逐渐增加到无限值,振荡周期逐渐减小,最后分子浓度为达到设定阈值,此为与客观理论相违背,故假设错误。

2.若  $C_{i+1}=C_i$ ,即随着时间的推移,节点所处空间的分子浓度趋于平衡状态,释放分子时间间隔完全相同,及振荡周期相同。

3.若  $C_{i+1}<C_i$ ,即随着时间的增加,节点所处空间分子浓度逐渐减少到 0,振荡周期逐渐增加,最

后分子浓度为趋于 0, 振荡失效, 此为与客观理论相违背, 故假设错误。

综上所述: 基于纳米网络中的纳米机器能维持长久有效的运行, 故振荡周期不会随时间的推移而逐渐的增大或减小, 因此, 三维空间中振荡周期应为恒定。

## 2 稳态周期的计算

### 2.1 单节点分子振荡稳态周期的计算

假设空间中仅有一个节点, 第  $i$  次释放的分子脉冲相对应的周期为  $\lambda_i$ ,  $t_1$  是到最近一个脉冲释放瞬间的时间差, 一共有  $u$  个脉冲,  $d$  代表空间维度。则这个点处分子浓度公式可以表示为<sup>[13]</sup>:

$$C(r, t) = C(0, t) + \sum_{i=1}^{u-1} \lambda_i \quad (4)$$

当分子振荡稳定时,

$$T = C(0, \sum_{i=1}^u \lambda_i) = \frac{Q}{(4D\pi \sum_{i=1}^u \lambda_i)^{d/2}} = \frac{Q}{(4D\pi \sum_{i=1}^u \lambda)^{d/2}}$$

若时间趋于无穷,

$$\lambda = \frac{1}{4\pi D} \left( \frac{Q}{T} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i^{d/2}} \right)^{2/d} \quad (5)$$

当且仅当  $d=3$  时,  $\sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i^{3/2}} = 2.612$ , 周期  $\lambda$  为常数。

当阈值  $T$  分别取 10/20 和 80 时, 得到的周期分别为 1.2921, 0.8140 和 0.3233。

### 2.2 多节点分子振荡稳态周期的计算

假设空间内的节点数为  $k$ ,  $j$  表示节点, 任选一点  $X$  为参考节点, 各节点与参考节点的相位差分别为  $\theta_j$ 。每个节点释放的分子脉冲个数为  $u$ , 最近一个分子脉冲传输的时间为  $t$ 。  $r_j$  为第  $j$  个节点到参考节点的距离。振荡周期随着仿真时间的变化而变化, 假设振荡周期最终会趋于定值  $\lambda$ , 那么当时间无穷时, 大小不为  $\lambda$  的周期将被弱化。在误差允许范围内, 这里可以把所有周期设为  $\lambda$ 。则当时间无穷大时的参考节点的分子浓度<sup>[11]</sup>:

$$Cx(t) = \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^u C(r_j, (i-1)\lambda + \theta_j + t) \quad (6)$$

当时间趋于无穷时,

$$T = \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^{\infty} C(r_j, (i-1)\lambda + \theta_j) \quad (7)$$

若各节点同时释放分子, 则:

$$T = \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^{\infty} C(r_j, (i-1)\lambda) \quad (8)$$

## 3 分子振荡与同步的仿真结果与分析

这一节我们给出不同节点数在不同条件下的 MATLAB 仿真结果。仿真中所用参数如下: 仿真时间约 3 600 s, 步长 0.01, 扩散系数为 10, 纳米机器每次释放的分子个数为 8 000。

图 1 是在一维空间中, 单节点振荡周期随时间变化的曲线图。由图可以看出, 对于一个给定的阈值, 由于残余分子的影响, 振荡周期缓慢增大, 但是不会有极限值。对于不同的阈值, 振荡周期随着阈值的增大而减小, 这是因为分子稀释到较大的阈值所花费的时间比稀释到较小的阈值所花费的时间少<sup>[14]</sup>。

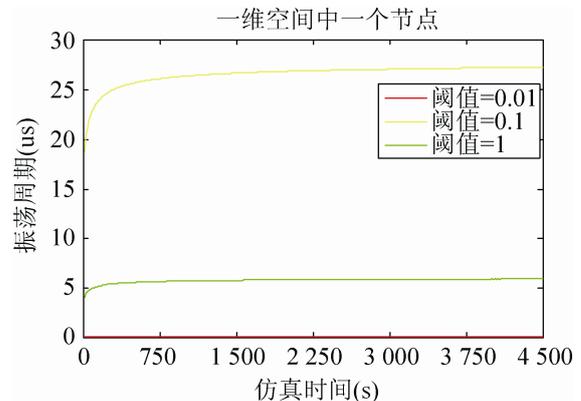


图 1 一维空间中一个节点周期变化

图 2 是在二维空间中, 单节点振荡周期随时间变化的曲线图。相比于图 1, 二维空间中分子的振荡周期也是逐渐增大, 但是变化较快。振荡周期随着阈值的增大而减小, 原因同上。

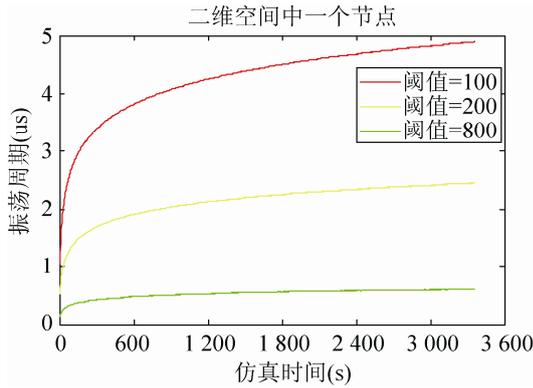


图2 二维空间中一个节点周期变化

图3是三维空间中,单节点振荡周期在不同阈值下随时间变化的曲线图。当时间趋于无穷大时,不同阈值下的周期都将趋于某一定值。如图所示,若阈值T分别取值10,20和80,仿真结果显示周期分别为1.2800,0.8100和0.3200,近似于2.1节经计算得到的1.2921,0.8140和0.3233。

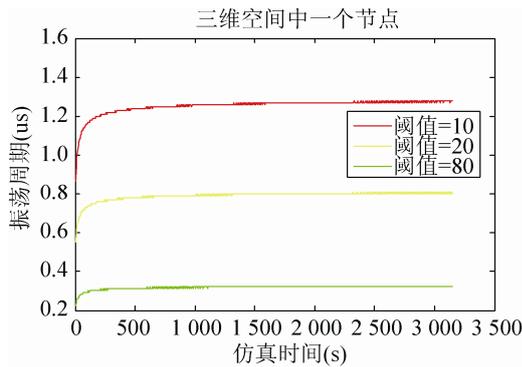


图3 三维空间中一个节点周期变化

图4是一维空间中,两节点同时释放分子的周期变化图。由图可知,两节点的周期由缓慢增大到以一定速率增长,说明两节点对对方的影响变大。

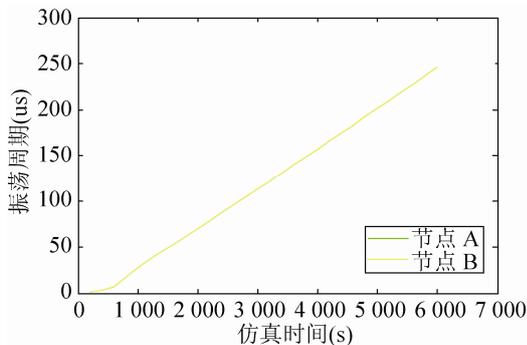


图4 一维空间中两个节点无时延振荡周期变化

图5是一维空间中,B节点比A节点延时200s释放分子的周期变化曲线,节点间互相影响较大。

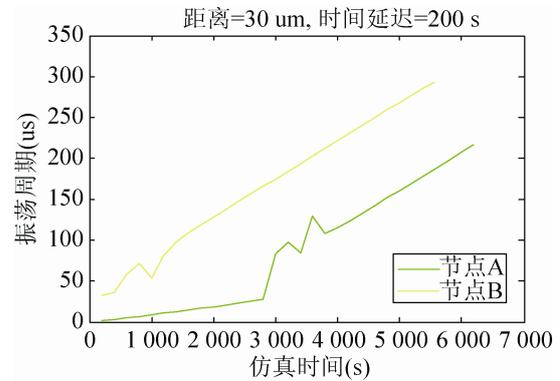


图5 一维空间中近距有时延两个节点周期变化

图6是一维空间中两节点的浓度差的变化图。释放分子早的节点的振荡周期相对偏小,说明分子浓度变化速率快。可以看出,随着时间的推移两节点间的相位差越来越大,但是最终不会同相位。

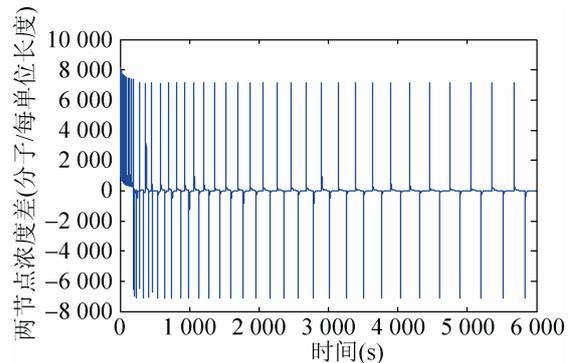


图6 一维空间中两个节点浓度变化

图7~9是二维空间中两个节点在不同距离、不同延迟时周期变化。

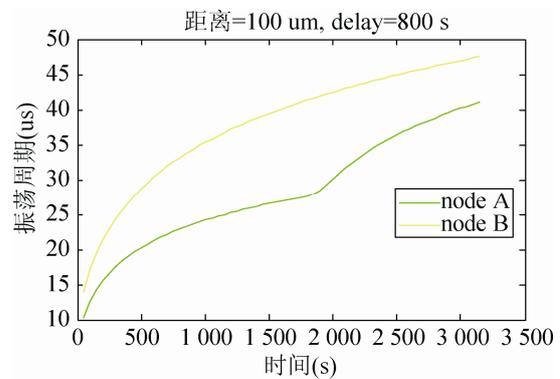


图7 二维空间中两个节点周期变化

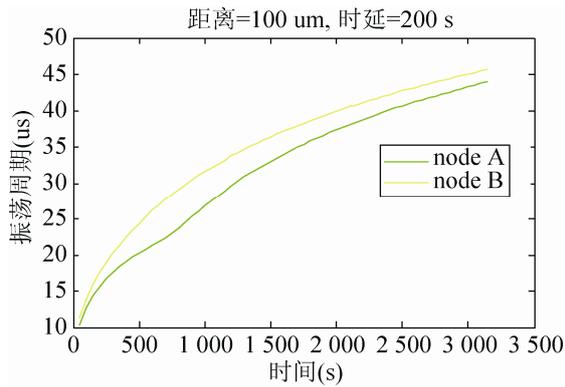


图 8 二维空间中两个节点周期变化

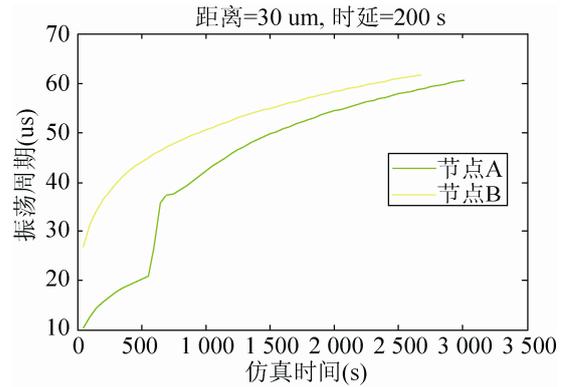


图 9 二维空间中两节点周期变化

图 7~8 说明当节点距离一定时间延迟不同时, B 节点振荡周期缓慢平稳增大, A 节点周期增速由小变大, 这与 B 节点开始释放分子对产生影响有关。

图 8~9 说明当时间延迟一定节点间距不同时, 距离越大, 两节点周期曲线越接近, 说明节点对对方的影响变小。

图 10~12 是三维空间中节点在不同距离、不同延迟条件下的周期变化曲线。与一维、二维空间不同的是, 三维空间节点振荡周期受距离、时延的影响相对较小, 曲线变化趋势一致。当时间趋于无穷时, 两个节点的周期都会趋于某一定值, 这说明三维空间的节点可以实现同步<sup>[15]</sup>。

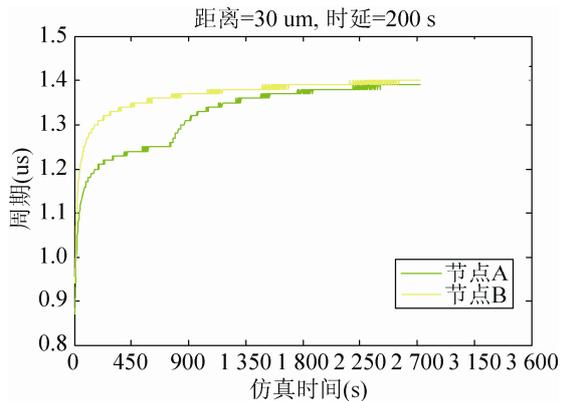


图 10 三维空间中两个节点周期变化

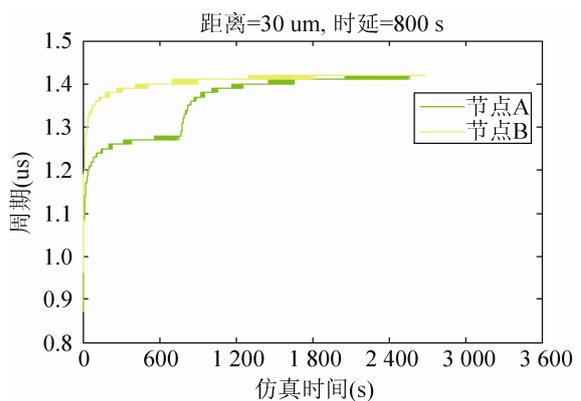


图 11 三维空间中两节点周期变化

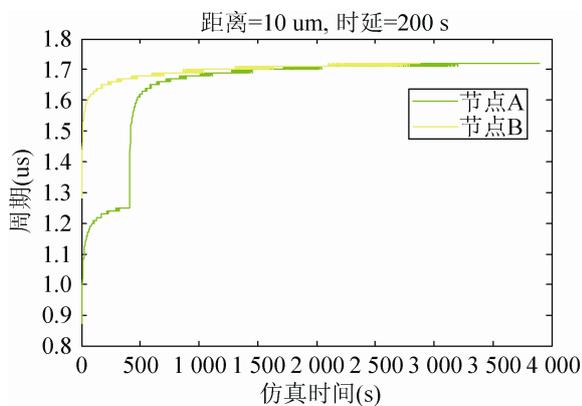


图 12 三维空间中两个节点周期变化

## 4 结论

本文描述了纳米网络中一个基于细菌群体效应的分子振荡模型。在该模型中, 纳米机器通过释放自诱导剂分子并检测其浓度来进行同步<sup>[16]</sup>。本文通过理论分析和仿真来确定分子浓度对振荡周期同步性的影响。对于单节点的情况, 一维和二维空间振荡周期随着时间的增大而持续增大, 而三维空间最终会达到稳定振荡的状态, 即振荡周期趋于一个常数; 其他条件不变的情况下, 分子振荡周期随着阈值的增大而减小。对于两个节点的情况, 两节

点的周期随着时间的增大而增大；时延不同，节点周期变化趋势大致相同。本文验证了在三维空间时，纳米网络中纳米机器释放的分子浓度是周期性变化的，因此可用来作为振荡器的时钟控制<sup>[17]</sup>。

### 参考文献：

- [1] I F Akyildiz, F Brunetti, C Blázquez. Nanonetworks: A new communication paradigm [J]. *Comput. Netw.* (S1865-0929), 2008, 52(12): 2260-2279.
- [2] S Abadal, I F Akyildiz. Bio-Inspired Synchronization for Nanocommunication Networks [C]// *Proc. IEEE GLOBECOM*, 2011. USA: IEEE, 2011: 1-5.
- [3] 黎作鹏, 张菁, 蔡绍滨, 等. 分子通信综述 [J]. *通信学报*, 2013, 34(5): 177-182.
- [4] K B Xavier, B L Bassler. LuxS quorum sensing: more than just a numbers game. [J]. *Current Opinion in Microbiology* (S1369-5274), 2003, 6(2): 191-197.
- [5] J D Dockery, J P Keener. A mathematical model for quorum sensing in *Pseudomonas aeruginosa* [J]. *Bull. Math Biol.* (S0092-8240), 2001, 63(1): 95-116.
- [6] S Abadal, I F Akyildiz. Automata modeling of Quorum Sensing for nanocommunication networks [J]. *Nano Commun. Netw.* (S1878-7789), 2011, 2(1): 74-83.
- [7] S Abadal, I Llatser, E Alarcón, *et al.* Cooperative signal amplification for molecular communication in nanonetworks [J]. *Wireless Netw.* (S1022-0038), 2014, 20(6): 1611-1626.
- [8] A F Taylor, M R Tinsley, F Wang, *et al.* Dynamical quorum sensing and synchronization in large populations of chemical oscillators. [J]. *Science* (S0036-8075), 2009, 323(10): 614-617.
- [9] D J Schwab, A Baetica, P Mehta. Dynamical quorum-sensing in oscillators coupled through an external medium [J]. *Physica D* (S0167-2789), 2012, 241(10): 1782-1788.
- [10] D McMillen, N Kopell, J Hasty, *et al.* Synchronizing genetic relaxation oscillators by intercell signaling [C]// *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 2002, 99: 679-684.
- [11] J Garcia-Ojalvo, M B Elowitz, *et al.* Modeling a synthetic multicellular clock: repressilators coupled by quorum sensing [C]// *Proc Natl Acad Sci USA*. 2004, 101: 10955-10960.
- [12] M J Moore, T Nakano. Oscillation and Synchronization of Molecular Machines by the Diffusion of Inhibitory Molecules [J]. *IEEE Trans. Nanotechnol* (S1536-125X), 2013, 12(4): 601-608.
- [13] M J Moore, T Nakano. Synchronization of Inhibitory Molecular Spike Oscillators [M]// *Bio-Inspired Models of Networks, Information, and Computing Systems: Germany: Springer*, 2012: 183-195.
- [14] I Llatser, I Pascual, N Garralda, *et al.* Exploring the Physical Channel of Diffusion-Based Molecular Communication by Simulation [C]// *Proc. IEEE GLOBECOM*, 2011. USA: IEEE, 2011: 1-5.
- [15] I Llatser, E Alarcon, M Pierobony. Diffusion-based channel characterization in molecular nanonetworks [C]// *Proc. INFOCOM WKSHPs*, 2011. USA: IEEE, 2011: 467-472.
- [16] N Garralda, I Llatser, A Cabellos-Aparicio, *et al.* Diffusion-based physical channel identification in molecular nanonetworks [J]. *Nano Commun. Netw.* (S1878-7789), 2011, 2(4): 196-204.
- [17] M Pierobon, I F Akyildiz. A physical end-to-end model for molecular communication in nanonetworks [J]. *IEEE Journal on Selected Areas in Communications* (S0733-8716), 2010, 28(4): 602-611.