

Difüzyon ile Moleküler Haberleşme Simülasyonu için Çok Alanlı Model

Ali Akkaya¹, Akif Cem Heren¹, Tuna Tuğcu¹

¹ Boğaziçi Üniversitesi, Bilgisayar Mühendisliği Bölümü, İstanbul

ali.akkaya@boun.edu.tr,

akif.heren@boun.edu.tr

tugcu@boun.edu.tr

Özet: Difüzyon ile Moleküler Haberleşme simülasyonları analitik modellerin doğrulanmasında ve analitik olarak modellenemeyen senaryoların analizinde kullanılmaktadır. Nano seviyedeki parçacıkların simülasyon ile analiz edilmesi senaryonun karmaşıklığına bağlı olarak uzun sürebilmektedir. Uzun süren simülasyon süreleri ise araştırma projelerinin başarısını etkilemektedir. Bu çalışmada simülasyon hassasiyetini koruyarak çalışma süresini büyük ölçüde azaltan çok alanlı simülasyon modeli önerilmektedir. Sonuçlar zaman adımının simülasyonun hassasiyetini ve çalışma süresini önemli ölçüde etkileyen bir sistem parametresi olduğunu ve önerilen model ile çalışma süresinin simülasyon hassasiyetini etkilemeksizin azaltılabileceğini göstermektedir.

Anahtar Sözcükler: Moleküler haberleşme, simülasyon, zaman adımı

Multi-zone Simulation of Molecular Communication via Diffusion

Abstract: Simulation of Molecular Communication via Diffusion (MCvD) is used to verify the analytical models and to analyze the scenarios that are not yet analytically modeled. The analysis of nano scale particles via simulation can take long durations depending on the complexity of the scenario in hand. Long simulation durations also affect the success of research projects. In this work, we propose a novel zone-based simulation model which decreases the execution time dramatically, while keeping the same simulation accuracy with high statistical significance. The results show that time step is an important design parameter determining the accuracy and execution time of the simulation and using the zone-based simulation model, it is possible to reduce simulation execution time while preserving an acceptable accuracy level.

Keywords: Molecular communication, simulation, time step.

1. Giriş

Nanomakineler, en az birisi 100 nanometre veya daha küçük bileşenlerden oluşan otonom cihazlardır. Her bir nanomakinenin kapasitesi limitli olduğundan, karmaşık işleri yapabilmek için ortaklaşa çalışmaları gerekmektedir. Nanoağlar, nanomakinelerin karmaşık işleri gerçekleştirmek için haberleşmelerini inceler. Belirtilen haberleşmenin gerçekleşmesi için önerilen yaklaşımlardan birisi de kalsiyum [1] ve feromon [2] gibi birçok moleküler haberleşme modelinin temelini oluşturan difüzyon ile moleküler haberleşmedir.

Nanoağlar araştırmaları iki ana grupta değerlendirilebilir. Birinci grup, kanal cevap fonksiyonunu analitik olarak incelemektedir [3, 4]. İkinci grup ise Brownian hareketinin simülasyonu ile nanoağ sistemlerini incelemektedir. Bu yöntemin avantajı, analitik olarak modellenemeyen karmaşık ortamların incelenmesini olanaklı kılmasıdır. Bu gruba örnek olarak [5, 6] verilebilir. Simülasyonun araştırma aracı olarak kullanılmasının dışında, nano seviyede simülasyon ile

ilgili de araştırmalar yapılmıştır. [7]'de araştırmacılar Brownian hareketinin simülasyonu için iki adımlı bir yapı önermiştir. [8]'de NanoNS adlı bir simülasyon yapısı önerilmiştir. N3Sim ise, java tabanlı difüzyon temelli moleküler haberleşme simülasyonlarında kullanılabilecek bir simülatördür [9, 10]. HLA üzerinde çalışan dağıtık simülasyon mimarisi [11]'de önerilmiştir. [12]'de ise nöron temelli moleküler haberleşme için kullanılan simülasyon yapısı önerilmiştir.

Bu çalışmada, ilk olarak zaman adımının difüzyon ile moleküler haberleşme simülasyonunun hassasiyet ve çalışma süresine etkisini inceliyoruz. Sonrasında, simülasyonun hassasiyetini etkilemeden daha hızlı çalışmasını sağlayacak çok alanlı bir model öneriyoruz. Sonuçlar önerilen modelin özellikle uzun iletişim süresi veya sinyal gücü durumlarında araştırmacılara fayda sağlayacağını göstermektedir.

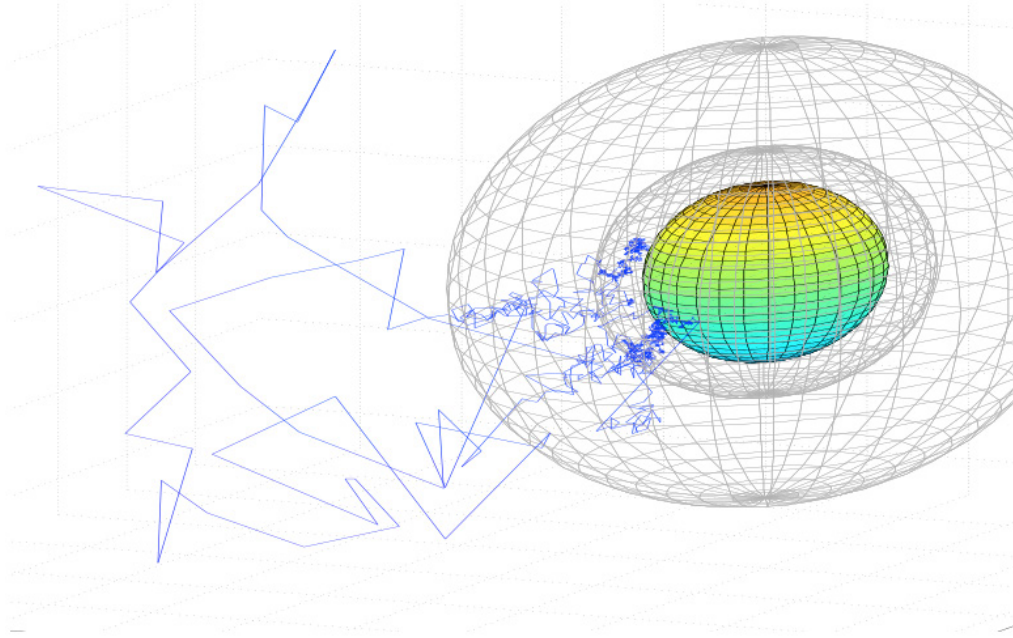
2. Çok Alanlı Simülasyon Modeli

Çok alanlı simülasyon modeli [7]'de açıklanan yaklaşımı kullanmaktadır. Bu modeli noktasal gönderici ve küresel alıcı için Şekil 1'de gösterildiği gibi geliştirmektedir. Alıcının etrafındaki varsayımsal küre ortamı “n” adet “Zonen” adında birden çok alana ayırmaktadır.

Zone_n'deki moleküller Δt_n ile gösterilen zaman adımı kullanılır. “n” büyüdükçe Δt_n de büyümektedir. Yapılan simülasyonun hassasiyeti büyük ölçüde her adımda molekülün yer değiştirmesini belirleyen Δt değerine bağlıdır. Alıcıdan yeteri kadar uzaktaki moleküller için daha uzun zaman adımı kullanmak simülasyonların daha

kısa sürmesini, alıcıya yakın olan moleküllerin ise daha kısa zaman adımı kullanmaları, daha hassas simülasyon sonuçları alınmasını olanaklı kılar. Model, alan yapısını kullanarak simülasyon hassasiyetini korurken, simülasyonların daha hızlı çalışmasını sağlamaktadır.

Simülasyonda, molekülün hareketi her bir Δt anında molekülün pozisyonunun anlık olarak hesaplanması ile modellenmiştir. Molekülün rotası, bu noktaların doğrusal olarak birleştirilmesi ile elde edilir. Simülasyon için kullanılan Δt , Δt_0 ile aynıdır. Bunun nedeni Δt_0 'nin sistemdeki en küçük Δt olması ve Δt_0 için belirlenen olayların daha sık olmasıdır.



Şekil 1. Çoklu alan simülasyon modeli

Her bir molekül için bir sonraki konum, içerisinde bulunduğu alanın zaman adımı kullanılarak hesaplanır. Zone₀'da bulunan moleküller için çok daha sık aralıklarla konum güncellemesi yapıldığından simülasyon daha hassas olacaktır. Dış alanlardaki moleküller için ise daha seyrek aralıklarla konum güncellemesi yapılacağından simülasyon daha kısa sürede tamamlanabilecektir. Örneğin Δt_1 1 ms, Δt_0 1 μ s olduğunda, simülasyon 1 μ s zaman adımı çalıştırılır. Zone₀'daki moleküller pozisyonlarını her bir simülasyon adımı güncellerler, ancak Zone₁'deki moleküller her 1000. adımda konumlarını güncellerler. Zone₁'deki moleküllerin rotaları bu noktaların birleştirilmesi ile modellenir. Bir molekül Zone₁'den Zone₀'a geçtiğinde her

bir simülasyon adımı konumunu güncellemeye başlar. Aynı şekilde bir molekül Zone₀'dan Zone₁'e geçtiğinde her 1000. simülasyon adımı konumunu güncellemeye başlar.

Çok alanlı modelde Zone_n'in yarıçapı, r_{zn} önemli bir dizayn parametresidir. Çok alanlı simülasyon modelinin performansını direk etkiler. Eğer yeteri kadar büyük seçilmezse, simülasyon sonuçları yeteri kadar hassas olmayacaktır. Eğer gereğinden büyük seçilirse çok alan kullanmanın simülasyon çalışma zamanına olan pozitif etkisi gözlemlenemeyecektir. r_{zn} 'i seçmek için istatistik alanında kullanılan üç sigma kuralı kullanılabilir. Üç sigma kuralı, normal dağılım ile oluşturulan değerlerin hangi aralıkta bulunacağı ile ilgilidir.

Bu kurala göre, normal dağılım ile oluşturulan değerlerin %68,2'si $[\mu - \sigma, \mu + \sigma]$, %95,4'ü $[\mu - 2\sigma, \mu + 2\sigma]$, %99,7'si ise $[\mu - 3\sigma, \mu + 3\sigma]$ aralığında olacaktır. Molekül hareketleri her boyutta $\mu = 0$, $\sigma = \sqrt{2 D \Delta t_n}$ olan Gaussian dağılımı olduğundan, Zone_n 'deki bir molekülün Zone_{n-1} üzerinde atlamasını engellemek için $r_{z(n-1)}$ 'in aşağıdaki formül kullanılarak seçilmesi gerekmektedir

$$r_{z(n-1)} = r_r + 3\sqrt{3}\sqrt{2 D \Delta t_n}$$

Burada r_r alıcının yarıçapı, Δt_n ise Zone_n için zaman adımdır. Bu şekilde seçilen yarıçap ile Δt_0 kullanılarak yapılan simülasyonlar ile benzer hassasiyette sonuçlar çok daha hızlı elde edilebilecektir. Bu parametrenin seçimi simülasyon gereksinimlerine bağlıdır. Eğer yüksek hassasiyet gerekli değilse daha küçük bir yarıçap kullanılabilir. Bu şekilde simülasyonun çok daha hızlı çalışması sağlanabilir.

3. Sonuçlar

Çok alanlı simülasyon modelinin performansını alan kullanılmayan simülasyon ile karşılaştırmak için, öncelikle iki alanlı modelin simülasyon hassasiyetini etkilemeden çalışma süresini nasıl azalttığını incelenmiştir. Ardından, iletişim uzunluğu ve sinyal gücü gibi sistem parametrelerinin simülasyon çalışma süresinin iyileşme oranına etkisini araştırılmıştır. Önerilen modelin performansını değerlendirebilmek için iki alanlı modelde hızlanmasını aşağıdaki gibi tanımlayabiliriz.

$$S_{dz} = \frac{T_{sz}}{T_{dz}}$$

Bu formülde T_{sz} tek alanlı simülasyonun çalışma süresini, T_{dz} ise iki alanlı simülasyonun çalışma süresini göstermektedir. Simülasyonda kullanılan parametreler Tablo 1'de listelenmiştir.

Parametre	Değer
Molekül sayısı (N^{Tx})	10,000
Difüzyon katsayısı (D)	79.4 (μm) ² /s
Alıcı yarıçapı (r_r)	10 μm
Zone 0 yarıçapı (r_{z0})	$r_r + 3\sqrt{3}\sigma$ μm
Göndericinin alıcı merkezine uzaklığı (r_0)	$r_r + 4$ μm
Zaman adımı ($\Delta t_{1,0}$)	$\{10^{-3}, 10^{-6}\}$ s

Tablo 1. Simülasyon parametreleri

3.1 Zaman Adımının Sinyal Alımı ve Simülasyon Süresine Etkisi

Bir simülasyonun gerçekçi yapıldığı simülasyonun çalışma süresini ve hassasiyetini etkiler. Simülasyon sonuçlarının hassasiyetini sayısal olarak değerlendirebilmek için küresel soğurgan alıcı için [3]'te verilen formül kullanılabilir. Soğurgan molekülün gönderilen moleküllere oranının zamana bağlı değeri aşağıdaki formül ile hesaplanabilir.

$$F_{hit}(t) = \frac{r_r}{r_r} \text{erfc} \left[\frac{r_0 - r_r}{\sqrt{4 D t}} \right]$$

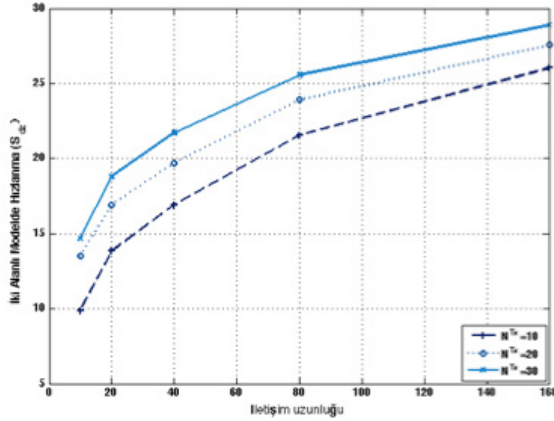
Bu formülde r_r alıcının yarıçapı, r_0 gönderici ile alıcının merkezi arasındaki uzaklığı göstermektedir. İlk simülasyon senaryosunda, 10.000 molekülün yarıçapı 10 μm olan alıcıya 14 μm uzaklıktan gönderilmektedir. Bu senaryoda $\Delta t = 10^{-3}$ s seçildiğinde büyük oranda hata gözlemlenirken, $\Delta t = 10^{-6}$ s seçildiğinde hata büyük oranda azalmaktadır.

Tablo 2 tek ve iki alanlı simülasyonların farklı alan büyüklükleri ile oluşturulan senaryoların sonuçlarını vermektedir. Sonuçlar uzun zaman adımlı ve tek alanlı simülasyonun %1.4'lük bir hata oluşturduğunu göstermektedir. İki alanlı simülasyon yapıldığında bu hata en küçük alan yarıçapı için %0.13'e düşmektedir. Alan yarıçapı büyütüldükçe bu hata daha da azalmakta ve en iyi durumda %0.05'e kadar düşmektedir. Bu durumda altı kat hızlanma gözlemlenmektedir. Bu sonuç iki alanlı simülasyonun potansiyelini göstermesi açısından önemlidir.

Simülasyon tipi	Δt (s)	r_{z0}	Hızlanma	RMSE
Tek alan	10^{-3}	-	757.52	139.11
İki alan	$10^{-3}, 10^{-6}$	$r_r + \sqrt{3}\sigma$	27.47	13.01
İki alan	$10^{-3}, 10^{-6}$	$r_r + 2\sqrt{3}\sigma$	12.39	4.28
İki alan	$10^{-3}, 10^{-6}$	$r_r + 3\sqrt{3}\sigma$	6.04	2.72
Tek alan	10^{-6}	-	1	2.24

Tablo 2. Zaman Adımının Sinyal Alımı ve Simülasyon Süresine Etkisi

3.2 Sinyal Gücünün ve İletişim Uzunluğunun Etkisi



Şekil 2. Sinyal gücünün ve iletişim uzunluğunun etkisi

Birçok araştırma probleminin çözümü, sistem parametrelerinin detaylı incelenmesi ile mümkün olabilmektedir. Difüzyon ile moleküler iletişim araştırmalarında, sinyal gücü ve iletişim uzunluğu sistem davranışını etkileyen iki parametredir.

Bu iki parametrenin etkisini incelemek için farklı sinyal gücü ve iletişim uzunluğu değerleri için simülasyon senaryoları çalıştırılmıştır. Şekil 2’de de görüleceği gibi, sinyal gücündeki artış, farklı iletişim uzunlukları için hızlanma sağlamaktadır. Bunun temel nedeni sistemde biriken moleküllerdir. Simülasyon ilerledikçe ortamda biriken molekül sayısı artmaktadır. Simülasyon süresini sistemdeki moleküllerin Zone1’de mi, yoksa Zone0’da mı bulunduğu etkilemektedir. İki alanlı modelde sistemdeki molekül sayısı arttıkça, ve simülasyon süresi uzadıkça, daha fazla sayıda molekül daha seyrek aralıklarla konum güncellemesi yapacakları Zone1’de olacaklarından hızlanma artmaktadır. İletişim uzunluğu arttığında da, ortamdaki molekül sayısı artacağından yine benzer sebeple hızlanma artmaktadır.

4. Sonuç

Simülasyon, difüzyon ile moleküler haberleşmenin analizinde önemli bir araçtır. Analitik modellerin doğrulanmasında veya analitik modellerin olmadığı karmaşık senaryolarda kullanılmaktadır. Simülasyon sıklıkla kullanıldığından, simülasyonların çalışma süresi araştırma projeleri için önemlidir. Bu çalışmada zaman adımının simülasyon süresi ve hassasiyetine etkisi incelenmiş, çalışma süresi ile hassasiyet arasındaki ilişki gösterilmiştir. İki alanlı simülasyon modeli önerilerek, simülasyon süresinin hassasiyeti etkilenmeden çalışma süresinin nasıl kısaltılabi-

leceği gösterilmiştir. Sonuçlarda, özellikle ortamda moleküllerin biriktiği senaryolarda önerilen modelin simülasyonu büyük oranda hızlandırdığı gözlemlenmiştir.

5. Kaynaklar

[1] A. C. Heren, M. S. Kuran, H. B. Yilmaz, and T. Tugcu, “Channel capacity of calcium signalling based on inter-cellular calcium waves in astrocytes,” in Communications Workshops (ICC), 2013 IEEE International Conference on. IEEE, 2013, pp. 792–797.

[2] A. H. Purnamadaja and R. A. Russell, “Bi-directional pheromone communication between robots,” Robotica, vol. 28, no. 1, pp. 69–79, 2010.

[3] H. B. Yilmaz, A. C. Heren, T. Tugcu, and C.-B. Chae, “3-D Channel Characteristics for Molecular Communications with an Absorbing Receiver,” ArXiv e-prints, Apr. 2014.

[4] A. Noel, K. C. Cheung, and R. Schober, “Using dimensional analysis to assess scalability and accuracy in molecular communication,” in Communications Workshops (ICC), 2013 IEEE International Conference on. IEEE, 2013, pp. 818–823.

[5] M. S. Kuran, H. B. Yilmaz, and T. Tugcu, “A tunnel-based approach for signal shaping in molecular communication,” in Communications Workshops (ICC), 2013 IEEE International Conference on. IEEE, 2013, pp. 776–781.

[6] M. S. Kuran, H. Yilmaz, T. Tugcu, and I. F. Akyildiz, “Interference effects on modulation techniques in diffusion based nanonetworks,” Nano Communication Networks, vol. 3, no. 1, pp. 65–73, 2012.

[7] A. Toth, D. Banky, and V. Grolmusz, “3-d brownian motion simulator for high-sensitivity nanobiotechnological applications,” IEEE transactions on nanobioscience, vol. 10, no. 4, pp. 248 – 249, 2011.

[8] E. Gul, B. Atakan, and O. B. Akan, “Nanons: A nanoscale network simulator framework for molecular communications,” Nano Communication Networks, vol. 1, no. 2, pp. 138 – 156, 2010.

[9] N. Garralda, I. Llatser, A. Cabellos-Aparicio, and M. Pierobon, “Simulation-based evaluation of the diffusion-based physical channel in mo-

lecular nanonetworks,” in 2011 IEEE Conference on Computer Communications Workshops (INFOCOM WKSHPS), 2011, pp. 443 – 448.

[10] N. Garralda, I. Llatser, A. Cabellos-Aparicio, E. Alarcón, and M. Pierobon, “Diffusion-based physical channel identification in molecular nanonetworks,” *Nano Communication Networks*, vol. 2, no. 4, pp. 196 – 204, 2011.

[11] A. Akkaya, G. Genc, and T. Tugcu, “HLA based architecture for molecular communication simulation,” *Simulation Modelling Practice and Theory*, vol. 42, no. 0, pp. 163 – 177, 2014.

[12] J. Suzuki, H. Budiman, T. A. Carr, and J. H. DeBlois, “A simulation framework for neuron-based molecular communication,” in 17th Asia Pacific Symposium on Intelligent and Evolutionary Systems, IES2013, ser. IES2013, 2013, pp. 103–113.