

上海交通大学

SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY

学士学位论文

THESIS OF BACHELOR



论文题目： DNA 分子通信系统的系统模型研究

学生姓名：	孙 文韬
学生学号：	516030910265
专 业：	测控技术与仪器
指导教师：	闫浩教授
学院(系)：	仪器科学与工程系

上海交通大学

毕业设计（论文）原创性声明

本人郑重声明：所呈交的毕业设计（论文），是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本人完全意识到本声明的法律结果由本人承担。

学位论文作者签名：

日期： 年 月 日

上海交通大学 学位论文版权使用授权书

本学位论文作者完全了解学校有关保留、使用学位论文的规定，同意学校保留并向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版，允许论文被查阅和借阅。本人授权上海交通大学可以将本学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存和汇编本学位论文。

保 密 ☐，在 _____ 年解密后适用本授权书。

本学位论文属于

不保密 ☒。

(请在以上方框内打✓)

学位论文作者签名： 某某

指导教师签名： 某某

日 期： 某 年 某 月 某 日

日 期： 某 年 某 月 某 日

DNA 分子通信系统的系统模型研究

摘 要

中文摘要应该将学位论文的内容要点简短明了地表达出来，应该包含论文中的基本信息，体现科研工作的核心思想。摘要内容应涉及本项科研工作的目的和意义、研究方法、研究成果、结论及意义。注意突出学位论文中具有创新性的成果和新见解的部分。摘要中不宜使用公式、化学结构式、图表和非公知公用的符号和术语，不标注引用文献编号。硕士学位论文中文摘要字数为 500 字左右，博士学位论文中文摘要字数为 800 字左右。英文摘要内容应与中文摘要内容一致。

摘要页的下方注明本文的关键词（4~6 个）。

关键词： DNA 分子, COMSOL, 爱国荣校

A STUDY OF SYSTEMS MODELING IN DNA-BASED MOLECULAR COMMUNICATIONS

ABSTRACT

Shanghai Jiao Tong University (SJTU) is a key university in China. SJTU was founded in 1896. It is one of the oldest universities in China. The University has nurtured large numbers of outstanding figures include JIANG Zemin, DING Guangen, QIAN Xuesen, Wu Wenjun, WANG An, etc.

SJTU has beautiful campuses, Bao Zhaolong Library, Various laboratories. It has been actively involved in international academic exchange programs. It is the center of CERNet in east China region, through computer networks, SJTU has faster and closer connection with the world.

Key words: SJTU, master thesis, XeTeX/LaTeX template



目 录

第一章 引言	1
1.1 分子通信概述	1
1.1.1 分子通信的基本原理	1
1.1.2 分子通信的发展现状	1
1.1.3 一种 DNA 分子受控释放的实现方法	1
1.2 COMSOL Multiphysics 多物理场仿真介绍	1
1.2.1 COMSOL Multiphysics 的优势	1
1.2.2 COMSOL Multiphysics 的应用	1
1.3 课题研究意义及内容	1
1.3.1 课题研究意义	1
1.3.2 课题研究内容	1
第二章 DNA 分子的释放过程简述	3
2.1 DNA/Zr ⁴⁺ 层层自组装结构	3
2.1.1 组装过程	3
2.1.2 理化性质	3
2.2 层层自组装结构受控分解的原理	3
2.2.1 电信号激励下的电化学反应	3
2.2.2 Zr ⁴⁺ 水解过程	3
2.2.3 电场影响下 DNA 分子运动	3
2.2.4 反应过程总述	3
2.3 基本控制方程	3
2.3.1 扩散定律	3
2.3.2 Nernst-Einstein 关系	3
2.3.3 Nernst-Planck 方程	3
2.3.4 化学反应速率方程	4
2.3.5 Butler-Volmer 方程	4
第三章 建模与仿真	5
3.1 求解过程的简述	5
3.2 反应容器物理模型	5
3.3 电化学反应仿真	5



3.3.1	计算流程	5
3.3.2	结果与讨论	5
3.4	Zr^{4+} 水解反应仿真	5
3.4.1	计算流程	5
3.4.2	结果与讨论	5
3.5	DNA 扩散过程仿真	5
3.5.1	计算流程	5
3.5.2	结果与讨论	5
第四章	根据仿真结果对进行通信系统优化	7
4.1	控制电压释放曲线实现逐层释放	7
4.2	接收机位置与最大传输速度的关系	7
	全文总结	9
	参考文献	11
	致 谢	13



插图索引



表格索引



算法索引



主要符号对照表

ϵ 介电常数

μ 磁导率

第一章 引言

1.1 分子通信概述

1.1.1 分子通信的基本原理

——介绍分子通信的概念原理实现方法等。

1.1.2 分子通信的发展现状

——介绍当前分子通信的发展现状

1.1.3 一种 DNA 分子受控释放的实现方法

——引出本文所讨论的， Zr^{4+} 与 DNA 分子组装成的 LBL 结构受电压信号激励而释放的这一方法。

1.2 COMSOL Multiphysics 多物理场仿真介绍

1.2.1 COMSOL Multiphysics 的优势

——简单介绍 COMSOL 是什么，它的优势，为什么拿它来做仿真。

1.2.2 COMSOL Multiphysics 的应用

——国内外一些用 COMSOL 做仿真的例子，增强说服力。

1.3 课题研究意义及内容

1.3.1 课题研究意义

——引出本课题组的先前工作，指出为了更好地了解电压与 DNA 释放速度和释放浓度的关系，本课题开展对电压控 DNA 释放过程的建模。

1.3.2 课题研究内容

——详细说明课题的研究内容：对 DNA 分子通信系统的 DNA 释放过程进行理论建模。

第二章 DNA 分子的释放过程简述

2.1 DNA/ Zr^{4+} 层层自组装结构

2.1.1 组装过程

——用到的组装方法

2.1.2 理化性质

——介绍该结构的物理与化学性质

2.2 层层自组装结构受控分解的原理

2.2.1 电信号激励下的电化学反应

——通过电极电位表等客观条件，推断出通电后发生的电极反应

2.2.2 Zr^{4+} 水解过程

——介绍 Zr^{4+} 水解相关的内容

2.2.3 电场影响下 DNA 分子运动

——介绍在浓度梯度力与电场力共同作用下 DNA 的行为

2.2.4 反应过程总述

——总结反应过程，插入反应过程图等

2.3 基本控制方程

2.3.1 扩散定律

——主要用到菲克定律，稀溶液中粒子的扩散。

2.3.2 Nernst-Einstein 关系

——得到物质化合价和迁移率与扩散率的关系 [1]

2.3.3 Nernst-Planck 方程

——电化学系统中离子的运动，计算粒子通量



2.3.4 化学反应速率方程

——反应物浓度影响反应速度

2.3.5 Butler-Volmer 方程

——电极电势与电化学反应速率的关系

第三章 建模与仿真

3.1 求解过程的简述

——介绍三个仿真过程的关系，简述求解的过程

3.2 反应容器物理模型

——根据课题组实验的参数定义反应容器

3.3 电化学反应仿真

3.3.1 计算流程

——介绍 COMSOL Multiphysics 的操作及计算过程

3.3.2 结果与讨论

——讨论结果以及参数影响等

3.4 Zr^{4+} 水解反应仿真

3.4.1 计算流程

——介绍在 MATLAB 中计算水解量

3.4.2 结果与讨论

——讨论结果以及参数影响等

3.5 DNA 扩散过程仿真

3.5.1 计算流程

——介绍 COMSOL Multiphysics 的操作及计算过程

3.5.2 结果与讨论

——讨论结果以及参数影响等

第四章 根据仿真结果对进行通信系统优化

4.1 控制电压释放曲线实现逐层释放

——讨论如何控制电压释放曲线以实现逐层释放

4.2 接收机位置与最大传输速度的关系

——讨论接收机位置与传输速度的关系

全文总结

这里是全文总结内容。

2015 年 2 月 28 日，中央在北京召开全国精神文明建设工作表彰暨学雷锋志愿服务大会，公布全国文明城市（区）、文明村镇、文明单位名单。上海交通大学荣获全国文明单位称号。

全国文明单位这一荣誉是对交大人始终高度重视文明文化工作的肯定，是对交大长期以来文明创建工作成绩的褒奖。在学校党委、文明委的领导下，交大坚持将文明创建工作纳入学校建设世界一流大学的工作中，全体师生医护员工群策群力、积极开拓，落实国家和上海市有关文明创建的各项要求，以改革创新、科学发展为主线，以质量提升为目标，聚焦文明创建工作出现的重点和难点，优化文明创建工作机制，传播学校良好形象，提升社会美誉度，显著增强学校软实力。2007 至 2012 年间，上海交大连续三届荣获“上海市文明单位”称号，成为创建全国文明单位的新起点。

上海交大自启动争创全国文明单位工作以来，凝魂聚气、改革创新，积极培育和践行社会主义核心价值观。坚持统筹兼顾、多措并举，将争创全国文明单位与学校各项中心工作紧密结合，着力构建学校文明创建新格局，不断提升师生医护员工文明素养，以“冲击世界一流大学汇聚强大精神动力”为指导思想，以“聚焦改革、多元推进、以评促建、丰富内涵、彰显特色”为工作原则，并由全体校领导群策领衔“党的建设深化、思想教育深入、办学成绩显著、大学文化丰富、校园环境优化、社会责任担当”六大板块共 28 项重点突破工作，全面展现近年来交大文明创建工作的全貌和成就。

进入新阶段，学校将继续开拓文明创建工作新格局，不断深化工作理念和工作实践，创新工作载体、丰富活动内涵、凸显创建成效，积极服务于学校各项中心工作和改革发展的大局面，在上级党委、文明委的关心下，在学校党委的直接领导下，与时俱进、开拓创新，为深化内涵建设、加快建成世界一流大学、推动国家进步和社会发展而努力奋斗！

上海交通大学医学院附属仁济医院也获得全国文明单位称号。



参考文献

- [1] FERRARI P A, GOLDSTEIN S, LEBOWITZ J L. Diffusion, Mobility and the Einstein Relation[M/OL]. in: FRITZ J, JAFFE A, SZÁSZ D. Statistical Physics and Dynamical Systems: Rigorous Results. Boston, MA: Birkhäuser Boston, 1985: 405-441. https://doi.org/10.1007/978-1-4899-6653-7_22. DOI: 10.1007/978-1-4899-6653-7_22.



致 谢

感谢那位最先制作出博士学位论文 L^AT_EX 模板的交大物理系同学！

感谢 William Wang 同学对模板移植做出的巨大贡献！

感谢 @weijianwen 学长一直以来的开发和维护工作！

感谢 @sjtug 以及 @dyweb 对 0.9.5 之后版本的开发和维护工作！

感谢所有为模板贡献过代码的同学们, 以及所有测试和使用模板的各位同学！

感谢 L^AT_EX 和 SJTUT_HESIS, 帮我节省了不少时间。

A STUDY OF SYSTEMS MODELING IN DNA-BASED MOLECULAR COMMUNICATIONS

An imperial edict issued in 1896 by Emperor Guangxu, established Nanyang Public School in Shanghai. The normal school, school of foreign studies, middle school and a high school were established. Sheng Xuanhuai, the person responsible for proposing the idea to the emperor, became the first president and is regarded as the founder of the university.

During the 1930s, the university gained a reputation of nurturing top engineers. After the foundation of People's Republic, some faculties were transferred to other universities. A significant amount of its faculty were sent in 1956, by the national government, to Xi'an to help build up Xi'an Jiao Tong University in western China. Afterwards, the school was officially renamed Shanghai Jiao Tong University.

Since the reform and opening up policy in China, SJTU has taken the lead in management reform of institutions for higher education, regaining its vigor and vitality with an unprecedented momentum of growth. SJTU includes five beautiful campuses, Xuhui, Minhang, Luwan Qibao, and Fahu, taking up an area of about 3,225,833 m². A number of disciplines have been advancing towards the top echelon internationally, and a batch of burgeoning branches of learning have taken an important position domestically.

Today SJTU has 31 schools (departments), 63 undergraduate programs, 250 masters-degree programs, 203 Ph.D. programs, 28 post-doctorate programs, and 11 state key laboratories and national engineering research centers.

SJTU boasts a large number of famous scientists and professors, including 35 academics of the Academy of Sciences and Academy of Engineering, 95 accredited professors and chair professors of the "Cheung Kong Scholars Program" and more than 2,000 professors and associate professors.

Its total enrollment of students amounts to 35,929, of which 1,564 are international students. There are 16,802 undergraduates, and 17,563 masters and Ph.D. candidates. After more than a century of operation, Jiao Tong University has inherited the old tradition of "high starting points, solid foundation, strict requirements and extensive practice." Students from SJTU have won top prizes in various competitions, including ACM International Collegiate Programming Contest, International Mathematical Contest in Modeling and Electronics Design Contests. Famous alumni include Jiang Zemin, Lu Dingyi, Ding Guangen, Wang Daohan, Qian Xuesen, Wu Wenjun, Zou Taofen, Mao



Yisheng, Cai Er, Huang Yanpei, Shao Lizi, Wang An and many more. More than 200 of the academics of the Chinese Academy of Sciences and Chinese Academy of Engineering are alumni of Jiao Tong University.