

多接收机自由扩散分子通信信道建模

孙卓, 鲍煦, 林颀, 张文策

(江苏大学计算机科学与通信工程学院, 江苏 镇江 212013)

摘 要: 考虑点源、一对吸收机和透明机共存场景, 在透明机接收分子概率模型基础上引入干扰因子, 考虑空间中吸收机对该透明机接收分子的影响, 建立吸收机干扰下点源-透明机信道模型, 并结合神经网络使用 Levenberg-Marquardt 算法对信道模型参数进行学习和预测。仿真结果不仅验证了所提信道模型的有效性, 还表明空间中任意点峰值时刻与点源到该点的距离平方成正比, 与分子扩散系数成反比, 峰值时刻不受空间中的吸收机影响。

关键词: 分子通信; 自由扩散; 多接收机; 信道建模

中图分类号: TN92

文献标识码: A

DOI: 10.11959/j.issn.1000-436x.2021151

Channel modeling of molecular communication via free diffusion with multiple receiver

SUN Zhuo, BAO Xu, LIN Jie, ZHANG Wence

School of Computer Science and Communication Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang 212013, China

Abstract: A coexistence scenario with a point source, a pair of absorbing and transparent receiver was considered, an interference factor was introduced in the proposed channel model based on the receiving molecular probability in the transparent receiver considering the influences of the absorbing receiver on the transparent one. Furthermore, the channel model of point source and transparent receiver had been proposed by using Levenberg-Marquardt algorithm combined with artificial neural network to study and predict channel model parameters. The simulation results not only verify the effectiveness of the proposed channel model, but also show that the peak time of any point in the environment is directly proportional to the square of the distance from the point source to the receiver, and inversely proportional to the molecular diffusion coefficient, and the peak time is not affected by the absorbing receiver in the environment.

Keywords: molecular communication, free diffusion, multi receiver, channel model

1 引言

近年来, 随着纳米技术的快速发展, 纳米物联网成为研究关注的热点^[1]。学术界将由纳米尺度的组件组成, 在纳米或微米尺度范围内, 能够执行数据计算、存储、分类和驱动等多种任务的设备称为

纳米机器^[2-3]。单个纳米机器具有一定的局限性, 因此为了能够在更大程度上完成更复杂的任务, 纳米机器需要通过信息共享、合作互联组成分布式的纳米网络^[2,4]。物联网 (IoT, Internet of things) 的普及使纳米网络具有非常广阔的应用前景, 在 5G 和 6G 等技术中有许多潜在应用, 如生物纳米物联网

收稿日期: 2020-12-07; 修回日期: 2021-03-05

通信作者: 鲍煦, xbao@ujs.edu.cn

基金项目: 江苏省重点研发计划基金资助项目 (No.BE2018108); 国家自然科学基金资助项目 (No.61772243); 江苏省六大人才高峰高层次人才计划资助项目 (No.XYDXX-115)

Foundation Items: The Key Research and Development Project of Jiangsu Province (No.BE2018108), The National Natural Science Foundation of China (No.61772243), Six Talent Peak High Level Talent Plan Projects of Jiangsu Province (No.XYDXX-115)

(IoBNT, Internet of bio-nano-things)、纳米传感网络等^[5-6], 是未来研究与开发纳米尺度互联网^[2]和纳米物联网^[7]的基础。

传统的通信技术受到收发器体积、能耗及生物兼容性等因素的制约, 无法直接应用于纳米机器^[2]。与传统的基于射频的通信系统不同, 分子通信是一种以生物化学分子为信息载体的短距离通信技术。具有生物兼容性强、工作效率高^[8]、能源消耗低等优点。分子通信是 IoBNT 中的一项重要技术, 它利用生物化学分子进行信息传输, 实现在纳米机器之间的通信, 可应用于由体内智能传感器组成的体域网中^[6,9]。此外, 分子通信在医疗工程、药学应用、工业和环保等领域也起到重要作用^[10]。因此, 分子通信被普遍认为实现纳米网络最有效可行的通信技术之一^[11]。

一个典型的分子通信系统包括发射机、信道和接收机, 而信道是分子通信研究中的核心内容, 信道模型的准确与否直接影响分子通信系统设计的有效性和稳健性。在分子通信系统中, 信道特性与分子传输机制有关, 包括自由扩散、分子马达、细菌马达等^[12]。其中, 自由扩散是自然界中分子运动最普遍的形式, 因此基于自由扩散的分子通信技术 (MCvD, molecular communication via diffusion) 近年来成为研究热点^[12]。

MCvD 中常见的发射机模型包括点源发射机 (以下简称为点源) 和球形源发射机 (以下简称为球源), 接收机模型分为吸收接收机 (以下简称为吸收机) 和透明接收机 (以下简称为透明机) 等。吸收机吸收在任意时刻撞击其表面的分子, 而透明机则对分子运动不构成任何影响, 仅记录分子在透明机内部的数量。目前, 已有文献讨论了点对点分子传输系统 (包括点源和球源) 和透明机、吸收机或吸附可逆吸收机等信道特征。常见的信道响应包括吸收球的吸收速率、接收机的接收概率、信道中的分子浓度、分子在信道中的扩散特性等^[12]。

对于点源发射分子的三维无边界场景, 文献[13]推导了空间任意位置的分子浓度。Yilmaz 等^[14]针对单个点源和一个完全吸收机 (吸收概率为 1) 的 MCvD 场景, 推导了吸收机的吸收概率。在吸收概率小于 1, 部分分子被吸收后仍存在一定概率回到环境中的分子通信场景, Deng 等^[15]对其进行了理论建模, 推导了三维信道冲激响应表达式, 给出了

任意时间区间内吸附分子个数的稳态解并提出了仿真算法。由于球源对其发射的分子有一定的影响, 因此信道与点源存在的信道状态不同。文献[16]发现球源发射的分子浓度具有一定的方向性, 并推导了方向增益。Genc 等^[17]引入了 2 种随机分布函数对球源-球接收机信道进行建模。文献[18]研究了被吸收边界和反射边界包围的一对点源和透明机的分子通信系统, 推导了空间中任意位置、任意时刻的瞬时和稳态分子浓度分布。文献[19-20]研究了不规则扩散的分子通信系统, 对该信道进行建模并分析了反常扩散中定时调制方案和振幅调制方案的误码率。在研究分子通信网络的过程中, 不仅需要点对点的分子通信信道进行建模, 还需要分析多个接收机共存的场景下信道的变化特性。

文献[21]提出了多个吸收机场景下提高仿真精度的方法, 并基于该模型分析了吸收概率与发射机接收机之间距离的关系。文献[22-23]利用随机几何的方法分析了多个随机发射机和一个接收机 (吸收球或透明球) 的信道场景, 推导了在吸收球或透明球处分子个数的数学表达式。Bao 等^[24]研究了点源和 2 个吸收球的分子通信系统模型, 对其进行蒙特卡罗场景仿真, 并提出了在其中一个吸收球处的吸收概率模型。Dinc^[25]导出了具有球形吸收接收器的三维无界扩散通道脉冲响应的解析估计。Huang 等^[26]研究了基于一维扩散的分子通信系统, 分析了单个发射器和 2 个完全吸收接收器之间的信道响应。文献[27]分析了 2 个源、2 个接收机场景下的分子接收概率模型。文献[28]利用高斯、泊松概率分布建模多个吸收机的 MCvD 场景。然而, 以上文献并未考虑 MCvD 场景中的干扰吸收机对空间分子分布的影响。

本文考虑一个点源、一个吸收机和一个透明机的 MCvD 场景, 研究吸收机对透明机接收分子个数的影响, 并提出以透明机为研究对象的分子通信信道模型。本文通过观测透明机的接收分子概率随透明机到点源的距离、透明机和吸收机的夹角 α 以及时间 t 的变化, 分析吸收型接收机对空间浓度的干扰, 并给出干扰因子的表达式, 进而提出了该场景的信道模型, 仿真验证了其准确性。此外, 本文通过数据拟合确定该信道模型中的参数, 采用人工神经网络 (ANN, artificial neural network) 方法进行模型参数的学习, 以大量数据验证了该模型的合理性。

仿真结果表明, 本文提出的基于多接收机场景的信道模型在考虑收发机的拓扑结构、接收机之间和接收机对空间浓度的干扰的同时, 还可以应用在空间定位和预测等, 在仿真中都有较好的成效。

2 场景仿真设计与分析

本文研究的 MCvD 系统模型如图 1 所示, 包含一个点源 S、一个吸收机 R_1 和一个透明机 R_2 , α 为吸收机 R_1 和透明机 R_2 在点源 S 处的夹角。S 在初始时刻释放 20 000 个分子, 在扩散系数为 $100 \mu\text{m}^2/\text{s}$ 的环境中进行无规则的布朗运动, 仿真步长为 0.001 s 。 R_1 的半径为 $2 \mu\text{m}$, R_2 的体积设置为 $1 \mu\text{m}^3$ 。由于球坐标系的对称性, α 取值落在 $[0, \pi]$ 范围内。本文记录仿真过程中每个分子的位置, 总仿真时长为 2 s , 每隔一个仿真步长判断一次分子的位置与吸收机和透明机的距离, 分子一旦触碰吸收机的表面或是在吸收机的内部, 就被该吸收机完全吞吃。每 0.001 s 记录每个分子的空间坐标, 同时判断是否被吸收机 R_1 吸收、是否在透明机 R_2 内。将被 R_1 吸收的分子从空间中移除, 在 R_2 内的分子不发生反应, 仅记录 R_2 内分子数的变化。定义观测概率密度 (OPD, observing probability density) 为某时刻 R_2 内观测分子数与源发射总分子数的比值, 累积观测概率 (COP, cumulative observing probability) 定义为某时间段内观测分子数与源发射总分子数的比值。 R_2 的 OPD 和 COP 分别记为 f_{R_2} 和 F_{R_2} 。具体的仿真参数设置如表 1 所示^[14,24]。

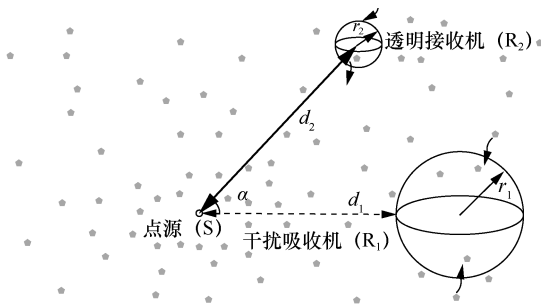


图 1 MCvD 系统模型

本文以透明机 R_2 作为观测对象来研究吸收机对自由空间分子分布的影响, R_1 对自由空间各点分子浓度的干扰情况通过观测 R_2 的球内分子浓度变化得到体现。如图 1 所示的几何关系可能会对透明机的分子观测概率有较大的影响, 所以

d_1 、 d_2 、 α 和 t 都满足多样性, 对各种不同的场景进行仿真。

本文以 α 、 d_1 、 d_2 和 t 为主要因素描述了其对 f_{R_2} 的影响。图 2(a)~图 2(d)分别描述了 $d_1 = 4 \mu\text{m}$, $t = 0.05 \text{ s}$ 、 0.1 s 、 0.8 s 、 2 s 时刻的空间分子分布概率, 颜色越浅表示 f_{R_2} 越大。从图 2(a)可以看出, 在 $t = 0.05 \text{ s}$ 时刻, 当 d_2 较小时, 所有角度的 f_{R_2} 都是相似的。此时, R_1 与 S、 R_2 相距甚远, 对 R_2 几乎没有影响。但是, 随着 d_2 的增加, f_{R_2} 在不同角度上明显不同。以 $d_2 = 3 \mu\text{m}$ 为例, α 越小, R_2 越接近 R_1 , R_1 对 R_2 的干扰越大, R_2 的球内分子观测概率越小, 即 f_{R_2} 越小。随着 d_2 继续增加, α 的影响再次减少, 即 f_{R_2} 增加。另一方面, 以 $d_2 = 10 \mu\text{m}$ 为例, f_{R_2} 在所有角度上几乎都是平坦的。因为从 S 到 R_2 的距离为 $10 \mu\text{m}$ 时对随机的自由扩散运动来说已经是比较远了, 而此时 $t = 0.05 \text{ s}$, 环境中的大部分分子还未移动到 $d_2 = 10 \mu\text{m}$ 的位置。

表 1 仿真参数

参数	取值
点源 S 发射的总分子数	20 000
扩散系数 $D / (\mu\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1})$	100
吸收机 R_1 的半径 $r_1 / \mu\text{m}$	2
透明机 R_2 的体积 $V_2 / \mu\text{m}^3$	1
仿真步长 $\Delta t / \text{s}$	0.001
仿真总时长/s	2
吸收机的吸收概率 P_{react}	1
仿真次数	111

图 2(b)中对比不同 d_2 位置的 f_{R_2} 和 d_2 的增加导致 R_1 、 R_2 和 S 之间发生几何关系的变化。 d_2 越大, R_2 离 S 越远, R_2 观测到的球内分子数量越少。当 α 为锐角时, R_2 先向 R_1 逼近, 然后在 d_2 增大的过程中远离 R_1 , 即 R_1 的干扰先增大后减小。随着分子自由扩散过程的进行, 通过仿真数据可以判断图 2(b)中, $t = 0.1 \text{ s}$ 已经过了 f_{R_2} 的峰值时刻, f_{R_2} 在整个场景中不断下降, 区块的颜色更加清晰地印证了上述分析。在图 2(c)中, $t = 0.8 \text{ s}$, f_{R_2} 在整个场景中的数值都很小, R_1 的影响不再明显。大部分分子被 R_1 吸收, 环境中剩余的分子大大减少, α 和 d_2 对 f_{R_2} 的影响也开始减小。图 2(d)为 $t = 2 \text{ s}$ 时刻的空间分子分布概率图谱, 此刻空间中分子已经所剩不

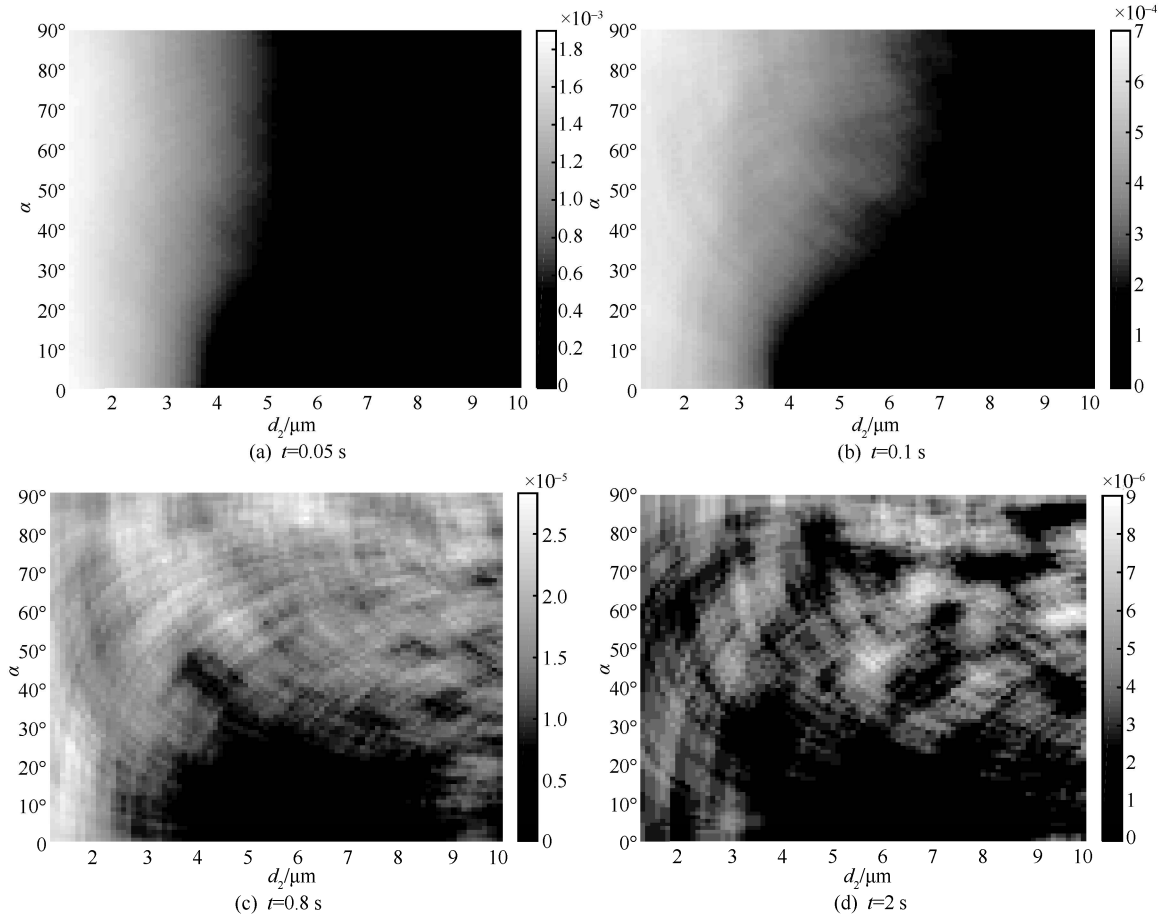


图 2 透明型接收机在不同距离 d_2 和角度 α 下的观测概率密度 f_{R_2}

多, 仍在进行无方向性的自由扩散运动, α 和 d_2 的影响已经完全消失。

当 $d_2 = 4 \mu\text{m}$ 时, 不同场景下, t 对透明机 R_2 的分子累积观测概率 F_{R_2} 的影响如图 3 所示。

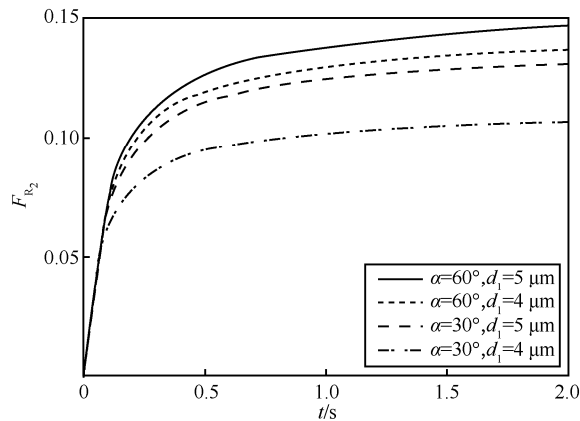


图 3 t 对透明机的分子累积观测概率 F_{R_2} 的影响

从图 3 可以看出, t 的值被固定时, 分别增加 α 和 d_1 的数值都会导致 F_{R_2} 的增加。

3 公式拟合和结果分析

在仅有一个点源场景中, 点源以冲击函数 $\delta(t)$ 发射分子, 空间中任意点的球形透明机概率密度如式(1)所示。

$$f^{3D}(t) = \frac{V_{\text{rx}}}{(4\pi Dt)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{d_2^2}{4Dt}} \quad (1)$$

其中, V_{rx} 为透明机的体积。然而, 空间中存在一个吸收机作为干扰机的场景中, 点源到透明机的信道模型是未知的, 本文以单位体积的透明机为观测对象, 将透明机内的分子观测概率为球中心点的分子观测概率, 根据第 2 节的仿真分析, MCvD 系统的透明机 R_2 的 OPD 为

$$f_{R_2} = I \frac{1}{(4\pi Dt)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{d_2^2}{4Dt}} \quad (2)$$

将式(2)对 t 求积分, 可得 R_2 的 COP 为

$$F_{R_2} = I \frac{1}{4\pi D d_2} \operatorname{erfc}\left(\frac{d_2}{\sqrt{4Dt}}\right) \quad (3)$$

其中, $\operatorname{erfc}(\cdot)$ 为互补误差函数; I 为干扰因子, 表示 R_1 对 R_2 的干扰程度, 数值为 $0 \sim 1$, I 越接近 1, 则 R_1 对 R_2 的干扰越小。本文通过大量的仿真, 在式(2)的基础上, 得出不同场景下 I 的数值, 如图 4 所示。通过曲线拟合, I 可以表示为

$$I = \sin(k_1 \alpha + k_2 (d_1 + r_1)) \quad (4)$$

其中, k_1 和 k_2 是调节参数, 具体数值取决于 MCvD 场景; r_1 表示 R_1 的半径; 系数 k_1 和 k_2 的估计方法为 LM (Levenberg-Marquardt) 算法^[23]。本文可以通过机器学习算法训练和预测数据来获取参数。

在 $d_2 = 4 \mu\text{m}$ 的场景下, I 随着 d_1 和 α 变化的情况如图 4(a)所示。已知该场景中 $d_1 > d_2 = 4 \mu\text{m}$, 则 d_1 越大, R_1 越远离 S 和 R_2 , R_1 对 R_2 的干扰越小, 因此 I 越接近 1, 并在 $d=0.8 \mu\text{m}$ 附近达到峰值。在相同的前提下, α 越大, I 越接近 1。将 $\alpha = 15^\circ$ 和 $\alpha = 120^\circ$ 这 2 个场景进行对比, $\alpha = 15^\circ$ 时 I 为 $0.5 \sim 1$, 且随 d_1 的增加而快速增加; $\alpha = 120^\circ$ 时 I 为 $0.95 \sim 1$, 且波动极小, d_1 对 I 的影响不明显。 α 和 d_1 越大, R_1 对 R_2 的干扰越小, I 越接近 1。

在 $d_1 = 5 \mu\text{m}$ 的场景下, I 随着 d_2 和 α 变化的情况如图 4(b)所示。随着 d_2 增加, 点源和 2 个接收机的几何关系会经过 $d_2 < d_1$ 、 $d_2 = d_1$ 、 $d_2 > d_1$ 这 3 个过程。从图 4(b)可以看出, 曲线不是单调的。在 $d_2 > 2 \mu\text{m}$ 的情况下, 当 α 取较小数值时, 随着 d_2 的增加, R_2 先向 R_1 靠近, 经过距离最小点后又渐渐远离 R_1 , R_2 受到 R_1 的干扰先增大后减小, 即 I 先减小后增大, f_{R_2} 在 R_1 的干扰下先增大后减小。在 α 逐渐增加的过程中, 这种趋势逐渐消退。 $\alpha = 60^\circ$ 时, I 的曲线几乎没有这样的起伏趋势; $\alpha = 120^\circ$ 时, I 的曲线更平缓。 α 较大时, 随着 d_2 增加, R_2 与 R_1 逐渐远离, R_1 对 R_2 的干扰逐渐减小。固定 d_2 的值, α 的增加导致 R_1 与 R_2 之间的距离随之增大, R_1 对 R_2 的干扰相应减小, I 越接近 1, 这与图 4(a)中观察到的情况相一致。

图 5 揭示了 I 如何通过系数 k_1 和 k_2 影响 f_{R_2} 。从图 5(a)可以看出, 在 $\alpha = 60^\circ$ 的场景中, d_2 增加时, k_1 和 k_2 的变化不大, 这说明 d_2 对 I 的影响较小, R_1 对 R_2 的影响较为恒定。图 5(b)给出了 k_1 和 k_2 随 α 的变化曲线, 以 $d_2 = 7 \mu\text{m}$ 为例, 当 α 比较小时, k_1 的值比较大, 随着 α 的增大, k_1 曲线的斜率逐渐减小, I 的值也趋于恒定, 这与图 4 的结果一致。

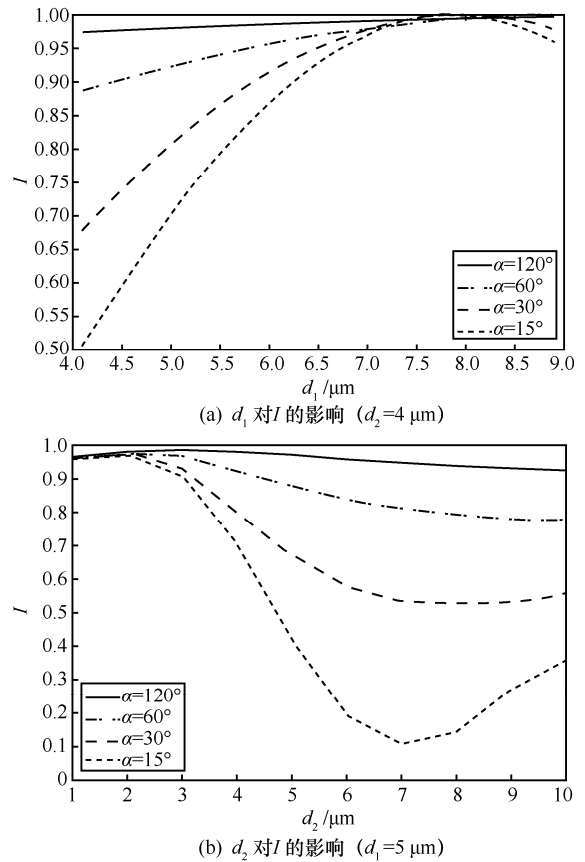


图 4 不同角度下干扰因子 I 与 d_1 和 d_2 的关系

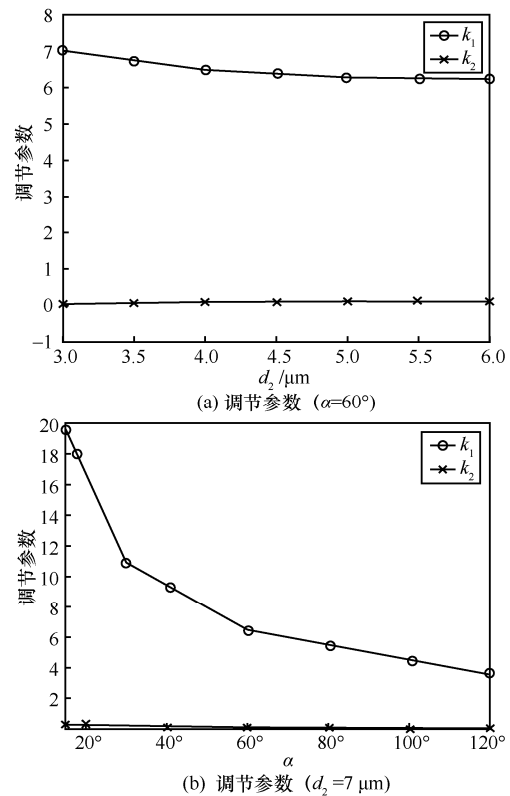


图 5 不同场景中主要参数 k_1 和 k_2 的数值

式(2)可以认为是“一个点源和一个吸收机”场景下自由空间中 MCvD 的信道脉冲响应。由 R_2 的观测概率密度可得, f_{R_2} 会出现一个峰值。对式(2)中的 t 求导, 使 $df_{R_2}/dt=0$, 此时 $t=t_{\text{peak}}$, t_{peak} 为峰值时间, 计算式为

$$t_{\text{peak}} = \frac{d_2^2}{6D} \quad (5)$$

将 t_{peak} 代入式(2), 可得观测概率密度峰值 f_{peak} 为

$$f_{\text{peak}} = I \left(\frac{3}{2\pi d_2^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{3}{2}} \quad (6)$$

在不同的 d_1 、 d_2 、 α 以及有无 R_1 存在的场景下, 透明机的瞬时观察概率 f_{R_2} 作为时间 t 的函数的曲线如图 6 所示。从图 6 可以看出, 式(2)计算结果与仿真结果曲线高度贴合, 证明了本文提出模型的正确性。本文将 2 种场景的变量分别代入式(5)和式(6)中, 得到 $t_{1\text{peak}}$ 、 $f_{1\text{peak}}$ 、 $t_{2\text{peak}}$ 和 $f_{2\text{peak}}$ 的值如图 6 所示。根据式(5)和式(6)计算得出的峰值时间和峰值与图 6 所示曲线相匹配, 证明 t_{peak} 只与 D 和 d_2 有关。从图 6 还可以看出, 在 R_1 存在和 R_1 不存在这 2 种情况下, f_{R_2} 的变化趋势是相似的。这也表明了式(5)拟合结果与仿真结果的准确性。但是在 R_1 存在的情况下, f_{R_2} 的峰值明显低于 R_1 不存在情况下的峰值, 说明点源 S 释放出的分子有一部分被 R_1 吸收, 因此 R_2 观测到的分子数减少。

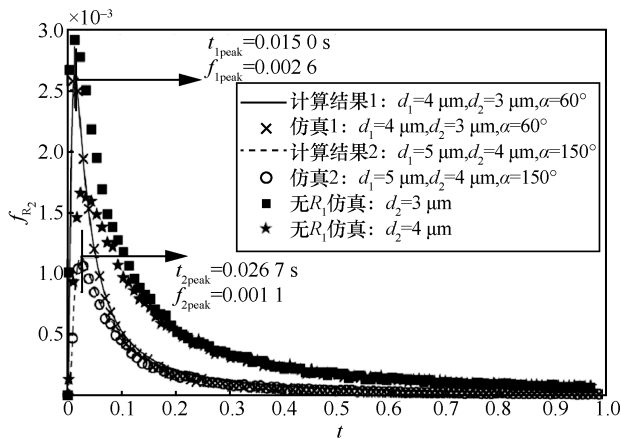


图 6 计算结果和仿真以及 R_1 不存在情况下仿真的对比

图 6 中 2 个场景的拟合参数及拟合结果如表 2 所示。表 2 中 R-square 为相关系数, 它的取值范围

为 $[0,1]$, R-square 越接近 1, 表明方程的变量对因变量 y 的解释能力越强, 拟合模型越贴合数据。

R-square 的计算式为

$$\text{R-square} = r(X, Y) = \frac{\text{Cov}(X, Y)}{\sqrt{\text{Var}[X]\text{Var}[Y]}} \quad (7)$$

其中, $\text{Cov}(X, Y)$ 为 X 和 Y 的协方差函数, $\text{Var}[X]$ 和 $\text{Var}[Y]$ 分别为 X 和 Y 的方差函数。拟合数据和原始数据对应点的误差平方和 (SSE, sum of the squares of errors) 为

$$\text{SSE} = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (8)$$

均方根误差 (RMSE, root mean square error) 为

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{\text{SSE}}{n}} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (9)$$

其中, n 表示样本数量, y_i 和 \hat{y}_i 表示因变量的实际值和预测值。在表 2 中, R-square、SSE 和 RMSE 均在合理的数量级上, 证明了拟合的有效性。

表 2 图 6 中 2 个场景的拟合参数及拟合结果

$d_2/\mu\text{m}$	α	k_1	k_2	R-square	SSE	RMSE
3	60°	7.015 7	0.038 2	0.999 6	$4.018 6 \times 10^{-6}$	$6.403 7 \times 10^{-6}$
4	150°	2.868 8	0.023 8	0.999 9	$2.781 1 \times 10^{-7}$	$1.684 6 \times 10^{-6}$

不同 d_1 、 α 和 t 的场景中, 透明机的累计观察概率 F_{R_2} 作为 d_2 的函数比较计算结果和仿真结果如图 7 所示。从图 7 可以看出, f_{R_2} 随着 d_2 的增加而减少, 这与第 2 节的分析是一致的。 d_2 和 α 同时增大, 即 R_1 与 S 、 R_2 的距离同时增大时, R_1 远离其他节点, 因此 R_1 对 R_2 的干扰减小, f_{R_2} 增大。式(3)曲线和仿真曲线的变化趋势相同, 式(3)数值和仿真结果的高度吻合, 证明了参数拟合和模型的有效性和正确性。

4 神经网络训练和预测

为了使式(2)和式(3)中构建的信道模型在实际场景中能够有效应用, 本文使用 ANN 对参数 k_1 、 k_2 进行训练。对于 ANN 的训练, 本文使用反向传播和贝叶斯正则化来处理过度学习, 根据 LM 算法优化更新权值和偏差值。在 ANN 训练中, 本文将 390 个样本组成的数据作为训练数据集 A, 其中 70% 被划分为训练子集, 其余 30% 被划分为 2 个样本个数相等的子集用于验证与测试, 这些样本

利用式(2)和式(3)来拟合大量仿真数据得到，并进行随机分组。

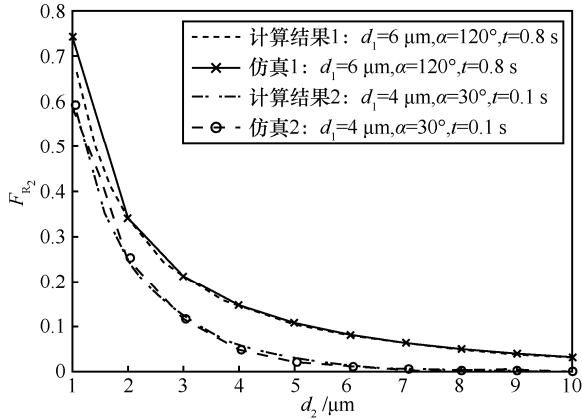


图 7 计算结果和仿真结果

神经网络训练过程的流程和数据集结构如图 8 所示。以每个特定场景的模型参数为输入参数，利用 LM 算法对仿真数据进行拟合求出 k_i 值，并将其作为输出参数，构成了带有场景参数的训练和预测数据集。训练和预测数据集形成后，训练数据被输入 ANN 进行训练。训练后的神经网络只需要输入系统参数 d_2 、 α （验证数据集的输入参数）而得到预测调节参数 k_i' 。将完成每一次训练后进行预测得到的预测数据集和验证数据集的调节参数 k_i 进行对比，预测数据和验证数据对应点的均方误差（MSE, mean square error）如图 9 所示。表达式为

$$MSE = RMSE^2 = \frac{SSE}{n} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (10)$$

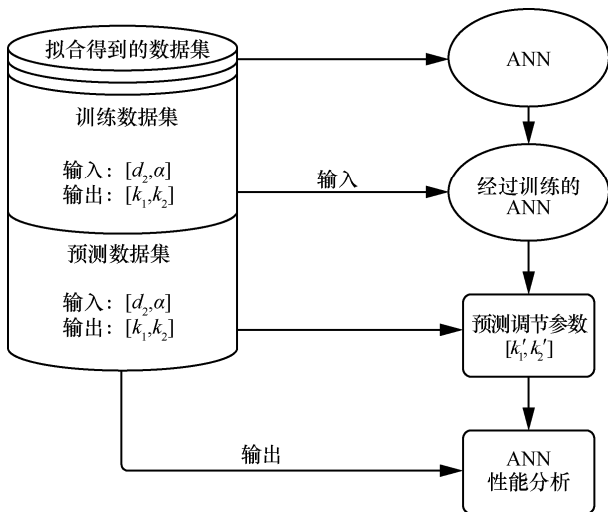


图 8 神经网络训练过程的流程和数据集结构

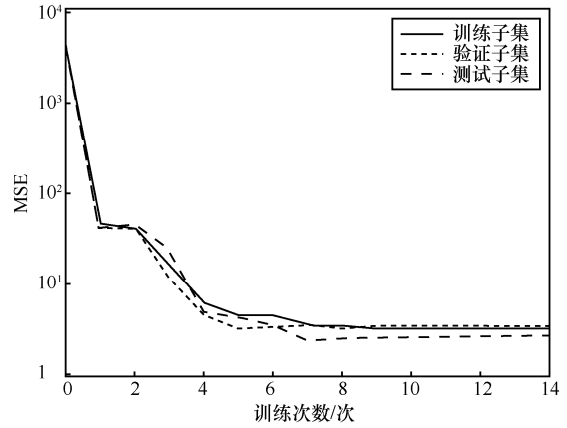


图 9 不同训练次数时的 MSE

MSE 越趋近 0，表明预测数据和实际数据越相近，即训练得到的关系式的正确性越高。图 9 中曲线表明训练次数为 8 时 MSE 最小，即最佳性能点；更少次数的训练会发生“欠拟合”，缺乏对参数之间关系的充分学习；更多次数的训练会发生“过拟合”，不能有效学习参数之间的关系。

训练子集、验证子集、测试子集，以及全部数据的回归系数曲线如图 10 所示。从图 10(a)~图 10(c)可以看出，训练子集、验证子集、测试子集都具有非常强的相关性结果。从图 10(d)可以看出，全部数据训练得到的拟合曲线贴合训练数据，相关性高，而 59 个测试数据的相关性略有降低，测试数据集的验证数据的相关度也与此相似。由此可见，该 ANN 模型是可行的。

为了检验 ANN 的泛化能力，本文使用同样来自式(2)和式(3)的另外的 390 个样本组成的预测数据集 B 去测试数据集 A 训练得到的神经网络，回归分析如图 11 所示，训练得到的拟合曲线贴合测试数据，相关性高，系数为 $R=0.9751$ ，由此再次证明了该 ANN 模型的可行性。

最后，本文使用数据集 A 通过其他对比算法进行 ANN 训练，再用数据集 B 对其泛化能力进行检验。使用的对比算法如表 3 所示，训练的结果如表 4 所示。从表 4 可以看出，LM 算法最适用于 ANN 模型的训练与泛化。

5 结束语

本文以点源、吸收机和透明机共存的自由扩散分子通信系统为研究对象，分析吸收机对自由空间中分子运动的影响，进而对其进行信道建模。此外，本文提出了使用 ANN 方法对信道模型参数进行学习，仿真结果证明了所提信道模型的准确性。

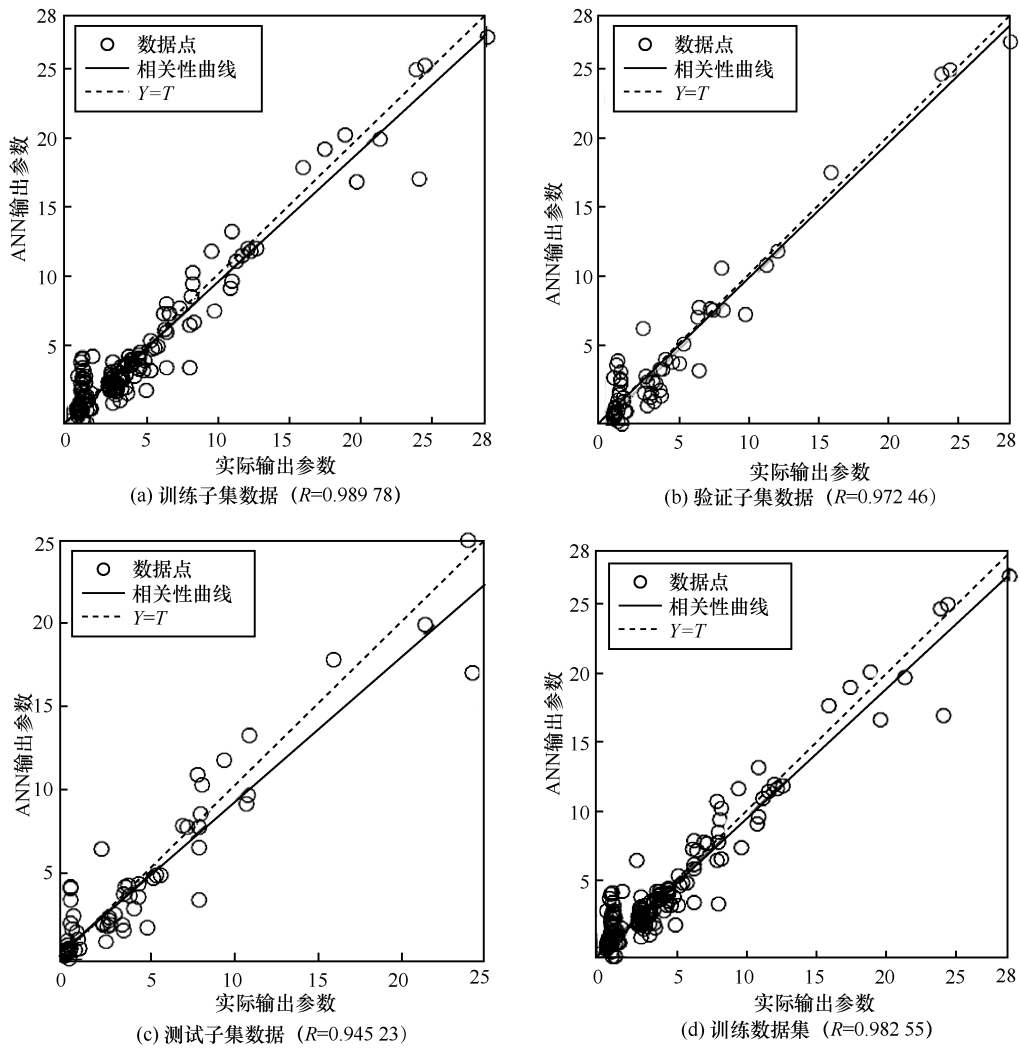


图 10 不同数据集的回归分析

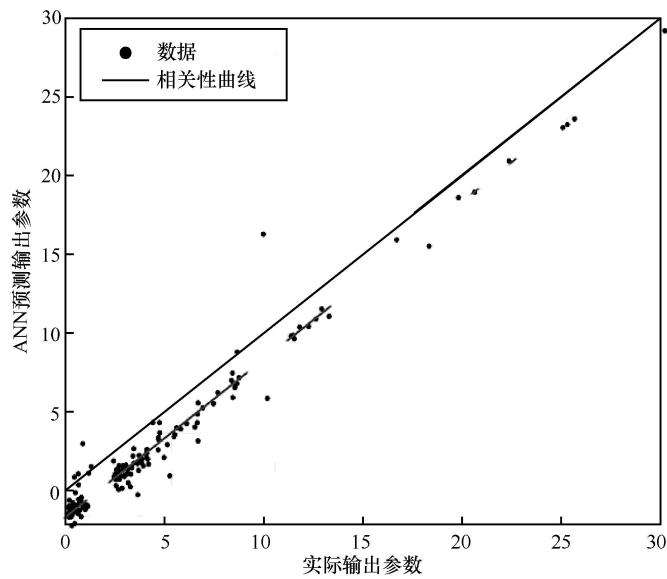


图 11 预测数据集的回归分析

表 3 对比算法介绍

训练算法	全称	特点
BFG	BFGS quasi-Newton algorithm	对于较小的网络是一种有效的训练算法, 对于非常大的网络效率并不高
BR	Bayesian regularization	使用此函数训练的网络必须使用 MSE 或 SSE 性能函数
CGB	conjugate gradient with Powell-beale restart	据 Powell-Beale 重启的共轭梯度反向传播来更新权重和偏差值的网络训练函数
CGF	conjugate gradient backpropagation with Fletcher-Reeves update	共轭梯度法中存储量要求最小的算法, 但泛化能力较差
CGP	conjugate gradient backpropagation with Polak-Ribière updates	要求的存储量大, 但收敛速度快
LM	Levenberg-Marquardt	避免了直接计算 Hessian 矩阵, 从而减少了训练中的计算量, 可以更快地完成计算, 但是需要较大内存, 而且对于大型矩阵收敛速度慢
OSS	one-step secant backpropagation	比 BFG 算法占用更少的存储空间和计算量。与共轭梯度算法相比, 它每完成一次训练都需要更多的存储空间和计算量
RP	resilient backpropagation	可以在不降低网络设计准确性的前提下, 提供更快的权重和偏差的局部自适应。运行时需要存储每个权重和偏差的更新值, 会占用较多的存储空间
SCG	scaled conjugate gradient	将模值信赖域算法与共轭梯度算法结合起来, 减少了用于调整方向时搜索网络的时间

表 4 不同算法泛化能力比较

训练算法	R ² -square	SSE	RMSE
BFG	9.0374×10^{-1}	4.1024×10^2	7.2615×10^{-1}
BR	7.7082×10^{-1}	3.8048×10^3	2.211 4
CGB	4.2863×10^{-1}	9.4861×10^3	3.491 8
CGF	8.0876×10^{-1}	2.1526×10^3	1.663 4
CGP	5.8537×10^{-1}	3.7298×10^3	2.189 5
LM	9.7599×10^{-1}	1.5427×10^3	1.408 2
OSS	6.8866×10^{-1}	4.1527×10^3	2.310 3
RP	7.5656×10^{-1}	3.7293×10^3	2.189 4
SCG	7.7725×10^{-1}	2.3101×10^3	1.723 2

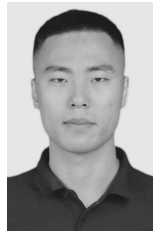
参考文献:

- [1] DRESSLER F, FISCHER S. Connecting in-body nano communication with body area networks: challenges and opportunities of the Internet of Nano things[J]. Nano Communication Networks, 2015, 6(2): 29-38.
- [2] AKYILDIZ I F, BRUNETTI F, BLÁZQUEZ C. Nanonetworks: a new communication paradigm[J]. Computer Networks, 2008, 52(12): 2260-2279.
- [3] BUSH S F. Nanoscale communication networks[M]. Boston: Artech House Press, 2010.
- [4] GREGORI M, AKYILDIZ I F. A new nanonetwork architecture using flagellated bacteria and catalytic nanomotors[J]. IEEE Journal on Selected Areas in Communications, 2010, 28(4): 612-619.
- [5] ZHOU Y Q, TIAN L, LIU L, et al. Fog computing enabled future mobile communication networks: a convergence of communication and computing[J]. IEEE Communications Magazine, 2019, 57(5): 20-27.
- [6] ZHOU Y Q, LIU L, WANG L, et al. Service-aware 6G: an intelligent and open network based on the convergence of communication, computing and caching[J]. Digital Communications and Networks, 2020, 6(3): 253-260.
- [7] AKYILDIZ I F, JORNET J M. The Internet of nano-things[J]. IEEE Wireless Communications, 2010, 17(6): 58-63.
- [8] NAKANO T, SUDA T, KOUJIN T, et al. Molecular communication through gap junction channels: System design, experiments and modeling[C]//2007 2nd Bio-Inspired Models of Network, Information and Computing Systems. Piscataway: IEEE Press, 2007: 139-146.
- [9] AKAN O B, RAMEZANI H, KHAN T, et al. Fundamentals of molecular information and communication science[J]. Proceedings of the IEEE, 2017, 105(2): 306-318.
- [10] FARSAFAD N, YILMAZ H B, ECKFORD A, et al. A comprehensive survey of recent advancements in molecular communication[J]. IEEE Communications Surveys and Tutorials, 2016, 18(3): 1887-1919.
- [11] PIEROBON M, AKYILDIZ I F. A physical end-to-end model for molecular communication in nanonetworks[J]. IEEE Journal on Selected Areas in Communications, 2010, 28(4): 602-611.
- [12] JAMALI V, AHMADZADEH A, WICKE W, et al. Channel modeling for diffusive molecular communication—a tutorial review[J]. Proceedings of the IEEE, 2019, 107(7): 1256-1301.
- [13] BERG H C. Random walks in biology[M]. Princeton: Princeton University Press, 1993.
- [14] YILMAZ H B, HEREN A C, TUGCU T, et al. Three-dimensional channel characteristics for molecular communications with an absorbing receiver[J]. IEEE Communications Letters, 2014, 18(6): 929-932.
- [15] DENG Y S, NOEL A, ELKASHLAN M, et al. Modeling and simulation of molecular communication systems with a reversible adsorption receiver[J]. IEEE Transactions on Molecular, Biological and Multi-Scale Communications, 2015, 1(4): 347-362.
- [16] YILMAZ H B, SUK G Y, CHAE C B. Chemical propagation pattern for molecular communications[J]. IEEE Wireless Communications Letters, 2017, 6(2): 226-229.
- [17] GENÇ G, KARA Y E, TUGCU T, et al. Reception modeling of sphere-to-sphere molecular communication via diffusion[J]. Nano

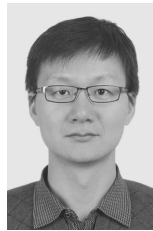
Communication Networks, 2018, 16: 69-80.

- [18] BAO X, ZHU Y F, ZHANG W C. Channel characteristics for molecular communication via diffusion with a spherical boundary[J]. IEEE Wireless Communications Letters, 2019, 8(3): 957-960.
- [19] HUANG S, LIN L, XU J, et al. Molecular communication via subdiffusion with a spherical absorbing receiver[J]. IEEE Wireless Communications Letters, 2020, 9(10): 1682-1686.
- [20] CAO T N, TRINH D P, JEONG Y, et al. Anomalous diffusion in molecular communication[J]. IEEE Communications Letters, 2015, 19(10): 1674-1677.
- [21] ARIFLER D, ARIFLER D. Monte Carlo analysis of molecule absorption probabilities in diffusion-based nanoscale communication systems with multiple receivers[J]. IEEE Transactions on NanoBioscience, 2017, 16(3): 157-165.
- [22] DENG Y S, NOEL A, GUO W S, et al. Analyzing large-scale multiuser molecular communication via 3-D stochastic geometry[J]. IEEE Transactions on Molecular, Biological and Multi-Scale Communications, 2017, 3(2): 118-133.
- [23] ZABINI F. Spatially distributed molecular communications: an asynchronous stochastic model[J]. IEEE Communications Letters, 2018, 22(7): 1326-1329.
- [24] BAO X, LIN J, ZHANG W C. Channel modeling of molecular communication via diffusion with multiple absorbing receivers[J]. IEEE Wireless Communications Letters, 2019, 8(3): 809-812.
- [25] DINC F. Analytical estimation for the impulse response of an n-dimensional diffusion channel with an absorbing receiver[J]. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 2019, 52(11): 11LT01.
- [26] HUANG X Y, FANG Y T, NOEL A, et al. Channel characterization for 1-D molecular communication with two absorbing receivers[J]. IEEE Communications Letters, 2020, 24(6): 1150-1154.
- [27] KOO B H, LEE C, YILMAZ H B, et al. Molecular MIMO: from theory to prototype[J]. IEEE Journal on Selected Areas in Communications, 2016, 34(3): 600-614.
- [28] LU Y, HIGGINS M D, NOEL A, et al. The effect of two receivers on broadcast molecular communication systems[J]. IEEE Transactions on NanoBioscience, 2016, 15(8): 891-900.

[作者简介]



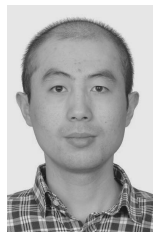
孙卓（1994-），男，吉林镇赉人，江苏大学博士生，主要研究方向为分子通信。



鲍煦（1982-），男，江苏靖江人，博士，江苏大学教授、博士生导师，主要研究方向为分子通信、智慧无线通信、纳米传感网技术。



林颜（1994-），女，福建平潭人，江苏大学硕士生，主要研究方向为分子通信。



张文策（1987-），男，河北保定人，博士，江苏大学副教授、硕士生导师，主要研究方向为分子通信、大规模 MIMO、智能反射面技术。