分子通信的频域检测

Meltem Civas[*†] **Ali Abdali**[*] **Murat Kuscu**[*] **Ozgur B. Akan**[*†]

[*]下一代通信中心（CXC）电气与电子工程系 Koç 大学，34450，土耳其伊斯坦布尔{mcivas16, aabdali21, mkuscu, akan}@ku.edu.tr

[†]万物互联（IoE）团队，工程系电气工程系，剑桥大学，CB3 0FA，英国剑桥{mc2365, oba21}@cam.ac.uk

arXiv:2301.01049v1 [eess.SP] 3 Jan 2023

摘要——**分子通信（MC）是一种仿生通信范式，使用分子作为信息载体，因此需要非常规的发射机/接收机架构以及调制/检测技术。实用的分子通信接收器（MC-Rxs）可基于场效应晶体管生物传感器（生物场效应晶体管）架构实现，其中表面受体可与配体发生可逆反应，而配体浓度承载着信息。随后，配体结合受体的时变浓度通过场效应转化为电信号，用于解码传输的信息。然而，配体-受体相互作用并不能实现理想的分子选择性，因为分子通信信道中共存的相似类型配体（即干扰物）可能与同类型受体相互作用，从而造成串扰。仅凭接收器电输出的时域样本来克服这种分子串扰并非总是可行，尤其是在接收器不了解干扰物统计特性或接近饱和运行时。本研究提出一种适用于基于生物场效应晶体管的分子通信接收器的频域检测（FDD）技术，该技术利用不同类型配体结合反应速率的差异；这种差异体现在配体-受体结合涨落的噪声频谱中。我们对该频域检测技术的误比特概率（BEP）进行了解析推导，并通过与广泛使用的时域检测（TDD）技术进行比较，展示其在随机分子干扰下解码传输浓度信号的有效性。所提出的频分双工方法可应用于任何将受体分子用作信道-接收机接口的基于生物传感器的分子通信接收器。**

索引词—**分子通信、接收器、频域检测、生物传感器、配体-受体相互作用**

I. 引言

利用分子编码和传递信息，即分子通信（MC），是自然界连接生物体（如天然细胞）的方式。通过工程化这一非传统通信范式，将连接扩展至合成生物纳米体（如纳米生物传感器和人工细胞），这一愿景催生了生物纳米物联网*(IoBNT)*这一新型网络框架，有望推动生物纳米技术在医疗保健和环境领域实现前所未有的应用 [1], [2]。

与传统电磁通信技术有着本质区别，分子通信需要采用新型收发机架构，以及能够应对高度时变的生化环境中非线性且复杂的信道特性的新型调制、编码和检测技术 [3]。分子通信接收器（MC-Rxs）的设计和检测技术无疑是文献中最受关注的领域。然而，由于被动接收器架构建模简单，以往许多研究都采用了这类架构；它们在物理上与分子通信信道不相连，因此实际应用价值不大 [3]。分子通信领域的一个新兴趋势是，对更实用的分子通信接收器进行建模和设计，并在其表面采用配体受体作为选择性生物识别单元，从而模拟天然细胞的感知与通信界面。其中一种设计已在 [4], 中得到实际实现，它基于场效应晶体管生物传感器（生物场效应晶体管），利用场效应将配体受体（LR）相互作用转化为电信号，以解码传输的信息。

配体-受体相互作用是天然细胞进行感知和通信的基础。然而，生物受体对靶配体的选择性并不理想，这种所谓的受体多重识别会导致与生化环境中共存的其他类型分子发生串扰 [5]。天然细胞通常通过细胞内化学反应网络和多状态受体机制（如动力学校对）来应对这种串扰 [6]。同样的分子干扰问题也存在于采用配体受体的非生物MC-Rx中，因此在开发可靠的检测技术时也应加以解决 [7]。

我们此前关于生物合成分子通信接收器的研究，通过开发基于对单个受体结合时间间隔进行采样的检测技术，解决了分子干扰问题，从而区分干扰信号分子与信息分子 [6], [7]。然而，这种方法并不适用于基于生物传感器的分子通信接收器，因为它们无法获取单个受体状态的时间轨迹。另一方面，根据结合受体浓度的时变情况解码信息，效果并不理想，这是因为不同类型的配体在时域中无法区分。尤其是在接收器不了解干扰物浓度统计特性，且接收器在接近饱和状态下运行时，更是如此 [7]。

本文提出了一种基于受体-配体结合相互作用的频域检测（FDD）技术，适用于基于生物传感器的分子通信接收器，

该技术能够区分通道中共存的不同类型配体，并根据受体占有率波动（即结合噪声）的功率谱密度（PSD）估计各配体的浓度。

随机且可逆的 LR 相互作用可建模为平衡态下的二态连续时间马尔可夫过程，其状态转移速率由 LR 对 [5]的结合速率和解离速率决定。尽管多种不同类型的配体都能与同一类型的受体相互作用，但这些相互作用通常由不同的结合速率和解离速率决定。反应速率的差异会导致相互作用的特征频率 f_{ch} 不同；该特征频率是平衡态下马尔可夫过程相关时间 τ_B 的倒数，同时也是配体浓度和 LR 反应速率的函数 [7]。LR 对的特征频率表现为结合噪声的洛伦兹形功率谱密度中的截止频率。所提出的频分双工方法利用频域中的这种相关性，以最大似然（ML）方式估计信息分子的浓度，并利用估计出的浓度对传输的信息进行最优解码。我们以闭式形式推导了频分双工方法的误比特概率（BEP），并将其与一种时域检测（TDD）技术的误差性能进行了比较；该技术依据单个采样时刻采集的结合受体数量进行检测。性能分析结果表明，所提出的频分双工方法显著优于时域检测方法，尤其是在干扰条件较强时。

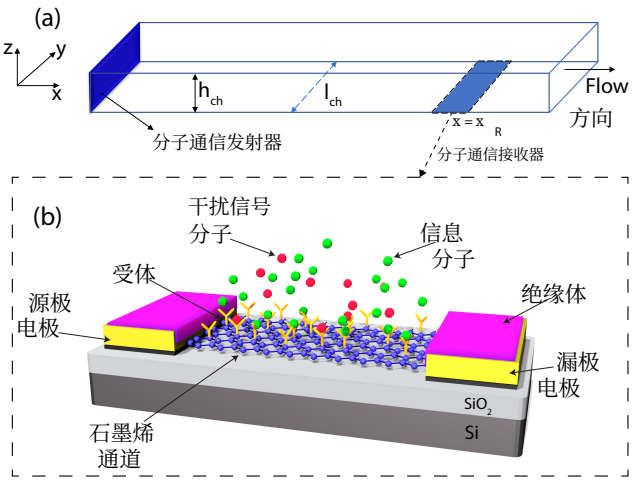


图 1：a）微流控通道的三维视图；图中标出了发射器和接收器的位置。b）暴露于信息分子和干扰分子中的基于石墨烯场效应晶体管的分子通信接收器。

II. 系统模型

我们考虑一种采用二进制浓度移位键控（CSK）的微流控分子通信系统，发射器（Tx）在每个信号间隔 [8]开始时立即释放 $N_{m|s}$ 个分子。这里， m 表示信息分子， $s \in \{0,1\}$ 表示传输比特。假设信号间隔足够长，可以忽略符号间干扰（ISI）。如图1(a)所示，微流控通道被抽象为一个横截面呈矩形的三维通道。Tx位于通道入口，分子在通道横截面上均匀分布并立即释放，随后在单向流体流动的作用下从Tx传播至Rx，Rx位于

通道底部。我们考虑如图 1(b) [4]所示的二维基于石墨烯生物场效应晶体管的分子通信接收器。通道中存在一种干扰分子，它们也能与接收器上的受体结合，但反应速率不同。假设在采样时刻，接收器附近的干扰分子浓度 c_i服从均值为 μ_{c_i} 、方差为 $\sigma^2_{c_i}$的对数正态分布。我们假设接收器知道所传输的信息分子数量 $N_{m|s}$，以及信息分子和干扰分子的结合/解离速率。

释放的分子通过对流和扩散沿微流控通道传播。对流使传输的分子从发射器 Tx 向接收器 Rx 均匀、单向地漂移，而扩散则作用于各个方向

使分子在传播过程中发生弥散。弥散形成平滑的浓度分布，可近似为高斯分布。假设与受体结合的配体数量足够少，可以忽略其对通道中浓度的影响，则传播过程可表示为一维对流-扩散问题，其解为 [8]:

$$c_{m|s}(x,t) = \frac{N_{m|s}}{A_{ch}\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{4Dt}\right), \qquad (1)$$

其中，$c_{m|s}(x,t)$表示位置 x 和时间 t处的配体浓度，$A_{ch} = h_{ch} \times l_{ch}$ 是通道的横截面积，其中 h_{ch} 和 l_{ch} 分别为通道高度和宽度， u 是沿 x 轴方向的流体流速， D 是有效扩散系数。对于矩形横截面的通道， D 可表示如下 [9]:

$$D = \left(1 + \frac{8.5u^2h_{ch}^2l_{ch}^2}{210D_0^2(h_{ch}^2 + 2.4h_{ch}l_{ch} + l_{ch}^2)}\right)D_0, \qquad (2)$$

其中， D_0 是配体的扩散系数。

由式 (1) 给出的配体浓度分布峰值在时间 $t_D = \frac{x_R}{u}$ 到达接收器（Rx）的中心位置 x_R。由于扩散使分子通信信道（MC channel）的特性类似于低通滤波器，接收器位置附近的浓度信号变化缓慢，因此，在 t_D [8]、 [9] 附近的短时间窗口内，配体浓度可视为恒定，配体-受体反应（LR reactions）得以满足平衡条件。接收器可在时间 $t = t_D$ 对受体状态进行采样，此时配体浓度为 $c_{m|s}(x_R, t_D) = \frac{N_{m|s}}{A_{ch}\sqrt{4\pi Dt_D}}$ [10]。因此，结合受体的数量 $N_{b|s}$ 服从二项分布，其均值为

$$\mu_{N_{b|s}} = p_{b|s}N_r \qquad \sigma^2_{N_{b|s}} = p_{b|s}\left(1 - p_{b|s}\right)N_r,$$

[10] N_r 方差为 ( )，其中 表示独立表面受体的数量。在两种不同类型的配体（即信息

和干扰分子）存在时，单个受体的结合态概率为 [6]

$$p_{b|s} = \frac{c_{m|s}/K_{D_m} + c_i/K_{D_i}}{1 + c_{m|s}/K_{D_m} + c_i/K_{D_i}}, \tag{3}$$

其中， $K_{D_m} = k_m^-/k_m^+$ 和 $K_{D_i} = k_i^-/k_i^+$ 分别是信息分子和干扰分子的解离常数。带电配体与受体结合后会产生有效电荷，如 $Q_{Gr|s} = N_{b|s} q_{eff} N_{e^-}$所示，该电荷反映在石墨烯沟道上；其中， N_{e^-} 是每个配体分子中的自由电子数。 q_{eff} 是存在离子屏蔽（即德拜屏蔽）时，单个已结合配体的有效电子电荷： $q_{eff} = q \times \exp\left(-\frac{r}{\lambda_D}\right)$，其中 q 是元电荷， r 是表面受体的长度， λ_D 是德拜长度，其关系式为$\lambda_D = \sqrt{(\epsilon \kappa_B T)/(2 N_A q^2 c_{ion})}$，其中 ϵ 是介质的介电常数， κ_B 是玻尔兹曼常数， N_A 是阿伏伽德罗常数 [10]。因此，结合分子产生的平均表面电势可写为 $\Psi_{Gr|s} = \frac{Q_{Gr|s}}{C_G}$，其中 $C_G = \left(\frac{1}{C_{Gr}} + \frac{1}{C_Q}\right)^{-1}$ 是生物场效应晶体管的总栅极电容。 C_{Gr} 是石墨烯与电解质通道之间的电双层电容， $C_{Gr} = A_{Gr}\epsilon/\lambda_D$，其中 A_{Gr}是暴露于电解质的石墨烯表面积， C_Q 是量子电容， $C_Q = c_q \times A_{Gr}$，其中 c_q 是石墨烯单位面积的量子电容 [4]。平衡态下，结合分子导致的输出电流偏差为

$$\Delta I_{b|s} = g \times \Psi_{Gr|s}, \tag{4}$$

其中 g 是生物场效应晶体管的跨导。对于较大的 N_r，采样时刻的结合受体数量 $N_{b|s}$ 可近似视为高斯分布 $N_{b|s} \sim \mathcal{N}(\mu_{N_{b|s}}, \sigma^2_{N_{b|s}})$，即 [10]。由于换能过程是线性的，结合分子引起的输出电流变化也可近似视为高斯分布，其均值为 $\mu_{\Delta I_{b|s}} = \zeta \mu_{N_{b|s}}$，方差为 $\sigma^2_{\Delta I_{b|s}} = \zeta^2 \sigma^2_{N_{b|s}}$，其中 $\zeta = \left(\frac{q_{eff} N_{e^-} g}{C_G}\right)$。

在低维半导体材料中，另一种会导致总输出电流波动的噪声是 $1/f$ 噪声，它取决于栅极电压，且与接收信号无关。我们采用常用的电荷噪声模型来描述石墨烯场效应晶体管中 $1/f$噪声的特性 [11]： $S_f(f) = S_{f_{1Hz}}/f^{\beta}$其中 $S_{f_{1Hz}}$是 1 Hz 处的噪声功率，噪声指数 β 是一个经验参数 $0.8 \leq \beta \leq 1.2$。如 [10]所述，在物理相关的观测窗口内，$1/f$噪声可近似为白噪声。基于此，$1/f$ 噪声的方差可写为

$$\sigma_f^2 = \int_0^{f_L} S_f(f_L) \mathrm{d}f + \int_{f_L}^{f_H} S_f(f) \mathrm{d}f, \tag{5}$$

其中， f_L 是观测窗口的下限频率，低于该频率时噪声功率被视为恒定； f_H 是上限频率，高于该频率时噪声功率被认为可以忽略。因此，总输出电流的方差和均值分别为 $\sigma^2_{\Delta I_s} = \zeta^2 \sigma^2_{N_{b|s}} + \sigma_f^2$ 和$\mu_{\Delta I_s} = \mu_{\Delta I_{b|s}}$。

III. 时域检测

由于接收器不了解干扰物浓度统计，因此它仅根据与信息分子发送浓度 [7]相对应的接收信号统计，构建用于时分双工的最优最大似然决策阈值：

$$\gamma_{td} = \frac{1}{\sigma^2_{\Delta I_1} - \sigma^2_{\Delta I_0}} \Big(\sigma^2_{\Delta I_1} \mu_{\Delta I_0} - \sigma^2_{\Delta I_0} \mu_{\Delta I_1} + \sigma_{\Delta I_1} \sigma_{\Delta I_0} \times \sqrt{(\mu_{\Delta I_1} - \mu_{\Delta I_0})^2 + 2(\sigma^2_{\Delta I_1} - \sigma^2_{\Delta I_0}) \ln(\sigma_{\Delta I_1}/\sigma_{\Delta I_0})} \Big). \tag{6}$$

由于接收器 Rx 在计算γ_{td}时未考虑干扰统计，因此它采用单分子情形对应的结合态概率，即 $p_{b|s} = \frac{c_{m|s}/K_{D_m}}{1 + c_{m|s}/K_{D_m}}$。

为推导时分双工（TDD）的比特错误概率（BEP），我们首先求出接收器输出的统计特性。根据全期望定律，结合受体的平均数量可表示为： $\mu_{N_{b|s}} = \int_0^{\infty} N_r p_{b|s}(c_i) f(c_i) \mathrm{d}c_i$，其中 $p_{b|s}(c_i) = \frac{c_{m|s}/K_{D_m} + c_i/K_{D_i}}{1 + c_{m|s}/K_{D_m} + c_i/K_{D_i}}$，且 $f(\cdot)$ 是对数正态分布的概率密度函数。因此， $\mu_{\Delta I_s} = \zeta \mu_{N_{b|s}}$。类似地，根据全方差定律，我们得到输出电流的方差为

$$\sigma^2_{\Delta I_s} = \zeta^2 \Big(\int_0^{\infty} \big(1 - p_{b|s}(c_i)\big) p_{b|s}(c_i) N_r f(c_i) \mathrm{d}c_i + \int_0^{\infty} \big(p_{b|s}(c_i) N_r\big)^2 f(c_i) \mathrm{d}c_i \Big) - \mu^2_{\Delta I_s} + \sigma_f^2. \tag{7}$$

因此，给定决策阈值 γ_{td}，时域检测方法的比特错误概率可表示为 [7]:

$$P_e^{TDD} = \frac{1}{4} \operatorname{erfc}\left(\frac{\gamma_{td} - \mu_{\Delta I_0}}{\sqrt{2\sigma^2_{\Delta I_0}}}\right) + \frac{1}{4} \operatorname{erfc}\left(\frac{\mu_{\Delta I_1} - \gamma_{td}}{\sqrt{2\sigma^2_{\Delta I_1}}}\right). \tag{8}$$

IV. 频域检测

本节介绍一种频分双工方法，该方法利用总噪声过程（基于石墨烯生物场效应晶体管的分子通信接收器的结合噪声 $+ 1/f$ 噪声）的模型功率谱密度和观测功率谱密度，估计信息分子c_m的接收浓度，并将其用于符号判决。这里，观测功率谱密度是由时域样本构造的噪声周期图。接下来，我们将介绍模型功率谱密度，然后介绍所提出的估计方法。

A. 结合噪声功率谱密度理论模型

本节介绍特定信息分子和干扰分子浓度组合下结合噪声功率谱密度的理论模型，即 $\boldsymbol{\lambda} = [c_m, c_i]$。受体的结合过程可用具有三种状态的朗缪尔反应模型描述：未结合态 (R) 、与信息分子结合态 (RM) 和与干扰分子结合态 (RI)，其状态占据概率分别为 p_R， p_{RM}和 p_{RI}： [12]: $R + M \underset{k_m^+}{\overset{k_m^-}{\rightleftharpoons}} RM$，和 $R + I \underset{k_i^+}{\overset{k_i^-}{\rightleftharpoons}} RI$。因此，

化学主方程表示如下:

$$\begin{bmatrix} \frac{\mathrm{d}p_{RM}}{\mathrm{d}t} \\ \frac{\mathrm{d}p_{RI}}{\mathrm{d}t} \\ \frac{\mathrm{d}p_{R}}{\mathrm{d}t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -k_m^- & 0 & k_m^+ c_m \\ 0 & -k_i^- & k_i^+ c_i \\ k_m^- & k_i^- & -k_m^+ c_m - k_i^+ c_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_{RM} \\ p_{RI} \\ p_R \end{bmatrix} \quad (9)$$

（9）中包含反应速率和浓度的矩阵的秩为 2，因为一个状态概率可以表示为另外两个状态占据概率的函数，即 $p_R + p_{RM} + p_{RI} = 1$. 因此，将（9）左侧设为零，即可得到平衡概率:

$$p_{RM}^0 = \frac{c_m/K_{D_m}}{1 + \frac{c_m}{K_{D_m}} + \frac{c_i}{K_{D_i}}}, p_{RI}^0 = \frac{c_i/K_{D_i}}{1 + \frac{c_m}{K_{D_m}} + \frac{c_i}{K_{D_i}}} \quad (10)$$

以及 $p_R^0 = 1 - (p_{RM}^0 + p_{RI}^0)$。 在平衡条件下，状态占据概率可以表示为平衡状态概率及其周围的涨落 [12], [13] 的函数:

$$p_j(t) = p_j^0 + \Delta p_j(t), \quad j \in \{RM, RI, R\}. \quad (11)$$

将（11）代入（9）并使用泰勒展开，状态涨落可表示如下 [12]:

$$\frac{\mathrm{d}\Delta \mathbf{p}'(t)}{\mathrm{d}t} = \mathbf{\Omega} \Delta \mathbf{p}'(t). \quad (12)$$

在（12）中， $\Delta \mathbf{p}'(t) = [\Delta p_{RM}(t); \Delta p_{RI}(t)]$ 是包含状态占据概率的向量的简化形式，其中$\mathbf{\Omega}$ 是

$$\mathbf{\Omega} = \begin{bmatrix} -k_m^+ c_m - k_m^- & -k_m^+ \\ -k_i^+ c_i & -k_i^+ c_i - k_i^- \end{bmatrix}. \quad (13)$$

由随机结合反应引起的 MC-Rx 输出电流偏差，即 $\Delta I_b(t)$, 可表示为

$$\Delta I_b(t) = \frac{q_{eff}\ g}{C_G}\ \mathbf{z}^T \mathbf{R} \Delta \mathbf{p}'(t) \quad (14)$$

其中，$\mathbf{z} = [N_{e^-}; N_{e^-}; 0]$ 是一个向量，其中包含与每种状态相对应的元电荷数；$\mathbf{R}$ 是变换矩阵，使得 $\Delta \mathbf{p}(t) = \mathbf{R} \Delta \mathbf{p}'(t)$。 由于 $\Delta I_b(t)$ 是平稳过程，令 $t = 0$ 如下设置，即可求得结合噪声涨落的理论功率谱密度 [12]:

$$\begin{aligned} S_b(f) &= 2\ \mathcal{F}\{\mathrm{E}[\Delta I_b(t) \Delta I_b(t+\tau)]\} \quad (15) \\ &= 2\ \mathcal{F}\{\mathrm{E}[\Delta I_b(0) \Delta I_b(\tau)]\} \\ &= 4N_r \left(\frac{q_{eff} g}{C_G}\right)^2 \mathbf{z}^\intercal \mathbf{R} \Gamma \left(\mathrm{Re}\{(j2\pi f \mathbf{I}_{2\times 2} - \mathbf{\Omega})^{-1}\}\right)^\intercal \mathbf{R}^\intercal \mathbf{z} \end{aligned}$$

其中， $\mathcal{F}\{\cdot\}$ 表示傅里叶变换，$\mathbf{I}_{2\times 2}$ 是单位矩阵， Γ 是包含期望状态概率的矩阵，其表达式如下 [12]:

$$\Gamma = \begin{bmatrix} p_{RM}^0 \left(1 - p_{RM}^0\right) & -p_{RM}^0 p_{RI}^0 \\ -p_{RM}^0 p_{RI}^0 & p_{RI}^0 \left(1 - p_{RI}^0\right) \end{bmatrix}. \quad (16)$$

因此，与特定的（c_m， c_i）组合相对应的总电流噪声理论功率谱密度可写为

$$S(f) = S_b(f) + S_f(f). \quad (17)$$

B. 功率谱密度参数的最大似然估计

在接下来的部分中，我们将介绍参数值提取，即根据噪声功率谱密度估计信息分子和干扰分子的浓度 $\boldsymbol{\lambda} = [c_m, c_i]$。 检测器使用估计得到的信息分子浓度 $\hat{c}_m$ 进行符号判决，具体将在下一节 IV-C 中说明。我们的分析基于以下假设:

- 总噪声过程，即结合涨落与 $1/f$ 噪声的组合，是一个平稳、零均值的过程，具有单边谱。
- 接收器已知由式（17）表示的模型功率谱密度函数，以及信息分子和干扰分子的结合/解离速率。接收器还知道第 II 节所述比特 $s = 0$ 和 $s = 1$对应的发射信息分子数。因此，接收器将在一个采样窗口内对输出电流 ΔI_b 进行时间采样，以估计稳态信息分子和干扰分子浓度；其中，我们考虑一个如第 II 节所述服从对数正态分布的干扰物浓度 c_i 的单次实现。为分离噪声，将舍弃 ΔI_b 的直流分量。
- 根据第 II 节 [10]讨论的平衡假设，假定信息和干扰信号的浓度在采样窗口内保持恒定。
- 时域样本的观测功率谱密度以及式 (17) 表示的功率谱密度参数模型将用于对 $\boldsymbol{\lambda} = [c_m, c_i]$进行最大似然估计。假设观测功率谱密度是通过周期图法计算得到的。

对于每个发送符号，我们有 N 个噪声样本 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots\ldots, x_N)$，采样周期为 Δt。因此，每个符号的总采样时长，即采样窗口的长度，为 $T_d = N\Delta t$。采样信号的周期图可由样本的离散傅里叶变换（DFT）计算得到 $\boldsymbol{x}$。

当 N 为偶数时，周期图的值表示如下： $Y_k = \frac{2\Delta t}{N}|X_k|^2$ 其中 $k = 1, \ldots\ldots, N/2 - 1$, 且 $|X_k|$是 $\boldsymbol{x}$.的 DFT 分量

对于长度为 N 的随机时间序列，随机变量$W_k = 2_S^{Y_k}$ (f_k) 服从卡方分布 χ^2 [14], 其中，式（17）给出的 $S(f_k)$ 是频率 f_k 处的真实功率谱密度，且 $f_k = \frac{k}{N\Delta t}$ 和 $k = 1, \ldots, N/2 - 1$.。自由度为 2 的 χ^2 分布实际上是指数分布 [15]。因此，周期图的取值围绕真实功率谱密度呈指数分布；给定某一频率处的模型功率谱密度值，其概率如下:

$$p(Y_k | S(f_k)) = \frac{1}{S(f_k)} \mathrm{e}^{-\frac{Y_k}{S(f_k)}}, \quad (18)$$

根据上述内容， $S(f_k)$也是 f_k [15]处的期望值。根据（18），观测到一对特定的信息和干扰物浓度 $\boldsymbol{\lambda} = [c_m, c_i]$ 的似然为

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\lambda}) = \prod_{k=1}^{N/2-1} p(Y_k | S(f_k, \boldsymbol{\lambda})) = \prod_{k=1}^{N/2-1} \frac{1}{S(f_k, \boldsymbol{\lambda})} \mathrm{e}^{-\frac{Y_k}{S(f_k, \boldsymbol{\lambda})}}, \quad (19)$$

算法1 频分双工算法

1：以初始猜测值 $\boldsymbol{\lambda}^0 = [c_m^0, c_i^0]$ 运行牛顿法求得满足式（21）的最优 $\boldsymbol{\lambda}^* = [c_m^*, c_i^*]$。
2: $\hat{c}_m \leftarrow c_m^*$
3：求出决策阈值 γ_{fd}。
4：执行阈值操作：
5: **如果** $\hat{c}_m > \gamma_{fd}$ 估计比特 $\hat{s} \leftarrow 1$
6: **否则** 估计比特 $\hat{s} \leftarrow 0$
7: **结束 if**

其中，$\boldsymbol{\lambda} = [c_m, c_i]$ 是待估计的参数。这里，我们使用Whittle似然，它渐近地可以很好地近似精确似然，同时计算效率也更高，即与精确似然 [15], [16]的 $O(n^2)$相比，为 $O(n\log\ n)$。因此，准对数似然可写为：

$$\ln \mathcal{L}(\boldsymbol{\lambda}) = -\sum_{k=1}^{N/2-1} \left(\frac{Y_k}{S(f_k, \boldsymbol{\lambda})} + \ln S(f_k, \boldsymbol{\lambda}) \right). \tag{20}$$

ˆ最大似然估计器提取使式 (20) 最大化的 $\boldsymbol{\lambda}$ 的值，即 $\boldsymbol{\lambda}$。最大化 $\ln \mathcal{L}(\boldsymbol{\lambda})$ 等价于最小化 $l = -\ln \mathcal{L}(\boldsymbol{\lambda})$ [17],，满足

$$\hat{\boldsymbol{\lambda}} = \arg\min_{\boldsymbol{\lambda}} \{l\}. \tag{21}$$

式 (21) 可使用数值方法求解，例如 Newton-Ralphson方法，只需经过少数几次迭代即可获得最大似然值 [18]。

C. 符号检测

第 IV-B 节中描述的最大似然估计器是渐近无偏的，因此 $\boldsymbol{\lambda}$ 趋于服从多元正态分布 ˆ[19] ，其 $\mathrm{E}[\boldsymbol{\lambda}] = \boldsymbol{\lambda}$，而估计参数的相应方差，即逆费 Fisher 信息矩阵 (FIM)$\mathbf{F}(\boldsymbol{\lambda})$ 的对角元素，

$$\sigma^2_{\hat{\lambda}_i} = (\mathbf{F}(\boldsymbol{\lambda}))^{-1}_{(ii)}, \quad \mathbf{F}(\boldsymbol{\lambda})_{(ij)} = \mathrm{E}\left(\frac{\partial^2 l}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} \right). \tag{22}$$

其中，期望是相对于观测频谱的概率分布 $p(Y_1,\ Y_2,\ \ldots\ldots,\ Y_N)$ 求取的。将 $l = -\ln \mathcal{L}(\boldsymbol{\lambda})$ 代入 (22)，FIM 可展开为：

$$\mathbf{F}_{(ij)} = \mathrm{E}\left(\sum_{k=1}^{N/2-1} \frac{S(f_k) - Y_k}{S(f_k)^2} \frac{\partial^2 S}{\partial \lambda_i \partial \lambda_j} + \frac{2Y_k - S(f_k)}{S(f_k)^3} \frac{\partial S}{\partial \lambda_i} \frac{\partial S}{\partial \lambda_j} \right). \tag{23}$$

考虑到 $S(f)$ 是缓慢变化的函数，因此无需计算式（23）中的各个周期图值。因为可以对频率求和来平滑周期图值，使得对于任意光滑函数 ( ) [20], $\sum_{n=1}^{N/2-1} Y_k \phi(f_k) \simeq \sum_{n=1}^{N/2-1} S\ f_k\ \phi\ f_k$, $\phi\ f_k$ [19], ( ) ( )。基于此，式（23）可简化为 [19]

$$\mathbf{F}_{(ij)} \simeq \sum_{k=1}^{N/2-1} \frac{1}{S(f_k)^2} \frac{\partial S}{\partial \lambda_i} \frac{\partial S}{\partial \lambda_j}, \tag{24}$$

其中，导数是在参数的真实值处计算的。对于样本数量较大的情况，这是一个很好的近似，此时根据中心极限定理，周期图值可近似为高斯分布 [21]。接收器通过对估计的信息分子浓度 $\hat{c}_m$应用最大似然决策规则来判定传输比特，如算法1中的频分双工伪算法所述。频分双工的最大似然决策阈值为

$$\gamma_{fd} = \frac{1}{\sigma^2_{\hat{c}_{m|1}} - \sigma^2_{\hat{c}_{m|0}}} \Bigg(\sigma^2_{\hat{c}_{m|1}} c_{m|0} - \sigma^2_{\hat{c}_{m|0}} c_{m|1} + \sigma_{\hat{c}_{m|1}} \sigma_{\hat{c}_{m|0}} \times \sqrt{(c_{m|1} - c_{m|0})^2 + 2(\sigma^2_{\hat{c}_{m|1}} - \sigma^2_{\hat{c}_{m|0}}) \ln\left(\sigma_{\hat{c}_{m|1}} / \sigma_{\hat{c}_{m|0}}\right)} \Bigg), \tag{25}$$

其中，$\sigma^2_{\hat{c}_{m|s}}$ 是方差，$c_{m|s}$ 是传输比特为 $s \in \{0, 1\}$时估计的信息分子的期望值。由于接收器不知道干扰分子浓度的真实值，因此在不存在干扰的情况下计算决策阈值。因此，在计算阈值 γ_{fd}时使用以下模型功率谱密度：

$$S(f, c_m) = 4N_r \zeta^2 \frac{1}{2\pi f + 1/\tau_m} p_b(1 - p_b) + S_f(f), \tag{26}$$

其中 $\tau_m = 1/(c_m k_m^+ + k_m^-)$ 和 $p_b = \frac{c_m}{K_{D_m} + c_m}$. 因此，利用 (26) 以及 $\boldsymbol{\lambda} = [c_m]$对应的 (24)，与传输比特 $s \in \{0, 1\}$ $\sigma^2_{\hat{c}_{m|s}}$ =对应 $1/\sum_{k=1}^{N/2-1} {}_S\ {}_{f_k}{}^{1\ 2} \left. {}^{\partial S\ \ 2}_{\partial c_m} \right|_{c_m = c_{m|s}}$.
的信息分子浓度估计值的方差可写为()( )。请注意，此处 $\sigma^2_{\hat{c}_{m|s}}$ 的表达式并未给出实际的渐近方差，因为接收器根据 (17) 所述的模型功率谱密度估计 c_m 的值。

D. 渐近误码概率

为了计算 FDD 的 BEP，我们需要与 $s = 0$ 和 $s = 1$ 对应的估计信息分子浓度的方差实际值，即 $\sigma^2_{\hat{c}_{m|s}}$。利用式（17）给出的模型功率谱密度 $S(f, (c_m, c_i))$，以及 $\boldsymbol{\lambda} = [c_m, c_i]$ 对应的式（24），方差可表示为 $\sigma^2_{\hat{c}_{m|s}}$ =$(\mathbf{F}_s(\boldsymbol{\lambda}))^{-1}$ (11)，其中 $\mathbf{F}_s$ 的各元素为：

$$\mathbf{F}_{s_{(11)}} = \sum_{k=1}^{N/2-1} \frac{1}{S(f_k)^2} \left(\frac{\partial S}{\partial c_m} \right)^2 \Big|_{\substack{c_m = c_{m|s} \\ c_i = \mu_{c_i}}}, \tag{27}$$

$$\mathbf{F}_{s_{(22)}} = \sum_{k=1}^{N/2-1} \frac{1}{S(f_k)^2} \left(\frac{\partial S}{\partial c_i} \right)^2 \Big|_{\substack{c_m = c_{m|s} \\ c_i = \mu_{c_i}}}, \tag{28}$$

$$\mathbf{F}_{s_{(12),(21)}} = \sum_{k=1}^{N/2-1} \frac{1}{S(f_k)^2} \left(\frac{\partial S}{\partial c_m} \right) \left(\frac{\partial S}{\partial c_i} \right) \Big|_{\substack{c_m = c_{m|s} \\ c_i = \mu_{c_i}}}. \tag{29}$$

因此，FDD 的 BEP 可写为

$$P_e^{FDD} = \frac{1}{4} \operatorname{erfc}\left(\frac{\gamma_{fd} - c_{m|0}}{\sqrt{2\sigma^2_{\hat{c}_{m|0}}}} \right) + \frac{1}{4} \operatorname{erfc}\left(\frac{c_{m|1} - \gamma_{fd}}{\sqrt{2\sigma^2_{\hat{c}_{m|1}}}} \right). \tag{30}$$

这里需要注意，式（30）是基于第 IV-C 节中的高斯分布假设得到的渐近表达式。

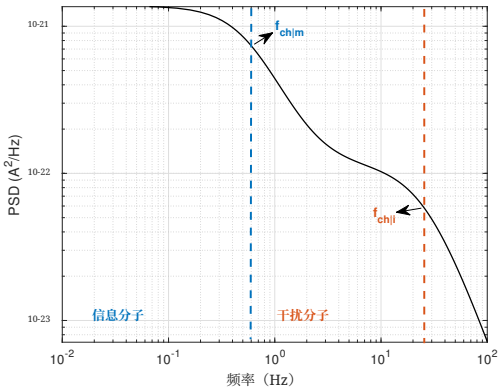


图 2：标出特征频率的模型功率谱密度。

V. 性能评估

本节从比特错误概率（BEP）的角度分析频分双工（FDD）和时分双工（TDD）的性能。系统参数的默认值列于表 I，反应速率取自 [7]。在本文余下部分中，饱和和非饱和分别指 Rx 的受体因配体浓度过高而达到饱和，以及远未达到饱和的情况。为模拟饱和情况，发送的信息分子数量设为$N_{m|s\in\{0,1\}} = [2,5]\times 10^4$。否则，采用默认值。

我们首先考察均值干扰物浓度 μ_{c_i} 对饱和和非饱和条件下时分双工和频分双工的比特错误概率性能的影响。我们定义一个调节参数 γ，使得干扰物浓度的均值为 $\mu_{c_i} = \gamma\ c_{m|s=1}$。如图 3a 所示，在这两种情况下，频分双工的性能都优于时分双工。随着 μ_{c_i}增加，时分双工的性能因接收器饱和而急剧下降。在非饱和条件下，随着.....增加，频分双工的性能有所提升

表 I：系统参数的默认值

温度（T）	300K
微流控通道高度（h_{ch}）、宽度（l_{ch}）	5 μ米，10 μ米
平均流速（u）	10 μm/s
接收器中心位置到发射器的距离（x_R）	1mm
介质的离子浓度（c_{ion}）	30 mol/m^3
介质相对介电常数（ϵ/ϵ_0）	80
本征扩散系数 (D_0)	2×10^{-11} m^2/s
结合 rate 信息 和干扰信号分子 (k_m^+，k_i^+)	4×10^{-17} m^3/s
信息分子的解离速率（k_m^-）	2 s^{-1}
干扰物的解离速率（k_i^-）	8 s^{-1}
配体中的平均电子数（N_{e^-}）	3
独立受体的数量（N_r）	120
表面受体的长度（r）	2 nm
石墨烯生物场效应晶体管的跨导（g）	1.9044×10^{-4} A/V
晶体管中石墨烯的宽度（l_{gr}）	10μm
石墨烯单位面积的量子电容（c_q）	2×10^{-2} F m^{-2}
$s=0$传输的配体数量，1 ($N_{m\|s}$)	$[1,5]\times10^3$
噪声样本数量 (N)	700
采样周期 (Δt)	0.005 秒
干扰与信息分子浓度的均值比值 ($\gamma=\mu_{c_i}/c_{m\|s=1}$)	1
干扰均值/标准差比（μ_{c_i}/σ_{c_i}）	10
$1/f$ 噪声在 1 Hz 处的功率（S_{f_1Hz}）	10^{-23} A^2/Hz

μ_{c_i}，但达到某个临界点后，继续增大 μ_{c_i} 会使频分双工的性能下降，因为接收器未饱和时，估计的信息分子浓度 $\sigma^2_{\hat{c}_{m|s}}$ 的方差会在某个 μ_{c_i} 处达到最小值，之后其数值会随着 μ_{c_i}增大而上升。然而，在饱和条件下，$\sigma^2_{\hat{c}_{m|s}}$ 会随着 μ_{c_i}单调增加。

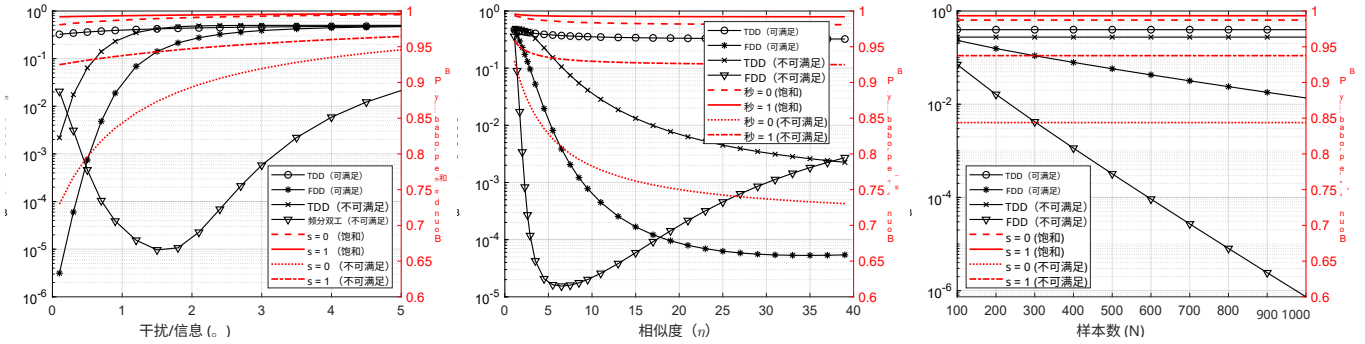
接下来，我们考察相似度参数，即信息分子与干扰分子的亲和力比 $\eta = K_{D_i}/K_{D_m}$，对饱和和非饱和情况下比特错误概率性能的影响。如图 3b 所示，在饱和和非饱和情况下，频分双工的性能均优于时分双工。对于非饱和情况，随着相似度增加，两种检测方法的性能都会有所提升，直至达到某个临界点；这是因为干扰对检测性能的影响减弱，即干扰分子的结合态概率降低。然而，当相似度进一步增大时，频分双工的性能会下降。直观而言，这是因为与比特 $s=0$ 和 $s=1$ [22] 对应的特征频率

$$\begin{aligned}\mathbf{f_{ch|s}} &= [f_{ch|m}, f_{ch|i}] \\ &= \frac{1}{4\pi}\left[\frac{1}{\tau_{m|s}}+\frac{1}{\tau_i}\pm\sqrt{\left(\frac{1}{\tau_{m|s}}-\frac{1}{\tau_i}\right)^2+4k_m^+c_{m|s}k_i^+c_i}\right],\end{aligned} \tag{31}$$

其中 $\tau_{m|s} = 1/(c_{m|s}k_m^+ + k_m^-)$ 和 $\tau_i = 1/(c_i k_i^+ + k_i^-)$ 在频谱中逐渐接近，使得比特难以区分。如图 2 所示，在一个示例场景中，由于两种类型的分子（即信息分子和干扰分子）发生结合，每个传输比特的频谱中都会出现两个特征频率，$f_{ch|m}$ 和 $f_{ch|i}$；其排列顺序取决于各类分子的浓度以及结合/解离速率。在非饱和情况下，我们没有观察到这一现象，因为随着相似度增加，特征频率不会彼此靠近到足以降低检测性能的程度。我们还考察了时间样本数 N 和采样周期 Δt 对比特错误概率性能的影响。如图 3c 所示，频分双工的性能随 N 增大而提升。这是预期之中的，因为增加采样数会降低信息分子浓度估计值 $\sigma^2_{\hat{c}_{m|s}}$ 的方差，从而降低比特错误概率。对于时分双工，性能不会随 N 改变，因为接收器在采样窗口内只采集一个样本。对于不同的 Δt，在非饱和情况下，频分双工的性能会随着 Δt 增大而提升。请注意，Δt 应短于任何反应的特征时间尺度，才能捕捉波动并满足平衡采样假设；这一点将在第 II 节中讨论。因此，我们考虑满足这一条件的 Δt 值。

VI. 结论

本文提出了一种用于基于 FET 的 MC-Rx 的频分双工方法，该方法利用输出噪声功率谱密度提取传输比特。我们推导了在存在



(a) (b) (c)

图 3：不同（a）平均干扰浓度水平、（b）信息分子与干扰分子亲和力相似度以及（c）时间样本数量 N 下的比特错误概率。

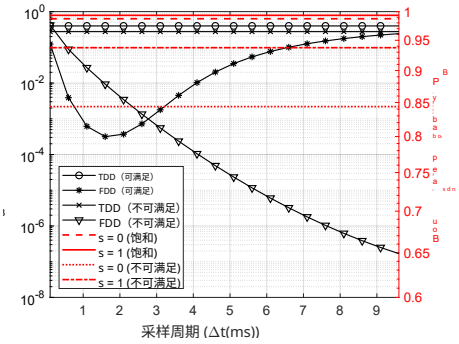


图 4：不同采样周期下的比特错误概率。

单一类型干扰分子的微流控通道中，所提出方法和单次时分双工方法的比特错误概率。分析表明，所提出的检测方法显著优于时域检测方法，尤其是在通道中存在强干扰时。

致谢

本研究部分得到 AXA研究基金（科奇大学 AXA万物互联讲席）、地平线2020玛丽·斯克沃多夫斯卡-居里个人奖学金（资助协议101028935）、土耳其科学技术研究委员会（TÜBİTAK，资助编号120E301）以及华为研究生研究奖学金的支持。

参考文献

[1] O. B. Akan，等，“分子信息与通信科学基础”，*IEEE*会刊，第105卷，318，2016年第2期，第306页。[2] I. F. Akyildiz，等，“Panacea：一种用于早期检测和缓解传染病的生物纳米物联网应用”，*IEEE Access*，第8卷，第140 512–140 523页，2020年。[3] M. Kuscu，等，“分子通信的发射器与接收器架构：关于调制、编码和检测技术的物理设计综述”，*IEEE*会刊，第107卷，第7期，第1302–1341页，2019年。[4] M. Kuscu，等，“面向纳米物联网（iont）的石墨烯分子通信接收器的制造与微流控分析”，*Scientific Reports*，第11卷，第1期，第1–20页，2021年。[5] T. Mora，“非特异性配体存在时浓度传感的物理极限”，*Physical Review Letters*，第115卷，第3期，第038102页，2015年。[6] M. Kuscu和O. B. Akan，“使用单一类型配体受体的分子通信通道传感”，IEEE通信汇刊，第67卷，第10期，第6868–6884页，2019年。[7] M. Kuscu和O. B. Akan，“分子干扰下利用配体受体进行分子通信检测”，数字信号处理，第124卷，第103186页，2022年。[8] M. Kuscu和O. B. Akan，“面向生物纳米物联网中采用表面型接收器的微流控分子通信，对流-扩散-反应系统的建模”，PLOS ONE，第13卷，第2期，第e0192202页，2018年。[9] A. O. Bicen和I. F. Akyildiz，“流动诱导分子通信微流控通道的系统理论分析与最小二乘设计”，IEEE信号处理汇刊，第61卷，第20期，第5000–5013页，2013年。[10] M. Kuscu和O. B. Akan，“基于SINW FET的分子通信接收器的建模与分析”，IEEE通信汇刊，第64卷，第9期，第3708–3721页，2016年。[11] I. Heller，等，“石墨烯晶体管中的电荷噪声”，Nano Letters，第10卷，第5期，第1563–1567页，2010年。[12] L. J. Mele，等，“与电位传感器表面电荷涨落相关的化学噪声谱通用模型及等效电路”，IEEE传感器期刊，第21卷，第5期，第6258–6269页，2020年。[13] J. Mucksch，等，“通过表面集成荧光相关光谱定量分析可逆表面结合”，Nano Letters，第18卷，第5期，第3185–3192页，2018年。[14] S. Vaughan，“红噪声中周期信号的贝叶斯检验”，皇家天文学会月报，第402卷，320，2010年第1期，第307页。[15] D. Barret和S. Vaughan，“X射线功率密度谱的最大似然拟合：应用于中子星X射线双星4U 1608-522的高频准周期振荡”，天体物理学杂志，第746卷，第2期，第131页，2012年。[16] A. M. Sykulski，等，“去偏Whittle似然”，Biometrika，第106卷，第2期，第251–266页，2019年。[17] E. R. Anderson，等，“太阳振荡功率谱建模”，天体物理学杂志，第364卷，第699–705页，1990年。[18] D. Pfefferl´e和S. I. Abarzhi，“利用热线风速测量实验数据估计瑞利-泰勒界面混合谱特性的Whittle最大似然估计”，Physical Review E，第102卷，第5期，第053107页，2020年。[19] T. Toutain和T. Appourchaux，“最大似然估计量：在日震测量精度估计中的应用”，天文学与天体物理学，第289卷，第649–658页，1994年。[20] M. Levin，“功率谱参数估计”，IEEE信息论汇刊，第11卷，第1期，第100–107页，1965年。[21] K. Libbrecht，“关于太阳振荡频率测量的最终精度”，天体物理学杂志，第387卷，第712–714页，1992年。[22] M. Frantlovi´c，等，“竞争吸附和质量传递对基于亲和力的生物传感器平衡质量涨落的影响分析”，传感器与执行器B：化学，第189卷，79，2013年第71页。