



Moleküler Haberleşmede Moleküler Bilginin Tespiti Ve Tahmini

Program Kodu: 1001

Proje No: 115E362

Proje Yürütücüsü:
Doç. Dr. Barış ATAKAN

OCAK 2018

İZMİR



Önsöz

Bu projede çeşitli sinyal tespit yöntemlerini baz alan moleküler haberleşme sistemleri için kapsamlı başarımlar analizleri yapılarak, moleküler salım hızı ve konum tahmini için algoritmalar geliştirilmiştir. Proje TÜBİTAK 1001 programı tarafından 115E362 kodu ile desteklenmiştir.

İçindekiler

1. GİRİŞ	1
2. LİTERATÜR ÖZETİ	2
3. DİFÜZYONA DAYALI HAFIZALI MOLEKÜLER HABERLEŞMENİN PERFORMANS ANALİZİ	4
3.1 M-Seviyeli Molekül Kaymalı Anahtarlama (M-MKA) (M-Level Molecular Shift Keying)	5
3.2 M-Seviyeli Yoğunluk Kaymalı Anahtarlama (M-YKA) (M-Level Concentration Shift Keying).....	9
3.3 Gecikme ve Performans Analizlerinin Doğrulanması	11
3.4 Eşik Değerlerinin Belirlenmesi	13
3.5 Performans Değerlendirmesi	14
3.5.1 Kanal Hafızasının M-MKA ve M-YKA Performanslarına Etkileri	14
3.5.2 Eşik Değer Seçiminin Performansa Etkileri	16
4. DİFÜZYONA DAYALI EŞZAMANSIZ (ASYNCHRONOUS) HABERLEŞMENİN PERFORMANS ANALİZİ	17
4.1 Kanal Hafızalı Eşzamansız Moleküler Haberleşme	18
4.2 İşaret Mesajının Tasarımı.....	24
4.3 Performans Değerlendirmesi	25
4.4 Sonuç.....	28
5. MOLEKÜLER HABERLEŞMEDE BİR KAYNAĞIN YERİNİN VE SALIM HIZININ BELİRLENMESİ.....	29
5.1 Moleküler Haberleşme İçin Belirleyici Model	29
5.2 Moleküler Haberleşme İçin Stokastik Model	31
5.3 Bir Kaynağın Yerinin Ve Salım Hızının Tahmin Edilmesi.....	33
5.3.1 Mesafe ve Yer Tahmini.....	33
5.3.2 Salım Hızı Tahmini	34
5.4 Performans Değerlendirmesi	34
6. MOLEKÜLER SİNYALİN YENİDEN OLUŞTURULMASI.....	37
6.1 Giriş.....	37
6.2 Sistem Modeli	38
6.3 Sinyal Bozulmasının Türetilmesi.....	39
6.4 Benzetim Sonuçları.....	41
6.5 Sistem Modelinin Doğrulanması	44
6.6 Sonuç.....	46
7. DENEYSEL MOLEKÜLER HABERLEŞME.....	46
7.1 Uzaklık Tahmini	47
Kaynakça	49

Tablo ve şekil listeleri

Tablo 1-1. M-MKA analizlerinin doğrulanması için kullanılan parametre setleri.....	11
Tablo 2-1. Değişen d ve τ_s değerleri için sembol hata olasılığı.....	26
Tablo 2-2. Değişen m ve τ_s değerleri için sembol hata olasılığı.....	26
Tablo 2-3. Değişen M ve τ_s değerleri için sembol hata olasılığı.....	26
Tablo 4-1 Teorik Benzetim Parametreleri.....	41
Tablo 4-2. Rasgele Yürüyüş Benzetim Parametreleri.....	44
Tablo 6-1. Farklı mesafeler için hesaplanan (2)'deki k sabitinin değerleri.....	47
Tablo 6-2. Farklı mesafeler için Difüzyon sabiti hesaplanarak bulunan mesafe tahminleri....	49

Şekil 1-1 n -i. zaman diliminin n . zaman dilimine etkisi.....	6
Şekil 1-2. M-MKA'nın (16)'da verilen sembol hata olasılığının doğrulanması.....	12
Şekil 1-3. M-YKA'ya ait olan ve (24)'te verilen sembol hata olasılığı ifadesinin 3. ve 4. semboller için doğrulanması.....	12
Şekil 1-4. (1-30)'da verilen performans kazanç metriğinin kanal hafıza seviyesi arttıkça farklı mesafe (d) değerleri için nasıl değiştiğini (a)'da M-MKA için (b)'de M-YKA için gösterilmiştir.....	15
Şekil 1-5. M-MKA'da alıcı tarafından alınan molekül sayısının ortalaması (a) ve varyansının (b) kanal hafızası arttıkça nasıl değiştiği gösterilmektedir.....	15
Şekil 1-6. Şekil 1-5'te kullanılan aynı senaryo için sembol hata olasılıklarının kanal hafızası arttıkça nasıl değiştiği gösterilmektedir.....	16
Şekil 1-7. Eşik değer seçim mekanizmalarının M-MKA ve M-YKA'nın performansına olan etkileri gösterilmektedir.....	17
Şekil 2-1. Eşzamansız moleküler haberleşmeyi gösteren zaman cetveli.....	19
Şekil 2-2. $s(n)$ sembolünün iletiminin ve algılanmasının gösterildiği zamanlama cetveli.....	21
Şekil 2-3. Sembol hata olasılığının işaret sembolünün gecikmesine göre değişimi.....	24
Şekil 2-4. İşaret sembolünün gecikmesi τd 'nin olasılık dağılım fonksiyonunun dört farklı D_{bcn} değeri için gösterilmesi.....	25
Şekil 2-5. İşaret sembolünün gecikmesi τd 'nin olasılık dağılım fonksiyonunun dört farklı N_{bcn} değeri için gösterilmesi.....	25
Şekil 2-6. Eşzamansız ve eşzamanlı moleküler haberleşmenin sembol hata olasılıklarının farklı d değerleri için karşılaştırılması.....	27
Şekil 2-7. Eşzamansız ve eşzamanlı moleküler haberleşmenin sembol hata olasılıklarının farklı m değerleri için karşılaştırılması.....	27
Şekil 2-8. Eşzamansız ve eşzamanlı moleküler haberleşmenin sembol hata olasılıklarının farklı M değerleri için karşılaştırılması.....	28
Şekil 3-1. Molekül yayan noktasal bir kaynak ve üzerine çarpan molekülleri absorplayan küresel bir alıcı.....	29
Şekil 3-2. Dört farklı mesafe değeri için mesafe tahmini.....	34
Şekil 3-3. Şekil 3- 2'de gösterilen tahminler için ortalama karesel hatalar.....	35
Şekil 3-4. Dört alıcı ile bir moleküler kaynağın yerinin bulunması.....	35
Şekil 3-5. Şekil 3-4'te gösterilen yer tahminine ait ortalama karesel hata.....	36
Şekil 3-6. Kaynağa ait dört farklı salım hızının tahmin edilmesi.....	36
Şekil 3-7. Şekil 3- 6'daki ölçümlere ait ortalama karesel hatalar.....	37
Şekil 4-1. NM için Moleküler Sinyalin Yeniden Oluşturulması Modeli.....	38
Şekil 4-2. Farklı ρ_{sx} değerleri için Sinyal Bozulması – Örnekleme Periyodu grafiği ($b = 1.5 \mu m$).....	43



Şekil 4-3. Farklı difüzyon katsayısı değerleri için Sinyal Bozulması ($\rho_{sx} = 0.75$, $b = 1.5 \mu m$)	43
Şekil 4-4. $T = 0.2s$ ve $T = T_{opt}$ için a 'ya göre sinyal bozulması grafiği.....	44
Şekil 4-5. Farklı VR değerleri için Sinyal Bozulması – Örnekleme Periyodu grafiği (a) Teorik ($\rho_{sx} = 0.75$) (b) Rasgele yürüyüş benzetimi	45
Şekil 4-6. x ve s dağılımlar ($T = 5s$, $D = 10 - 12 m^2s$, $a = 1 \mu m$, $b = 1.5 \mu m$)	46
Şekil 6-1. MQ-3 sensor ve oda spreyi kullanılarak hazırlanan masaüstü moleküler haberleşme düzeneği	47
Şekil 6-2. Sırasıyla 30,50,70 cm uzaklıkları için sensördeki zamana bağlı yoğunluk değişimlerini göstermektedir.	48

Özet

Moleküler haberleşme bilgi taşıyıcısı olarak molekülleri kullanan bir haberleşme paradigmasıdır. Yeryüzündeki en eski ve en yaygın haberleşme yöntemi olan moleküler haberleşme tek hücreli canlılardan çok hücreli hayvan ve bitkilere kadar bütün canlıların hayati fonksiyonlarını sürdürebilmeleri için vazgeçilmezdir. Doğada var olanların yanı sıra günümüzde moleküler haberleşme moleküler sinyalleri algılayıp yorumlayabilen nano ve biyoteknoloji tabanlı birçok yeni uygulamanın da önemli bileşenleri arasına girmiştir. Bu proje kapsamında moleküler haberleşme ile ilgili gerçekleştirilen çalışmalar beş ana bölüme ayrılabilir. Birinci bölümde kanal hafızalı difüzyona dayalı moleküler haberleşmenin başarımının anlaşılabilmesi için analitik başarım değerlendirmeleri ve ilgili benzetim deneyleri yapılmıştır. Başarım değerlendirmesi için geliştirilen analitik modelin doğruluğu rastgele yürüyüş (random walk) benzetimleri ile gösterilmiştir. Deneyler bazı moleküler haberleşme senaryoları için kanal hafızasının başarımı azaltmak yerine arttırdığını göstermiştir. İkinci bölümde hafızalı moleküler haberleşme kanalının eşzamansız olduğu durumlar için analitik başarım değerlendirmeleri yapılmıştır. Moleküler haberleşmenin verici tarafından gönderilen bir işaret (beacon) sembolünün tespiti ile başlatıldığı düşünülmüştür. Bu işaret sembolü için kullanılan salım miktarı ve difüzyon katsayısı gibi parametrelerin uygun seçimi ile eşzamansız moleküler haberleşmenin neredeyse eşzamanlı kadar iyi başarım sağlayabildiği gösterilmiştir. Üçüncü bölümde bir moleküler kaynağın yerini ve salım hızını bulabilmek için teorik bir tahmin yöntemi geliştirilerek başarımı benzetim deneyleri ile gösterilmiştir. Dördüncü bölümde ise moleküler sinyallerin alıcıda yeniden oluşturulması için analitik bir model oluşturularak sinyal bozulmasının analitik ifadesi türetilmiştir. Yine benzetim deneyleri ile bozulmanın hangi parametrelerden nasıl etkilendiği araştırılarak en iyi alıcı tasarımı gerçekleştirilmiştir. Son olarak beşinci bölümde bir moleküler kaynak ve mikroişlemci ile kontrol edilen bir algılayıcıdan oluşan moleküler haberleşme sistemi gerçekleştirilmiştir. Gerçeklenen sistem kullanılarak difüzyon katsayısı ve kaynak ile alıcı arasındaki mesafe tahmini için yöntemler önerilerek başarımları gösterilmiştir. Burada özetlenen projenin beş bölümünde moleküler alıcı mükemmel absorblayıcı (perfect absorber) olarak düşünülmüştür. Mükemmel alıcı birçok açıdan yüzey reseptörlü alıcıların performansını da yansıtabildiği için performans değerlendirmelerinde reseptörlü alıcılar kapsam dışında bırakılmıştır.



Abstract

Molecular communication is a communication paradigm in which molecules are used as information carrier. Molecular communication, the oldest and the most pervasive communication paradigm in Nature, is essential for all living organisms from a single cell to multi-cell animals and plants in order to sustain their vital functionalities. Besides the molecular communications in Nature, molecular communication is one of the most important components of the nano and biotechnology applications which sense and interpret the molecular signals. The research on molecular communication provided by this project can be divided into the five main parts. In the first part, in order to understand the performance of the molecular communication with channel memory, an analytical performance evaluation scheme and the corresponding numerical results are introduced. The introduced analytical model is validated through the random walk simulations. The results reveal that the channel memory can improve the performance of the molecular communication for some specific scenarios. In the second part, an analytical performance evaluation is given for the asynchronous molecular communication with memory. It is assumed that the transmitter sends a beacon symbol to the receiver to initiate the molecular communication. By selecting the parameters of the beacon symbol, such as emission level and diffusion coefficient, appropriately, it is possible to have a satisfactorily high performance which is close to the performance of the synchronous case. In the third part, the estimation methods are developed to estimate the emission rate and the location of a molecular source. In the fourth part, an analytical model is derived to understand how accurate a molecular signal around a receiver can be reconstructed. By investigating how the system parameters affect the distortion of the reconstruction, the optimal receiver design scheme is given. In the last part, a practical molecular communication system including a molecular source and a sensor controlled by a microcontroller is realized. By using this system, the estimation methods are introduced for the estimations of diffusion coefficient and the distance between the source and the sensor. In those five parts of the project briefly discussed here, the receiver is assumed to be a perfect absorber. Since the perfect absorber is able to reflect the performance of the receiver with surface receptors, the receivers with the surface receptors are not considered in the context of this project.



1. GİRİŞ

Moleküler haberleşme yeryüzündeki en eski ve en yaygın haberleşme yöntemidir. Tek hücreli organizmalardan çok hücreli gelişmiş hayvanlara ve bitkilere kadar moleküler haberleşme bütün canlı varlıklar için vazgeçilmezdir. Örneğin, bir bakteri kolonisindeki bakteriler çevrelerine işaret molekülleri (signaling molecules) yaymak sureti ile haberleşirler ve bilgi paylaşımında bulunurlar. Bu bilgi paylaşımı bakteri kolonisinin çoğalma, hareket etme ve antibiyotik üretimi gibi önemli davranışlarını koordine edilebilmesini sağlar. İnsan vücudundaki bütün hücreler de birbirleri ile iletişim halindedir. Aslında bütün çok hücreli organizmaların varlıklarını devam ettirebilmesi, hücrelerin kendi arasındaki iletişime ve koordinasyona bağlıdır. Örneğin, beynimizdeki nöron hücreleri bir çeşit işaret molekülü olan sinir taşıyıcıları (neurotransmitters) ile haberleşirler. Sinir taşıyıcıları ile yapılan bu moleküler haberleşme bütün akılsal (mental) faaliyetlerimizi belirleyen bir fenomendir. Hücreler arasında gerçekleşen moleküler haberleşmenin yanı sıra, böceklerden memelilere kadar bütün hayvanlar feromon (pheromone) adı verilen işaret molekülleri ile haberleşirler. Feromona dayalı bu moleküler haberleşme özellikle karınca ve arı sürülerinde çok çarpıcıdır öyle ki; görev bölüşümü ve besin kaynaklarının tespiti gibi üst düzeyde koordinasyon gerektiren işler tamamen sürü içindeki moleküler haberleşme sayesinde gerçekleştirilir.

Diğer taraftan, moleküler haberleşme biyomimetik makinelerin (biomimetic machines) ya da daha çok kullanılan ifadesi ile nanomakinelerin (nanomachines) arasındaki bir nanoağın (nanonetworks) gerçekleştirilmesini de sağlayabilmektedir Atakan (2014). Değiştirilmiş hücre ve bakteriler (modified cells and bacteria) veya biyonanorobotlar (bionanorobot) bu nanomakinelere örnek olarak gösterilebilir. Nanomakineler tek başlarına düşünüldüğünde çok basit işlem, algılama ve hareket yeteneklerine sahiptir. Fakat tıpkı doğadaki karınca, arı ve bakteri sürülerinde olduğu gibi birden fazla nanomakinenin moleküler haberleşme ile koordinasyon halinde çalışması yani bir nanoağ (nanonetworks) oluşturmaları daha karmaşık uygulamaların gerçekleştirilmesini sağlayabilmektedir. Örneğin, biyomedikal alanda; iletişim halinde olan bir grup değiştirilmiş bakteri insan vücudundaki tümörlerin tanınarak yok edilmesini sağlayabilmektedir Freitas (1999). Bir çevresel gözetim (environmental monitoring) uygulamasında zararlı molekül kaynaklarının molekül emisyon hızları (emission rate) ve yerleri bir grup iletişim halindeki nanomakine ile bulunabilir.

Bu projede moleküler haberleşme ile ilgili gerçekleştirilen çalışmalar beş ana bölüme ayrılabilir. Bu beş bölüm raporun üçüncü bölümünden itibaren yedinci bölüme kadar ayrı bölümler halinde anlatılmıştır. Burada kısaca değinmek gerekirse; birinci bölümde kanal

hafızalı, difüzyona dayalı moleküler haberleşmenin başarımının anlaşılabilmesi için analitik başarım değerlendirmeleri ve ilgili benzetim deneyleri yapılmıştır. Başarım değerlendirmesi için geliştirilen analitik modelin doğruluğu rastgele yürüyüş (random walk) benzetimleri ile gösterilmiştir. Deneyler bazı moleküler haberleşme senaryoları için kanal hafızasının başarımı azaltmak yerine arttırdığını göstermiştir. İkinci bölümde hafızalı moleküler haberleşme kanalının eşzamansız olduğu durumlar için analitik başarım değerlendirmeleri yapılmıştır. Moleküler haberleşmenin verici tarafından gönderilen bir uyarı sembolünün tespiti ile başlatıldığı düşünülmüştür. Bu uyarı sembolü için kullanılan salım miktarı ve difüzyon katsayısı gibi parametrelerin uygun seçimi ile eşzamansız moleküler haberleşmenin neredeyse eşzamanlı kadar iyi başarım sağlayabildiği gösterilmiştir. Üçüncü bölümde bir moleküler kaynağın yerini ve salım hızını bulabilmek için teorik bir tahmin yöntemi geliştirilerek başarımı benzetim deneyleri ile gösterilmiştir. Dördüncü bölümde ise moleküler sinyallerin alıcıda yeniden oluşturulması için analitik bir model oluşturularak sinyal bozulmasının analitik ifadesi türetilmiştir. Yine benzetim deneyleri ile bozulmanın hangi parametrelerden nasıl etkilendiği araştırılarak en iyi alıcı tasarımı gerçekleştirilmiştir. Son olarak beşinci bölümde bir moleküler kaynak ve mikroişlemci ile kontrol edilen bir algılayıcıdan oluşan moleküler haberleşme sistemi gerçekleştirilmiştir. Gerçeklenen sistem kullanılarak difüzyon katsayısı ve kaynak ile alıcı arasındaki mesafe tahmini için yöntemler önerilerek başarımları gösterilmiştir. Burada özetlenen projenin beş bölümünde moleküler alıcı mükemmel absorblayıcı (perfect absorber) olarak düşünülmüştür. Mükemmel alıcı birçok açıdan yüzey reseptörlü alıcıların performansını da yansıtabildiği için performans değerlendirmelerinde reseptörlü alıcılar kapsam dışında bırakılmıştır.

2. LİTERATÜR ÖZETİ

Yukarıda bahsedildiği gibi moleküler haberleşme tek hücrelilerden böceklerle, çok hücreli hayvanlardan bitkilere kadar bütün canlıların yaşamsal faaliyetleri için çok önemlidir. Bu yüzden biyoloji ve ilgili alanlarda moleküler haberleşme konusunda yapılan çalışmalar 1900'lü yılların başlarına kadar gitmektedir. Bununla birlikte moleküler haberleşmenin haberleşme teorisi perspektifi ile incelenmesi görece çok yenidir (Akyildiz vd. 2008; Atakan 2014; Hiyama vd. 2005; Freitas 1999). Yapılan ilk çalışmalarda daha çok konunun ana hatları belirlenerek araştırma zorluklarının (research challenges) altı çizilmiştir. Geleneksel radyo, optiksel ve kablolu haberleşme yaklaşımlarının aksine moleküler haberleşme kanalının temel özelliği bilgi sinyallerinin yayılma gecikmelerinin (propagation delays) rastgele olmasıdır. Bir kaynaktan yayılan moleküller rastgele olarak ortamda yayılırlar. Bu yayılım sonucunda moleküllerin ancak sınırlı bir kısmı alıcıya ulaşabilir. Bu davranış moleküler haberleşmenin başarım değerlendirmesini (performance evaluation) yapmak için

göz önünde bulundurulması gereken en temel özelliğidir. Bu nedenle geleneksel haberleşmede kullanılan gürültü seviyesi, hata olasılığı, paket gecikmesi ve kanal kapasitesi gibi birçok standart başarımlar ölçütünün (performance metrics) moleküler haberleşme için yeniden tanımlanması gerekmektedir. Literatürdeki yapılan ilk çalışmalar daha çok bu ve bunun gibi başarımlar ölçütlerini tanımlamayı amaçlamıştır. Bu ölçütlerin başında gelen kanal kapasitesi moleküler haberleşmenin farklı yaklaşımları için türetilmiştir (Kuran vd. 2010; Arifler 2011; Kadloor vd. 2012). Bu çalışmalarda moleküler haberleşme kanalı ya yoğunluk kanalı (concentration channel) ya da gecikme kanalı (delay channel) olarak düşünülmüştür. Yoğunluk kanalında bilgi sembolleri kaynak tarafından iletilen moleküllerin yoğunluğu ile kodlanırken gecikme kanalında semboller iletilen bilgi moleküllerinin kanalda karşılaştıkları gecikme kullanılarak kodlanmaktadır. Diğer bilinen kablosuz haberleşme kanallarında olduğu gibi moleküler haberleşmede de kanaldaki gürültü sinyalinin fiziksel modeli ve davranışlarının belirlenmesi son derece önemlidir. Bu ihtiyacı karşılamak için moleküler haberleşme kanalındaki gürültüyü modelleme konusunda yapılmış önemli çalışmalar bulunmaktadır (Pierobon ve Akyildiz 2011; Moore vd. 2009). Bu çalışmalarda türetilen gürültü modelleri alıcı tarafından alınan moleküler sinyalin ortalama değerlerden ne kadar ve nasıl sapma gösterebileceğini ortaya koymaktadır. Bu çalışmaların yanında moleküllerin emisyonu, difüzyonu ve alıcı tarafından alınışının ayrı ayrı modelleri birleştirilerek moleküler haberleşme için uç uca (end-to-end) fiziksel modeller de türetilmiştir (Pierobon ve Akyildiz 2010; Miorandi 2011). Nanomakineler arasındaki moleküler haberleşme için enerji konusu da oldukça önemlidir. Şöyle ki; nanomakinelerin çok düşük enerji seviyeleri ile çalışıyor olmaları haberleşme için harcayabilecekleri enerji miktarının çok etkin kullanılması zorunluluğunu doğurmaktadır. Bu nedenle moleküler haberleşmenin başarımı enerjinin ne kadar etkili kullanılabildiğine bağlıdır. Moleküler haberleşme için enerjiye dayalı modeller de literatürde bulunmaktadır Kuran vd. (2010). Bilinen kablosuz, kablolu bütün haberleşme yaklaşımlarında olduğu gibi moleküler haberleşme için de eş zamanlama (synchronization) çok önemlidir. Moleküler haberleşmede kaynak ve alıcı arasındaki eşzamanlama problemini çözmeye yönelik teknikler de geliştirilmiştir ShahMohammadian vd. (2013). Öte taraftan nanomakineler arasındaki moleküler haberleşmede nanomakinelerin çok düşük işlem yeteneklerinden dolayı eş zamanlama her zaman mümkün olmayabilir. Bu yüzden eşzamanlama ihtiyacını ortadan kaldırmak için moleküler dizilere dayalı eşzamansız moleküler haberleşme teknikleri de geliştirilmiştir Atakan vd. (2012). Moleküler haberleşme konusunda yapılan çalışmaların çoğunluğu bir kaynak ve bir alıcıdan oluşan noktadan noktaya (point-to-point) moleküler haberleşme kanalını temel almaktadır. Fakat birden fazla kaynak ve alıcıyı içeren moleküler yayın (broadcast), çoklu erişim (multiple access) ve aktarım (relay) kanallarını inceleyen çalışmalar da literatürde yer almaktadır (Nakano ve Liu 2010; Atakan vd. 2010). Ayrıca hücre

yapışması (cell adhesion) mekanizmasından esinlenilerek hareketli nanomakineler (mobile nanomachines) için de çarpışmaya dayalı moleküler haberleşme (collision-based molecular communication) tekniği geliştirilmiştir. Bu teknikte bilgi rastgele hareket eden nanomakinelerin çarpışmaları sırasında yüzey molekülerinin teması ile iletilmektedir Guney vd. (2012). Benzer şekilde temas halindeki nanomakinelerin haberleşmesini sağlayabilecek hücreler arası kalsiyum sinyalleşmeye (calcium signaling) dayanan mekanizmalar da önerilmiştir Kuran vd. (2012). Ayrıca moleküllerin tren rayına benzeyen protein filamanlar üzerinde moleküler motorlar ile taşınması ile gerçekleştirilebilen moleküler haberleşme yöntemleri de literatürde bulunmaktadır. Bu yöntemler hücre içi molekül iletiminden esinlenen yöntemlerdir Nakano vd. (2012).

Moleküler haberleşme literatüründe bilgi tespit ve tahmin üzerine yapılan çalışma sayısı yok denecek kadar azdır. Var olan çalışmalar da çok basitleştirici (oversimplifying) varsayımlara dayanmaktadır. Temel olarak (Mahfuz vd. 2010; Moore vd. 2012)'de verilen iki çalışmanın üstünde durulabilir. Mahfuz vd. (2010)'de ikili (binary) moleküler haberleşme için bilgi tespit tekniği önerilmektedir. Önerilen teknik moleküler haberleşme kanalındaki haberleşme ve gürültü sinyallerinin rastgele dağılımının normal dağılım (normal distribution) olduğu varsayılmaktadır. Moore vd. (2012)'de ise kaynak ile alıcı arasındaki uzaklığı bulmak için bir ölçüm tekniği önerilmiştir. Önerilen ölçüm tekniği kaynak ile alıcının bir boyutlu (one-dimensional) ortamda olduğunu varsaymaktadır.

3. DİFÜZYONA DAYALI HAFIZALI MOLEKÜLER HABERLEŞMENİN PERFORMANS ANALİZİ

Bu çalışmada hafızalı moleküler haberleşme kanalının detaylı gecikme ve performans analizi verilmektedir. Herhangi bir seviyedeki kanal hafızası göz önünde bulundurularak molekül tipine ve yoğunluğuna dayanan modülasyon biçimleri analiz edilmiştir. Molekül tipine dayanan modülasyonda bilgi sembolleri değişik tipteki moleküller tarafından kodlanırken molekül yoğunluğuna dayanan modülasyonda farklı yoğunluk seviyeleri bilgi sembollerini kodlamak için kullanılmıştır. Her iki modülasyon biçiminde öncelikle sembol gecikmelerinin olasılık dağılımları türetilerek sembol hata olasılıkları elde edilmiştir. Elde edilen olasılık dağılımlar ve hata olasılıkları geniş çaptaki benzetim deneyleri ile doğrulanmıştır. Performans analizleri dilim zamanı (slot time) ve salınan molekül sayısı gibi sistem parametreleri uygun seçildiğinde haberleşme hızının hafıza ile artırılabilirliğini göstermiştir. Ayrıca molekül tipine dayalı modülasyonun molekül yoğunluğuna dayalı modülasyondan daha iyi bir performans sağlayabildiği gösterilmiştir.

3.1 M-Seviyeli Molekül Kaymalı Anahtarlama (M-MKA) (M-Level Molecular Shift Keying)

M-MKA da her bir sembol, S_a , $a \in \{1, \dots, M\}$, iletilici tarafından ψ_a tipinde N_a tane molekülün dilim zamanının başında bırakılması ile alıcıya gönderilir. Gönderilen dilim zamanı boyunca alıcı σ_a ya da daha fazla ψ_a tipinde molekül alabilirse S_a sembolünün doğru bir şekilde alıcıya iletiildiği kabul edilmektedir. Şimdi $c_a(N_a, t)$ ile ifade edilen bir sayma işlemi (counting process) tanımlayalım. $c_a(N_a, t)$, N_a sayıdaki ψ_a moleküllerinin dilim zamanının başında yani $t = 0$ da bırakılmasından sonra t anına kadar alıcıya ulaşan molekül sayısını ifade etmektedir. Bu işlem ile ilgili olasılık kütle fonksiyonu (probability mass function), $\varphi_a(N_a, l, t)$, aşağıdaki gibi verilebilir.

$$\begin{aligned} \varphi_a(N_a, l, t) &= \Pr(c_a(N_a, t) = l) \\ &= \binom{N_a}{l} F_{\psi_a}^l(t) [1 - F_{\psi_a}(t)]^{N_a - l}, \end{aligned} \quad 1-1$$

Burada $l \in [0, N_a]$, $t \geq 0$ olarak verilir ve $F_{\psi_a}(t)$ herhangi bir molekülün ileticiden alıcıya ulaşırken maruz kaldığı gecikmenin toplam dağılım fonksiyonunu (cumulative distribution function) göstermektedir ve aşağıdaki gibi verilir Karatzas ve Shreve (1991).

$$F_{\psi_a}(t) = \operatorname{erfc}\left(\frac{d}{2\sqrt{D_{\psi_a}t}}\right), \quad t > 0 \quad 1-2$$

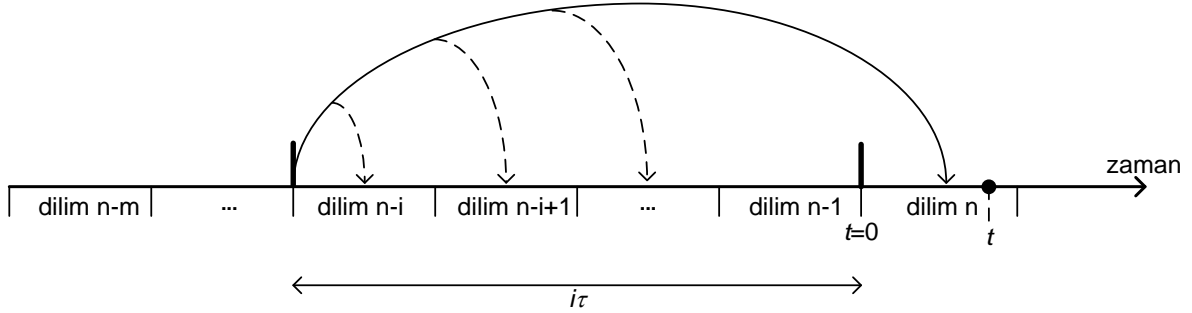
Burada D_{ψ_a} , ψ_a moleküllerinin difüzyon katsayısını göstermektedir, d ise iletilici ve alıcı arasındaki mesafedir.

Şimdi yukarıda tanımlanan sayma işlemi $c_a(N_a, t)$ biraz değiştirilerek daha önceki dilim zamanlarda bırakılan moleküllerin şimdiki dilime olan etkisini anlayabilmek için bir başka sayma işlemi $c_{a,i,h}(N_a, t)$ tanımlanabilir. Şekil 1-1'de görüldüğü gibi, burada $c_{a,i,h}(N_a, t)$ N_a sayıdaki ψ_a moleküllerin $n - i$. dilim zamanının başında bırakılmasından sonra bu moleküllerden şimdiki zaman diliminde (yani n . zaman diliminde) alıcıya ulaşanların sayısını ifade etmektedir. Ayrıca bu sayma işlemi $n - i$. dilim zamanının başında bırakılan bu moleküllerden h tanesinin şimdiki zaman diliminden (yani n . zaman diliminden) önceki zaman dilimlerinde alıcıya ulaştığını göz önünde bulundurmaktadır. Bu yeni sayma işlemine ait olasılık kütle fonksiyonu $\varphi_{a,i,h}(N_a, j, t)$ aşağıdaki gibi verilebilir.

$$\varphi_{a,i,h}(N_a, j, t) = \binom{N_a-h}{j} \frac{[F_{\psi_a}(t+i\tau) - F_{\psi_a}(i\tau)]^j [1 - F_{\psi_a}(t+i\tau)]^{N_a-(h+j)}}{[1 - F_{\psi_a}(i\tau)]^{N_a-h}} \quad 1-3$$

$\varphi_{a,i,h}(N_a, j, t)$ fonksiyonunu h parametresine olan bağımlılıktan kurtarırsak; $n - i$. dilim zamandan n . dilim zamana ulaşan molekül sayısını $c_{a,i}(N_a, t)$ sayma işlemi ile ve bu sayma işlemiyle ilgili olasılık kütle fonksiyonunu da ($\varphi_{a,i}(N_a, j, t)$) aşağıdaki gibi verebiliriz.

$$\begin{aligned} \varphi_{a,i}(N_a, j, t) &= \Pr(c_{a,i}(N_a, t) = j) = \\ &= [F_{\psi_a}(t + i\tau) - F_{\psi_a}(i\tau)]^j \sum_{h=0}^{N_a-j} \binom{N_a}{h} \binom{N_a-h}{j} F_{\psi_a}^h(i\tau) [1 - F_{\psi_a}(t + i\tau)]^{N_a-(h+j)} \end{aligned} \quad 1-4$$



Şekil 1-1 n-i. zaman diliminin n. zaman dilimine etkisi

Yukarıda tanımlanan $c_{a,i}(N_a, t)$ sayma işleminde n . ve $n - i$. dilim zamanlarda S_a sembolünün gönderildiği düşünülmektedir. Oysa M farklı sembol mevcut olduğundan n . dilim zamanda S_a gönderilirken $n - i$. dilim zamanda diğer sembollerin gönderilmiş olması da mümkündür. Bu durum Şekil 1-1'den de kolayca gözlemlenebilir. Dolayısıyla, n . dilim zamanda S_a sembolünün gönderildiği düşünülürse gerideki m dilim zaman boyunca gönderilen sembollerin n . dilim zamana olan etkisi aşağıdaki gibi tanımlanan yeni bir sayma işlemi ile ifade edilebilir.

$$e_{a,i}(N_a, t) = \begin{cases} c_{a,i}(N_a, t), & s(n - i) = S_a \\ 0, & s(n - i) = S_b, \quad b \neq a \end{cases} \quad 1-5$$

Burada $s(n - i)$, $n - i$. dilimde gönderilen sembolü ifade eder. Daha önce tanımlanan sayma işlemleri ve ilgili olasılık kütle fonksiyonları kullanılarak $e_{a,i}(N_a, t)$ sayma işlemine ait olasılık kütle fonksiyonu aşağıdaki gibi verilebilir.

$$\begin{aligned}
\tilde{\varphi}_{a,i}(N_a, j, t) &= \Pr(e_{a,i}(N_a, t) = j) \\
&= \left[\frac{1}{M} \Pr(c_{a,i}(N_a, t) = j) + \frac{M-1}{M} \delta(j) \right] \\
&= \left[\frac{1}{M} \varphi_{a,i}(N_a, j, t) + \frac{M-1}{M} \delta(j) \right]
\end{aligned} \tag{1-6}$$

Burada, $j = 0, \dots, N_a$ ve $\delta(\cdot)$ delta fonksiyonunu temsil etmektedir. Sonuç olarak n . dilimde gönderilen S_a sembolüne ait ψ_a molekülleri ve m tane geçmiş dilim boyunca gönderilen sembollerden gelen olası ψ_a moleküllerinin sayısını ifade etmek için aşağıdaki toplam sayma işlemi (compound counting process) tanımlanabilir.

$$c_{a,T,m}(N_a, t) = \left(\sum_{i=1}^m e_{a,i}(N_a, t) \right) + c_a(N_a, t) \tag{1-7}$$

Daha önce verilen sayma işlemlerine ait olasılık kütle fonksiyonlarının konvolüsyonunu kullanarak $c_{a,T,m}(N_a, t)$ sayma işleminin olasılık kütle fonksiyonu aşağıdaki gibi verilebilir.

$$\varphi_{a,T,m}(N_a, k, t) = \varphi_a(N_a, k, t) * [\tilde{\varphi}_{a,1}(N_a, k, t) * \dots * \tilde{\varphi}_{a,m}(N_a, k, t)] \tag{1-8}$$

Burada $k = 0, \dots, (m+1)N_a$. Bu durumda S_a sembolünün karşılaştığı gecikmeye ait dağılım fonksiyonu aşağıdaki gibi ifade edilebilir.

$$F_a(t) = \Pr(\gamma_a \leq t) = \Pr(c_{a,T,m}(N_a, t) \geq \sigma_a) = \sum_{k=\sigma_a}^{(m+1)N_a} \varphi_{a,T,m}(N_a, k, t) \tag{1-9}$$

γ_a , S_a sembolünün karşılaştığı gecikmeyi göstermektedir. Şimdiye kadar n . zaman diliminde gönderilen S_a sembolü ve bu sembole önceki zaman diliminde gönderilen sembollerin etkisi modellenerek S_a sembolünün karşılaştığı gecikmenin olasılık dağılımı türetilmiştir. Oysa n . zaman diliminde S_a sembolü gönderilmiş olsa bile bu zaman dilimden önceki zaman dilimlerinde gönderilen farklı sembolere ait moleküllerin alıcıya ulaşması (mesela S_b sembolüne ait ψ_b molekülleri) ve S_a yerine başka bir sembolün n . zaman diliminde alınması mümkündür. Bu yüzden bu durumun da modelleme ve analizde göz önünde bulundurulması gerekmektedir. Şimdi $e_{a,i}(N_a, t)$ sayma işlemine benzer biçimde $e_{b,i}(N_b, t)$ sayma işlemini $n-i$. zaman diliminde bırakılmış ve n . zaman diliminde alıcıya ulaşan S_b sembolüne ait ψ_b moleküllerini göz önünde bulundurabilmek için aşağıdaki gibi tanımlayabiliriz.

$$e_{b,i}(N_b, t) = \begin{cases} c_{b,i}(N_b, t), & s(n-i) = S_b \\ 0, & s(n-i) = S_a, \quad a \neq b \end{cases} \tag{1-10}$$

Burada $c_{b,i}(N_b, t)$ daha önce tanımlanan $c_{a,i}(N_a, t)$ işleminin S_b sembolü için düşünülmüş halidir. Dolayısıyla bu işlem için olasılık kütle fonksiyonu (1-6)'da verilen ifadeye benzer şekilde aşağıdaki gibidir.

$$\begin{aligned}\tilde{\varphi}_{b,i}(N_b, j, t) &= \Pr(e_{b,i}(N_b, t) = j) = \left[\frac{1}{M} \Pr(c_{b,i}(N_b, t) = j) \frac{M-1}{M} \delta(j) \right] \\ &= \left[\frac{1}{M} \varphi_{b,i}(N_b, j, t) + \frac{M-1}{M} \delta(j) \right]\end{aligned}\quad 1-11$$

Önceki zaman dilimlerinden gelebilecek S_a 'dan farklı olası sembollerin her biri için (1-7)'ye benzer şekilde toplam sayma işlemi aşağıdaki gibi verilir.

$$\tilde{c}_{b,T,m}(N_b, t) = \sum_{i=1}^m e_{b,i}(N_b, t) \quad 1-12$$

Bu toplam sayma işleminin olasılık kütle fonksiyonu ise şu şekildedir.

$$\tilde{\varphi}_{b,T,m}(N_b, k, t) = \tilde{\varphi}_{b,1}(N_b, k, t) * \dots * \tilde{\varphi}_{b,m}(N_b, k, t) \quad 1-13$$

Buradan yola çıkarak önceki zaman dilimlerinden gelen bu ve bunun gibi S_a 'dan farklı olası S_b sembollerinin karşılaştıkları gecikmenin olasılık dağılımı aşağıdaki gibi ifade edilebilir.

$$\begin{aligned}F_b(t) &= \Pr(\gamma_b \leq t) = \Pr(\tilde{c}_{b,T,m}(N_b, t) \geq \sigma_b) \\ &= \sum_{k=\sigma_b}^{mN_b} \tilde{\varphi}_{b,T,m}(N_b, k, t)\end{aligned}\quad 1-14$$

γ_b , S_b sembolünün karşılaştığı gecikmeyi göstermektedir. (1-9)'da verilen $F_a(t)$ ve az önce türetilen $F_b(t)$ kullanılarak S_a sembolünün n . zaman diliminde başarılı bir şekilde alıcıya gönderilebilme olasılığı aşağıdaki şekilde verilebilir.

$$P_a = F_a(\tau) \prod_{b \neq a} [1 - F_b(\tau)] \quad 1-15$$

Burada τ kanaldaki zaman dilimlerinin genişliğini göstermektedir. (1-15) kullanılarak kolayca hatalı gönderme olasılığı aşağıdaki gibi bulunur.

$$SEP_a = 1 - P_a \quad 1-16$$

Aslında toplamda M farklı sembol olduğu için n . zaman diliminde gönderilen sembol S_a dışında herhangi bir sembol olabilir. Eğer bu sembollerin eşit olasılıklarla gönderildiğini düşünürsek genel bir sembol hata olasılığını aşağıdaki gibi elde edebiliriz.

$$SEP = \frac{1}{M} \sum_{a=1}^M SEP_a \quad 1-17$$

3.2 M-Seviyeli Yoğunluk Kaymalı Anahtarlama (M-YKA) (M-Level Concentration Shift Keying)

M-YKA'da M-MKA'dan farklı olarak tek tip molekül kullanılmaktadır. Her bir sembol, $S_a, a \in \{1, \dots, M\}$, iletilici tarafından ψ tipindeki N_a tane molekülün dilim zamanının başında bırakılması ile alıcıya gönderilir. Alıcı M farklı sembolü tespit edebilmek için $\{\sigma_1, \dots, \sigma_M\}$ ile verilen M tane eşik değeri kullanır. Her bir sembol için iki tane eşik değeri kullanılır. Örneğin eğer bir zaman dilimi içerisinde alıcı $[\sigma_1, \sigma_2]$ aralığında molekül alabildiyse iletilici tarafından zaman diliminin başında sembol 2 (S_2)'nin gönderildiğini düşünür.

M-MKA'dan farklı olarak M-YKA'dan n . zaman diliminde gönderilen bir sembole m tane geçmiş zaman diliminde gönderilen bütün sembollerin karışma ihtimali vardır. Çünkü tek tip molekül kullanılmaktadır. Bu nedenle (1-7)'de verilen sayma işlemine benzer şekilde herhangi bir n . zaman diliminde alıcı tarafından alınan molekülü ifade etmek için aşağıdaki gibi bir toplam sayma işlemi tanımlanabilir.

$$c_{a,T,m}(N_a, t) = (\sum_{i=1}^m e_i(t)) + c_a(t) \quad 1-18$$

Burada sayma işlemi $e_i(t)$ aşağıdaki gibi ifade edilebilir.

$$e_i(t) = \sum_{b=1}^M c_{b,i}(N_b, t) \times \delta(s(n-i), S_b). \quad 1-19$$

Bu ifadedeki Kronecker delta $\delta(\cdot)$, $s(n-i) = S_b$ durumu için birdir, diğer durumlarda sıfırdır. Dolayısıyla geçmişteki m zaman diliminin n . zaman dilimine karışabildiğini matematiksel olarak ifade eder. Ayrıca $c_{b,i}(N_b, t)$ sayma işlemi (1-4)'teki olasılık kütle fonksiyonu ile karakterize edilen sayma işlemi ile aynıdır. Bu durumda $c_{b,i}(N_b, t)$ sayma işlemine ait olasılık kütle fonksiyonu

$$\begin{aligned}
\varphi_{b,i}(N_b, j, t) &= \Pr(c_{b,i}(N_b, t) = j) \\
&= [F_\psi(t + i\tau) - F_\psi(i\tau)]^i \times \sum_{h=0}^{N_b-j} \binom{N_b}{h} \binom{N_b-h}{j} F_\psi^h(i\tau) \\
&\quad \times [1 - F_\psi(t + i\tau)]^{N_b-(h+j)}
\end{aligned} \tag{1-20}$$

ile verilir ve burada $0 \leq j \leq N_b$, $1 \leq b \leq M$, $1 \leq i \leq m$ olarak verilir. Sonuç olarak $e_i(t)$ sayma işlemine ait olasılık kütle fonksiyonu ise aşağıdaki gibi bulunur.

$$\begin{aligned}
\tilde{\varphi}_i(j, t) &= \Pr(e_i(t) = j) \\
&= \frac{1}{M} \sum_{b=1}^M \Pr(c_{b,i}(N_b, t) = j)
\end{aligned} \tag{1-21}$$

Burada $j = 0, \dots, N = \max\{N_1, \dots, N_M\}$ olarak verilir. (1-18)'de verilen toplam sayma işlemi ve (1-21) göz önünde bulundurulduğunda (1-18)'deki toplam sayma işlemine ait olasılık kütle fonksiyonu aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\varphi_{a,T,m}(N_a, k, t) = \varphi_a(N_a, k, t) * [\tilde{\varphi}_1(k, t) * \dots * \tilde{\varphi}_m(k, t)] \tag{1-22}$$

Burada $a \in \{1, \dots, M\}$ and $k \in \{0, \dots, N_a + mN\}$. (1-1)'deki olasılık kütle fonksiyonuna benzer şekilde $\varphi_a(N_a, l, t)$ şu şekilde ifade edilir.

$$\begin{aligned}
\varphi_a(N_a, l, t) &= \Pr(c_a(N_a, t) = l) \\
&= \binom{N_a}{l} F_\psi^l(t) [1 - F_\psi(t)]^{N_a-l}
\end{aligned} \tag{1-23}$$

Burada $l \in [0, N_a]$, $t \geq 0$. Yukarıdaki eşitlikleri esas alarak M-YKA için sembol hata olasılığı şu şekildedir.

$$\begin{aligned}
SEP_a &= \Pr(c_{a,T,m}(N_a, \tau) \notin [\sigma_{a1}, \sigma_{a2}]) \\
&= 1 - \Pr(c_{a,T,m}(N_a, \tau) \in [\sigma_{a1}, \sigma_{a2}]) \\
&= 1 - \sum_{k=\sigma_{a1}}^{\sigma_{a2}} \varphi_{a,T,m}(N_a, k, \tau)
\end{aligned} \tag{1-24}$$

Yukarıdaki ifadede σ_{a1} ve σ_{a2} sembol S_a 'nın alıcı tarafından tespit edilmesi için kullanılan iki eşik değeri göstermektedir. Bütün sembollerin düşünüldüğü genel durum için ise sembol hata olasılığı aşağıdaki şekilde ifade edilir.

$$SEP = \frac{1}{M} \sum_{a=1}^M SEP_a \tag{1-25}$$

3.3 Gecikme ve Performans Analizlerinin Doğrulanması

Bu bölümde yukarıda geliştirilen bütün eşitliklerin son adımı olan (1-16) ve (1-24)'te verilen sembol hata olasılıkları benzetim deneyleri yolu ile doğrulanmaktadır. Bu doğrulamalarda moleküllerin difüzyonları için zaman adımı (time step) $t_s = 10^{-6}$ olarak belirlenmiş, adım uzunluğu ise

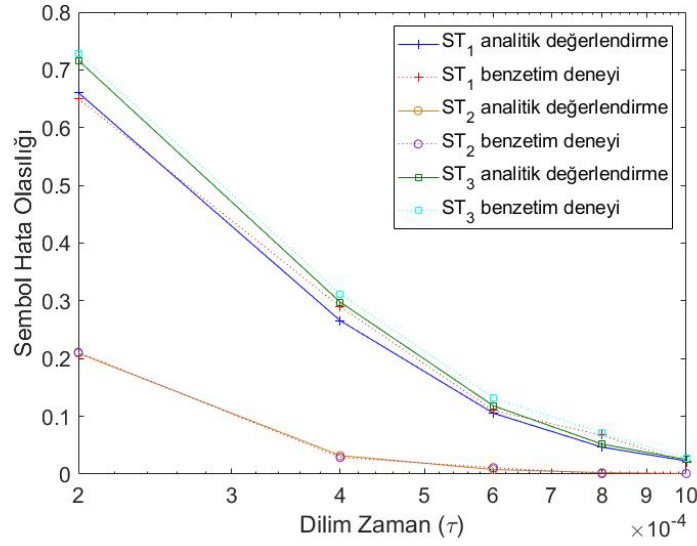
$$\rho = \sqrt{2t_s D} \quad 1-26$$

ifadesi ile belirlenmiştir. (1-16)'da verilen M-MKA'ya ait sembol hata olasılığı ifadesi için dört sembol ve Tablo 1-1'de verilen üç ayrı parametre seti kullanılmıştır. Semboller için kullanılan difüzyon sabitleri, bırakılan molekül sayıları ve eşik değerler şu şekildedir. $D_{\psi_a} = \{1000, 1100, 1200, 1300 \mu m^2/s\}$, $N_a = \{20, 22, 24, 26\}$, $\sigma_a = \{10, 10, 10, 10\}$, $a = 1, 2, 3, 4$. Diğer parametreler M, m, d Tablo 1-1'de verilen üç ayrı parametre setine göre değişmektedir.

Tablo 1-1. M-MKA analizlerinin doğrulanması için kullanılan parametre setleri.

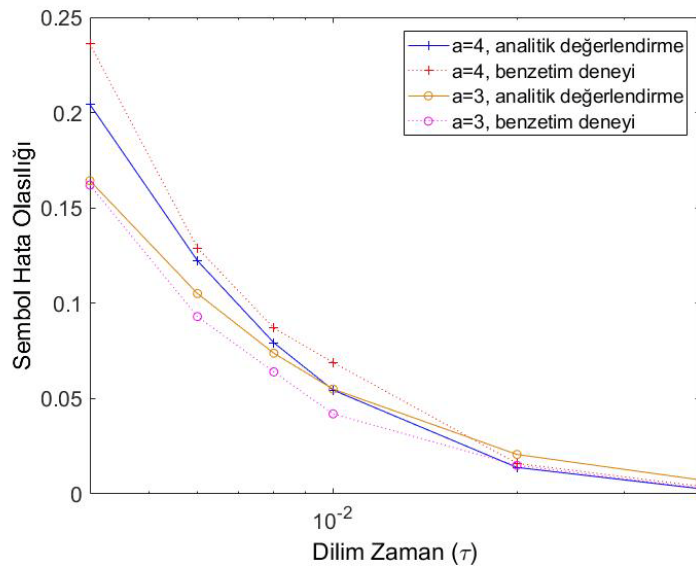
Setler	M	m	d
ST ₁	4	4	0.6
ST ₂	4	4	0.4
ST ₃	4	2	0.6

Şekil1-2'de görüldüğü gibi M-MKA'nın (1-16)'da verilen sembol hata olasılığı eşitliği benzetim deneylerinde elde edilen sonuçlar ile neredeyse birebir aynıdır. Bu da geliştirilen sembol hata olasılığının doğrulandığını göstermektedir.



Şekil 1-2. M-MKA'nın (16)'da verilen sembol hata olasılığının doğrulanması

M-YKA'nın sembol hata olasılığı ifadesi olan (1-24)'ü doğrulayabilmek için gene dört tane sembol düşünülmektedir. Bu sembolleri ile ilgili iletilen tarafından bırakılan molekül sayıları, alıcı tarafından kullanılan eşik değerler, kullanılan molekülün difüzyon katsayısı, kanaldaki hafıza miktarı ve iletilen ve alıcı arasındaki mesafe gibi parametreler şu şekilde seçilmiştir. $N_1 = 10, N_2 = 20, N_3 = 30, N_4 = 40, \sigma_1 = 15, \sigma_2 = 24, \sigma_3 = 33, D = 1000 \mu m^2 / s, m = 4$ ve $d = 0.6 \mu m$. Şekil1-3'te görüldüğü gibi M-YKA'ya ait olan ve (1-24)'te verilen sembol hata olasılığı ifadesi 3. ve 4. semboller için benzetim deneylerinden elde edilen sonuçlar ile neredeyse bire bir aynıdır. Bu da geliştirilen ifadelerin doğruluğunu göstermek için yeterlidir.



Şekil 1-3. M-YKA'ya ait olan ve (24)'te verilen sembol hata olasılığı ifadesinin 3. ve 4. semboller için doğrulanması.

3.4 Eşik Değerlerinin Belirlenmesi

M-MKA ve M-YKA'da sembollerin tespiti için alıcı tarafından kullanılan eşik değerlerin etkili bir şekilde seçilmesi gerekmektedir. Eşik değerleri sembol hata olasılıkları olabildiğince düşük çıkabilecek şekilde belirlenmelidir. M-MKA için öncelikle her bir sembol için kullanılan sayma işlemlerinin ortalamaları ve standart sapmaları aşağıdaki gibi belirlenebilir.

$$E_a = \sum_{k=0}^{(m+1)N_a} k \varphi_{a,T,m}(N_a, k, \tau)$$

$$STD_a = \sqrt{\sum_{k=0}^{(m+1)N_a} (k - E_a)^2 \varphi_{a,T,m}(N_a, k, \tau)}$$

Daha sonra belirlenen bu ortalama ve standart sapma değerlerine göre aşağıdaki gibi yapılacak olan eşik değer seçimlerinin sembol hata olasılıklarını azaltabileceği düşünülebilir. Bu azalma performans değerlendirmeleri kısmında grafiksel olarak gösterilmektedir.

$$th_a = [E_a - STD_a], \forall a = 1, \dots, M$$

$$th_a = [E_a - 2STD_a], \forall a = 1, \dots, M$$

$$th_a = [E_a - 3STD_a], \forall a = 1, \dots, M$$

M-YKA'daki eşik değerlerin belirlenmesinde ise öncelikle sayma işleminin ortalaması aşağıdaki gibi bulunabilir.

$$r_a = E(c_{a,T,m}(N_a, \tau)), \quad a = 1, \dots, M \quad 1-27$$

$$E(c_{a,T,m}(N_a, \tau)) = \sum_{k=0}^{N_a+mN} k \varphi_{a,T,m}(N_a, k, \tau) \quad 1-28$$

Şimdi M-YKA için kullanılan eşik değerler için iki ardıl referans değeri aşağıdaki gibi kullanılabilir.

$$th_a = \left[\frac{r_a + r_{a+1}}{2} \right], \quad a = 1, \dots, M - 1 \quad 1-29$$

Performans değerlendirmeleri bölümünde yukarıda verilen eşik değer seçme yönteminin sembol hata olasılığını azaltarak performansı nasıl arttırdığı grafiksel olarak gösterilmiştir.

3.5 Performans Değerlendirmesi

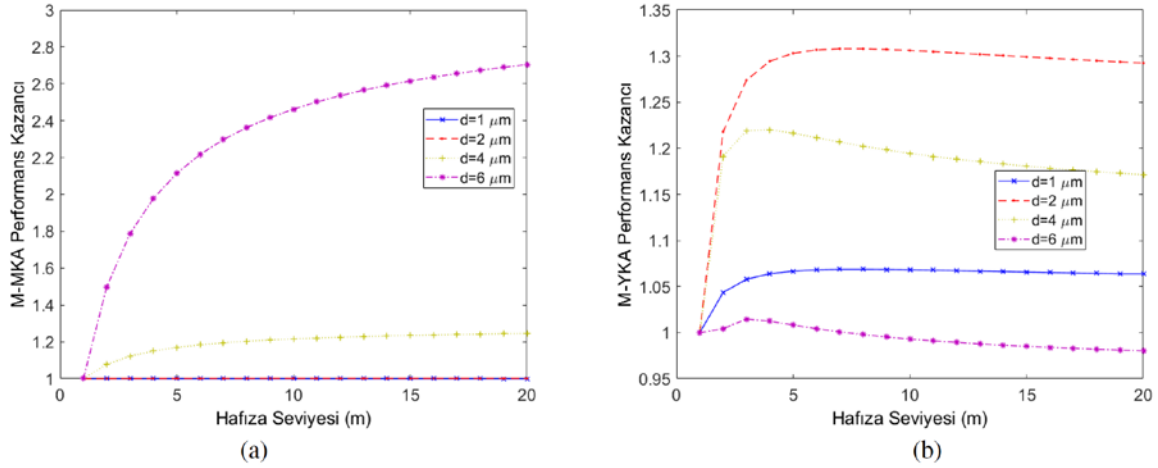
Bu bölümde M-MKA ve M-YKA'nın performans değerlendirmeleri verilecektir. Önce kanal hafızasının bu iki moleküler haberleşme biçimine etkisi gösterilecek ardından eşik değer seçiminin performansı nasıl etkilediği gösterilecektir.

3.5.1 Kanal Hafızasının M-MKA ve M-YKA Performanslarına Etkileri

Moleküler haberleşme kanalındaki hafıza seviyesinin M-MKA ve M-YKA'nın performansını nasıl etkilediğini gözlemleyebilmek için aşağıdaki gibi bir performans kazanç metriği tanımlanabilir.

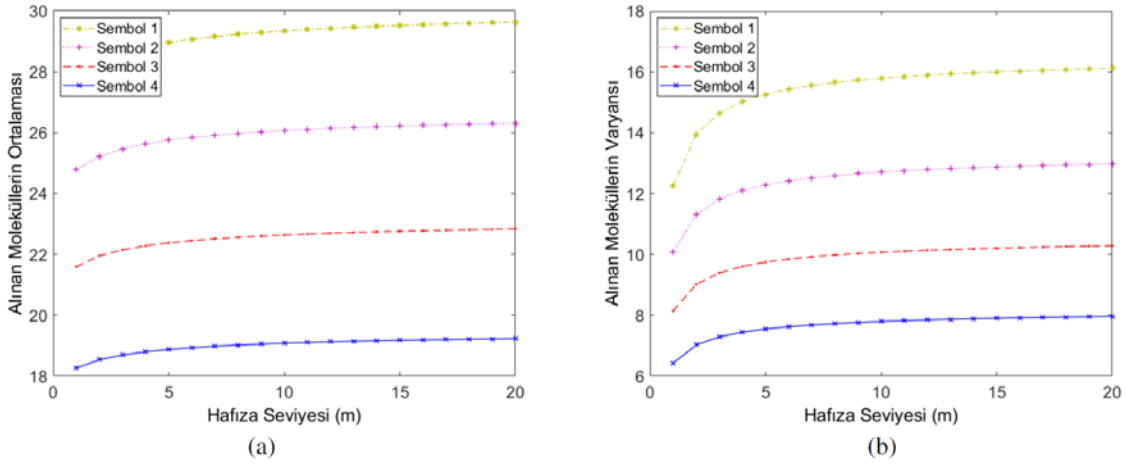
$$\eta(i) = \frac{1-SEP(i)}{1-SEP(1)} \quad 1-30$$

SEP(*i*) hafıza seviyesi *i* olduğu durum için, yani *m* = *i* için, sembol hata olasılığını göstermektedir. Dolayısıyla, yukarıdaki ifadede paydada yer alan SEP(1), kanal hafızasının bir olduğu durum için sembol hata olasılığını göstermektedir. Kolayca anlaşılacağı üzere, *i* arttıkça $\eta(i)$ 'deki artış, kanal hafızasındaki artışın performansı olumlu etkilediğini azalışın ise performansı olumsuz etkilediğini göstermektedir. Şekil1-3'te farklı mesafe değerleri için (1-30)'da verilen kazanç metriği M-MKA ve M-YKA modülasyon yöntemleri için gösterilmiştir. M-MKA'da $d = 4\mu m$ ve $d = 6\mu m$ için performansın kanal hafızası arttıkça iyileşebileceği görülmektedir. Aynı durum $d = 1,2,4\mu m$ için M-YKA'da da söz konusudur. Sonuç olarak eğer parametreler uygun seçilirse moleküler haberleşmede kanal hafızasındaki artışın performansı olumlu etkileyebileceği gösterilmiştir. Bu literatürdeki hafızadaki artışın kanal gürültüsünü artırarak performansı olumsuz etkileyeceği yaygın fikrini de çürütmektedir.



Şekil 1-4. (1-30)'da verilen performans kazanç metriğinin kanal hafıza seviyesi arttıkça farklı mesafe (d) değerleri için nasıl değiştiğini (a)'da M-MKA için (b)'de M-YKA için gösterilmiştir.

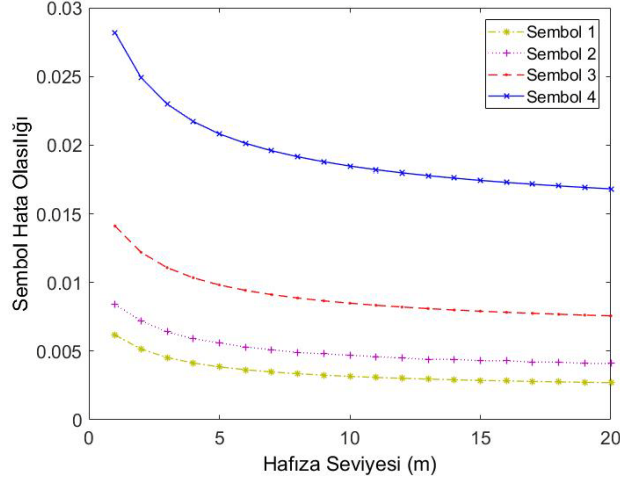
Şekil 1-5'te, M-MKA'da alıcı tarafından alınan molekül sayısının ortalaması ve varyansı gösterilmektedir. Dört farklı sembol için salım seviyesi (emission level) olarak 40, 35, 30 ve 25 seçilmiştir. Şekilde görüldüğü gibi salım seviyesindeki artış alınan molekül sayısının ortalamasını ve varyansını artırmaktadır. Bu artış kanalın hafıza seviyesi 1 ila 3 arasında iken hızlıdır. Hafıza seviyesi daha fazla arttığında ise ortalama değer ve varyans durağanlaşmaktadır.



Şekil 1-5. M-MKA'da alıcı tarafından alınan molekül sayısının ortalaması (a) ve varyansının (b) kanal hafızası arttıkça nasıl değiştiği gösterilmektedir.

Şekil1-5'te kullanılan aynı senaryo için eşik değerleri 20, 18, 16 ve 14 seçerek bu dört sembol için sembol hata olasılıkları Şekil 1-6'da gösterilmektedir. Görüldüğü üzere sembollerin ortalama değerleri ve varyansları arttıkça (bu artış Şekil1-5'ten takip edilebilir) sembol hata oranları azalmaktadır. Bu durum şu şekilde yorumlanabilir; alıcı tarafında

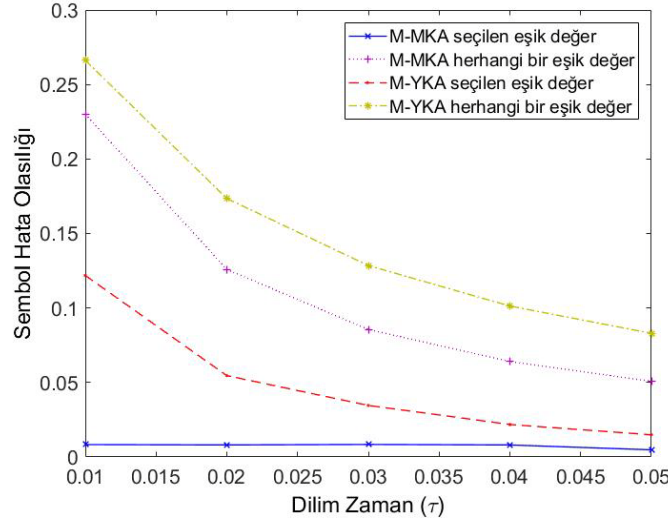
yüksek ortalama değer ve varyansa neden olan sembollerin önceden belirlenen eşik değeri aşabilmesi daha olası olduğu için bu sembol hata olasılığını düşürmektedir.



Şekil 1-6. Şekil 1-5'te kullanılan aynı senaryo için sembol hata olasılıklarının kanal hafızası arttıkça nasıl değiştiği gösterilmektedir.

3.5.2 Eşik Değer Seçiminin Performansa Etkileri

Burada eşik değer seçiminin performansı nasıl etkilediğini gösterebilmek için M-MKA ve M-YKA'da bir rastgele eşik değer seçimi bir de yukarıda anlatılan yöntemler ile eşik değer seçimi yapılmış ve sonuçlar karşılaştırılmıştır. Beş farklı dilim zaman için beşer farklı eşik değer setleri yukarıda anlatılan yöntemler ile belirlenmiştir. Bunlar M-MKA için {13,14,16,18}, {14,16,18,19}, {17,17,18,20}, {15,17,19,21} ve {15,17,19,21} olarak belirlenmiştir. Bu değerler yukarıda anlatıldığı gibi M-MKA için $th_a = [E_a - 2STD_a]$ 'nin tam sayı kısmı alınarak belirlenmiştir. M-MKA için rastgele eşik değerler {18,18,18,18} olarak seçilmiştir. M-YKA için ise eşik değerler {15,23,31}, {15,23,32}, {15,24,33}, {15,24,33} ve {15,24,33} olarak belirlenmiş, rastgele eşik değer seti ise {12,24,36} olarak seçilmiştir. Şekil 1-7'de görüldüğü gibi eşik değer seçim mekanizmaları M-MKA ve M-YKA için performansı %100'den daha fazla arttırmayı başarabilmiştir.



Şekil 1-7. Eşik değeri seçim mekanizmalarının M-MKA ve M-YKA'nın performansına olan etkileri gösterilmektedir.

4. DİFÜZYONA DAYALI EŞZAMANSIZ (ASYNCHRONOUS) HABERLEŞMENİN PERFORMANS ANALİZİ

Literatürde eşzaman (synchronization) gerektirmeyen moleküler haberleşme pek çok çalışmada incelenmiştir. Bu çalışmaların birinde TN (Transmitter Nanomachine) ve RN (Receiver Nanomachine) arasında iki molekül tip ile molekül sırasına dayalı eşzamansız bir moleküler haberleşme şeması önerilmiştir Atakan vd. (2012). Önerilen şema her ne kadar eşzamanlılığı ortadan kaldırırsa da, her sembolün bir önceki sembol tarafından müdahaleye uğradığı (interfere) varsayılmalıdır. Dolayısıyla bu çalışmada kanal hafızası hesaba katılmamıştır. Başka bir eşzamansız moleküler haberleşme şemasında Hsieh vd. (2013), farklı molekül tipleri kullanılarak bir bilgi sembolünün kodlanması sağlanmıştır. Benzer biçimde Lin vd. (2015)'te tek bir molekül kullanmak yerine, her bilgi sembolü çoklu molekül kullanılarak kodlanmış ve eşik seviyelerinin değerlerinden yararlanılarak alıcıda semboller algılanmıştır. Ancak bu çalışmaların tümünde kanal hafızası hesaba katılmamıştır, yani her sembolün bir önceki sembol tarafından müdahaleye uğradığı kabul edilmiştir.

Bu çalışmada, eşzamansız moleküler haberleşmenin herhangi bir kanal bellek seviyesindeki performansı verilmektedir. Bilgi sembolleri, iletilen molekülün türüne göre kodlanmaktadır. M farklı tipteki molekülün her biri farklı bir sembolü ifade etmektedir. Bu yüzden, her sembol salımda önceden belirlenmiş yoğunluktaki bir molekül tipiyle kodlanmıştır. Alıcıya uygun eşik seviyesinin üstünde molekül çarptığında algılama gerçekleşmektedir. Salım seviyesi ve eşik değeri her bir molekül türünü algılama süreciyle bağlantılı olduğu için her sembole özgü seçilmiştir. İletici ve alıcı arasında bir eş zamanlama olmadığı için moleküler haberleşmeyi başlatabilmek için bilgi sembollerinden farklı bir işaret

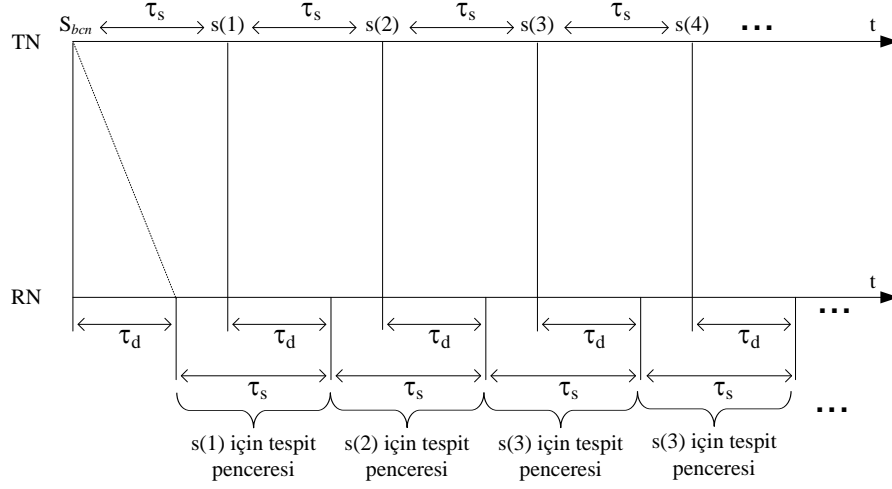
sembolü (beacon symbol) kullanılmaktadır. Bu işaret sembolü ilk sembol olarak gönderilerek iletilen ve alıcı arasındaki haberleşmeyi başlatmaktadır. Performans değerlendirmeleri moleküler haberleşme kanalındaki sembol hata olasılığının (symbol error probability) işaret sembolünün nasıl tasarlandığı ile çok ilgili olduğunu göstermiştir. Öyle ki; işaret sembolü uygun bir şekilde seçildiği zaman sembol hata olasılığının büyük miktarda düştüğü gözlenmiştir. Bunun üzerine bir işaret sembolü tasarım mekanizması önerilmiştir. Önerilen mekanizma sayesinde sembol hata olasılığının büyük miktarlarda düşürülebildiği gösterilmiştir. Elde edilen sonuçlar ışığında işaret sembolü uygun bir şekilde tasarlandığında eşzamansız moleküler haberleşme kanalında eşzamanlı moleküler haberleşme kanalına yakın bir sembol hata olasılığı elde edilebileceği kanaati oluşmuştur. Bu da eş zamanlama zorunluluğunu ortadan kaldırmaktadır.

4.1 Kanal Hafızalı Eşzamansız Moleküler Haberleşme

M'lik (M-ary) eşzamansız moleküler haberleşmede her bir $S_a, a \in \{1, \dots, M\}$, sembolünü gönderebilmek için iletilen tarafından ψ_a tipinde N_a tane molekül salınmaktadır. Salınan moleküller difüzyon ile alıcıya vararak alıcı tarafından algılanmaktadır. Salım, Şekil 2-1'deki zaman cetvelinde (time diagram) gösterildiği gibi her ara-sembol zamanı (inter-symbol time) τ_s içinde iletilen tarafından gerçekleştirilir. Burada $s(i)$ gönderilen i . sembolü göstermektedir ve $s(i) = S_a, a \in \{1, \dots, M\}, i \in \{1, \dots\}$ dir. Alıcının alınan molekülleri ayırt edip sayarak sembollerini algıladığı kabul edilmektedir. Bu algılama önceden belirlenmiş bir σ_a eşik değerine dayanarak gerçekleştirilir. Ara sembol zamanı τ_s içinde ψ_a tipli en az σ_a kadar molekül saptanabiliyorsa S_a sembolünün doğru alınmış olduğu kabul edilir. Aktarılan herhangi bir sembolün önceki m sayıdaki sembolden etkilendiği kabul edilir. Burada m kanal hafızasının derecesini göstermektedir. Örneğin, $m=20$ ise, herhangi bir sembol iletimi son 20 sembol tarafından etkilenmiştir. İletici ve alıcı arasında eşzamanlılık yoktur.

İletici ve alıcı arasındaki iletişim, iletilen tarafından aşağıdaki şekilde iletilen işaret sembolü S_{bcn} ile tetiklenir. S_{bcn} iletilen tarafından $t = 0$ anında N_{bcn} tane ψ_{bcn} tipli molekül salınarak iletilir. Alıcı σ_{bcn} tane molekül topladığı $t = \tau_d$ anında işaret sembolünü algılar. Burada τ_d rastgele bir değişkendir ve ψ_{bcn} 'nin difüzyon katsayısı (D_{bcn}), N_{bcn} ve σ_{bcn} ile ilgilidir. İşaret sembolünün algılanmasından sonra iletilen ve alıcı arasındaki moleküler haberleşme $t = \tau_d$ anında başlamış olur. $t = \tau_d$ anından sonra alıcı her ara-sembol zamanı (τ_s) aralığının başında yeni sembol gönderir. Ara sembol zamanı bittiğinde alınan molekülleri sayar ve eşik değerlerine göre $\sigma_a, a \in \{1, \dots, M\}$ iletilen tarafından hangi molekülün gönderilmiş

olabileceğine karar verir (Şekil 2-1). Şimdi rastgele gecikme zamanı τ_d 'nin olasılık dağılımlarını türetmeye odaklanalım.



Şekil 2-1. Eşzamansız moleküler haberleşmeyi gösteren zaman cetveli

N_{bcn} sayıdaki ψ_{bcn} moleküllerini $t = 0$ anında bırakarak iletili işaret sembolü S_{bcn} 'yi gönderir. Şekil 2-1'de görüldüğü gibi alıcı $t = \tau_d$ anında σ_{bcn} tane ψ_{bcn} molekülü topladığında S_{bcn} sembolünü algılamış olur. τ_d için olasılık dağılım fonksiyonu aşağıdaki gibi verilebilir.

$$\begin{aligned} F_{\tau_d} &= \Pr(\tau_d \leq t) \\ &= \sum_{i=\sigma_{bcn}}^{N_{bcn}} \binom{N_{bcn}}{i} F_{bcn}^i(t) [1 - F_{bcn}(t)]^{N_{bcn}-i} \end{aligned} \quad 2-1$$

Burada $F_{bcn}(t)$, ψ_{bcn} molekülleri tarafından alıcıya varmak için karşılaşılan gecikmenin dağılım fonksiyonunu göstermektedir ve aşağıdaki gibi verilir. Karatzas ve Shreve (1991)

$$F_{bcn}(t) = \text{erfc}\left(\frac{d}{\sqrt{4D_{bcn}t}}\right), \quad t > 0 \quad 2-2$$

Burada D_{bcn} , ψ_{bcn} moleküllerinin difüzyon katsayısını, d ise iletili ve alıcı arasındaki uzaklığı göstermektedir. $\text{erfc}(\cdot)$ tamamlayıcı hata fonksiyonudur (complementary error function). τ_d 'nin olasılık yoğunluk fonksiyonu ve ortalaması ise aşağıdaki gibi verilebilir.

$$f_{\tau_d}(t) = \frac{d}{dt} F_{\tau_d}(t) \quad 2-3$$

$$E[\tau_d] = \int_0^{\infty} t f_{\tau_d}(t) dt \quad 2-4$$

İşaret sembolü $t = \tau_d$ anında alıcı tarafından tespit edildikten sonra alıcı her ara-sembol zamanı boyunca alınan molekülleri sayar. Eğer ara sembol zamanının sonunda $\sigma_a, a \in \{1, \dots, M\}$ herhangi bir tipteki molekül tarafından geçilebilirse alıcı o molekül tipine ait sembolün iletici tarafından gönderildiğini düşünür. Şimdi $r_a(N_a, t)$ gibi bir sayma işlemi düşünelim. $r_a(N_a, t)$, iletici tarafından $t = 0$ anında N_a tane ψ_a molekülünden bıraktığı düşünüldüğünde t zamanına kadar alıcıya çarpan ψ_a moleküllerinin sayısını ifade etmektedir. Bu sayma işlemine ait olasılık kütle fonksiyonu aşağıdaki gibi verilebilir.

$$\begin{aligned} \phi_a(N_a, l, t) &= \Pr(r_a(N_a, t) = l) \\ &= \binom{N_a}{l} F_{\psi_a}^l(t) [1 - F_{\psi_a}(t)]^{N_a - l} \end{aligned} \quad 2-5$$

Burada $l \in [0, N_a], t \geq 0$ dır ve $F_{\psi_a}(t)$, ψ_a tipindeki bir molekülün alıcıya ulaşmaya kadar karşılaştığı gecikmeye ait toplam dağılım fonksiyonunu (cumulative distribution function) göstermektedir ve aşağıdaki gibi verilir.

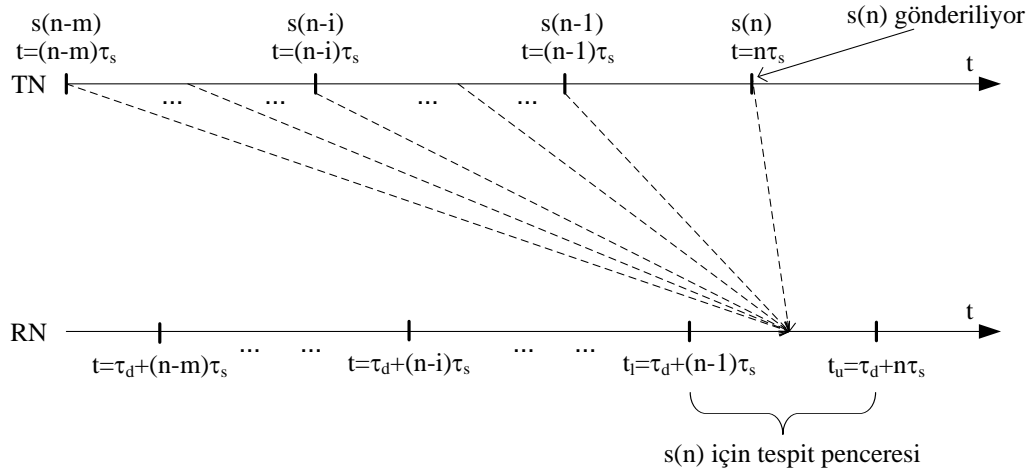
$$F_{\psi_a}(t) = \operatorname{erfc}\left(\frac{d}{2\sqrt{D_{\psi_a}t}}\right), \quad t > 0 \quad 2-6$$

Burada D_{ψ_a} , ψ_a tipindeki moleküllerin difüzyon katsayısını göstermektedir.

Şimdi n . sembole ($s(n) = S_a$, $a \in \{1, \dots, M\}$) odaklanalım. $s(n)$, $t = n\tau_s$ zamanında iletici tarafından ψ_a tipli N_a molekülleri salınarak iletilmiştir. İletici ve alıcı arasında herhangi bir eşzamanlama olmadığından, alıcı $s(n)$ 'yi Şekil 2-2'de gösterildiği gibi $t_l = \tau_d + (n-1)\tau_s$ ve $t_u = \tau_d + n\tau_s$ aralığında algılamaya çalışacaktır. Burada, dikkat edilirse t_l ve t_u , $s(n)$ sembolünün alt ve üst limit algılama aralıklarını ifade etmektedir. Ayrıca basitçe görülebileceği gibi $t_u = t_l + \tau_s$ biçiminde de gösterilebilir.

τ_d 'nin büyüklüğüne bağlı olarak semboller $s(n)$ sembolünün algılanmasına müdahale edebilir. Bu müdahaleci (interfering) semboller, $s(n-1), s(n-2) \dots$ gibi öncül semboller olabileceği gibi $s(n+1), s(n+2) \dots$ gibi ardıl semboller de olabilirler. Aslında, $(t_l, t_u]$ aralığında alıcıya ulaşan moleküller ile ilişkilendirilen semboller τ_d 'nin büyüklüğüne bağlı olarak ifade etmek mümkündür. Eğer $k\tau_s < t_d \leq (k+1)\tau_s$, $k \in \{0, \dots, m\}$ ise, $s(n+k), s(n+k)$ sembollerine ait moleküller alıcıya ulaşabilirler. Genel olarak şunu söyleyebiliriz ki eğer mevcut (current) sembol $s(n) = S_a$ ise, $s(n)$ ile müdahaleye uğrayabilecek semboller,

$s(n+k-i)$, $k \in \{0, \dots, m\}$, $i \in \{0, \dots, m\}$ şeklinde açıklanabilir. $k=i$ durumunda $s(n+k-i)$ 'nin $s(n)$ olacağına dikkat edilmelidir.



Şekil 2-2. $s(n)$ sembolünün iletiminin ve algılanmasının gösterildiği zamanlama cetveli

Şimdi $s(n+k-i)$ sembolüne ait kaç molekülün $(t_l, t_u]$ aralığında alıcıya ulaşabileceğini ifade etmeye yoğunlaşalım. Eğer $s(n+k-i)$ sembolü S_a sembolü ise $s(n) = S_a$ sembolünün σ_a eşiğini aşmasına yardımcı olabilir. Aksi durumda, $s(n) = S_a$ sembolüne bir etkisi olmayacaktır. Bu nedenle, ψ_a tipli molekül miktarını belirten $s(n+k-i)$ sembolünden gelen rastgele değişken $e_{k,i}^a$ aşağıdaki biçimde tanımlanabilir.

$$e_{k,i}^a = \begin{cases} c_{k,i}^a, & s(n+k-i) = S_a, k \neq i \\ 0, & s(n+k-i) = S_b, b \neq a, k \neq i \end{cases} \quad 2-7$$

Burada $c_{k,i}^a$, $S_a = s(n+k-i)$ durumu için alıcıya varan ψ_a molekülünün sayısını gösteren rastgele değişkendir. $k \neq i$ koşulu rastgele değişken $e_{k,i}^a$ 'nin geçerli sembol $s(n)$ 'nin katkısını hariç tuttuğu anlamına gelir. Çünkü $k=i$ durumu için $s(n+k-i)$, $s(n)$ halini alır. $c_{k,i}^a$ 'ye karşılık gelen olasılık kütle fonksiyonu şu şekilde verilebilir:

$$\varphi_{k,i}^a(l, \tau_d) = \binom{N_a}{l} [p_{k,i}^a(\tau_d)]^l [1 - p_{k,i}^a(\tau_d)]^{N_a - l} \quad 2-8$$

Burada $p_{k,i}^a(\tau_d)$, $t = (n+k-i)\tau_s$ zamanında salınımı yapılmış ψ_a tipli moleküllerin alıcıya $(t_l, t_u]$ aralığında ulaşma olasılığıdır ve

$$p_{k,i}^a(\tau_d) = F_{\psi_a}[t_u - (n + k - i)\tau_s] - F_{\psi_a}[t_l - (n + k - i)\tau_s] \quad 2-9$$

şeklinde ifade edilebilir. t_l ve t_u 'nin $t_l = t_d + (n - 2)t_s$ ve $t_u = t_d + (n - 1)t_s$ şeklinde verilebildiğini dikkate alırsak, (2-8) aşağıdaki gibi de yazılabilir:

$$p_{k,i}^a(\tau_d) = F_{\psi_a}[\tau_d - (k - i)\tau_s] - F_{\psi_a}[\tau_d - (k - i + 1)\tau_s] \quad 2-10$$

Şimdi (2-7)'deki $c_{k,i}^a$ için olan kütle olasılık fonksiyonunu kullanarak $e_{k,i}^a$ için bir olasılık kütle fonksiyonu geliştirebiliriz:

$$\tilde{\varphi}_{k,i}^a(l, \tau_d) = \frac{1}{M} \varphi_{k,i}^a(l, \tau_d) + \frac{M-1}{M} \delta(l), \quad 2-11$$

Burada $l = 0, \dots, N_a$ dır ve $\delta(\cdot)$ delta fonksiyonudur. Rastgele $e_{k,i}^a$ değişkeni $s(n + k - i)$, $k, i \in \{0, 1, \dots, m\}$, $k \neq i$ sembolünden gelen müdahaleci molekülleri ifade eder. Alıcı, $e_{k,i}^a$ 'ye ek olarak salınmış güncel sembolü ($s(n) = S_a$) de algılar. g_k^a , $s(n) = S_a$ durumu için $(t_l, t_u]$ aralığında alıcıya ulaşabilen molekül sayısı olsun. Bu durumda g_k^a 'nın olasılık kütle fonksiyonu

$$\vartheta_k^a(l, \tau_d) = \binom{N_a}{l} [q_k^a(\tau_d)]^l [1 - q_k^a(\tau_d)]^{N_a - l} \quad 2-12$$

şeklinde verilebilir. Burada $q_k^a(\tau_d)$, güncel sembol $s(n) = S_a$ tarafından $t = nt_s$ zamanında salınmış ψ_a tipli bir moleküllerin alıcıya $(t_l, t_u]$ aralığında ulaşma olasılığıdır. (2-9)'e benzer biçimde $q_k^a(\tau_d)$ aşağıdaki gibi ifade edilebilir:

$$\begin{aligned} q_k^a(\tau_d) &= F_{\psi_a}[t_u - n\tau_s] - F_{\psi_a}[t_l - n\tau_s] \\ &= F_{\psi_a}[\tau_d] - F_{\psi_a}[\tau_d - \tau_s] \end{aligned} \quad 2-13$$

Şimdi $k\tau_s < \tau_d \leq (k + 1)\tau_s$, $k \in \{0, \dots, m\}$ durumu için alıcıya ulaşabilen tüm ψ_a moleküllerinin sayısı

$$h_k^a = g_k^a + \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^m e_{k,i}^a \quad 2-14$$

şeklinde yazılabilir. (2-11) ve (2-12)'de verilen g_k^a 'nın ve $e_{k,i}^a$ 'nin olasılık kütle fonksiyonlarını kullanarak h_k^a 'nın olasılık kütle fonksiyonu

$$\varrho_k^a(l) = \vartheta_k^a(l, \tau_d) * \tilde{\varphi}_k^a(l, \tau_d) \quad 2-15$$

gibi yazılabilir. Burada * konvolüsyon işlemini göstermekte ve $\tilde{\varphi}_k^a(l, \tau_d)$ aşağıdaki ifadeye uymaktadır:

$$\tilde{\varphi}_k^a(l, \tau_d) = \tilde{\varphi}_{k,0}^a(l, \tau_d) * \dots * \tilde{\varphi}_{k,i \neq k}^a(l, \tau_d) * \dots * \tilde{\varphi}_{k,m}^a(l, \tau_d) \quad 2-16$$

Tüm konvolüsyon ilk değişken (l) 'ye göre yapılmıştır. Şimdi, aşağıdaki iki ihtimali tanımlayalım:

$$P_k^a(\tau_d) = \sum_{l=\sigma_a}^{(m+1)N_a} Q_k^a(l, \tau_d) \quad 2-17$$

$$Q_k^b(\tau_d) = \sum_{l=\sigma_b}^{(m+1)N_a} \tilde{\varphi}_k^a(l, \tau_d) \quad 2-18$$

(2-17) geçerli aralığa (slot) iletilen S_a sembolünün algılanma olasılığına denk düşer. Öte yandan, ifade (2-18), S_a 'nın dışındaki sembollerin güncel aralığa iletilme olasılığıdır. Buna bağlı olarak, S_a sembolünün doğru alınmama olasılığı aşağıdaki gibi ifade edilebilir:

$$SEP(a, \tau_d) = 1 - P_k^a(\tau_d) \prod_{b \neq a}^M [1 - Q_k^b(\tau_d)] \quad 2-19$$

Bu sembol hata olasılığı verilen bir τ_d 'ye karşılık gelir. τ_d koşulunu dikkate almadan S_a sembolünün sembol hata olasılığı için son ifade aşağıdaki integral ile verilir. Buradaki $f_{\tau_d}(t)$ (2-3)'de verilmiş olan ifadedir:

$$SEP(a) = \int_0^{\infty} SEP(a, \tau_d) f_{\tau_d}(t) dt \quad 2-20$$

Bu integral *Mathematica*'a ile eğri altında kalan alan birçok küçük kareye bölünerek elde edilmiştir. İki kontrol parametresi kullanılmıştır:

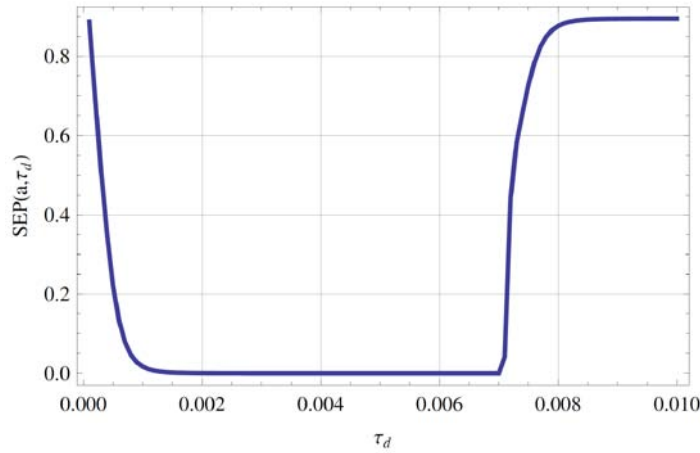
- İlk parametre olan κ , karelerin kenar uzunluğunu göstermektedir. Bu aynı zamanda ayrıntı derecesidir.
- İkinci parametre olan γ , karelerin sayısını göstermek için kullanılmıştır. Aynı zamanda eğrideki örneklerin sayısını da göstermektedir.

κ ne kadar küçük ve γ ne kadar büyükse o kadar iyidir. Bu parametrelerin değerlerine karar vermek için, ifade (2-3)'deki integrali karelere dayalı olan mekanizmayı kullanarak geliştirilmiştir. Alan olasılık yoğunluk fonksiyonunu temsil ettiği için bu integralin 1'e yakınsaması gerekmektedir. Bu yüzden κ ve γ 'ya verilecek değerlerin seçiminin kriteri bu integrali olduğunca 1'e yaklaştırmalıdır. Bu, ifade (2-20)'de verilen sembol hata olasılığının hesaplanma süresi ile değiştirilmelidir. Hesaplama zamanı γ 'de düşünülmüş nokta sayısına bağlıdır.

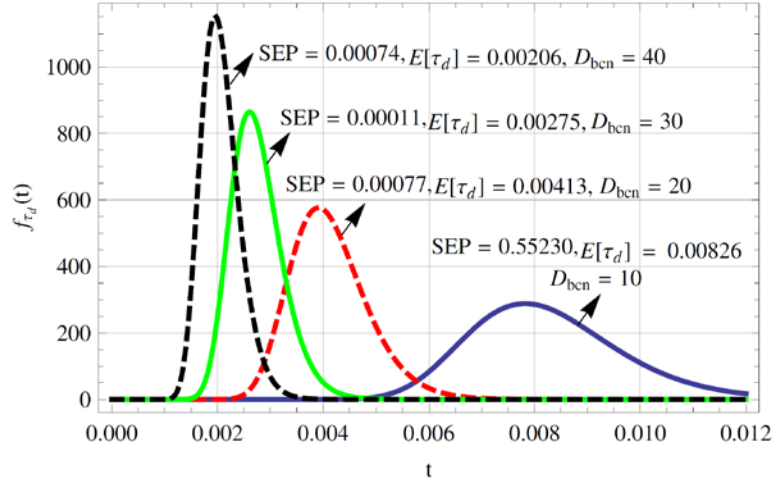
Bir sonraki bölümde, yukarıda verilen yaklaşımla hesaplanan sembol hata olasılığı ile eşzamansız moleküler haberleşme şemasının performansı değerlendirilecektir.

4.2 İşaret Mesajının Tasarımı

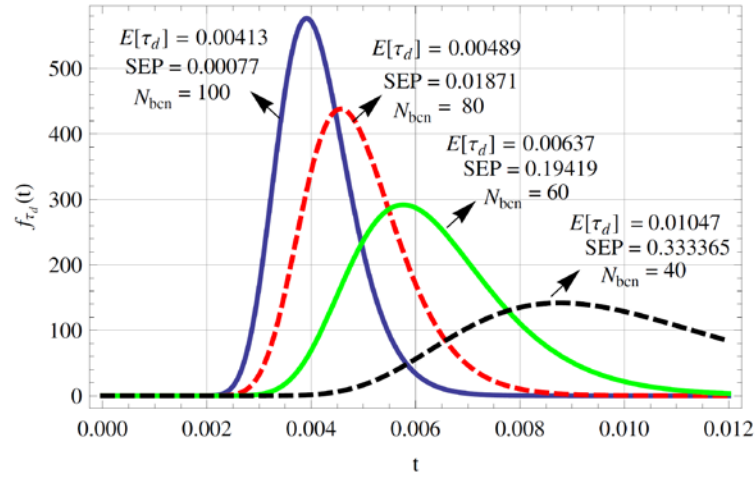
(2-20)'de görüldüğü gibi sembol hata olasılığı $SEP(a)$, $SEP(a, \tau_d)$ ve $f_{\tau_d}(t)$ 'nin çarpımının integrali şeklinde verilmektedir. Bu iki fonksiyonun çarpımı ne kadar küçükse sembol hata olasılığı da o kadar küçük olacaktır. Bu fonksiyonlardan $SEP(a, \tau_d)$ bilgi sembollerine bağlı iken $f_{\tau_d}(t)$ sadece işaret sembolüne bağlıdır. Bu nedenle bu iki fonksiyonun çarpımı dolayısıyla sembol hata olasılığı çok küçük olacak şekilde ayarlanabilir. Şimdi bu fonksiyonların davranışlarına bir göz atalım. Şekil 2-3'de $SEP(a, \tau_d)$, τ_d 'nin fonksiyonu olarak çizilmiştir. Burada $a = 4$, $D_a = \{1000, 1100, 1200, 1300\} \mu m^2/s$, $N_a = \{40, 39, 38, 37\}$, $\sigma_a = \{14, 14, 14, 14\}$, $m = 5$, $d = 0.6 \mu m$, $\tau_s = 7 ms$ ve $a = 1$ olarak seçilmiştir. Görüleceği üzere Şekil 2-3'ün orta kısmında genliği çok düşük düz bir bölge bulunmaktadır. Bu bölgenin uzunluğu sembol ara zamanın uzunluğuna çok yakındır. Bu düz bölgenin genliği çok düşük olduğundan τ_d 'nin olasılık dağılım fonksiyonu olan $f_{\tau_d}(t)$ 'yi bu bölgeye düşecek şekilde ayarlayabilirsek (2-20)'de integralin içinde bulunan çarpımı ve dolayısıyla sembol hata olasılığını küçültmüş oluruz. Şekil 2-4 ve 2-5'te görüleceği gibi işaret sembolüne ait molekülün (ψ_{bcn}) difüzyon katsayısı D_{bcn} ve sembolün N_{bcn} değeri değiştirilerek $f_{\tau_d}(t)$ 'nin bu düz ve düşük genlikli bölgesine düşmesini sağlayabiliriz. Yine Şekil 2-4 ve 2-5'te görüldüğü gibi $f_{\tau_d}(t)$ Şekil 2-3'te gösterilen $SEP(a, \tau_d)$ 'nin düz ve genliği az olan bölgesine düştüğünde sembol hata olasılığı önemli ölçüde azalabilmektedir. Örneğin $f_{\tau_d}(t)$ bu düz bölgeye tam olarak düştüğünde sembol hata olasılığı 0.00077'ye kadar düşerken $f_{\tau_d}(t)$ bu düz bölgeye düşmediği zaman hata olasılığı 0.55230'a kadar yükselebilmektedir.



Şekil 2-3. Sembol hata olasılığının işaret sembolünün gecikmesine göre değişimi.



Şekil 2-4. İşaret sembolünün gecikmesi τ_d 'nin olasılık dağılım fonksiyonunun dört farklı D_{bcn} değeri için gösterilmesi



Şekil 2-5. İşaret sembolünün gecikmesi τ_d 'nin olasılık dağılım fonksiyonunun dört farklı N_{bcn} değeri için gösterilmesi

4.3 Performans Değerlendirmesi

Bu bölümde hafızalı eşzamansız moleküler haberleşmenin performans değerlendirmesini verilmektedir. Ayrıca şemamızın performansını alıcı ve vericisi önceden belirli zaman aralıkları ile eş zamanlı (senkronize), hafızaya sahip moleküler haberleşme ile karşılaştırılmaktadır. Eşzamanlı moleküler haberleşme performans değerlendirme bir önceki çalışmamızda Galmés ve Atakan (2016) yapılmıştı. Karşılaştırmalarda eşzamanlı moleküler haberleşmenin performansı için bu yaklaşımı izliyoruz. Tablo 2-1, 2-2 ve 2-3'te (2-20)'de verilen sembol hata olasılığı τ_s değıştikçe farklı d , m , ve M değerleri için hesaplanarak verilmektedir. Tablolardan görüldüğü gibi hata olasılığı alıcı ve verici arasında eşzamanlama

olmamasına rağmen tatmin edici bir seviyede düşüktür. Bunun en büyük sebeplerinden bir tanesi bu veriler işaret sembolü uygun bir şekilde tasarlanarak elde edilmiş olmasıdır. Bu durumu Şekil 2-3, 2-4 ve 2-5'te kolayca görülebilir. Eğer işaret sembolü uygun bir şekilde tasarlanamaz ise sembol hata olasılığı çok büyümektedir.

Tablo 2-1. Değişen d ve τ_s değerleri için sembol hata olasılığı

τ_s (s)	$d = 0.2\mu m$	$d = 0.4\mu m$	$d = 0.6\mu m$
0.001	0.0001023950	0.0019136100	0.0253399000
0.002	0.0000149949	0.0070548700	0.0755756000
0.003	0.0000304827	0.0129581000	0.1207910000
0.004	0.0000470679	0.0186112000	0.1570520000
0.005	0.0000636248	0.0237734000	0.1858740000
0.006	0.0000796658	0.0284225000	0.2090940000
0.007	0.0000949915	0.0326010000	0.2281380000
0.008	0.0001095370	0.0363657000	0.2440250000
0.009	0.0001233030	0.0397720000	0.2574850000
0.010	0.0001363200	0.0428686000	0.2690440000

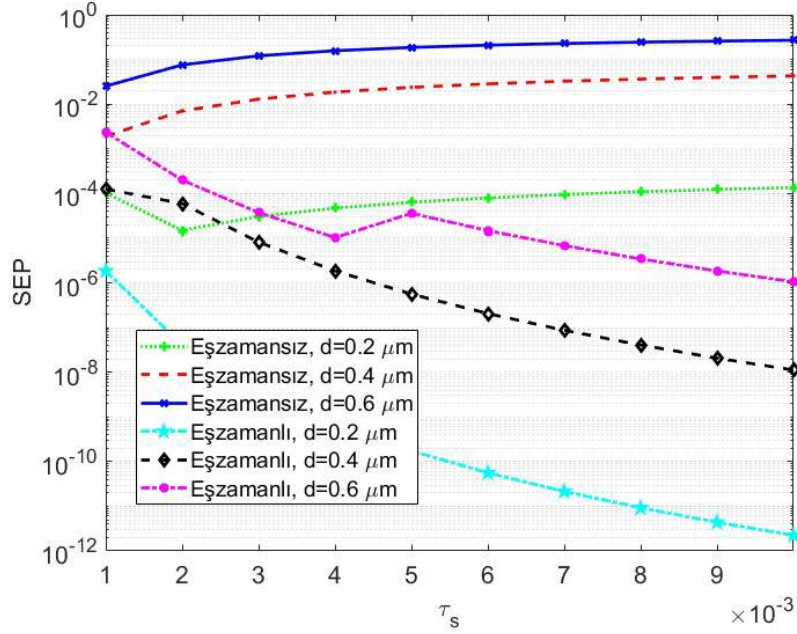
Tablo 2-2. Değişen m ve τ_s değerleri için sembol hata olasılığı

τ_s (s)	$m = 5$	$m = 3$	$m = 1$
0.001	0.0019136100	0.0013386600	0.0002477010
0.002	0.0070548700	0.0056372300	0.0020113500
0.003	0.0129581000	0.0109841000	0.0054417300
0.004	0.0186112000	0.0162947000	0.0095045300
0.005	0.0237734000	0.0212473000	0.0136604000
0.006	0.0284225000	0.0257689000	0.0176748000
0.007	0.0326010000	0.0298917000	0.0214580000
0.008	0.0363657000	0.0335945000	0.0249851000
0.009	0.0397720000	0.0369811000	0.0282599000
0.010	0.0428686000	0.0400731000	0.0312976000

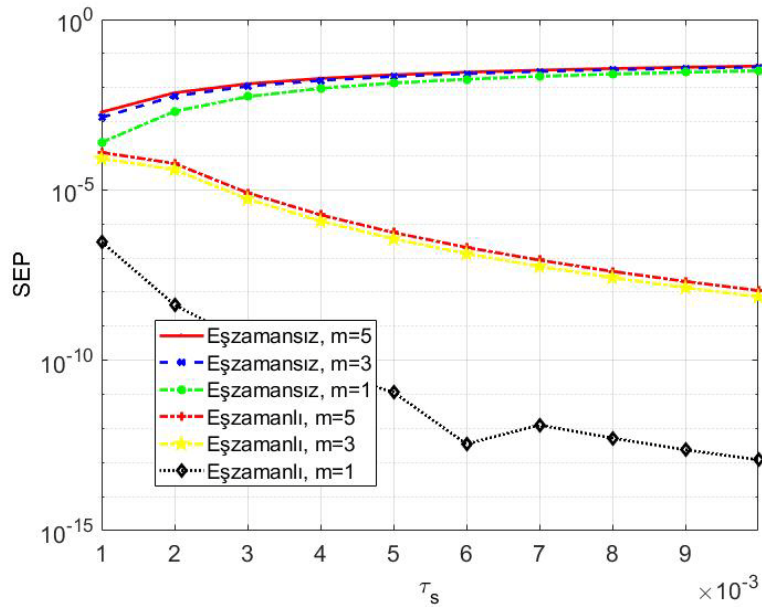
Tablo 2-3. Değişen M ve τ_s değerleri için sembol hata olasılığı

τ_s (s)	$M = 2$	$M = 4$	$M = 6$
0.001	0.0052346400	0.0019136100	0.0009650920
0.002	0.0143788000	0.0070548700	0.0040535100
0.003	0.0224805000	0.0129581000	0.0081107600
0.004	0.0292754000	0.0186112000	0.0122447000
0.005	0.0350008000	0.0237734000	0.0161609000
0.006	0.0398873000	0.0284225000	0.0197751000
0.007	0.0441133000	0.0326010000	0.0230808000
0.008	0.0478122000	0.0363657000	0.0260989000
0.009	0.0510843000	0.0397720000	0.0288582000
0.010	0.0540055000	0.0428686000	0.0313879000

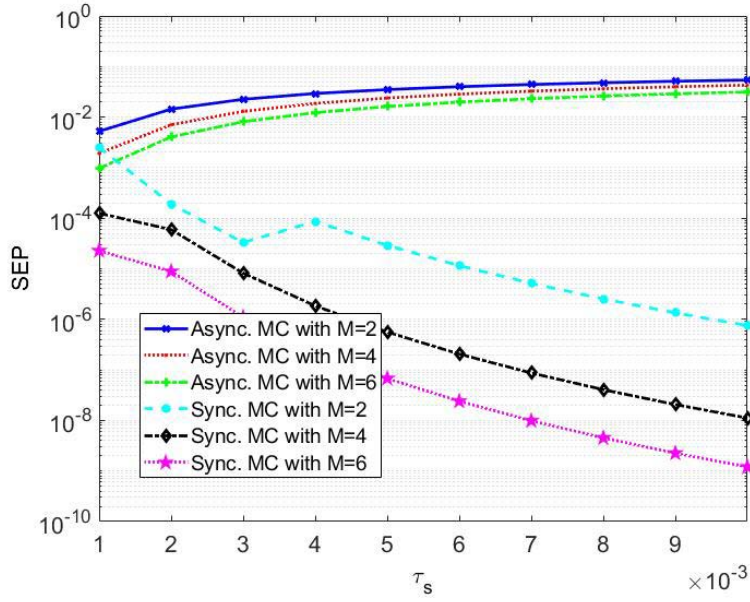
Şekil 2-6, 2-7 ve 2-8'de ise yukarıda verilen tablolardaki senaryolar için eşzamanlı ve eşzamansız moleküler haberleşme mekanizmalarının sembol hata olasılığı açısından karşılaştırılmaları bulunmaktadır. Bu şekillerde görüldüğü gibi alıcısı ve vericisi arasında eşzamanlama olmamasına rağmen işaret sembolü uygun tasarlanarak eşzamansız moleküler haberleşme eşzamanlıya yakın performanslar gösterebilmektedir.



Şekil 2-6. Eşzamansız ve eşzamanlı moleküler haberleşmenin sembol hata olasılıklarının farklı d değerleri için karşılaştırılması



Şekil 2-7. Eşzamansız ve eşzamanlı moleküler haberleşmenin sembol hata olasılıklarının farklı m değerleri için karşılaştırılması



Şekil 2-8. Eşzamansız ve eşzamanlı moleküler haberleşmenin sembol hata olasılıklarının farklı M değerleri için karşılaştırılması

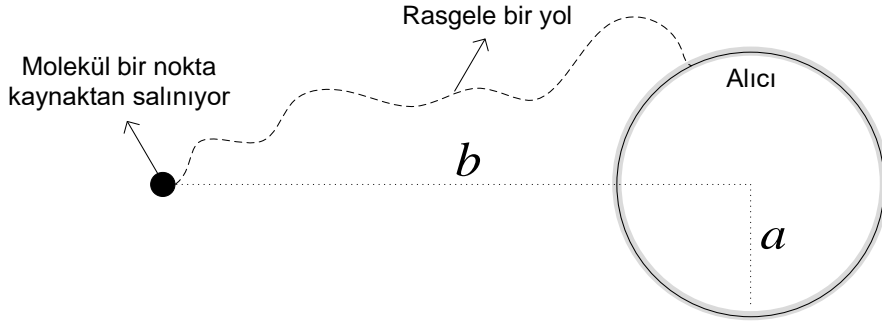
4.4 Sonuç

Bu çalışmada, hafızalı eşzamansız moleküler haberleşmenin performans analizi incelenmiştir. Farklı molekül türleri, verici ve alıcılar arasında herhangi bir eşzamanlama olmaksızın bilgi sembollerini kodlamak ve göndermek için kullanılmıştır. Bir sembol iletiminin herhangi bir sayıdaki önceki sembollerden etkilendiği varsayılmaktadır, bu da kanalın rastgele bir hafıza seviyesine sahip olduğu anlamına gelmektedir.

İlk olarak sembol gecikme dağılımı türetilmiştir. Sonra, bu gecikme dağılımına dayanarak eşzamansız moleküler haberleşme şemasını değerlendirmek için sembol hata olasılığını geliştirilmiştir. Daha sonra sembol hata olasılığının eşzamansız moleküler haberleşmeyi başlatmak için kullanılan işaret sembolünün nasıl tasarlandığı ile çok ilgili olduğu gösterilerek işaret sembolü için bir tasarlama mekanizması önerilmiştir. Eşzamansız moleküler haberleşmenin performans değerlendirmelerinde tatmin edici düzeyde bir sembol hata olasılığı elde edilebileceği gösterilmiştir. Ayrıca bu performansı alıcı ve vericileri önceden belirlenmiş bir zaman aralığında senkronize edilmiş eşzamanlı moleküler haberleşme şeması ile karşılaştırılmıştır. Sonuçlarımız eşzamansız moleküler haberleşmenin eşzamanlıya yakın bir performans sağlayabildiğini göstermektedir.

5. MOLEKÜLER HABERLEŞMEDE BİR KAYNAĞIN YERİNİN VE SALIM HIZININ BELİRLENMESİ

Bu bölümde moleküler haberleşmede bir kaynağın yerini ve molekül salım hızını (emission rate) tahmin edebilmek için tahmin yöntemleri önerilmektedir. İlk olarak kaynak ile alıcı arasındaki kanalda bulunan moleküler sinyallerin belirleyici (deterministic) modelleri ve olasılık dağılımları (probability distributions) türetilen olasılık dağılımları esas alınarak kaynağın yerini ve salım hızını tahmin etmek için tahmin yöntemleri önerilecektir. Önerilen yöntemlerinin performans değerlendirmeleri moleküler haberleşmede yer ve salım hızının tatmin edici bir hassasiyet ile tahmin edilebildiğini ve ümit vadeden gözlemlene (monitoring) ve takip etme (tracking) uygulamalarının mümkün olabildiğini göstermiştir.



Şekil 3-1. Molekül yayan noktasal bir kaynak ve üzerine çarpan molekülleri absorplayan küresel bir alıcı

5.1 Moleküler Haberleşme İçin Belirleyici Model

Şekil 3-1'de görüldüğü gibi noktasal bir molekül kaynağı ve küresel alıcıdan oluşan bir senaryo düşünülmektedir. Noktasal kaynak η salım hızı ile molekülleri yaymaktadır. Bu nedenle kaynağın S moleküllerini yayma işlemi aşağıdaki gibi bir kimyasal reaksiyon ile tanımlanabilir.



Burada \star , S moleküllerinin salınmasına neden olan kimyasal kaynağı göstermektedir. Kaynak tarafından salınan moleküller bütün yönlere doğru difüzyona başlarlar. Bu moleküllerden ancak belli miktardaki molekül alıcıya ulaşmayı başarabilir. Salınan bir molekülün alıcıya ulaşma olasılığı şu şekilde verilebilir Ziff vd. (2009).



$$\rho(b, t) = \frac{a}{b} \operatorname{erfc}\left(\frac{b-a}{\sqrt{4Dt}}\right) \quad 3-2$$

Burada Şekil 3-1'de gösterildiği gibi a küresel alıcının yarıçapını b ise alıcın merkezinden nokta kaynağa kadar olan mesafeyi göstermektedir. D ise moleküllerin difüzyon katsayısıdır. $t \rightarrow \infty$ durumu için bu olasılık ifadesi $\rho = a/b$ olarak ifade edilebilir.

$$\bar{\eta} = \rho\eta \quad \star \rightarrow \bar{S} \quad 3-3$$

Artık \bar{S} molekülleri alıcıya ulaşması beklenen S molekülleri olarak düşünülebilir. Görüldüğü gibi \bar{S} moleküllerinin salım hızı $\bar{\eta} = \rho\eta$ olmuştur. Şimdi \bar{S} moleküllerinin alıcıya ulaşma işlemi de aşağıdaki gibi tanımlanabilir.

$$\bar{S} \xrightarrow{\lambda} \hat{S}, \quad 3-4$$

Burada \hat{S} alıcıya ulaşan S moleküllerini, λ ise bu moleküllerin oluşma hızını göstermektedir. (3-4)'te verilen reaksiyon birinci dereceden bir reaksiyon olduğu için $\lambda = 1/\tau_1$ olarak verilebilir. τ_1 bir \bar{S} molekülünün alıcıya ulaşabilmesi için ihtiyaç duyduğu ortalama zamanı göstermektedir. Bu zaman da alıcı ile verici arasındaki mesafenin (b) bir fonksiyonu olarak yazılabilir. Alıcıya ulaşan moleküllerin, yani \hat{S} moleküllerinin, belli bir hız ile alıcıdan tasfiye edildiği düşünülmektedir ve bu tasfiye işlemi de ζ gibi bir hızla şu şekilde tanımlanabilir.

$$\hat{S} \xrightarrow{\zeta} \star, \quad 3-5$$

$m_1(t)$ ve $m_2(t)$ 'nin sırasıyla S ve \hat{S} moleküllerinin yoğunluğunu gösterdiğini düşünelim. (3-3), (3-4) ve (3-5)'te verilen reaksiyonları göz önünde bulundurularak $m_1(t)$ ve $m_2(t)$ aşağıdaki gibi ifade edilebilir.

$$\dot{\mathbf{m}}(t) = \mathbf{B}\mathbf{m}(t) + \mathbf{c}, \quad \mathbf{m}(0) = \mathbf{0}, \quad 3-6$$

Burada $\mathbf{m}(t)$, \mathbf{B} , ve \mathbf{c} aşağıdaki gibidir.

$$\mathbf{m}(t) = \begin{bmatrix} m_1(t) \\ m_2(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} -\lambda & 0 \\ 0 & -\zeta \end{bmatrix}, \quad \mathbf{c} = \begin{bmatrix} \eta \\ 0 \end{bmatrix} \quad 3-7$$

Bu bölümde moleküler haberleşme için belirleyici model anlatıldı. Bir sonraki bölümde ise bu belirleyici modelden de yola çıkarak moleküler haberleşme için bir stokastik model tanıtılacaktır.

5.2 Moleküler Haberleşme İçin Stokastik Model

S ve \hat{S} moleküllerinin sayılarını sırası ile x_1 ve x_2 ile ifade edelim ve $P(t, \mathbf{x})$ fonksiyonu $\mathbf{x} = [x_1, x_2]^T$ vektörünün olasılık dağılımını gösterebiliriz. Bu durumda (3-1), (3-3) ve (3-4)'ta tanımlanan reaksiyon hızlarını göz önünde bulundurarak $P(t, \mathbf{x})$ aşağıda verilen kimyasal mastır denkleminin (chemical master equation) çözümü olarak ifade edilebilir.

$$\frac{\partial P(t, \mathbf{x})}{\partial t} = \bar{\eta}[P(t, \mathbf{x} - [1 \ 0]^T) - P(t, \mathbf{x})] + \zeta[(x_2 + 1)P(t, \mathbf{x} + [0 \ 1]^T) - x_2 P(t, \mathbf{x})] + \lambda[(x_1 + 1)P(t, \mathbf{x} + [1 \ -1]^T) - x_1 P(t, \mathbf{x})]. \quad 3-8$$

(3-8)'in çözümü için $P(t, \mathbf{x})$ 'nin başlangıç dağılımlarının ($P(0, \mathbf{x})$) belirlenmesi gerekmektedir. Bununla birlikte herhangi bir başlangıç dağılımı için kimyasal mastır denkleminin çözümü ilgili belirleyici başlangıç değeri (deterministic initial value) çözüme indirgenebilir Jahnke ve Huisinga (2007). Bunun için düşünülebilecek bir başlangıç dağılımı aşağıdaki gibi verilebilir.

$$P(0, \mathbf{x}) = f(x) = \begin{cases} 1, & \text{if } x = \xi \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad 3-9$$

Burada $\xi = [\xi_1, \xi_2]^T$ dir. ξ_1 ve ξ_2 sırası ile x_1 ve x_2 'nin belirleyici başlangıç değerlerini göstermektedir. Bu şekilde verilen başlangıç değeri için (3-7)'deki kimyasal mastır denkleminin çözümü aşağıdaki gibidir.

$$P(t, \mathbf{x}) = \mathcal{P}(\mathbf{x}, \mathbf{m}(t)) * \mathcal{M}(\mathbf{x}, \xi_1, \mathbf{r}^{(1)}(t)) * \mathcal{M}(\mathbf{x}, \xi_2, \mathbf{r}^{(2)}(t)) \quad 3-10$$

Burada * konvolüsyon operasyonunu, $\mathcal{P}(\mathbf{x}, \mathbf{m}(t))$ ve $\mathcal{M}(\mathbf{x}, \xi_i, \mathbf{r}^{(i)}(t))$, $i \in \{1, 2\}$ sırası ile çarpım Poisson ve katlı terim (multinomial) dağılımlarını göstermektedir. Ayrıca $\mathbf{m}(t)$ ve $\mathbf{r}^{(i)}(t) \in [0, 1]^2$ aşağıdaki denklemlerin çözümü ile verilir.

$$\dot{\mathbf{m}}(t) = \mathbf{B}\mathbf{m}(t) + \mathbf{c}, \quad \mathbf{m}(0) = \mathbf{0} \quad 3-11$$

$$\dot{\mathbf{r}}^{(i)}(t) = \mathbf{B}\mathbf{r}^{(i)}(t), \quad \mathbf{r}^{(i)}(0) = \epsilon_i \quad 3-12$$

Burada ϵ_i , $\mathbb{R}^{2 \times 2}$ 'deki bir birim matrisin i . kolonunu, $\mathbf{0}$ ise sıfır vektörünü ifade etmektedir. $\mathbf{m}(t)$, \mathbf{B} ve \mathbf{c} daha önce (3-6)'da verilmişti. Eğer S ve \hat{S} moleküllerinin başlangıçta ortamda hiç bulunmadığını düşünürsek, bu $\xi_1 = \xi_2 = 0$ anlamına gelmektedir. Bu durumda (3-10)'da verilen katlı terim (multi-nomial) dağılımları şu şekilde olur,

$$\mathcal{M}(\mathbf{x}, \mathbf{0}, \mathbf{r}^{(1)}(t)) = 1, \quad \mathcal{M}(\mathbf{x}, \mathbf{0}, \mathbf{r}^{(2)}(t)) = 1 \quad 3-13$$

ve (3-10)'da verilen $P(t, \mathbf{x})$

$$\begin{aligned} P(t, \mathbf{x}) &= \mathcal{P}(\mathbf{x}, \mathbf{m}(t)) \\ &= \frac{m_1(t)^{x_1}}{x_1!} \times \frac{m_2(t)^{x_2}}{x_2!} \times e^{-|\mathbf{m}(t)|} \end{aligned} \quad 3-14$$

olarak ifade edilir. Burada $|\mathbf{m}(t)| = \sum_{i=1}^2 |m_i(t)|$ olarak ifade edilebilir. Ayrıca (3-11)'i çözerek $m_1(t)$ ve $m_2(t)$ 'yi aşağıdaki gibi bulabiliriz.

$$m_1(t) = \frac{\bar{\eta} - e^{-\lambda t} \bar{\eta}}{\lambda} \quad 3-15$$

$$m_2(t) = \frac{\bar{\eta}}{\zeta} + \frac{\bar{\eta}}{e^{\lambda t} \beta} - \frac{\bar{\eta} \lambda}{e^{\zeta t} \zeta \beta} \quad 3-16$$

Burada $\beta = \lambda - \zeta$ dir. Şimdi $P(t, \mathbf{x})$ kullanılarak x_2 'ye ait marjinal dağılım şeklinde verilebilir.

$$P(t, x_2) = \frac{m_2(t)^{x_2}}{x_2!} e^{-|m_2(t)|} \quad 3-17$$

Görüldüğü gibi $P(t, x_2)$ homojen olmayan bir Poisson dağılımıdır. Fakat (3-16)'da verilen $m_2(t)$ ifadesi incelendiğinde son iki terimin zamanla hızlı bir şekilde eriyebileceği görülmektedir. Ayrıca bu iki terimin farklı işaretlere sahip olmasının ifade üzerindeki zamana bağımlılığı azalttığı söylenebilir. Bu nedenle $m_2(t)$ ifadesinin belli bir zaman sonra aşağıdaki gibi zamandan bağımsız bir sabite dönüşür.

$$m = \frac{\bar{\eta}}{\zeta} = \frac{a\eta}{b\zeta} \quad 3-18$$

$$P(x_2) = \frac{m^{x_2}}{x_2!} e^{-|m|} \quad 3-19$$

Bu dönüşümde doğal olarak $P(t, x_2)$ gibi bir homojen Poisson dağılımına dönüştürür. Bir sonraki bölümde bu dağılımı kullanarak moleküler kaynağın yerini ve salım hızını tahmin etmek için yöntemler tanıtılacaktır.

5.3 Bir Kaynağın Yerinin Ve Salım Hızının Tahmin Edilmesi

Bu bölümde önce molekül salım hızı belli olan bir kaynak ile alıcı arasındaki mesafenin ve kaynağın yerinin tahmin edilebilmesi için bir tahmin yöntemi tanıtılacaktır. Ardından kaynağın alıcıya olan uzaklığının bilindiği durum için alıcının salım hızının tahmin edilmesi için bir tahmin yöntemi tanıtılacaktır.

5.3.1 Mesafe ve Yer Tahmini

(3-19)'da verildiği üzere alıcıya varan moleküllerin sayısı bir Poisson dağılımına sahiptir. Bu nedenle bu Poisson dağılımının hızı ((3-18) ve (3-19)'da m olarak verilen değişken) en büyük olabilirlik tahmini (maximum likelihood estimation) ile bulunabilir. Daha açık olarak eğer elimizde x_2 'ye ait h tane ölçüm var ise ($x_2^i, i \in \{1, \dots, h\}$), m parametresi aşağıdaki gibi tahmin edilebilir.

$$\tilde{m} = \frac{1}{h} \sum_{i=1}^h x_2^i \quad 3-20$$

Burada \tilde{m} (3-19)'daki m parametresine ait tahmindir. (3-18)'den ve (3-20)'de verilen tahminden yararlanarak kaynak ile alıcı arasındaki mesafe, yani b , şu şekilde tahmin edilebilir.

$$\tilde{b} = \frac{a\eta}{\tilde{m}\zeta} \quad 3-21$$

Kolayca anlaşılacağı üzere \tilde{b} kaynak ile alıcı arasındaki mesafe yani b için yapılmış bir tahmindir. Burada ayrıca η ve ζ parametrelerinin bilindiği varsayılmaktadır. (3-21)'de verilen bu tahmine ulaşıldıktan sonra dört tane farklı alıcı kullanarak bu alıcıların kaynak ile arasındaki mesafeler için dört ayrı tahmin, yani $\tilde{b}_1, \tilde{b}_2, \tilde{b}_3$ ve \tilde{b}_4 , bulunabilir. Daha sonra bu tahminler çok kenarlı işlem (multilateral process) kullanılarak kaynağın yerini bulmak için kullanılabilir. Bu işlem ile ilgili sayısal uygulama performans değerlendirmesi bölümünde verilmektedir.

5.3.2 Salım Hızı Tahmini

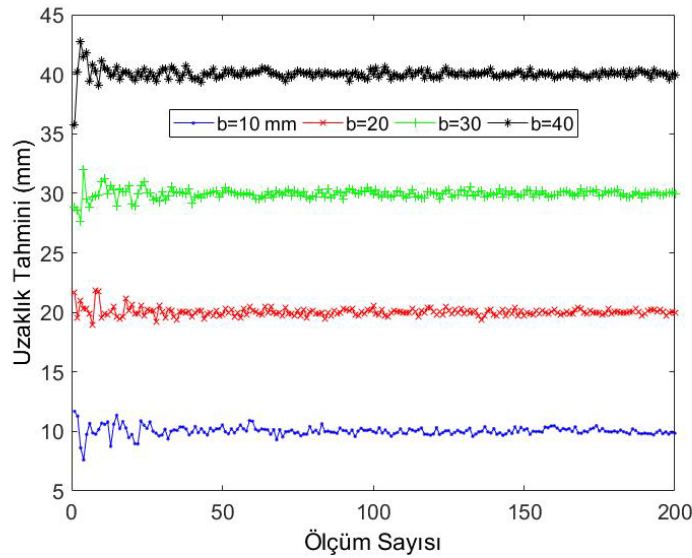
(3-20)'de verildiği gibi alıcıya ulaşan molekül sayısına ait dağılımın parametresi \tilde{m} olarak kestirildikten sonra bu kestirim ve (3-18) kullanılarak kaynağın salım hızına (η) ait tahmin aşağıdaki gibi ifade edilebilir.

$$\tilde{\eta} = \frac{b\zeta\tilde{m}}{a} \quad 3-22$$

Burada kaynak ile alıcı arasındaki mesafe (b) ve ζ parametresinin bilindiği varsayılmaktadır. Ayrıca alıcının kendi yarıçapını (a) bildiği zaten kolayca öngörülebilir. Bir sonraki bölümde burada verilen tahmin yöntemlerinin performans değerlendirmeleri verilecektir.

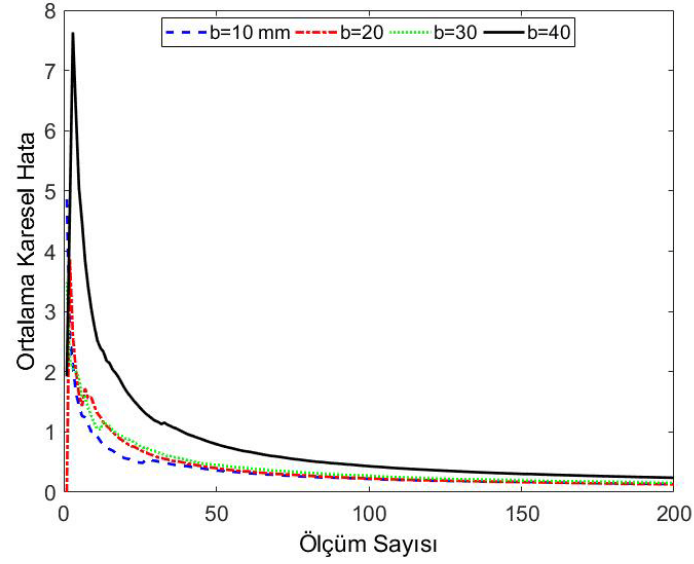
5.4 Performans Değerlendirmesi

Bu bölümde öncelikle mesafe ve yer tahmini yöntemi ile ilgili performans değerlendirmeleri yapılacak ardından salım hızı tahmininin değerlendirilmesi yapılacaktır. Mesafe tahmininin değerlendirmelerinde difüzyon katsayısı $D = 0.8 \text{ mm}^2/s$ olarak seçilerek dört farklı mesafe değeri ($b = 10, 20, 30, 40 \text{ mm}$) göz önünde bulundurulmaktadır. Yapılan tahminler Şekil 3-2'de gösterilmektedir.



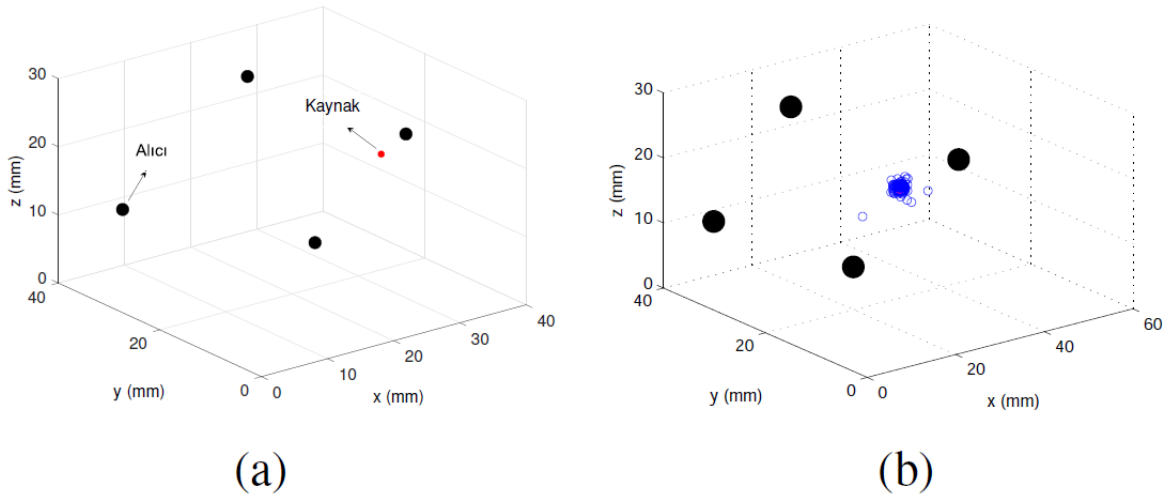
Şekil 3-2. Dört farklı mesafe değeri için mesafe tahmini.

Görüldüğü gibi seçilen dört farklı mesafe değeri de başarılı bir şekilde kestirilebilmektedir. Bu kestirime ait ortalama karesel hata (mean squared error) Şekil 3-3'te gösterilmektedir. Yapılan ölçüm sayısı artırılarak hatanın azaltılabileceği görülmektedir.

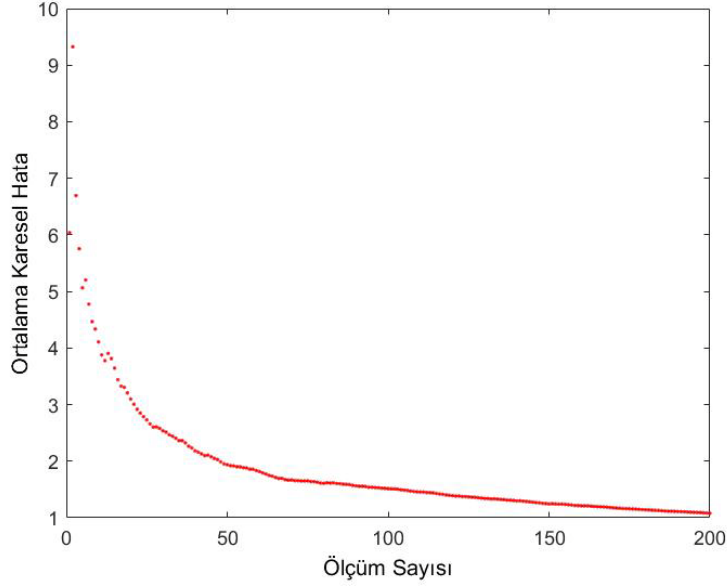


Şekil 3-3. Şekil 3- 2'de gösterilen tahminler için ortalama karesel hatalar.

Şekil 3-4'te ise dört farklı alıcı kullanılarak yapılan yer tahmini gösterilmektedir. Şekildeki mavi halkalar yapılan tahminleri göstermektedir. Bu tahmine ait ortalama karesel hata ise Şekil 3-5'te verilmektedir. Görüleceği üzere yer tahmini de mesafe tahmini gibi ölçüm sayısı (number of measurements) artıka azaltılabilmektedir. Genel olarak belli bir ölçüm sayısından sonra tatmin edici bir hata oranının sağlanabildiği açıkça görülebilmektedir.

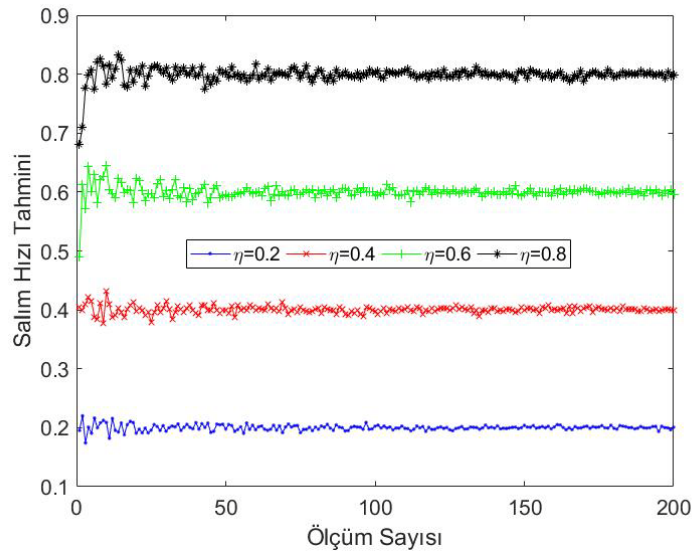


Şekil 3-4. Dört alıcı ile bir moleküler kaynağın yerinin bulunması

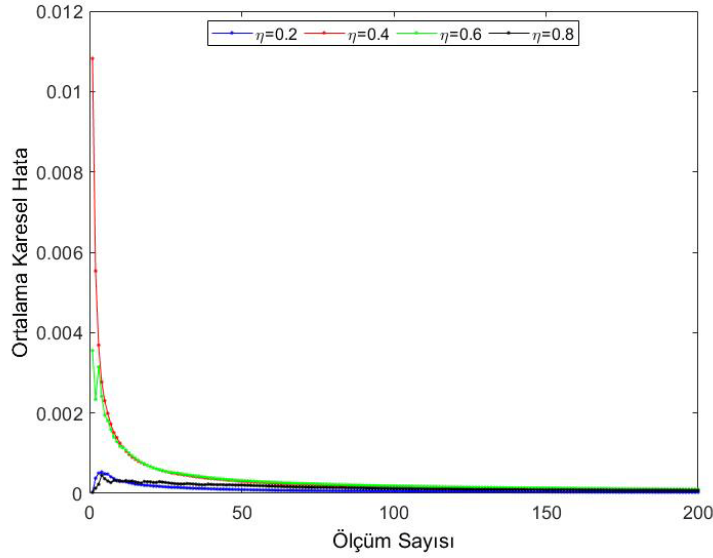


Şekil 3-5. Şekil 3-4'te gösterilen yer tahminine ait ortalama karesel hata

Salım hızının tahmin performansının değerlendirilmesi için yine dört farklı salım hızı seçilerek Şekil 3-6'da bu tahminler gösterilmiştir. Ayrıca bu tahminlere ait ortalama karesel hata ise Şekil 3-7'de gösterilmiştir. Yukarıda verilen mesafe ve yer tahmin değerlendirmelerine benzer şekilde hatanın ölçüm sayısı arttıkça azaltılabileceği ve genel olarak hata oranının tatmin edici seviyelerde olduğu rahatlıkla söylenebilir.



Şekil 3-6. Kaynağa ait dört farklı salım hızının tahmin edilmesi.



Şekil 3-7. Şekil 3- 6'daki ölçümlere ait ortalama karesel hatalar

6. MOLEKÜLER SİNYALİN YENİDEN OLUŞTURULMASI

6.1 Giriş

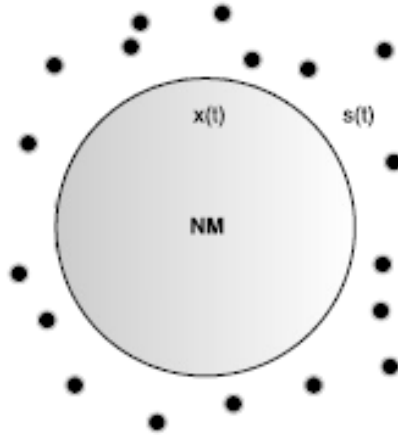
Pasif moleküler haberleşmede bilgi, nano makineler (NM'ler) tarafından molekül konsantrasyonu yoluyla algılanır. NM'ler için konsantrasyonu bilgi sinyali olarak düşünebiliriz. Molekül konsantrasyonu yoluyla NM'lerin haberleşmesi ile ilgili literatürde birçok çalışma olmasına rağmen molekül konsantrasyonunun NM tarafından nasıl ölçüldüğü ve tekrar oluşturulduğu ayrıntılı olarak çalışılmamıştır.

Berg ve Purcell (1977)'de bir hücrenin molekül konsantrasyonunu "kusursuz monitör" (perfect monitor) olarak, tek reseptörle ve çoklu reseptörlerle nasıl ölçtüğü modellenmiştir. Bu çalışmada konsantrasyon ölçümünün, hücrenin ortamdaki molekülleri saymasıyla ilgili olduğu gösterilmiştir. Kusursuz monitör, içine giren molekülleri sayan geçirgen bir küredir. Endres ve Wingreen (2008)'de hücre, molekülleri yüzeyindeki reseptörlerle sayan "kusursuz soğurucu" (perfect absorber) olarak modellenmiştir. Ayrıca hücre için "değişim algılayıcı cihaz" (gradient sensing device) modellenmesi yapılmıştır. Kusursuz soğurucu modeli, kusursuz monitör modelinden daha iyidir çünkü önceden sayılan moleküller tekrar sayılmaz ve ortamdaki gittiği varsayılır. Konsantrasyon ölçümü ile ilgili diğer bir yaklaşım ise molekül-reseptör bağlanma zaman serisinin olasılığı kullanılarak türetilen "en büyük benzerlik kestirimi" (maximum likelihood estimation) yöntemidir Endres ve Wingreen (2009). Kestirimin Berg ve Purcell, (1977)'de verilen Berg-Purcell limitinden iki kat daha iyi olduğu gösterilmiştir. Bu modellerin karşılaştırması ve algılama sınırları (Aquino vd. (2016)'de verilmiştir.

Mevcut moleküler haberleşme literatüründe NM'lerin sinyal alışıyla ilgili iki adet kabul bulunmaktadır. Birincisi, TN ve RN arasındaki mesafeye bağlı olarak belli bir zaman sonra RN etrafındaki molekül konsantrasyonu sabit kabul edilmektedir. İkinci kabul ise söz konusu sabit konsantrasyon RN tarafından kusursuz bir şekilde alınmaktadır. Ancak, bu iki kabul moleküllerin rasgele doğasına bağlı olarak gerçekçi olamaz. Bu raporda anılan kabullerin yerine NM etrafındaki konsantrasyon rasgele süreç olarak modellenmiştir. Ayrıca NM'nin molekül konsantrasyonunu, diğer bir deyişle sinyali, belli bir süre boyunca örneklediği ve bu örnekleme süresi boyunca hata olabileceği önerilmektedir. Bu prosedür, "sinyalin yeniden oluşturulması" (signal reconstruction) olarak adlandırılmıştır. Sinyalin yeniden oluşturulmasının nasıl olduğu öğrenilerek sinyal alış sırasındaki hata hesaplanabilir ve moleküler haberleşme sisteminin parametreleri bu hatayı en aza indirecek şekilde tasarlanabilir.

6.2 Sistem Modeli

Bu bölümde NM için sinyali algılama ve yeniden oluşturma modeli önerilmektedir. NM'nin kusursuz soğurucu olduğu ve bir molekülün NM yüzeyine çarptığı anda alındığı kabul edilmektedir. $s(t)$, NM etrafındaki molekül sayısını gösteren bir rasgele süreç ve $x(t)$, NM tarafından sayılan molekül sayısını gösteren bir rasgele süreç olsun. Bu model, Şekil 4-1'de gösterilmiştir.



Şekil 4-1. NM için Moleküler Sinyalin Yeniden Oluşturulması Modeli

$s(t)$, ortalaması $m(t)$, varyansı $v(t)$ ve otokovaryansı $R(v, u)$ olan bir Gauss rasgele sürecidir. NM belli bir T süresi boyunca örnekleyerek molekülleri saymaktadır ve bu süre

boyunca molekül sayısının değişmediği varsayılmaktadır. Burada $s(t)$ 'nin i 'inci örneği olarak $s_i \sim N(\mu_s, \sigma_s^2)$ bir Gauss rasgele değişkeni ve x_i , $x(t)$ 'nin i 'inci örneği olarak tanımlanmıştır. Moleküller birbirinden bağımsız olarak yayıldığından dolayı x_i bir Poisson rasgele değişkeni olarak tanımlanmaktadır.

Molekül konsantrasyonlarının hesaplanabilmesi için bir alışı hacminin tanımlanması gerekmektedir. Bir molekül, yarıçapı a olan bir NM'nin merkezinden b uzaklığında olsun. Burada b yarıçaplı küreyi Alış Hacmi (Reception Volume- V_R), a yarıçaplı küreyi ise RN Hacmi (Volume of the RN- V_N) olarak tanımlıyoruz. NM sadece V_R içindeki molekülleri alabilmektedir. Moleküller “rasgele yürüyüş” olarak adlandırılan rasgele hareketlere sahiptir. Bu yüzden bir NM'nin molekülleri alış olasılığını göz önünde bulundurmak durumundayız. Bir NM tarafından yakalanacak olan bir molekülün birikimli dağılım fonksiyonu (4-1)'de verilmiştir Ziff vd. (2009). Bu denklemde y NM'nin merkezine olan uzaklığı, t molekülü yakalamak için geçen zamanı, D ortamın difüzyon katsayısını, a NM yarıçapını ve $erfc$ tamamlayıcı hata fonksiyonunu göstermektedir.

$$F(y, t) = \frac{a}{y} \operatorname{erfc}\left(\frac{y-a}{\sqrt{4Dt}}\right) \quad 4-1$$

(4-1) ile verilen yakalama olasılığı, NM-molekül çarpışmasının sıklığının bulunması için kullanılabilir. V_R içinde bulunan moleküllerin mesafelerinin (a, b) aralığında eşit bir şekilde dağıldığı kabul edilmektedir. Önerilen modelde moleküllerin NM merkezine ortalama mesafesi $y = (b-a)/2 + a = (b+a)/2$ olarak kabul edilmektedir. Bu durumda T süresi içinde x_i Poisson rasgele değişkeninin sıklığı (rate) (4-2) ile verilmiştir. Raporun geri kalanında (4-2)'de geçen birikimli dağılım fonksiyonu $F(T)$ olarak kullanılacaktır.

$$\lambda = F\left(\frac{a+b}{2}, T\right) s_i \quad 4-2$$

(4-2)'ye bağlı olarak $x(t)$ rasgele sürecinin yoğunluk fonksiyonu $\lambda(t) = F(T)s(t)$ şeklinde yazılabilir. $x(t)$ rastgele sürecinin yoğunluk fonksiyonu da bir rasgele süreç olduğundan $x(t)$ bir ikili rasgele Poisson sürecidir (doubly stochastic poisson process-DSPP).

6.3 Sinyal Bozulmasının Türetilmesi

Sinyalin yeniden oluşturulmasının performansını ölçebilmek amacıyla gerçek sinyal ile aradaki fark ortalama karesel hata olarak (mean square error-MSE) belirlenecektir. Sinyalin,

diğer bir deyişle moleköl konsantrasyonunun ortalama MSE deęeri ařağıdaki formöl ile hesaplanabilir.

$$MSE = \frac{E(s_i - x_i)^2}{Hacim} = \frac{E(s_i^2) - 2E(s_i x_i) + E(x_i^2)}{Hacim} \quad 4-3$$

Burada s_i , $(V_R - V_N)$ içindeki moleköl sayısını, x_i ise V_N içindeki moleköl sayısını göstermektedir. (4-3)'teki ifadeyi $E(s_i x_i) = \rho_{s_i x_i} \sigma_{s_i} \sigma_{x_i} + E(x_i)E(s_i)$ olarak yazdığımızda ve ilgili hacimleri de yerine yazdığımızda ařağıdaki formölü elde ederiz.

$$MSE = \frac{E(s_i^2)}{(V_R - V_N)^2} - 2\rho_{s_i x_i} \frac{\sigma_{x_i}}{V_N} \frac{\sigma_{s_i}}{(V_R - V_N)} - 2 \frac{E(x_i)}{V_N} \frac{E(s_i)}{(V_R - V_N)} + \frac{E(x_i^2)}{V_N^2} \quad 4-4$$

(4-3)'te verilen ilk terimi $E((s_i)^2) = \sigma_s^2 + \mu_s^2$ şeklinde bulabiliriz. İkinci ve üçüncü terimleri bulmak için DSPP'nin özellikleri kullanılacaktır. (Valderrama, Jimenez, & Gutierrez, 1995)'te yoğunluk fonksiyonu bir Gauss rasgele süreci olan DSPP'nin ortalama ve varyansı verilmiştir. Buradan yararlanarak $x(t)$ 'nin ortalama ve varyansı ařağıdaki şekilde bulunmuştur.

$$E(x(t)) = F(T) \int_{t_0}^t m(u) du \quad 4-5$$

$$Var(x(t)) = 2F(T)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s R(v, u) dv du + F(T) \int_{t_0}^t m(u) du \quad 4-6$$

Burada t_0 , $x(t)$ 'nin başlangıç zamanını, $m(u)$, $s(t)$ 'nin ortalamasını ve $R(v, u)$ ise $s(t)$ 'nin otokovaryansını göstermektedir. Buradan hareketle $x(t)$ 'nin ikinci momenti (4-7)'de verilmiştir.

$$E(x^2(t)) = 2F(T)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^s R(v, u) dv du + F(T) \int_{t_0}^t m(u) du + \left(F(T) \int_{t_0}^t m(u) du \right)^2 \quad 4-7$$

$E(x_i^2)$ ifadesi $i \geq 0$ olduğu durumda (4-7)'deki $t_0 = iT$ ve $t = (i+1)T$ olarak yerine konarak bulunabilir. Bu türetim yapılırken (4-8)'de verildiğı üzere $x(t)$ 'nin ortalaması $1/T$, otokovaryansı ise $1/T^2$ ile normalize edilmiştir.

$$E((x_i)^2) = E(x^2(t)) \Big|_{t_0=iT}^{t=(i+1)T} = \frac{2(F(T))^2}{T^2} \int_{iT}^{(i+1)T} \int_{iT}^u R(v, u) dv du + \frac{F(T)}{T} \int_{iT}^{(i+1)T} m(u) du + \left(\frac{F(T)}{T} \int_{iT}^{(i+1)T} m(u) du \right)^2 \quad 4-8$$

(4-8)'de normalizasyonun yapılmasının nedeni T süresi boyunca bir örnek alınması ve bu sürede ortalama deęerin kullanılmak istenmesidir. Yukarıda bulunan bütün deęerler yerine konduğunda sinyal bozulması ařağıdaki şekilde bulunur.

$$\begin{aligned}
MSE = & \frac{\sigma_s^2 + \mu_s^2}{(V_R - V_N)^2} - 2[\rho_{s_i x_i} \frac{\sigma_s}{(V_R - V_N)} \frac{1}{V_N} \sqrt{\frac{2(F(T))^2}{T^2} \int_{iT}^{(i+1)T} \int_{iT}^u R(v, u) dv du + \frac{F(T)}{T} \int_{iT}^{(i+1)T} M(u) du +} \\
& \frac{\mu_s}{(V_R - V_N)} \frac{F(T)}{T} \int_{iT}^{(i+1)T} \frac{M(u)}{V_N} du] + \frac{1}{V_N^2} [\frac{2(F(T))^2}{T^2} \int_{iT}^{(i+1)T} \int_{iT}^u R(v, u) dv du + \frac{F(T)}{T} \int_{iT}^{(i+1)T} M(u) du + \\
& (\frac{F(T)}{T} \int_{iT}^{(i+1)T} M(u) du)^2] \tag{4-9}
\end{aligned}$$

$s(t)$, T süresi boyunca sabit kabul edildiği için $s(t)$ durağandır. Böylece, T süresi boyunca ölçülen bir örnek için ortalama, varyans ve otokovaryans $m(t) = \mu_s$, $V(t) = R(v, u) = \sigma_s^2$ şeklinde yazılabilir. Bu kabul göz önünde bulundurulduğunda $(0, T)$ zaman aralığında (4-9)'daki ifade aşağıdaki şekilde sadeleştirilebilir.

$$\begin{aligned}
MSE = & \frac{\sigma_s^2 + \mu_s^2}{(V_R - V_N)^2} - 2\rho_{s_i x_i} \frac{\sigma_s}{(V_R - V_N)} \frac{\sqrt{F(T)[F(T)\sigma_s^2 + \mu_s]}}{V_N} - \\
& \frac{2F(T)\mu_s^2}{V_N(V_R - V_N)} + \frac{F(T)[F(T)\sigma_s^2 + \mu_s + F(T)\mu_s^2]}{V_N^2} \tag{4-10}
\end{aligned}$$

6.4 Benzetim Sonuçları

Bu bölümde Tablo 4-1'de verilen parametrelere göre yapılan sinyal bozulması benzetim sonuçları verilmiştir. Daha sonra öne sürdüğümüz sistem modelinden elde edilen sonuçlar, moleküllerin NM etrafında yaptıkları “rasgele yürüyüş” (random walk) benzetimi ile doğrulanmıştır.

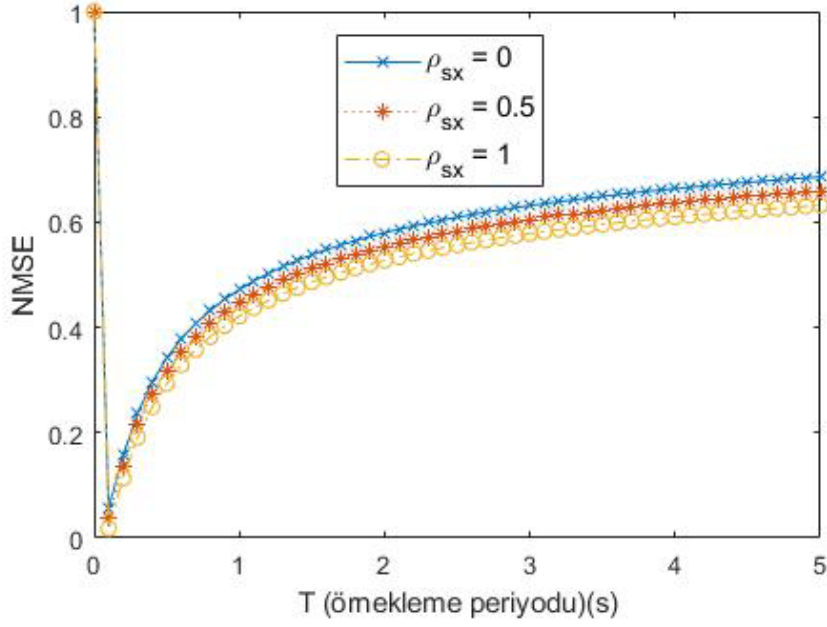
Tablo 4-1 Teorik Benzetim Parametreleri

Parametre	Değer	Parametre	Değer
μ_s	10^2	Difüzyon katsayısı (D)	$10^{-12} m^2/s$
σ_s^2	10^2	V_N yarıçapı (a)	$1 \mu m$
Korelasyon katsayısı (ρ_{sx})	0 - 1	V_R yarıçapı (b)	$1.5 - 2 \mu m$
Dağılım fonksiyonu ($F(T)$)	0 - 1	Örnekleme periyodu (T)	0 - 0.5 s

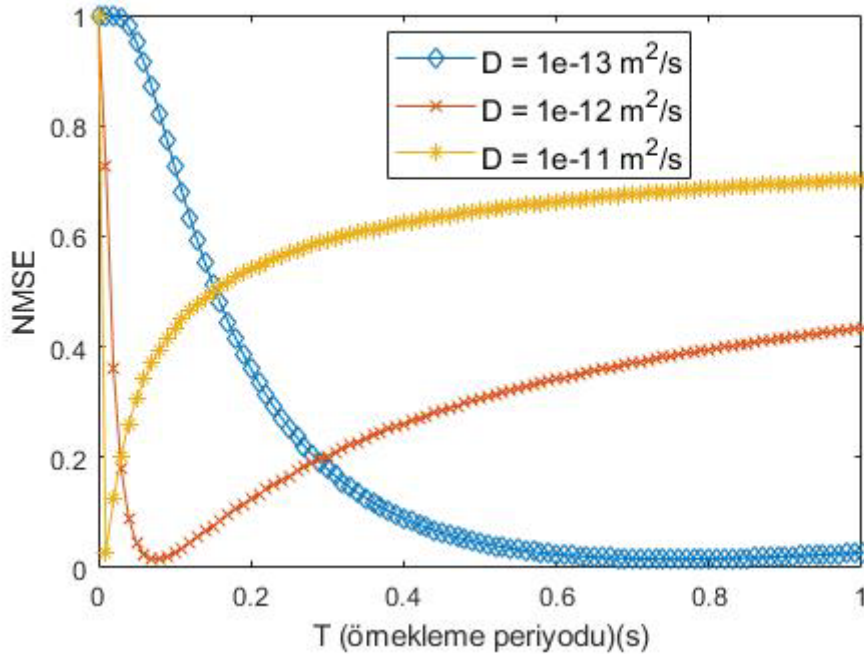
Benzetim sonuçları normalize edilmiş ortalama karesel hata değerlerini (normalized MSE-NMSE) göstermektedir. NMSE, MSE değerinin $(\sigma_s^2 + \mu_s^2)/(V_R - V_N)^2$ değerine bölünmesiyle elde edilmiştir. Ayrıca, benzetimlerde moleküllerin hareketi sırasında herhangi bir kimyasal reaksiyon olmadığı kabul edilmiştir.

(4-10)'da verilen sonuca göre yatay ekseninin örnekleme periyodunu gösterdiği farklı V_R yarıçapları için hesaplanan NMSE değerleri Şekil 4-2 (a)'da verilmiştir. V_R küçüldükçe sinyal bozulması değerleri daha hızlı bir şekilde minimum değerlerine düşmektedir. Bu durum bize V_R 'nin daha küçük değerleri için NM'nin sinyali daha hızlı yeniden oluşturduğu ve daha hızlı tepki verdiğini göstermektedir. Aslında, b değerini değiştirerek V_R içindeki sinyali de değiştirmiş oluyoruz çünkü V_R değişirken molekül sayısı aynı kalmaktadır. Minimum noktasından sonra, örnekleme periyodu arttıkça NMSE değerleri moleküllerin rasgeleliğinden dolayı artarak iraksamaktadır. T arttıkça NM'nin yakalama olasılığı artmakta ve buna bağlı olarak yeniden oluşturulan sinyalin sıklığı artmaktadır. Bu artış sinyal bozulmasının belli bir minimum noktasına ulaştıktan sonra T arttıkça artmasına sebep olmaktadır.

Şekil 4-3'te farklı korelasyon katsayısı değerleri için verilen grafik görülmektedir. V_R içindeki ve yeniden oluşturulan sinyal arasındaki korelasyon arttıkça sinyal bozulma değerleri düşmekte ve daha iyi sonuçlar gözlemlenmektedir. Şekil 4-4'te ise difüzyon katsayısının sinyal bozulması üzerindeki etkisi görülmektedir. Difüzyon katsayısı arttıkça $F(T)$ daha hızlı artmaktadır. Bu hızlı artış, daha büyük difüzyon katsayısına sahip sinyal bozulmasının daha hızlı bir şekilde minimum değerine ulaşmasını sağlamaktadır. Sinyal bozulmasının minimum olduğu noktada, V_R içindeki sinyal ile yeniden oluşturulan sinyal arasındaki fark en küçük halindedir. Bu nokta molekül konsantrasyonlarının denge noktasıdır. Bu denge noktasından sonra NM sinyali örneklemeye devam ederse konsantrasyon farkı büyür çünkü yakalanan moleküller artmaya devam eder ve V_R içinde kalan moleküller azalır. T artarken sinyal bozulması da difüzyon katsayısının büyüklüğü kadar artar çünkü moleküller daha az yoğun bir ortamda daha hızlı hareket etmektedirler.



Şekil 4-2. Farklı ρ_{sx} değerleri için Sinyal Bozulması – Örnekleme Periyodu grafiği ($b = 1.5 \mu m$)

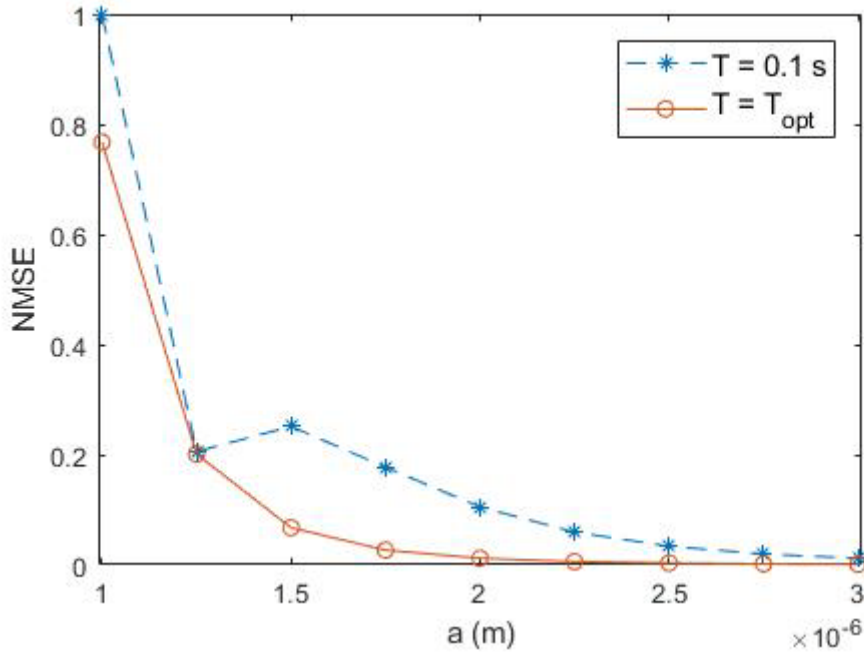


Şekil 4-3. Farklı difüzyon katsayısı değerleri için Sinyal Bozulması ($\rho_{sx} = 0.75$, $b = 1.5 \mu m$)

Türetilen sinyal bozulması formülü kullanılarak NM tasarımına yönelik çıkarımlar yapmak da mümkündür. Örneğin en uygun (optimum) örnekleme periyodunu (T_{opt}) bulmak için

$$\frac{\partial MSE}{\partial T} = 0$$

denkleminin çözülmesi yeterlidir. Bu denklemin sonucunda çok uzun ifadeler bulunmaktadır. Bu nedenle bu raporda yer verilmemiştir. Bunun yerine çıkarılan T_{opt} kullanılarak elde edilen nümerik değerler aşağıdaki grafikte gösterilmiştir. Bu grafikten de görüleceği üzere hesaplanan T_{opt} örnekleme periyodu olarak kullanıldığı zaman sabit bir örnekleme periyoduna göre daha iyi sonuçlar elde edilmiştir.



Şekil 4-4. $T = 0.2s$ ve $T = T_{opt}$ için a 'ya göre sinyal bozulması grafiği.

6.5 Sistem Modelinin Doğrulanması

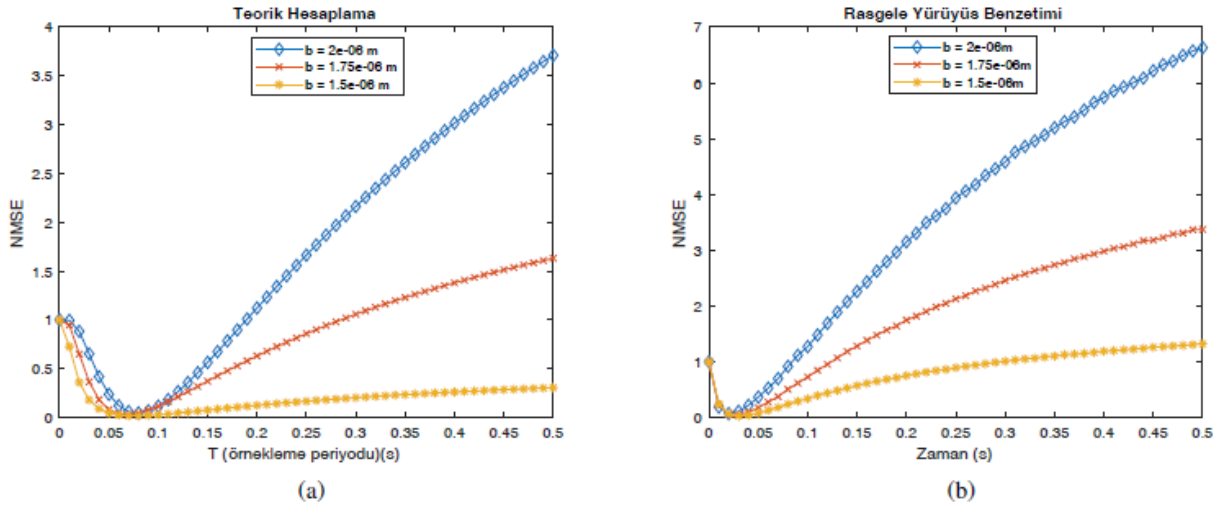
Bir molekülün hareketi modellenirken üç boyutlu uzayda her saniyede δ m kadar hareket ettiği varsayılır. Molekülün her hareketi diğerlerinden bağımsızdır ve adım uzunluğu, $\delta = \sqrt{2D\tau}$ şeklinde hesaplanır Berg (1993). Teorik modelin doğrulanabilmesi için yapılan rasgele yürüyüş benzetimlerinin parametreleri Tablo 4-2'de ve sonucunda elde edilen sinyal bozulması değerleri Şekil 4-2 (b)'de verilmiştir.

Tablo 4-2. Rasgele Yürüyüş Benzetim Parametreleri

Parametre	Değer	Parametre	Değer
μ_s	10^2	Örnekleme periyodu (T)	0 - 0.5 s
Difüzyon katsayısı (D)	$10^{-12} m^2/s$	Adım zamanı (τ)	10^{-3} s

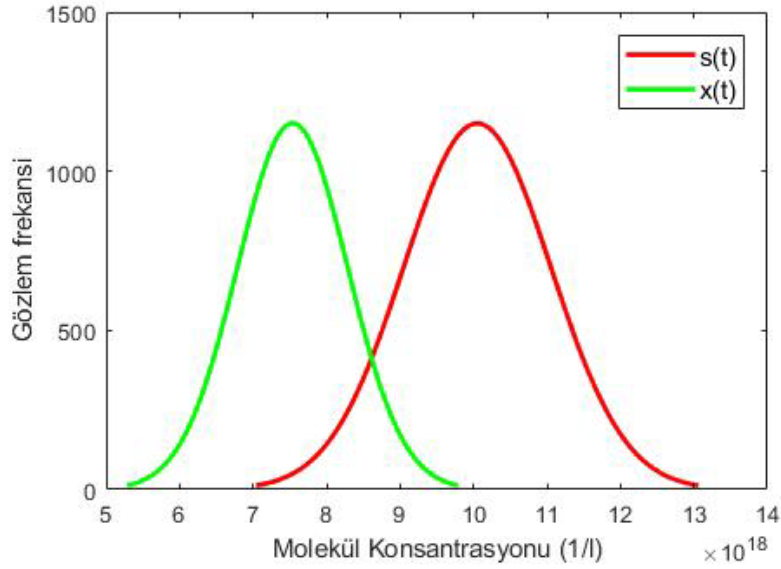
V_N yarıçapı (a)	$1\mu m$	Adım uzunluğu (δ)	$0.0447\mu m$
V_R yarıçapı (b)	$1.5 - 2\mu m$		

Şekil 4-2'den görüleceği üzere teorik ve rasgele yürüyüş benzetiminden çok benzer sonuçlar elde edilmiştir ve bu da teorik modelin doğrulandığını göstermektedir. Rasgele yürüyüş benzetiminde moleküllerin çarpışmasının ihmal edilmesi sebebiyle grafiklerde verilen sinyal bozulma değerlerinde küçük farklılıklar gözlemlenmektedir.



Şekil 4-5. Farklı V_R değerleri için Sinyal Bozulması – Örnekleme Periyodu grafiği (a) Teorik ($\rho_{sx} = 0.75$) (b) Rasgele yürüyüş benzetimi

Şekil 4-2. Önerilen sistem modeline göre elde edilen s ve x 'in dağılımları Şekil 4-6'da verilmiştir. Bu şekilden de görüldüğü üzere V_R içindeki sinyal ve yeniden oluşturulan sinyal çok benzer Gauss dağılımlarına sahiptir.



Şekil 4-6. x ve s dağılımları ($T = 5s, D = 10^{-12} \left(\frac{m^2}{s}\right), a = 1\mu m, b = 1.5\mu m$)

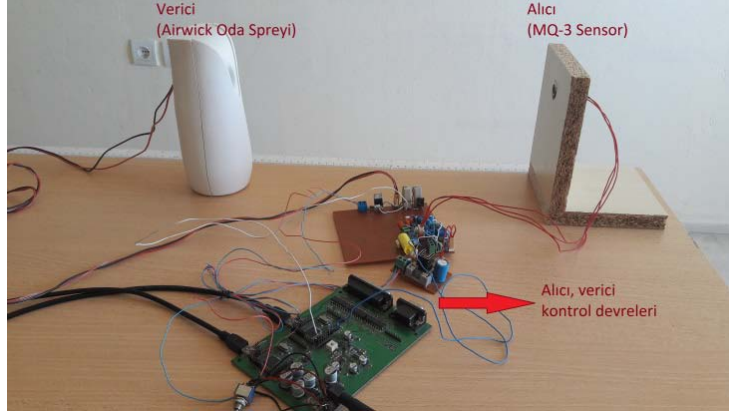
6.6 Sonuç

Bu bölümde dış dünyadaki sinyalin NM tarafından nasıl algılandığı ile ilgili, diğer bir deyişle sinyalin yeniden oluşturulması konusunda bir model önerilmiştir. NM, molekül sayan bir makine olarak kabul edilmiş ve yeniden oluşturulan sinyal rastgele bir sayma süreci olarak tanımlanmıştır. Yeniden oluşturulan sinyal ile gerçek sinyal arasındaki sinyal bozulması tanımlanmış ve matematiksel olarak türetilmiştir. Difüzyon katsayısı, korelasyon katsayısı ve alış hacmi yarıçapı gibi parametrelerin sinyal bozulması üzerindeki etkisi incelenmiştir. Bunun yanında türetilen sinyal bozulması ifadesi kullanılarak NM tasarımı üzerine bir örnek verilmiştir. En uygun örnekleme periyodunun nasıl bulunabileceği gösterilmiş ve benzetim sonuçları verilmiştir.

7. DENEYSEL MOLEKÜLER HABERLEŞME

Bu bölümde difüzyona dayalı moleküler haberleşmenin pratikte anlatılan teori ile örtüştüğünü göstermek için bir deney düzeneği hazırlanmıştır. Deney düzeneği Şekil 6-1'de görüldüğü gibi bir oda spreyi ve MQ-3 Sensor devresinden oluşmaktadır.

Bu düzenekteki alıcı ve verici bir mikro-denetleyici yardımıyla kontrol edilip elde edilen veriler bilgisayara aktarılmaktadır. Kullanılan MQ-3 sensörü ortamdaki alkol yoğunluğunu veren bir sensördür. Düzenekteki airwick oda spreyi ise içerisinde bütan, izobütan, propan ve etil alkol içermektedir. Özellikle etil alkol yoğunluğu sensör tarafından algılanmaktadır.



Şekil 6-1. MQ-3 sensor ve oda spreyi kullanılarak hazırlanan masaüstü moleküler haberleşme düzeneği

7.1 Uzaklık Tahmini

Sprey tarafından salınan moleküllerin yayılması aşağıda verildiği gibi difüzyon denkleminin çözümü ile modellenebilir.

$$U = \frac{Q}{(4\pi Dt)^{3/2}} e^{-\frac{r^2}{4Dt}} \quad 6-1$$

Burada U (mol/cm^3) alıcı kısmındaki tespit edilen yoğunluğu göstermektedir. Q ve D (cm^2/sec) ise sırası ile ortama salınan molekül sayısı ve difüzyon sabitini belirtmektedir. r ise sensör ile sprej arasındaki uzaklığı göstermektedir. (6-1)'de verilen çözüm durgun havada anlık salınım için tamamen serbest uzayda difüzyon denkleminin çözümü ile elde edilmektedir. Oysa Şekil 6-1'de görüldüğü gibi deneysel düzende birçok sınır koşulu ve sprej tarafından moleküllere anlık olarak uygulanan bir başlangıç itişisi söz konusudur. Bu farklılıklar göz önünde bulundurulduğunda (6-1)'de verilen modelin deneysel düzende için daha farklı bir formda olması gerektiği açıktır. Burada yine (6-1)'deki üstel formu düşünerek ve deneysel olarak elde ettiğimiz sonuçlar üzerinden eğri uydurma (curvefitting) gerçekleştirerek aşağıdaki gibi bir genel modele ulaşılabilir.

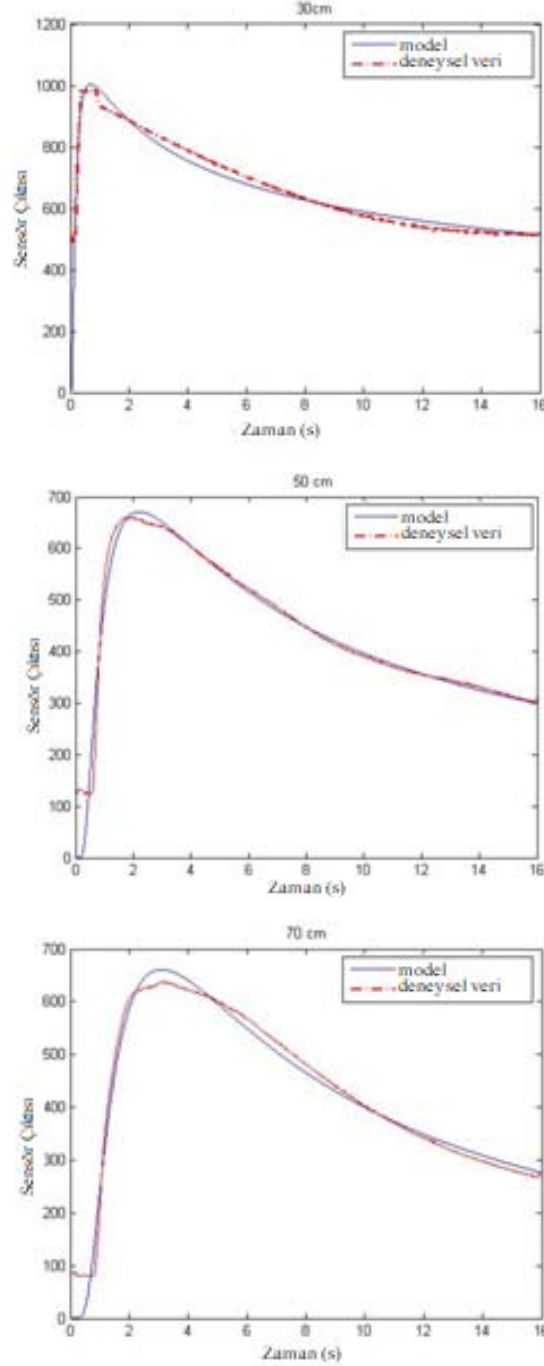
$$U = \frac{N}{t^k} e^{-\frac{b}{t}} \quad 6-2$$

Bu modelde N ve b parametreleri (6-1)'deki $Q/4\pi D$ ve $r^2/4D$ sabitlerinin yerini tutmaktadır. Bu parametreler farklı mesafeler için Matlab içindeki nonlinear data regression algoritması kullanılarak hesaplanmıştır. (6-1)'deki modelden en temel farkı zaman üssünün (k) değişken olmasıdır. Bu katsayı Tablo 6-1'de görüldüğü gibi kısa mesafeler için küçükken mesafe arttıkça katsayıda artmaktadır.

Tablo 6-1. Farklı mesafeler için hesaplanan (2)'deki k sabitinin değerleri

	30cm	50cm	70cm	100cm	150cm
<i>k</i>	0.4	0.7	1	1	1.2

(6-2)'nin türetilmesinde kullanılan bazı veriler Şekil 6-2'de gösterilmektedir



Şekil 6-2. Sırasıyla 30,50,70 cm uzaklıkları için sensördeki zamana bağlı yoğunluk değişimlerini göstermektedir.

(6-2)'de verilen model esas alınarak ve bu modelde $b = r^2/4D$ olduğu bilindiğinden eğer molekülün difüzyon katsayısı bulunabilirse buradan spray ile sensör arasındaki mesafe

$r = \sqrt{4bD}$ olarak tahmin edilebilir. [6-1]'de verildiği gibi bilinen farklı iki mesafeye moleküllerin ulaşma süresi göz önünde bulundurularak difüzyon katsayısı aşağıdaki gibi bulunabilir.

$$D = \frac{\left(\frac{r_1^2}{t_1} - \frac{r_2^2}{t_2}\right)}{2 \log \frac{t_2}{t_1}} \quad 6-3$$

Buradaki r_1 ve r_2 farklı mesafeleri, t_1 ve t_2 de bu mesafelerdeki vericiden alıcıya iletim süresini göstermektedir ve bu süreler deneysel olarak bulunan sonuçlardır. Tablo 6-2'de yukarıda anlatılan yöntem kullanılarak elde edilen beş farklı mesafeye ait tahmin sonuçları gösterilmektedir.

Tablo 6-2. Farklı mesafeler için Difüzyon sabiti hesaplanarak bulunan mesafe tahminleri

Mesafeler	30cm	50cm	70cm	100cm	150cm
Mesafe Tahminleri	30.9	55.4	79.5	97.9	105.5

Görüldüğü gibi 150cm'ye kadar mesafe tahmini düşük hatalar ile gerçekleşmektedir. Ancak 150cm için elde ettiğimiz sonuçta hata oldukça yüksektir. 150 cm gibi görece uzak mesafelerde sensöreulaşan moleküllerin yoğunluğu ancak bir gürültü düzeyinde olmaktadır. Dolayısıyla yapılan tahmindeki hata da yükselmektedir. Bu hatanın sprej tarafından salınan molekül yoğunluğu artırılarak düşürülebileceği düşünülmektedir. Bu konu ile ilgili deneysel çalışmalar proje kapsamında sürdürülmektedir.

Kaynakça

- Akyildiz, I. F. 2008. "NanoNetworking: A New Communication Paradigm", Computer Networks, 52 (12), 2260-2279.
- Aquino, G., Wingreen, N., Endres, R. 2016. "Know the Single-Receptor Sensing Limit? Think Again", Journal of statistical physics , 162 (5), 1353-1364.
- Arifler, D. 2011. "Capacity Analysis of a Diffusion-Based Short-Range Molecular Nano-Communication Channel", Computer Networks, 55 (6), 1426-1434.
- Atakan, B., Akan, B. O. 2010. "Deterministic capacity of information flow in molecular nanonetworks", Nano Communication Networks, 1 (1), 31-42.
- Atakan, B., Galmes, S., Akan B. O. 2012. "Nanoscale communication with molecular arrays in nanonetworks", IEEE Transactions on NanoBioscience, 11 (2), 149-160.
- Atakan, B. 2014. Molecular Communications and Nanonetworks: From Nature To Practical Systems (1st Edition). Newyork: Springer.
- Berg, H. 1993. Random walks in biology. Princeton University Press.
- Berg, H., Purcell, E. 1977. "Physics of Chemoreception", Biophysical Journal, 20, 193-219.
- Endres, R., Wingreen, N. 2008. "Accuracy of direct gradient sensing by single cells", Proceedings of the National Academy of Sciences , 105 (41), 15749-15754.

- Endres, R., Wingreen, N. 2009. "Maximum likelihood and the single receptor", *Physical review letters*, 103 (15), 158101-158105.
- Freitas, R. A. 1999. *Nanomedicine, Volume I: Basic Capabilities*. ABD: Landes Bioscience.
- Galmes, S., Atakan, B. 2016. "Performance Analysis of Diffusion-Based Molecular Communications With Memory". *IEEE Transactions on Communications*, 64 (9), 3786-3793.
- Guney, A., Atakan B., Akan B. O. 2012. "Mobile Ad Hoc Nanonetworks with Collision-based Molecular Communication", *IEEE Transactions on Mobile Computing*, 11 (3), 353-366.
- Hiyama, S. M. 2005. "Molecular Communication", *NSTI Nanotech*. California, USA.
- Hsieh, Y. P., Lee, Y. C., Shih, P. J., Yeh, P. C., Chen, K. C. 2013. "On the asynchronous information embedding for event-driven systems in molecular communications", *Nano Communication Networks*, 4 (1), 2-13.
- Jahnke, T., Huisinga, W. 2007. "Solving the chemical master equation for monomolecular reaction systems analytically", *Journal of Mathematical Biology*, 54 (1), 1-26.
- Kadloor, S., Adve, R. S., Eckford, A. W. 2012. "Molecular Communication Using Brownian Motion with Drift", *IEEE Transactions on Nanobiosciences*, 11 (2), 89-99.
- Karatzas, I., Shreve, S. 1991. *Brownian Motion and Stochastic Calculus*. New York: Springer.
- Kuran, M., Tugcu, T., Edis, B. 2012. "Calcium Signaling: Overview and Research Directions of a Molecular Communication Paradigm", *IEEE Wireless Communication Magazine*, 19(5), 20-27.
- Kuran, M. Ş., Yilmaz, H. B., Tugcu, T., Özerman, B. 2010. "Energy Model for Communication via Diffusion in Nanonetworks", *Nano Communication Networks*, 1 (2), 86-95.
- Lin, Y. K., Lin, W. A., Lee, C. H., Yeh, P. C. 2015. "Asynchronous threshold based detection for quantity-type-modulated molecular communication", *IEEE Transactions on Molecular, Biological and Multi-Scale Communications*, 1 (1), 37-49.
- Mahfuz, M. U., Makrakis, D., Mouftah, H. T. 2010. "On the Characterization of Binary Concentration-Encoded Molecular Communication in Nanonetworks", *Nano Communication Networks*, 1 (4), 289-300.
- Miorandi, D. 2011. "A stochastic model for molecular communications", *Nano Communication Networks*, 2 (4), 205-212.
- Moore, M. J., Nakano, T., Enomoto, A., Suda, T. 2012. "Measuring distance from single spike feedback signals in molecular communication", *IEEE Transactions on Signal Processing*, 60 (7), 3576-3587.
- Moore, M. J., Suda, T., Oiwa, K. 2009. "Molecular Communication: Modeling Noise Effects on Information Rate", *IEEE Transactions on Nanobioscience*, 8 (2), 169-180.
- Nakano, T., Liu, J. Q. 2010. "Design and Analysis of Molecular Relay Channels: An Information Theoretic Approach", *IEEE Transactions on Nanobioscience*, 9 (3), 213-221.
- Nakano, T., Moore, M. J., Wei, F., Vasilakos, A. V., Shuai, J. 2012. "Molecular communication and networking: opportunities and challenges", *IEEE Transactions on Nanobiosciences*, 11 (2), 135-148.
- Pierobon, M., Akyildiz, I. F. 2011. "Noise analysis in ligand-binding reception for molecular communication in nanonetworks", *IEEE Transactions on Signal Processing*, 59 (9), 4168-4182.
- Pierobon, M., Akyildiz, I. F. 2010. "A physical end-to-end model for molecular communication in nanonetworks", *IEEE Journal of Selected Selected Areas in Communications*, 28 (4), 602-611.
- ShahMohammadian, H., Messier, G. G., Magierowski, S. 2013. "Blind synchronization in diffusion-based molecular communication channels", *IEEE Communications Letters*, 17 (11) 2156 - 2159.
- Valderrama, M., Jimenez, F., Gutierrez, R. 1995. "Estimation and filtering on a doubly stochastic Poisson process", *Applied Stochastic Models and Data Analysis* , 11 (1), 13-24.
- Yilmaz, H. B., Heren, A. C., Tugcu, T., Chae, C. B. 2014. "Three-dimensional channel characteristics for molecular communications with an absorbing receiver", *IEEE Communications Letters*, 18 (6), 929-932.



Ziff, R. M., Majumdar, S. N., Comtet, A. 2009. "Capture of particles undergoing discrete random walks", Journal of Chemical Physics, 130 (20), 204104.

OCAK 2018
İZMİR

TÜBİTAK
PROJE ÖZET BİLGİ FORMU

Proje Yürütücüsü:	Doç. Dr. BARIŞ ATAKAN
Proje No:	115E362
Proje Başlığı:	Moleküler Haberleşmede Moleküler Bilginin Tespiti Ve Tahmini
Proje Türü:	1001 - Araştırma
Proje Süresi:	24
Araştırmacılar:	
Danışmanlar:	
Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi:	İZMİR YÜKSEK TEKNOLOJİ ENSTİTÜSÜ
Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri:	01/09/2015 - 01/12/2017
Onaylanan Bütçe:	146400.0
Harcanan Bütçe:	85851.16
Öz:	<p>Moleküler haberleşme bilgi taşıyıcısı olarak molekülleri kullanan bir haberleşme paradigmasıdır. Yeryüzündeki en eski ve en yaygın haberleşme yöntemi olan moleküler haberleşme tek hücreli canlılardan çok hücreli hayvan ve bitkilere kadar bütün canlıların hayati fonksiyonlarını sürdürebilmeleri için vazgeçilmezdir. Doğada var olanların yanı sıra günümüzde moleküler haberleşme moleküler sinyalleri algılayıp yorumlayabilen nano ve biyoteknoloji tabanlı birçok yeni uygulamanın da önemli bileşenleri arasına girmiştir. Bu proje kapsamında moleküler haberleşme ile ilgili gerçekleştirilen çalışmalar beş ana bölüme ayrılabilir. Birinci bölümde kanal hafızalı difüzyona dayalı moleküler haberleşmenin başarımının anlaşılabilmesi için analitik başarım değerlendirme ve ilgili benzetim deneyleri yapılmıştır. Başarım değerlendirme için geliştirilen analitik modelin doğruluğu rastgele yürüyüş (random walk) benzetimleri ile gösterilmiştir. Deneyler bazı moleküler haberleşme senaryoları için kanal hafızasının başarımı azaltmak yerine arttırdığını göstermiştir. İkinci bölümde hafızalı moleküler haberleşme kanalının eşzamansız olduğu durumlar için analitik başarım değerlendirme yapılmıştır. Moleküler haberleşmenin verici tarafından gönderilen bir işaret (beacon) sembolünün tespiti ile başlatıldığı düşünülmüştür. Bu işaret sembolü için kullanılan salım miktarı ve difüzyon katsayısı gibi parametrelerin uygun seçimi ile eşzamansız moleküler haberleşmenin neredeyse eşzamanlı kadar iyi başarım sağlayabildiği gösterilmiştir. Üçüncü bölümde bir moleküler kaynağın yerini ve salım hızını bulabilmek için teorik bir tahmin yöntemi geliştirilerek başarımı benzetim deneyleri ile gösterilmiştir. Dördüncü bölümde ise moleküler sinyallerin alıcıda yeniden oluşturulması için analitik bir model oluşturularak sinyal bozulmasının analitik ifadesi türetilmiştir. Yine benzetim deneyleri ile bozulmanın hangi parametrelerden nasıl etkilendiği araştırılarak en iyi alıcı tasarımı gerçekleştirilmiştir. Son olarak beşinci bölümde bir moleküler kaynak ve mikroişlemci ile kontrol edilen bir algılayıcıdan oluşan moleküler haberleşme sistemi gerçekleştirilmiştir. Gerçeklenen sistem kullanılarak difüzyon katsayısı ve kaynak ile alıcı arasındaki mesafe tahmini için yöntemler önerilerek başarımları gösterilmiştir. Burada özetlenen projenin beş bölümünde moleküler alıcı mükemmel absorblayıcı (perfect absorber) olarak düşünülmüştür. Mükemmel alıcı birçok açıdan yüzey reseptörlü alıcıların performansını da yansıtabildiği için performans değerlendirmelerinde reseptörlü alıcılar kapsam dışında bırakılmıştır.</p>
Anahtar Kelimeler:	Moleküler Haberleşme, Başarım Değerlendirmesi, Yer Tahmini, Salım Hızı Tahmini
Fikri Ürün Bildirim Formu Sunuldu Mu?:	Hayır
Projeden Yapılan Yayınlar:	1- Performance Analysis of Diffusion-Based Molecular Communications With Memory (Makale - İndeksli Makale),