COMUNICACIONES MOLECULARES

Un análisis desde el paradigma protocolario de IEEE



Yesenia Cevallos
Deysi Inca
Ivone Santillán
Cristian Vacacela Gómez
Talía Tene
Albert Espinal
Camilo Téllez
Nicolay Samaniego

COMUNICACIONES MOLECULARES

Un análisis desde el paradigma protocolario de IEEE

PRIMERA EDICIÓN

2023

EDITORIAL

Revisión técnica y edición:
Editorial CEDIA

Diseño y diagramación:
Paúl Arévalo García, CEDIA

Impresión:
Digitals by CEDIA

Coordinación editorial:
Santiago Berrezueta, CEDIA

ISBN:
978-9942-8952-3-3

Tiraje:
10 ejemplares

Todos los derechos reservados.
Prohibida la reproducción total o parcial de esta obra,
por cualquier medio o método, sin la autorización escrita del editor.

AUTORES

Yesenia Cevallos

Ingeniera en Electrónica y Telecomunicaciones por la Escuela Politécnica Nacional (Ecuador).
Magister en Tecnologías de la Información por la Universidad Técnica de Ambato (Ecuador).
Doctora en Ciencias y Tecnologías de los Sistemas Complejos por la Università della Calabria (Italia).
Docente/Investigadora por la Universidad Nacional de Chimborazo (Ecuador).
CCNA, CCNAI por la Universidad Nacional de Chimborazo (Ecuador).

Deysi Inca

Ingeniera en Electrónica y Computación por la Escuela Superior Politécnica del Chimborazo (Ecuador).
Magister en Comunicación de Redes por la Pontificia Universidad Católica (Ecuador).
Docente/Investigadora por la Universidad Nacional de Chimborazo (Ecuador).

Ivone Santillán

Magister en Enfermería por la Università degli Studi di Milano (Italia).
Master en Enfermería de Familia y de Comunidad por la Università degli Studi di Pavia (Italia).
Colaboración Sanitaria en el Ministerio de Salud Pública del Ecuador.
Docente/Investigadora por la Universidad Nacional de Chimborazo (Ecuador).

Cristian Vacacela Gómez

Biofísico por la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo (Ecuador).
Doctor en Física y Tecnologías Cuánticas por la Università della Calabria (Italia).
Docente/Investigador por la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo (Ecuador).
Editor Académico/Revisor en Revistas Internacionales de Nanomateriales y Nanocomunicaciones.

Talía Tene

Biofísica por la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo (Ecuador).
Doctora en Física y Tecnologías Cuánticas por la Università della Calabria (Italia).
Docente/Investigadora por la Universidad Técnica Particular de Loja (Ecuador).

Albert Espinal

Ingeniero en Computación por la Escuela Superior Politécnica del Litoral (Ecuador).
Magister en Sistemas de Información Gerencial por la Escuela Superior Politécnica del Litoral (Ecuador).
Doctor en Ingeniería por la Universidad Nacional de Cuyo (Argentina).
Docente/Investigador por la Escuela Superior Politécnica del Litoral (Ecuador).
CCNA, CCNP, CCAI - Cisco Networking Academy.
Main contact Cisco ASC/ITC - Corporación Ecuador Sin Brecha Digital.
CEO en SOL & TECH Soluciones y Tecnología.

Camilo Téllez

Ingeniero en Electrónica por la Universidad de San Buenaventura (Colombia).
MsC. en Sistemas Nanoelectrónicos por la Universidad Técnica de Dresden (Alemania).
IEEE EDS Colombia Chapter Chair (2022-2023) // IEEE Region 9 Chapter Coordinator - IEEE Nanotechnology Council.

Nicolay Samaniego

Ingeniero en Electrónica y Computación por la Escuela Superior Politécnica del Chimborazo (Ecuador).
Docente/Investigador/Rector de la Universidad Nacional de Chimborazo (Ecuador).

AGRADECIMIENTOS

A Dios por sustentar nuestras vidas, a nuestros seres queridos y a quienes piensan que la fuerza del conocimiento se superpone a la fuerza física.

COMUNICACIONES MOLECULARES

Un análisis desde el paradigma protocolario de IEEE

CONTENIDOS

pág

CONTENIDOS 11
PREFACIO 15

capítulo 1

Introducción
1.1 Empleo de las Tecnologías de la Información para fundamentar el análisis de las Comunicaciones Moleculares 24
1.2 Tipos de Comunicaciones Moleculares 26
1.3 Estándares de protocolos de Comunicaciones Moleculares IEEE 1906.1 y 1906.1.1 27
Referencias bibliográficas 30

capítulo 2

Sistema de Comunicación Molecular
2.1 Componentes de un sistema de Comunicación Molecular 36
2.2 Efectos contaminantes y limitantes en el canal de Comunicación Molecular 41
2.3 Características de los Canales de Transmisión Molecular por Difusión 45
2.4 Tipos de Receptores Moleculares 56
2.5 Tipos de modulación en Comunicaciones Moleculares 60
Referencias bibliográficas 72

capítulo 3

Análisis comunicacional de los estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1
3.1 Prospectiva de la necesidad para establecer un estándar de Nanocomunicaciones 78
3.2 Análisis General de los Estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1 80
3.3 Modelo de datos para Sistemas de Comunicación a Nanoescala según los Estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1 108
3.4 Características de nanocomunicaciones establecidas en los Estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1 110
3.5 Ejemplo de simulación genérica proporcionado por los Estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1 118
3.6 Ejemplo de la ejecución de código abierto de NS-3 definido en los Estándares nano de IEEE para el caso de Comunicaciones Moleculares 119
Referencias bibliográficas 138

PREFACIO

El campo de las CM (Comunicaciones Moleculares) incluye a las ciencias comunicacionales y de *networking*. Las interacciones de las CM se comprenden, interpretan y definen mediante elementos matemáticos, probabilísticos, y sistémicos de las teorías de la información y de las telecomunicaciones, y se aplican a nanoescala. En función de que las CM son la forma efectiva en la que las entidades biológicas se comunican entre sí en una amalgama armónica que orquesta sendos sistemas de comunicación a escala molecular de manera intra y extracelular, es frecuente en la literatura que se refiera a ellas como sistemas de comunicación molecular biológicos, sistemas de comunicación biológicos o, simplemente, sistemas biológicos, por lo que esta terminología será la que se emplee a lo largo de este libro.

Como sistemas de comunicación, los sistemas biológicos cuentan con los componentes necesarios para cumplir el propósito de enviar información (por ejemplo, de cómo sanar un órgano objetivo o cómo propagar una enfermedad) desde un origen hasta un destino a través de un canal de transmisión (el cual, por lo general, es un medio acuoso de difusión). Las CM, esencialmente, analizan la propagación de datos biológicos al nivel nano, donde las células, como "dispositivos inteligentes", constituyen nuestros cuerpos y se comunican, básicamente, a través de transporte Browniano y enlaces moleculares. Aun cuando las comunicaciones celulares se producen en un entorno ruidoso como resultado (de entre otras causas) de la propia difusión, los sistemas naturales han establecido una forma adecuada para enviar la información (transmisor biológico), a su destino (receptor biológico) posibilitando que las especies evolucionen y sobrevivan durante millones de años.

En biología abundan los sistemas transmisor-receptor, emitiendo y procesando información de varias maneras, que pueden ser cuantificadas mediante el paradigma de las teorías de la información de Shannon; por lo que, si se define una señal de entrada como S en términos de dosificación/concentración (como por ejemplo: la AHL Acil-Homoserina Lactona, dopamina o, incluso, fragmentos de ácido desoxirribonucleico-ADN) y se utiliza un medio de transmisión que establece cambios en la señal biológica S a través de "modulación", la capacidad de tal canal sería: $C = BW log_2\left(1 + \frac{S}{N}\right)(bps)$.

Donde BW es el ancho de banda, que es el rango de frecuencia de operación del canal (cambio en la concentración de moléculas o "Hz"), N es la señal correspondiente al ruido, y la capacidad se establece en bits por segundo. El procesamiento de la señal se determina en el destino molecular mediante receptores afines, como los receptores de superficie celular. Un mecanismo de modulación como una vía de señalización celular, asocia la señal entrante con un “traductor” (por ejemplo: un promotor receptivo para la expresión genética), lo que permite extraer el "significado" de la señal arribada.

Como es notable la acción comunicacional tras el hecho de la propagación de información entre entidades biológicas, la investigación molecular se fundamenta en las teorías matemáticas y comportamentales de los sistemas de comunicación (analógicos o digitales) convencionales. Particularmente, los modelos de interconexión de redes de computadoras ISO/OSI (*International Organization of Standardization/Open System Interconnection*) y TCP/IP (*Transmission Control Protocol/Internet Protocol*) se han empleado en el diseño, análisis, simulación y experimentación de sistemas de comunicaciones moleculares y, en este sentido, actualmente, la ciencia considera a las CM como un nuevo paradigma comunicacional de *networking*.

Sin embargo, la utilización de conceptos de los sistemas de comunicación tradicionales y de *networking* en las comunicaciones moleculares, no implica que un modelo o arquitectura de capas estratificadas de red presente a detalle las mismas características que aquellas que se exponen en la transmisión de información en seres vivos, por lo que se debería puntualizar las abstracciones, restricciones y condiciones en el estudio de los sistemas biológicos. Este hecho radica en la diferencia, que existe entre la interconexión de dispositivos electrónicos en sistemas de telecomunicaciones y la interconexión de entidades biológicas. No obstante, el comportamiento natural de los sistemas moleculares exhibe sorprendentes analogías con los sistemas de comunicación convencionales, a tal punto que, en muchas circunstancias, características en los sistemas de comunicación molecular se asemejan a los mecanismos de control de flujo y errores, direccionamiento, estable-

cimiento de enlaces de comunicación, retroalimentación desde el receptor hacia el transmisor, y, ciertamente, a la transmisión de información propiamente dicha, de un modo tan preciso, que parecería que cada elemento biológico se comporta como un minúsculo elemento de comunicación de una red tradicional.

En esta instancia se debe recalcar la importancia de las CM en la ciencia; su estudio se ha llevado a cabo desde hace quince años, aproximadamente, en razón de su potencial utilidad y aplicación en ámbitos tan diversos como el biomédico, el electrónico, el industrial, el ambiental agrícola y el militar. En el mundo electrónico, los nanomateriales se proyectan como el reemplazo de los semiconductores actuales. En las telecomunicaciones, las nanoantenas proporcionan anchos de banda mucho mayores a los de las antenas convencionales. Las Redes de Área Corporal (*Body Area Network*) son un nuevo tipo de redes de comunicación en el que las teorías de *networking* de las redes LAN (*Local Area Network*) y *WAN* (*Wide Area Network*) se abstraen y se usan en la comunicación al interior del cuerpo humano; aquí, células programadas genéticamente, dispositivos electrónicos micro-nano, o una combinación de estos elementos, se utilizan para procesos de monitoreo y control de enfermedades en pacientes que son atendidos remotamente (para evitar defunciones antes de derivar al paciente a un centro de salud, en casos de emergencias), así como en la administración especializada de medicamentos (*target drugs*), en los que el cuerpo humano es el entorno para la liberación de medicina cuya dosificación se fundamenta en mecanismos de *feedback* por parte del órgano objetivo.

A partir de las numerosas investigaciones en el mundo de las CM, han surgido varios elementos para su análisis teórico, simulación y experimentación, entre los que se encuentran:

— MolComML (*Molecular Communications Markup Language*).
— SBML (*Systems Biology Markup Language*).
— SBOL (*Synthetic Biology Open Language*).

— CellML.
— NeuroML.
— BiNS2 (*Biological and Nano-Scale Communication Simulator*).
— N3Sim.
— CalComSim.
— COMSOL Multiphysics.
— NS-2 y NS-3.
— BNSim.
— NCSim (*Bacteria Nanonetworks*).
— HLA Simulator.
— TouchCom.

En este entorno heterogéneo, el IEEE (*Institute of Electrical and Electronics Engineers*) ha intentado homogenizar y organizar el estudio, simulación y experimentación en CM, con el fin de establecer un enfoque para unificar esfuerzos en la investigación teórico-práctica y de una herramienta de simulación subyacente. Es así que se han propuesto los estándares de nanocomunicaciones IEEE 1906.1 y 1906.1.1. El estándar IEEE 1906.1 (aprobado en 2015) establece un modelo conceptual y terminología estándar para la comunicación

a. Definición de redes de comunicación a nanoescala.
b. Definición de canales de comunicación a nanoescala, cuya operación determina diferencias fundamentales con respecto a un canal a macro escala.
c. Definición de interfaces abstractas de canales de comunicación a nanoescala.
d. Métricas de rendimiento comunes a las redes de comunicación *ad hoc* y moleculares, a nanoescala.
e. Mapeo entre las redes de comunicación tradicionales y aquellas a nanoescala, incluyendo componentes de alto nivel, con el propósito de definir componentes significativos como codificación y paquetes (o *PDUs-Protocol Data Units* en general), direccionamiento, enrutamiento, localización, estratificación y confiabilidad.

de redes inalámbricas y moleculares a nanoescala. Tal estándar proporciona: Por su parte, el estándar IEEE 1906.1.1 (aprobado en 2020) establece un modelo de datos YANG (*Yet Another Next Generation*) común para los sistemas de comunicación a nanoescala descritos por su predecesor. YANG define una serie de módulos que describen los sistemas de comunicación a nanoescala y sus cantidades físicas asociadas (un marco común para todas las tecnologías de comunicación a nanoescala). Para la operación remota y el estudio de los sistemas de comunicación a nanoescala, el modelo especifica la configuración y gestión remotas, lo que permite una interpretación compartida de datos de una amplia gama de medios y tecnologías de comunicación a nanoescala. Las dos versiones de los estándares de IEEE especifican a NS-3 (*Network Simulator-3*) como herramienta de simulación.

Teniendo en cuenta lo expuesto, en este libro se analizan a profundidad, los estándares de nanocomunicaciones moleculares definidos por IEEE, propendiendo a aportar a la difusión de obras científicas de CM en nuestro idioma; así, los contenidos de esta obra se han organizado de la siguiente manera:

En el Capítulo 1 se introduce al lector en las CM, su importancia y su relación con los estándares de nanocomunicaciones de IEEE.

En el Capítulo 2 se estudian los parámetros de transmisión que rigen los sistemas de CM (desde un enfoque, fundamentalmente, de capa física ISO/OSI), y son necesarios para comprender la transferencia de información en el Capítulo 3.

En el Capítulo 3 se detallan los estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1.

En consistencia con el contenido del libro, el presente texto requiere el conocimiento ingenieril pertinente sobre programación informática, sistemas de comunicaciones, redes de computadoras, sistemas de comunicación molecular biológicos, y el manejo de las teorías de la información, matemáticas y técnicas probabilísticas subyacentes.

Autores

CAPÍTULO 1

Introducción

En este capítulo se analizará, brevemente, las Comunicaciones Moleculares (*CM*) desde la perspectiva de las Tecnologías de la Información y Comunicación (*TIC*) que han potenciado a los sistemas biológicos moleculares (denominados, simplemente, sistemas moleculares) como sistemas de comunicación. Este paradigma comunicacional es el que se emplea en la investigación de los sistemas moleculares en el mundo entero, por lo que esta visión conceptual-técnica le permitirá al lector introducirse en el ambiente de las comunicaciones biológicas que gobiernan la transferencia de información en seres vivos. Este es el enfoque que se utiliza a lo largo del libro; adicionalmente, en este capítulo se insertan algunos conceptos que son la fuente de estudio en los otros capítulos.

1.1. Empleo de las Tecnologías de la Información para fundamentar el análisis de las Comunicaciones Moleculares

Las CM constituyen una rama muy importante de la ciencia ya que permiten comprender cómo las comunicaciones a nanoescala gobiernan la transmisión de información intra y extracelularmente. La prevención y el tratamiento (temprano) de enfermedades, así como el empleo de dispositivos (biológicos y/o electrónicos que generen alertas en procesos de monitoreo y control médico) a nivel macro-nano en el interior (y, superficialmente, en la piel) del cuerpo humano han sido posibles gracias al entendimiento de tales sistemas de comunicación nano [1]–[3].

Desde hace quince años, aproximadamente, las CM analizan la transmisión de información en las células (componentes fundamentales de los seres vivos) y cómo se comunican mediante el transporte de moléculas y su interacción. La naturaleza como "el mayor laboratorio experimental" ha orquestado el rol que cada una de tales biomoléculas ha desempeñado en forma eficiente, en un entorno cuyo transporte, mayormente, se fundamenta en las leyes de la difusión de fluidos [4]–[7]; a pesar de que este medio de transmisión molecular, desde el punto de vista comunicacional es primordialmente ruidoso, la biología ha permitido que la evolución defina seres vivos que en su interior se potencien sistemas de comunicación robustos para permitir la supervivencia de especies durante millones de años [8]–[10].

Las ciencias interdisciplinarias de la información han cimentado las bases para la colección, análisis, almacenamiento, transmisión y diseminación de la información; en tanto, las teorías de la comunicación son un subconjunto de las ciencias de la información que trata con los principios y métodos de la transferencia de información entre dos entidades. Estos campos científicos han gobernado los sistemas de comunicación desde hace décadas. Gracias a los recientes avances de la nanotecnología, los paradigmas de comunicación, rápidamente, se han desplazado desde la micro hacia la nanoescala. La nanotecnología es una de las fronteras científicas en el ámbito de la investigación en la era moderna, y se muestra como prometedora en el futuro, a pesar de los grandes desafíos que la acompañan [11]. Consecuentemente, la amalgama interdisciplinaria de las Tecnologías de la Información (*TIC*) y la nanotecnología ha posibilitado el estudio de los sistemas de comunicación molecular para caracterizar los trascendentales procesos de comunicación biológicos desde los importantes principios de las ciencias comunicacionales [12]–[16].

A diferencia del paradigma de las telecomunicaciones actuales, las CM usan moléculas como fuentes de información y señales portadoras. Los transmi-

sores biológicos o nanomáquinas biológicas[i] codifican la información en moléculas y las liberan en su entorno para su propagación hasta el receptor, este último reacciona (física y/o químicamente) con las moléculas que han arribado y, por lo tanto, se decodifica la información [17]. Las moléculas de información pueden ser proteínas, iones o hebras de ADN (Ácido Desoxirribonucleico), etcétera. Entre las moléculas que fungen como portadoras de información se encuentran los neurotransmisores, las hormonas, los motores moleculares, los virus, entre otros. En las CM tienen lugar varios procesos que difieren en la forma en la que las moléculas se propagan en su entorno desde una red de células biológicas hacia otra, como ocurre en: las señales de calcio, la difusión química, los motores moleculares, el flagelo bacteriano y la señalización en feromonas [4], [18], [19].

Como se puede notar, resulta casi inercial considerar a los sistemas biológicos como sistemas de comunicación (los que, de acuerdo al teorema de Shannon, se componen de transmisor, canal de comunicaciones y receptor) que se encuentran en todos los procesos de transferencia de información en seres vivos. Las TIC proveen los fundamentos cuantitativos para el análisis de dichos procesos de transferencia de información en entidades biológicas naturales o sintéticas [3], [20]–[24]. Los sistemas de comunicación extremo a extremo en células y biomoléculas se pueden ver como agentes de procesamiento de información, y es este procesamiento el que permite a los científicos determinar cómo se produce la señalización biológica; adicionalmente, de manera implícita este procesamiento es el resultado de la aplicación del Teorema de Shannon al mundo natural [8], [10], [25].

Un ejemplo de cómo los sistemas de comunicación actúan entre células se puede encontrar en el cuerpo humano; aquí, la propagación de información biológica se realiza, básicamente, por difusión de diversos tipos de moléculas (fuentes de información), que generan (codifican) diferentes tipos de mensajes (mediante señalización intracelular-comunicación a corta distancia o extracelular-comunicación a larga distancia) que al llegar (a través del flujo sanguíneo, impulsos nerviosos, o sinapsis cerebral) al elemento fisiológico de recepción (célula, tejido u órgano objetivo) produce una función vital para el cuerpo desde ese preciso receptor [18]. Así también, como en los sistemas de comunicación tradicionales en los que la presencia de atenuación, interferencia, ruido y distorsión genera pérdidas y problemas en la señal de información, en los sistemas de comunicación biológicos los errores en la transmisión, transporte o recepción de información pueden producir enfermedades (algunas letales) a nivel genético [26].

---

i En términos generales las nanomáquinas se conceptualizan como capaces de ejecutar una función específica a nivel nano, entre las cuales se cuentan: a) Tareas simples de cómputo, b) Almacenamiento, c) Captación (relacionada a las funciones de un sensor), d) Actuación. Las bio nanomáquinas se caracterizan adicionalmente por contar con componentes biológicos. Debido a su diminuta escala las nanomáquinas encuentran serios problemas de energía y funcionalidad, las cuales sin embargo se pueden solventar mediante la conectividad de nanomáquinas en redes [11], [16].

1.2 Tipos de Comunicaciones Moleculares

Los diferentes tipos de CM y sus sistemas subyacentes que definen el transporte de las moléculas (y por consiguiente la transferencia de información en el canal de comunicación) se dividen en las siguientes categorías [27]–[29]:

1. Transporte activo.
2. Transporte por advección.
3. El transporte en el que las moléculas se desplazan aleatoriamente[ii] se divide en dos, el primero se denomina movimiento aleatorio, propiamente. Además, la segunda clase en el transporte aleatorio de moléculas es el que ocasiona el movimiento aleatorio con arrastre.

En el transporte activo se encuentran, por ejemplo, los motores moleculares que establecen caminos predefinidos que conectan al transmisor con el receptor. Los motores moleculares son filamentos de proteínas que convierten la energía química en cinética, y son la base para la generación de fuerza en elementos biológicos como los músculos. En este tipo de transporte, las moléculas de información se encapsulan en una carga, la cual, mediante el motor proteico (dineina y kinesina) se empuja hacia el destino molecular, siempre a través del camino establecido previamente entre los extremos de transmisión. Al ser transporte activo, para su funcionalidad requiere de energía química o TFA (Trifosfato de Adenosina) [30], [31].

En el transporte por advección, las moléculas se propagan a través de difusión en el fluido que las circunda; consecuentemente, esta clase de transporte es definido y predecible. La advección en CM puede utilizar también entidades portadoras cuyo movimiento se limita al confín de caminos específicos, a pesar de que muestra cierto componente de movimiento aleatorio. Un claro ejemplo de este tipo de transporte se despliega en la quimiotaxis, en la que el flagelo bacteriano (que contiene información codificada en las moléculas de su ADN) es liberado por un transmisor y se guía a una navegación que le llevará hasta el receptor; en tanto, este último, de forma continua, secreta sustancias de atracción molecular. También las uniones GAP se cuentan en este tipo de movimiento molecular [30], [31].

En el transporte por difusión propiamente (movimiento aleatorio), las moléculas se propagan o difunden espontáneamente en el medio (por lo general, líquido) en el que se encuentran, recorriendo el camino que les permitirá llegar al receptor mediante trayectorias que obedecen al movi-

ii Las aplicaciones de tipo natural o sintético se ven limitadas debido al nivel de ISI (Inter Symbol Interference) presente en el movimiento aleatorio y también se establece una limitación en la velocidad de transmisión [11].

miento Browniano, produciendo un alto grado de incertidumbre (no confiabilidad) en el receptor, en comparación a otros tipos de movimiento. Esta clase de movimiento se considera completamente pasivo; es decir, no requiere de energía adicional para producir la propagación. Este tipo de movimiento molecular es el más generalizado y común en la naturaleza; así, se tienen ejemplos presentes en las señales de calcio entre células, en los procesos bacterianos de detección de quórum, y en las transmisiones sinápticas entre neuronas, etcétera [30]–[33].

Cuando existe una fuerza que provoca una influencia externa en el movimiento de las moléculas, se trata del movimiento aleatorio con arrastre, típico en el transporte hormonal mediante el flujo sanguíneo, los sistemas de micro-fluidos y comunicaciones mediante feromonas. El arrastre denota un mayor grado de confiabilidad al llegar las moléculas de información al receptor, mejorando, notablemente, la capacidad del canal de comunicaciones molecular, porque el arrastre, en sí, otorga una velocidad que facilita el movimiento y disminuye la interferencia conocida como ISI (*Inter Symbol Interference*) [30]–[33].

1.3. Estándares de protocolos de Comunicaciones Moleculares IEEE 1906.1 y 1906.1.1

Teniendo en cuenta el soporte comunicacional de los párrafos precedentes, se debe indicar que, en la actualidad, existen muchas plataformas de simulación para CM, así como protocolos de comunicación de diferentes capas de la arquitectura TCP/IP (*Transmission Control Protocol/Internet Protocol*) que se emulan en escenarios biológicos. Con tales antecedentes, el Instituto de Ingenieros Eléctricos y Electrónicos IEEE (*Institute of Electrical and Electronics Engineers*) ha definido, a través de sus dos estándares 1906.1 y 1906.1.1, un modelo teórico y una plataforma de simulación que se sustenta en NS-3 (*Network Simulator-3*) para sistemas de nanocomunicaciones, dicho modelo, inspirado por la biología extiende el marco teórico de las TIC al mundo de las redes de comunicaciones al nivel nano.

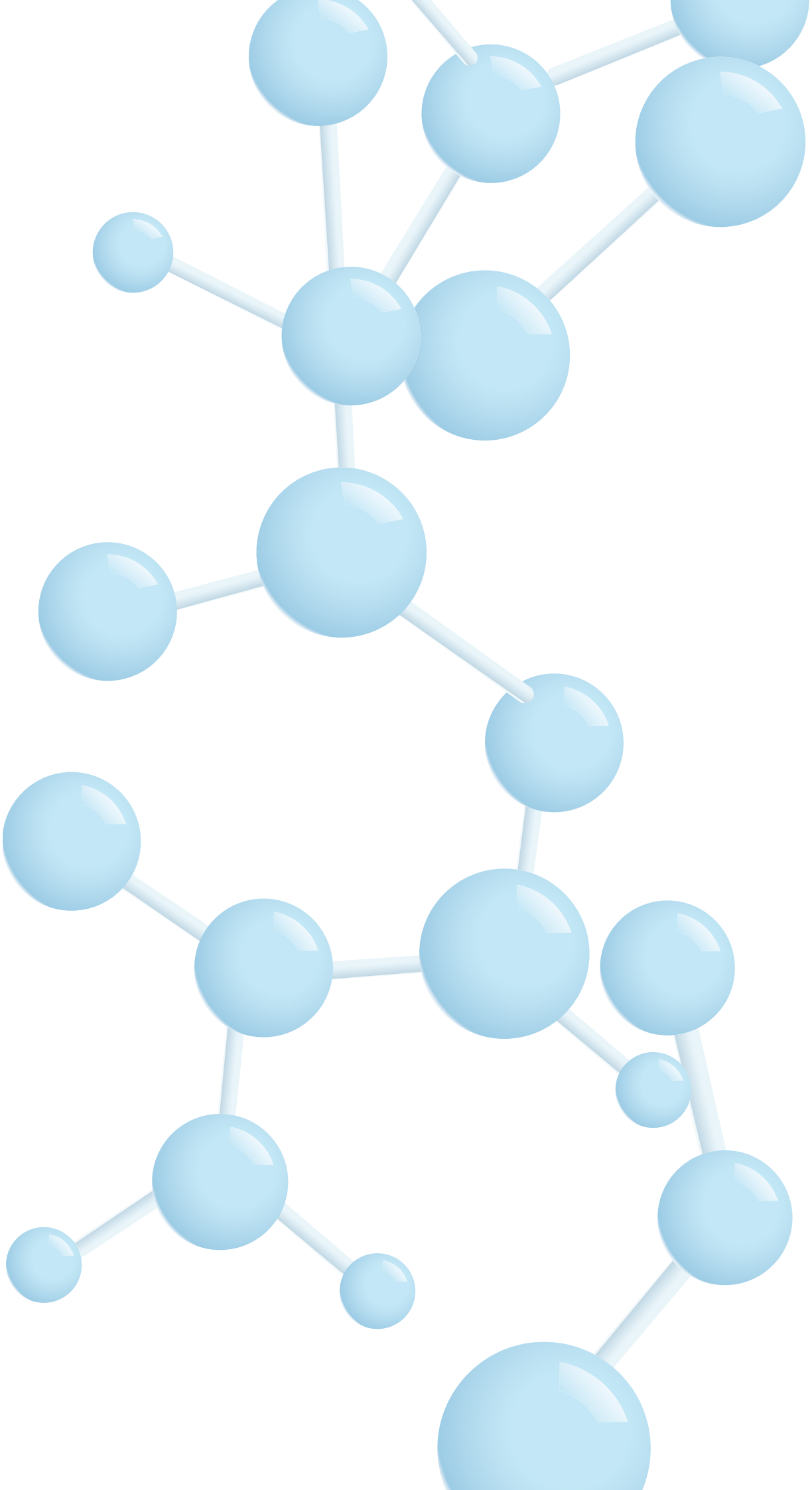
En su primera versión (aprobada en 2015 [34]), IEEE 1906.1 recomienda aspectos comunicacionales genéricos para redes guiadas, *ad hoc*, y moleculares a nanoescala, y define un modelo conceptual que incluye [2]:

a. Definición de nanoredes de comunicación.
b. Terminología común para nanoredes de comunicación.
c. Definición a nanoescala de canales de comunicación, diferenciándolos de sus contrapartes macro.
d. Abstracción de interfaces del canal de comunicación en sistemas de comunicación nano.
e. Métricas de rendimiento para nanoredes.
f. Mapeo entre redes de comunicación convencionales y aquellas al nivel nano, considerando, explícitamente, codificaciones, estructuras de información, direccionamiento, ruteo, localización, funciones entre capas del modelo ISO/OSI (*International Organization of Standardization/Open System Interconnection*) y parámetros de confiabilidad.

Según [2], [34], un modelo común abstracto (establecido en el estándar IEEE 1906.1) habilita la posibilidad teórica de procesar la información en función de un lenguaje común, de forma independiente de la disciplina científica desde la que se analice. Entonces, como la industria se interesa más en una integración comercial de la tecnología, la estructura abstracta establecida por el estándar sirve como fundamento general recomendable para la practicidad de comunicaciones a nanoescala u otros estándares; así, por ejemplo, teniendo en cuenta que la industria biomédica requiere estándares al nivel nano para generar diagnósticos y metodologías convenientes para los tratamientos, dichos procesos se pueden encaminar, adecuadamente, con el aporte de la abstracción definida en el estándar.

De acuerdo con [2], [35], a finales del año 2020 se aprueba una nueva versión de IEEE para un estándar de comunicaciones nano, y así aparece la versión 1906.1.1, que establece un modelo de información YANG (*Yet Another Next Generation*) para la puesta en marcha del modelo conceptual definido en el estándar 1906.1. En concordancia con su predecesor, el estándar 1906.1.1 define una serie de módulos que describen sistemas de nanocomunicaciones y los parámetros que permiten su cuantificación. El modelo YANG puntualiza la física detrás de una transmisión a nanoescala de su predecesor. Para procesos nano, ejecutados en forma remota, YANG especifica formatos de configuración y gestión, además de describir la estructura de la información, permitiendo una interpretación compartida desde un amplio rango de medios de comunicación y tecnologías asociadas, mediante:

a. Soporte de los requerimientos que conforman el estándar IEEE 1906.1.
b. Descripción de sistemas a nanoescala.
c. Representación de la física fundamental generada en los procesos del estándar IEEE 1906.1.
d. Definición, configuración y gestión de las simulaciones en NS-3 y su análisis pertinente.
e. Definición de una autodescripción de la estructura de datos que se emplean en repositorios de nanocomunicaciones experimentales.



Referencias bibliográficas

[1] J. Simonjan, B. D. Unluturk, and I. F. Akyildiz, "In-body Bionanosensor Localization for Anomaly Detection via Inertial Positioning and THz Backscattering Communication," *arXiv Prepr. arXiv2108.13747*, 2021.

[2] Y. Cevallos *et al.*, "Theoretical Basis for Gene Expression Modeling Based on the IEEE 1906.1 Standard," in *International Conference on Bio-inspired Information and Communication Technologies,* 2021, pp. 145–162.

[3] A. Zadeh Shirazi *et al.*, "The Application of Deep Convolutional Neural Networks to Brain Cancer Images: A Survey," *J. Pers. Med.*, vol. 10, no. 4, p. 224, 2020.

[4] N. Farsad, "Molecular communication: Interconnecting tiny nanobio devices," *GetMobile Mob. Comput. Commun.*, vol. 22, no. 2, pp. 5–10, 2018.

[5] M. \cSükrü Kuran, H. B. Yilmaz, I. Demirkol, N. Farsad, and A. Goldsmith, "A survey on modulation techniques in molecular communication via diffusion," *IEEE Commun. Surv. Tutorials*, vol. 23, no. 1, pp. 7–28, 2020.

[6] M. Kuscu, E. Dinc, B. A. Bilgin, H. Ramezani, and O. B. Akan, "Transmitter and receiver architectures for molecular communications: A survey on physical design with modulation, coding, and detection techniques," *Proc. IEEE,* vol. 107, no. 7, pp. 1302–1341, 2019.

[7] T. Nakano, M. J. Moore, F. Wei, A. V Vasilakos, and J. Shuai, "Molecular communication and networking: Opportunities and challenges," *IEEE Trans. Nanobioscience*, vol. 11, no. 2, pp. 135–148, 2012.

[8] K. R. Pilkiewicz, P. Rana, M. L. Mayo, and P. Ghosh, "Molecular Communication and Cellular Signaling from an Information-Theory Perspective," *Nanoscale Netw. Commun. Handb.*, p. 235, 2019.

[9] D. Bi, A. Almpanis, A. Noel, Y. Deng, and R. Schober, "A Survey of Molecular Communication in Cell Biology: Establishing a New Hierarchy for Interdisciplinary Applications," *arXiv e-prints*, p. arXiv--2009, 2020.

[10] N. Dalchau *et al.*, "Computing with biological switches and clocks," *Nat. Comput.*, vol. 17, no. 4, pp. 761–779, 2018.

[11] O. B. Akan, H. Ramezani, T. Khan, N. A. Abbasi, and M. Kuscu, "Fundamentals of molecular information and communication science," *Proc. IEEE*, vol. 105, no. 2, pp. 306–318, 2016.

[12] Y. Cevallos *et al.*, "Modelamiento comunicacional de la expresión genética y el transporte de prote{\'\i}nas mediante un sistema de transmisión digital extremo a extremo," 2022.

[13] G. Naik, Ed., *Biomedical Signal Processing: Advances in Theory, Algorithms and Applications*. Singapore: Springer Singapore, 2020. doi: 10.1007/978-981-13-9097-5.

[14] G. Bergtrom, *Basic cell and molecular biology 3e: what we know and how we found out*. 2018. Accessed: Oct. 22, 2020. [Online]. Available: https://open.umn.edu/opentextbooks/textbooks/244

[15] T. Nakano, A. W. Eckford, and T. Haraguchi, *Molecular communication*. Cambridge University Press, 2013.

[16] L. Rushton, *The endocrine system*. Infobase Publishing, 2009.

[17] D. B. Menendez, V. R. Senthivel, and M. Isalan, "Sender--receiver systems and applying information theory for quantitative synthetic biology," *Curr. Opin. Biotechnol.*, vol. 31, pp. 101–107, 2015.

[18] D. C. Ferreira, L. P. Reis, and N. V. Lopes, "A nanocommunication system for endocrine diseases," *Cluster Comput.*, vol. 20, no. 1, pp. 689–706, 2017.

[19] I. F. Akyildiz, F. Fekri, R. Sivakumar, C. R. Forest, and B. K. Hammer, "Monaco: fundamentals of molecular nano-communication networks," *IEEE Wirel. Commun.*, vol. 19, no. 5, pp. 12–18, 2012.

[20] Y. Cevallos, L. Molina, A. Santillán, F. De Rango, A. Rushdi, and J. B. Alonso, "A digital communication analysis of gene expression of proteins in biological systems: A layered network model view," *Cognit. Comput.*, vol. 9, no. 1, pp. 43–67, 2017.

[21] Y. Cevallos, L. Tello-Oquendo, D. Inca, C. Palacios, and L. Renter\'\ia, "Genetic Expression in Biological Systems: A Digital Communication Perspective," *Open Bioinforma. J.*, vol. 12, no. 1, 2019.

[22] Y. Cevallos, L. Tello-Oquendo, D. Inca, D. Ghose, A. Z. Shirazi, and G. A. Gomez, "Health Applications Based on Molecular Communications: A Brief Review," in *2019 IEEE International Conference on E-health Networking, Application & Services (HealthCom)*, 2019, pp. 1–6.

[23] Y. Cevallos *et al.*, "On the efficient digital code representation in DNA-based data storage," in *Proceedings of the 7th ACM International Conference on Nanoscale Computing and Communication*, 2020, pp. 1–7.

[24] Y. Cevallos *et al.*, "A brief review on DNA storage, compression, and digitalization," *Nano Commun. Netw.*, p. 100391, 2021.

[25] T. Nakano, M. Moore, A. Enomoto, and T. Suda, "Molecular communication technology as a biological ICT," in *Biological functions for information and communication technologies*, Springer, 2011, pp. 49–86.

[26] Y. Cevallos *et al.*, "Modeling Gene Expression and Protein Delivery as an End-to-End Digital Communication System," *Open Bioinforma. J.*, vol. 14, no. 1, 2021.

[27] I. F. Akyildiz, M. Pierobon, and S. Balasubramaniam, "An information theoretic framework to analyze molecular communication systems based on statistical mechanics," *Proc. IEEE*, vol. 107, no. 7, pp. 1230–1255, 2019.

[28] I. F. Akyildiz, M. Pierobon, and S. Balasubramaniam, "Molecular Communications and Networking [Scanning the Issue]," *Proc. IEEE*, vol. 107, no. 7, pp. 1227–1229, 2019.

[29] I. F. Akyildiz, M. Pierobon, and S. Balasubramaniam, "Moving forward with molecular communication: From theory to human health applications [point of view]," *Proc. IEEE*, vol. 107, no. 5, pp. 858–865, 2019.

[30] M. Pierobon, "Fundamentals of diffusion-based molecular communication in nanonetworks," Georgia Institute of Technology, 2013.

[31] A. Gohari, M. Mirmohseni, and M. Nasiri-Kenari, "Information theory of molecular communication: Directions and challenges," *IEEE Trans. Mol. Biol. Multi-Scale Commun.*, vol. 2, no. 2, pp. 120–142, 2016.

[32] J. Wang, M. Peng, Y. Liu, X. Liu, and M. Daneshmand, "Performance Analysis of Signal Detection for Amplify-and-Forward Relay in Diffusion-Based Molecular Communication Systems," *IEEE Internet Things J.*, vol. 7, no. 2, pp. 1401–1412, 2019.

[33] M. C. Gursoy, M. Nasiri-Kenari, and U. Mitra, "Towards High Data-Rate Diffusive Molecular Communications: Performance Enhancement Strategies," *arXiv Prepr. arXiv2101.02869*, 2021.

[34] "IEEE Standard Data Model for Nanoscale Communication Systems," *IEEE Std 1906.1.1-2020*, pp. 1–142, 2020, doi: 10.1109/IEEESTD.2020.9285373.

[35] S. F. Bush, "Interoperable nanoscale communication [future directions]," *IEEE Consum. Electron. Mag.*, vol. 6, no. 2, pp. 39–47, 2017.

CAPÍTULO 2

Sistemas de Comunicación Molecular

Teniendo en cuenta que en el capítulo anterior se fundamentó en el empleo de las tecnologías comunicacionales como herramientas para describir y cuantificar los parámetros comunicacionales de los sistemas de CM (Comunicaciones Moleculares) también denominados sistemas de comunicación biológicos o sistemas biológicos, en el presente capítulo se analizarán los componentes de un sistema de comunicación molecular desde la perspectiva fundamental del teorema de Shannon. Consecuentemente, se caracterizarán a los sistemas moleculares a través de los tres componentes básicos que integran los sistemas de comunicaciones, transmisor, canal de transmisión y receptor.

Como resultado del uso del paradigma comunicacional de Shannon, los sistemas de comunicación molecular (así como sus contrapartes convencionales) se estudiarán en presencia de factores limitantes (atenuación) y contaminantes (interferencia, ruido y distorsión) en el canal de comunicación. Adicionalmente, se discutirán, brevemente, los diferentes tipos de transmisores y receptores moleculares, técnicas de modulación biológicas al nivel nano y se establecerá la capacidad del canal de comunicaciones.

El análisis de los elementos comunicacionales realizado en este capítulo es fundamental para comprender cómo se utilizan tales componentes en el ámbito de las CM en general, y en particular en estándares, lenguajes y simuladores de CM.

2.1. Componentes de un sistema de Comunicación Molecular

Un sistema de CM se define como un conjunto natural y/o sintético de componentes que cooperan para producir el transporte de información desde una fuente (generadora de moléculas de información) que codifica dicha información (a través de propiedades físico/químicas) y la emite desde el transmisor; este último propaga la información por el canal de comunicaciones (en el cual las propias moléculas actúan como señales portadoras), y por diversos tipos de movimientos moleculares esta llega hasta el receptor, el cual decodifica las moléculas para obtener la información enviada desde el extremo que la origina [1]–[5]. En la Figura 2.1 [1] se observan los bloques constitutivos del proceso de comunicación en mención y también se visualizan algunos tipos de transporte que permiten la propagación de las moléculas en el canal de transmisión. Dicha comunicación se explica en los siguientes párrafos mediante cinco fases [1], [6]–[8]:

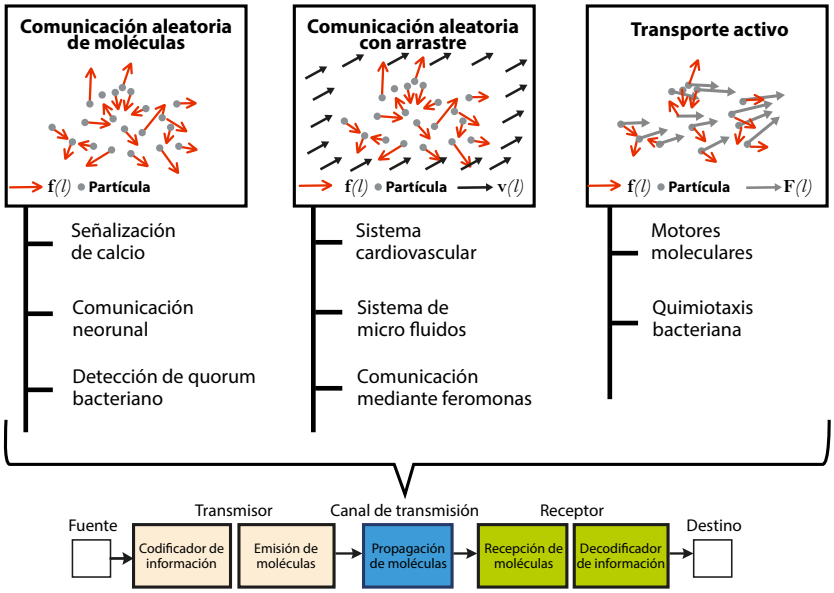


Figura 2.1. Diagrama de bloques de los elementos que componen un sistema de comunicación molecular, en el que se observan los tipos de transporte en el canal de comunicaciones.

1. *El bloque codificador (o modulador)* se encarga de producir variaciones en las propiedades de las moléculas de acuerdo a la fuente de información $X(t)$ de señales dependientes del tiempo $t = tk,\ k \in \mathcal{N}$ en forma continua o discreta. Tales propiedades se pueden clasificar en dos categorías principales; intensivas y extensivas [1], [6]–[8].

Las propiedades intensivas no dependen de la cantidad de moléculas, sino de su composición química y de su estructura, concentración, densidad, presión o temperatura. En cambio, las propiedades extensivas son proporcionales a la cantidad de moléculas; así, será de fundamental importancia su número, masa, volumen de ocupación, entalpía o entropía. Algunas propiedades intensivas se pueden asignar a una sola molécula; por ejemplo: temperatura, composición química y estructura; otras se derivan de la relación entre dos propiedades extensivas, por ejemplo: concentración o densidad. Algunas de esas propiedades son continuas, como en el caso de la concentración (en gran número) o temperatura; mientras otras son discretas, por ejemplo: número de moléculas, composición química y estructura. La codificación de la información produce como resultado valores de estas propiedades como función de la fuente de información $X(t)$[1], [6]–[8].

Los resultados de la codificación de la información producen valores de esas propiedades como función de la fuente de información $X(t)$. Consecuentemente, la codificación de una propiedad intensiva (cuyo nombre de función se tomará del inglés Intensive) que puede ser asignada a una sola molécula se formaliza por [1], [6]–[8]:

$$Int_{z,n}(X(t)) = A_z(X(t)) \tag{2.1}$$

Donde $A_z(\cdot)$ es la función de codificación para el z-*ésimo* elemento de la propiedad intensiva, el cual determina la propiedad intensiva para la n-*ésima* molécula.

En tanto, la codificación de una propiedad extensiva se puede formalizar como [1], [6]–[8]:

$$Ext_{z,m}(X(t)) = b_m\big(n_z(t)\big), \quad n_z(t) = \quad C_z(X(t)) \tag{2.2}$$

Donde b_m es una constante de proporcionalidad para la m-*ésima* propiedad extensiva, $n_z(t)$ es el número de moléculas con idéntica propiedad intensiva $A_z(X(t))$ en el transmisor al tiempo t, y $C_z(X(t))$ es una función de la fuente de información $X(t)$[1], [6]–[8].

Una de las propiedades intensivas más utilizadas, denominada concentración de la sustancia (caracterizada por moléculas con la propiedad intensiva z correspondiente a una composición y estructura específica) se puede obtener dividiendo el número de moléculas $n_z(t)$para el número de su volumen ocupado $Ext_{z,m}(X(t))$, donde m denota un volumen específico ocupado [1], [6]–[8].

2. *La transmisión de la información* consiste en la liberación de moléculas portadoras (que son las mismas moléculas de información) en el medio que las circunda. En un sistema de comunicación molecular el proceso referido corresponde al movimiento de las moléculas en sí, el cual se define por ciertas propiedades que particularizan los

diferentes tipos de transporte, y cada una de las características de dicho transporte establece la forma de codificación de la señal de información. Los modelos comunicacionales en CM que se asemejan a la realidad de la física de transporte de moléculas incluyen efectos debido a la difusión, evaporación, dilución, ósmosis/diálisis, gradientes de presión, encapsulación, o la liberación de vesículas/reservorios, expresados como [1], [6]–[8]:

$$p_n(t_n) \in S_T \quad \forall t_n, n : N_T(t_n) > 0, \qquad n \in \mathcal{N}_T(t_n) \tag{2.3}$$

Donde $N_T(t_n) = \sum_z z(t_n)$ corresponde al número de moléculas que se emiten en el tiempo t_n en el transmisor, y $NT(t)$ es el conjunto que contiene todos los índices de las partículas transferidas desde 0 al tiempo t [1], [6]–[8].

$$\mathcal{N}_T(t) = \left\{ \int_0^{t'} N_T(\tau)\, d\tau \middle| 0 < t' < t \right\} \tag{2.4}$$

3. *La propagación* es el mecanismo mediante el cual las moléculas de información se desplazan en su entorno y llegan hasta el receptor. Un sistema de CM es inevitablemente afectado por el movimiento Browniano, o movimiento estocástico (en el caso de la Figura 2.1 esto produce que la partícula se encuentre en cierta ubicación variable l, por lo que se describe matemáticamente con $f(l)$) [1], [6]–[8].

   También existe el movimiento con arrastre; es decir, aquel en el que se tiene un fluido con cierta velocidad (en el caso de la Figura 2.1, esto produce que la partícula se encuentre en cierta ubicación variable l, por lo que se describe matemáticamente con $f(l)$ y depende de la velocidad $v(l)$). Por otra parte, está el movimiento en el que se ejerce una fuerza sobre la partícula para guiar específicamente dicho movimiento (en el caso de la Figura 2.1 [1] esto produce que la partícula se encuentre en cierta ubicación variable l por lo que se describe matemáticamente con $f(l)$ y depende de la presencia de la fuerza $F(l)$) . En ambos casos, la existencia de la aleatoriedad es menos común que en el movimiento estocástico, pero siempre presente en cada una de las n moléculas del fluido [1], [6]–[8].

   De forma independiente de la particularidad de cada movimiento, se puede caracterizar el desplazamiento espacial desde la localización $p_n(t_n)$ en el extremo de transmisión hasta la localización $p_n(t_n + \Delta T)$ al tiempo $t_n + \Delta T$ [1], [6]–[8]:

$$p_n(t_n) \rightarrow p_n(t_n + \Delta T) \quad \forall\, n \in \mathcal{N}_T(t_n) \tag{2.5}$$

   Donde ΔT representa un tiempo arbitrario de llegada.

4. *La recepción de información* en un sistema de CM sucede mediante la detección de las moléculas que arriban al receptor; esta recepción, comúnmente, ocurre por reacciones químicas entre las moléculas portadoras de información y aquellas que se encuentran presentes en el receptor mismo; como, por ejemplo, a través de receptores químicos ubicados en el confín del receptor o en los límites espaciales S_R en el receptor. Posteriormente, las moléculas arribadas se pueden separar de los receptores químicos del receptor y ser degradadas (absorbidas) o reasumir su propagación (no absorción). El conjunto de moléculas recibidas en el extremo destino N_R de la transmisión al tiempo $t > t_n$ se representan como [1], [6]–[8]:

$$N_R(t) = \{n | p_n(t) \in S_R\} \tag{2.6}$$

5. *La decodificación de la información* corresponde a los procesos de demodulación de los sistemas de comunicación tradicionales. La decodificación se realiza para obtener la información que se transfiere desde el extremo de transmisión; la cual, como sus contrapartes convencionales puede incluir efectos adversos en la señal recibida como ruido y errores. Entre otras causas, los errores son el resultado de las colisiones entre moléculas, así como de reacciones químicas indeseadas. Al considerar el resultado de múltiples (diferentes) receptores, en una formulación general en la que las propiedades intensivas y extensivas se emplean para codificar la información desde la fuente $X(t)$, la recepción de información estaría compuesta de los valores estimados $\widehat{Int_z(t)}$ y $\widehat{Ext_m(t)}$ de tales propiedades y se podrían expresar como [1], [6]–[8]:

$$\widehat{X_{z,n}}(t) = A_z^{-1}\left(\widehat{Int_z(t)}\right) \tag{2.7}$$

$$\widehat{X_{z,m}}(t) = \frac{\widehat{Ext_m(t)}}{b_m} \tag{2.8}$$

Donde $\widehat{X_{z,n}}(t)$ y $\widehat{X_{z,m}}(t)$ son los valores estimados de la fuente de información $X(t)$ de la z-*ésima* propiedad intensiva de la molécula recibida n y de la m-*ésima* propiedad extensiva de las moléculas. Siendo $A_z^{-1}(\cdot)$ la inversa de la función de codificación $A_z(\cdot)$ para de la z-*ésima* propiedad intensiva, y b_m es la constante de proporcionalidad definida en la Ecuación 2.2. La señal recibida $Y(t)$ se obtiene de $\widehat{X_{z,n}}(t)$ y $\widehat{X_{z,m}}(t)$. Las expresiones en las Ecuaciones 2.7 y 2.8 son generales y, por lo tanto son válidas para cualquier esquema posible de codificación definido por las propiedades moleculares. Un ejemplo con relación al tema es aquel en el que la información se codifica en nucleótidos de diferentes hebras de ADN (Ácido Desoxirribonucleico) en el caso que la misma

fuente de información ha codificado las moléculas mediante las propiedades intensivas y extensivas, las moléculas en el extremo destino se puede obtener [1], [6]–[8]:

$$Y(t) = \frac{1}{L}\sum_{z=1}^{L}\left(\sum_{n=1}^{N_R(t)}\frac{\widehat{X_{z,n}(t)}}{N_R(t)} + \sum_{m=1}^{M}\frac{\widehat{X_{z,m}(t)}}{M}\right) \tag{2.9}$$

Donde se ha promediado el número total de L propiedades intensivas usadas para la codificación de la señal fuente de información $X(t)$. Para las propiedades intensivas se ha promediado el número de moléculas recibidas $N_R(t)$ al tiempo t; también tal promedio ha empleado M propiedades extensivas [1], [6]–[8].

En la Figura 2.2 [6] se visualizan dos casos de sistemas de CM; en la parte superior se encuentra el proceso extremo a extremo de CM en el que las moléculas parten desde el transmisor y llegan a su destino mediante movimiento Browniano. En la parte inferior de la Figura 2.2 [6], la comunicación extremo a extremo se define para el caso de transporte activo mediante motores moleculares. Los dos casos podrían ser equivalentes a los sistemas de comunicación tradicionales a través de medios de transmisión inalámbricos y alámbricos respectivamente [1], [6]–[8].

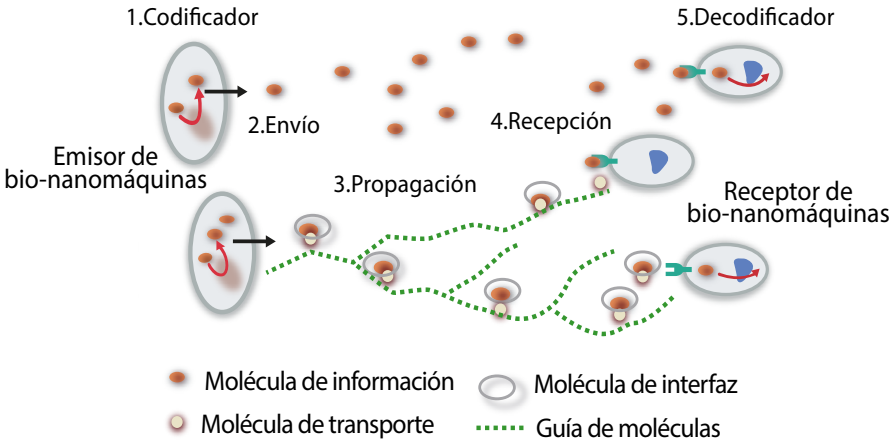


Figura 2.2. Arquitectura de un sistema de comunicación molecular como contraparte de comunicaciones no guiadas y guiadas en telecomunicaciones.

2.2. Efectos contaminantes y limitantes en el canal de Comunicación Molecular

Las CM son un tipo de comunicaciones en el entorno de lo que se denomina bio-inspiración que posibilita la transmisión de información entre dispositivos a escalas macro-nano.

Como cualquier otro tipo de sistema de comunicación, los sistemas de CM son propensos a sufrir severos problemas causados por efectos limitantes como la atenuación, y por efectos contaminantes entre los que se encuentran la dispersión, el retardo, el ruido y la interferencia, lo que degrada la calidad de la información y establece límites en la distancia del enlace de comunicación [5], [9], [10].

El ruido que produce daño en la señal de información molecular, degradándola, es un elemento siempre presente en CM, causado por fuentes de origen bioquímico, térmico y físico (debido a la naturaleza estocástica del movimiento molecular propiamente); el ruido, entonces, puede ser ocasionado por la difusión en el movimiento molecular Browniano, emisiones desde el transmisor contaminadas por ruido en sí, recepción errónea de moléculas en el destino, y degradación por reacción química indeseada en el canal de comunicaciones [6], [11]. La interferencia (la misma que se puede controlar a través de una velocidad de transmisión apropiada) es el resultado de la presencia, en el canal de transmisión, del remanente de la señal de información transmitida en un intervalo de tiempo previo (característica de la cola alargada de una curva de Gauss que gobierna la propagación de información molecular visualizada en las Figuras 2.3 a 2.5) [12], [13]. Asimismo, la atenuación constituye una seria dificultad en CM y se relaciona con las características físicas del medio en el que las moléculas se propagan y que impide el normal transporte molecular [6].

Cuando se trata de CM mediante el movimiento Browniano la latencia se define mediante la función de probabilidad de la señal [6]:

$$f(t) = \begin{cases} 0 & (t = 0) \\ \dfrac{d}{\sqrt{4\pi D t^3}} exp\left(-\dfrac{d^2}{4Dt}\right) & (t > 0) \end{cases} \tag{2.10}$$

Donde D es el coeficiente de difusión del medio, d es la distancia del enlace molecular y t es el tiempo en la transmisión. La figura 2.3 exhibe la función de densidad de probabilidad de la latencia para varias distancias, y demuestra que la latencia se ve afectada enormemente por la distancia [6].

El promedio de la latencia para una nanomáquina en el receptor, en cualquier punto espacial es infinita $\left(\int_0^\infty tf(t)dt = \infty\right)$, lo cual indica que el receptor esperaría infinitamente el arribo de una nanomáquina y, a través de ella, la información molecular correspondiente. El jitter (variación de la latencia) también es infinito; las pérdidas en la velocidad de transmisión se pueden calcular a partir de $1 - \int_0^T f(t)dt$, asumiendo que una nanomáquina en el receptor tiene un tiempo de espera T. La calidad del enlace molecular difiere significativamente si el entorno de propagación es cerrado. La Figura 2.4 muestra la función de probabilidad de masa $p(t)$ de la latencia (t) obtenida mediante simulaciones en el rango de distancia $[0, d]$, en este caso el promedio de la latencia es igual a $\frac{d^2}{2D}$, el jitter corresponde a $\sum_{i=0}^{\infty}\left(i\Delta - (d^2/2D)\right)^2 p(i\Delta)$, donde Δ es la longitud de los pasos definidos en la simulación. La pérdida de la tasa de transmisión viene dada por $1 - \sum_{i=0}^{T} p(i\Delta)$ si una nanomáquina en el receptor espera el tiempo T [6].

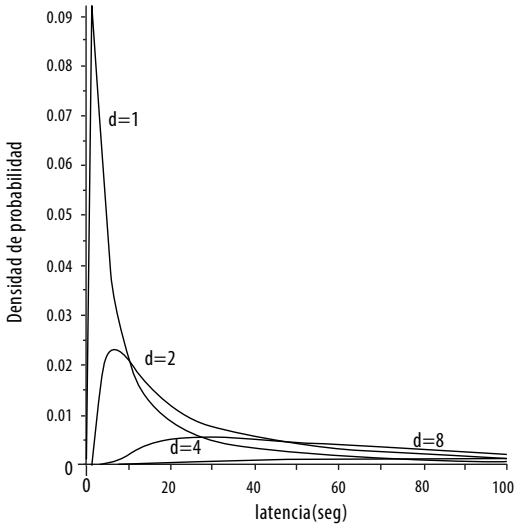


Figura 2.3. Función de densidad de probabilidad de la latencia en el intervalo semi-infinito $(-\infty; d]$ para varios nanotransmisores-receptores separados a distancias $d = \{1, 2, 4, 8\}$ (μm), y con un coeficiente de difusión $D = 0{,}1$ $(\mu m^2/s)$ [6].

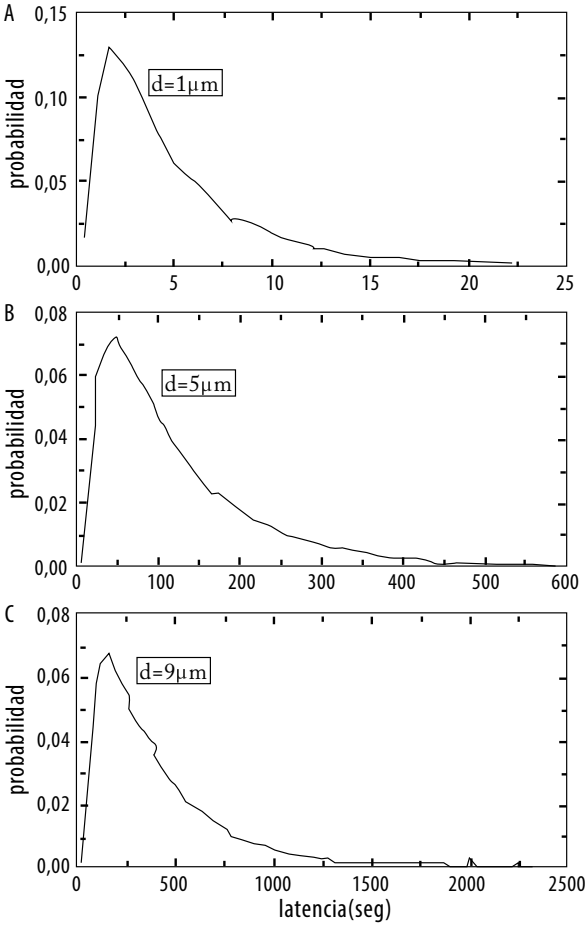


Figura 2.4. Función de probabilidad de masa de la latencia en un intervalo finito $[0\ ;\ d]$ para varias distancias $d = \{1,5,9\}\ (\mu m)$, y con un coeficiente de difusión $D = 0{,}1\ (\mu m^2/s)$ [6].

En el caso de que la transmisión molecular se realice con transporte aleatorio con arrastre, las moléculas de información sufren la fuerza que les propaga a la dirección específica por el arrastre. Un ejemplo de este tipo de movimiento nano se encuentra en el cuerpo humano, en donde las células secretan hormonas que se transportan en el sistema circulatorio hasta los órganos correspondientes. Esta clase de CM representa una forma de transporte activo que sucede cuando una molécula se propaga en un medio que se modela como un intervalo semi-finito (-∞; d], y la función de densidad de probabilidad de la latencia viene dada por [6]:

$$f(t) = \begin{cases} 0 & (t = 0) \\ \dfrac{d}{\sqrt{4\pi D t^3}} exp\left(-\dfrac{(d - vt)^2}{4Dt}\right) & (t > 0) \end{cases} \tag{2.11}$$

Donde $v \geq 0$ es la velocidad de arrastre del medio. La Figura 2.5 indica la densidad de probabilidad de la latencia para $v > 0$ y demuestra que el arrastre permite la propagación efectiva para comunicaciones que se denominan a larga distancia a nanoescala [12]. En tales circunstancias la latencia se expresa como d/v el jitter se establece por $D.d/2.v^3$. La pérdida de la tasa de transmisión corresponde a $1 - \int_0^T f(t)dt$, si una nanomáquina en el receptor espera el tiempo T [6].

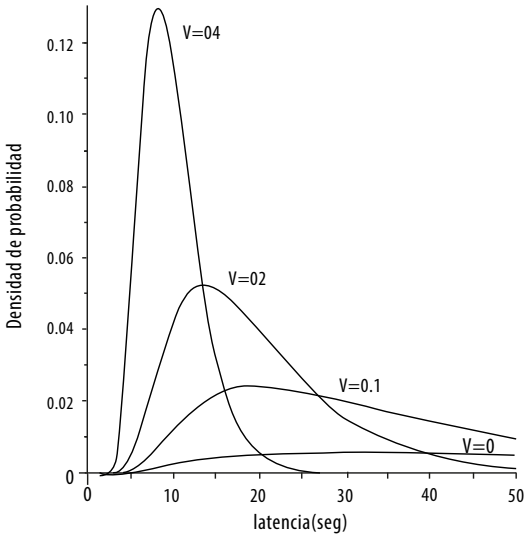


Figura 2.5. Función de probabilidad de masa de la latencia en un medio de propagación con una velocidad de arrastre $v = \{0,\ 0{,}1,\ 0{,}2,\ 0{,}4\}\ (\mu m/s)$, y con un coeficiente de difusión $D = 0{,}1\ (\mu m^2/s)$ y $d = 4\ (\mu m)$ [6].

2.3. Características de los canales de transmisión molecular por difusión

Las CM al ocurrir dentro de los seres vivos y a través de entornos líquidos (fluidos), fundamentalmente se desarrollan en medios en los que la física que define la propagación de la información es básicamente de difusión. Consecuentemente, se tendrán que analizar cuáles son las condiciones que priman en esta clase de canales de transmisión, el punto de partida radica en el modelamiento establecido a través de las leyes de Fick[iii] para entornos de difusión, en los cuales una simple partícula describe el movimiento Browniano [14].

2.3.1 Capacidad de un canal molecular

La capacidad del canal representada como C, cuyas unidades se determinan como (*bit/seg*), se define como la máxima velocidad de transmisión entre la fase de emisión de moléculas y su recepción en el extremo destino, donde tal máximo se define respecto a todas las posibles distribuciones probabilísticas en el proceso de emisión. Este máximo se obtiene directamente del teorema de Shannon, que define la capacidad del canal como el límite superior del valor de la información mutua $I(E;P)$ entre la señal que se ha transmitido (en la emisión de moléculas) $E = \{t_n, p_n(t_n)\}_n$ donde n es el índice de una molécula que se emite al tiempo t_n del set $\mathcal{N}_T(t_n)$, y la señal que arriba al receptor (es decir las moléculas recibidas) $\{t_{n_R}, p_{n_R}(t_{n_R})\}_{n_R}$, donde, t_{n_R} se refiere al tiempo de recepción de una o más moléculas y n_R es el índice de una molécula recibida en set $N_R(t)$, con respecto a la función de densidad de probabilidad $f_E(e)$ en todos los posibles valores de la señal transmitida, así [1]:

$$C = \max_{f_E(e)} \{I(E;P)\} \tag{2.12}$$

iii La primera y la segunda ley de Fick (Ecuaciones *A y B* respectivamente) corresponden a la física detrás de la propagación de partículas en un fluido; si existe un arrastre adicional en el fluido (definido mediante v_d), esta componente de velocidad deberá estar presente en las ecuaciones de Fick para la determinación del movimiento (en sí ya aleatorio) guiado adicionalmente por el arrastre, y así se obtiene una expresión matemática como [12]:

$$J = -D.\nabla\emptyset + v_d.\emptyset \tag{A}$$

Donde J representa el flujo, D es el coeficiente de difusión del medio, $\emptyset$ es la concentración de la sustancia, ∇ es el gradiente, v_d es la velocidad de las partículas que define el arrastre, y $v_d.\emptyset$ es el incremento del flujo. Al producirse el desplazamiento de las partículas, lógicamente la cantidad de sustancia también se modifica, de ahí que si se analiza tal variación en función del tiempo se obtendrá la Ecuación *B* [12]:

$$\frac{\partial\emptyset}{\partial t} = D.\nabla^2\emptyset - v_d.\nabla\emptyset \tag{B}$$

La información mutua $I(E;P)$ en (***bit/seg***) se define como [1]:

$$I(E;P) = H(E) - H(E|P) = H(P) - H(P|E) = H(E) + H(P) - H(E,P) \quad (2.13)$$

Donde $H(E)$ es la entropía/segundo de la señal transmitida E, $H(E|P)$ es la entropía/segundo de la señal transmitida E, dada la señal recibida P, $H(E|P)$ es la entropía/segundo de la señal transmitida P, dada la señal transmitida E, y $H(E,P)$ es la entropía/segundo compuesta de la señal transmitida E y de la señal recibida P [1].

2.3.2 Comunicaciones Moleculares en transporte con movimiento aleatorio (vía Random Walk)

En CM el movimiento es de tipo aleatorio, las moléculas que se emiten por un transmisor se propagan al receptor en forma Browniana, por lo que el movimiento molecular se modela a través de la ecuación de Langevin [1]:

$$m\frac{\partial^2(p_n(t) - v_n(t)t)}{\partial t^2} = F_n(t) - 6\pi\mu r\frac{\partial(p_n(t) - v_n(t)t)}{\partial t} + f(t) \quad (2.14)$$

Donde la posición de la partícula es $p_n(t) = \{p_{n,i}(t)\}_i$ de la partícula n al tiempo t a lo largo de un espacio dimensional i, m es la masa de la partícula, $v_n(t)$ es la velocidad del fluido donde la partícula n se encuentra; $F_n(t)$ es la fuerza aplicada a la partícula n de forma independiente del movimiento Browniano, μ es la viscosidad del fluido, el cual se asume como homogéneo en el espacio de propagación r; $f(t)$ es un proceso randómico que modela la fuerza del movimiento Browniano, cuyas propiedades dependen de la función de densidad de Gauss y posee una función de correlación $\langle f_i(t)f_j(t')\rangle$ dada por $\langle\langle f_i(t)f_j(t')\rangle \geq 12\pi\mu r k_B T\delta_{i,j}\delta(t-t')\rangle$, con $f_i(t)$ como la componente de $f(t)$ en la *i-ésima* dimensión, $\langle\cdot\rangle$ es el operador promedio, i y j indican cualquier dimensión espacial, k_B es la constante de Boltzmann, T es la temperatura absoluta del fluido, $\delta_{i,j}$ es igual a 1 si i y j son iguales o cero caso contrario, $\delta(t-t')$ es la función Delta de Dirac [1].

Los sistemas aleatorios ocurren de manera inercial en los sistemas biológicos, y se consideran la forma más simple y común de propagación en la naturaleza, así se presentan en los sistemas de señalización de calcio, sinapsis neuronal, el *quorum sensing* (percepción de cuórum o autoinducción).

2.3.2.1 Capacidad de un canal molecular Browniano

La Figura 2.6 [1] describe los bloques funcionales básicos de un sistema de CM basado en el movimiento aleatorio en el que se producen las siguientes fases:

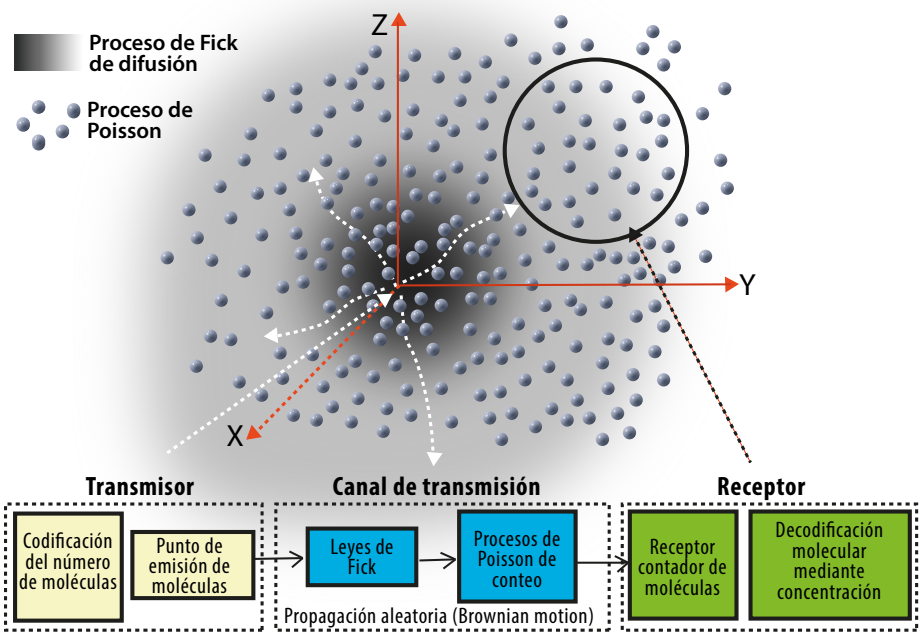


Figura 2.6. Componentes de un sistema de CM de movimiento aleatorio.

1. *Codificación de la información*. Un solo tipo de molécula se modula en número $N_T(t)$ al tiempo t porporcional a la fuente de información $X(t)$, que se expresa como, $N_T(t) = KX(t)$ para $t>0$ [1].
2. *Emisión molecular*. Las moléculas son liberadas en forma continua considerando al transmisor como un punto geométrico ideal en la posición, $p_{Tx} = \{p_x, T_x, p_y, T_x, p_z, T_x\}$ en un espacio tridimensional en el tiempo t_n de la emisión de la n-*ésima* molécula en la posición $p_n(t_n)$ correspondiente a la posición p_{Tx} del transmisor definida como $p_n(t_n) = p_{Tx}$, donde n es una función de $N_T(t)$ [1].
3. *Propagación molecular*. El movimiento Browniano permite el desplazamiento molecular tridimensional de acuerdo a la Ecuación 2.14 en la que se define $F_n(t) = 0, v_n(t) = 0$. En este modelo de abstracción se derivará la expresión analítica para la determinación de la capacidad del canal, se asume un caso espacial tridimensional con extensión infinita en cada dimensión [1].

4. *Recepción molecular*. El receptor detecta las partículas que están presentes al interior de un volumen esférico V_R centrado en la posición del receptor y con un radio $R_{V_R} \ll d$, donde d es la distancia entre el transmisor y el receptor. Tales suposiciones permiten resultados del movimiento Browniano que establecerá la capacidad del canal en la forma más simple, teniendo en cuenta un receptor ideal donde el número de moléculas recibidas $N_R(t)$ se expresa como, $N_R(t) = \{n | p_n(t) \in V_R\}$ [1].
5. *Decodificación de la información*. Se refiere idealmente al conteo del número de moléculas detectadas y expresadas como $Y(t) = \# N_R(t)$, para $t>0$, donde # establece la cardinalidad (número de elementos) del set $N_R(t)$ [1].
6. *Capacidad del canal propiamente C* [1]:

$$C \cong 2W\left(1 + log_2 \frac{\overline{P_{\mathcal{H}}}}{3WK_bT}\right) - \frac{4\sqrt{\pi d}}{3ln2\sqrt{D}} W^{\frac{3}{2}} - 4W\, log_2 4\pi Dd - 2W \frac{2\overline{P_{\mathcal{H}}} R_{V_R}}{9W^2 dK_bT} - 2W\, ln\left(\Gamma\left(\frac{2\overline{P_{\mathcal{H}}} R_{V_R}}{9W^2 dK_bT}\right)\right) - 2W\left(1 - \frac{2\overline{P_{\mathcal{H}}} R_{V_R}}{9W^2 dK_bT}\right) \psi\left(\frac{2\overline{P_{\mathcal{H}}} R_{V_R}}{9W^2 dK_bT}\right) \quad (2.15)$$

Donde $\psi(\cdot)$ es la función Digamma, D es el coeficiente de difusión, d es la distancia entre el transmisor y el receptor, R_{V_R} es el radio del receptor esférico de volumen V_R, K_b es la constante de Boltzmann, T es la temperatura absoluta, W es el ancho de banda del número de moléculas moduladas $N_T(t)$ y $\overline{P_{\mathcal{H}}} = \frac{3}{2} K_b TE[\widehat{n_T}]2W$; el promedio de la potencia termodinámica $P_{\mathcal{H}}$ se define como la energía necesaria para la emisión del número promedio de partículas por tiempo de muestreo *1/(2 W)*, dividido para el tiempo de muestreo [1].

2.3.3 Comunicaciones Moleculares en transporte con movimiento aleatorio y arrastre (vía Random Walk with drift)

En sistemas de CM que se basan en movimientos aleatorios con arrastre, las moléculas que son emitidas por el transmisor no solo se propagan por movimiento Browniano, sino que la posición de dichas moléculas se ve modificada por la presencia de una velocidad $v_n(t)$ y una fuerza $F_n(t)$ independiente de la componente Browniana o de la viscosidad del fluido. En consecuencia, tal propagación se modela a través de la ecuación de Langevin (Ecuación 2.14) y denota la realidad de los sistemas biológicos presentes, por ejemplo, en el sistema cardiovascular de los seres vivos o en la propagación de feromonas en plantas [1].

2.3.3.1 Capacidad de un canal molecular Browniano con arrastre

La abstracción básica de un sistema de CM con movimiento Browniano que cuenta con arrastre se despliega en la Figura 2.7 [1], en el que se producen las siguientes fases:

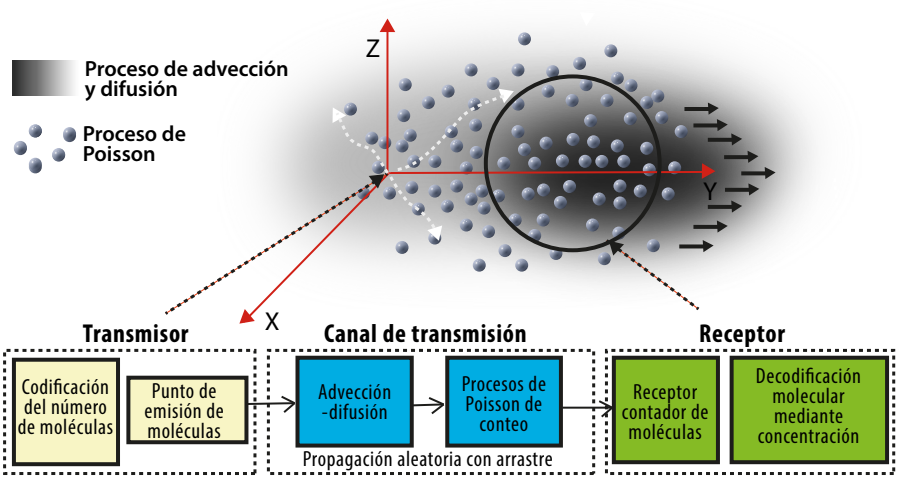


Figura 2.7. Componentes de un sistema de CM de movimiento aleatorio con arrastre.

1. *Propagación molecular*. Las moléculas se propagan asumiendo movimiento Browniano con una velocidad de arrastre homogénea $v = \{v_x, v_y, v_z\}$ en un espacio tridimensional (extensible a cualquier espacio dimensional) en el que existe una fuerza $F_n(t) = 0$ y una velocidad constante $v_n(t)$ para cada partícula n [1].
2. *Capacidad del canal propiamente*. Como una consecuencia de la mencionada propagación molecular se establece un sistema de comunicación en el que se aplica la ecuación de difusión-advección de Fokker-Planck de la siguiente manera [1]:

$$\frac{\partial \rho(p,t)}{\partial t} = D\nabla^2\rho(p,t) - v\nabla\rho(p,t) + N_T(t)\delta(|p - p_{Tx}|) \quad (2.16)$$

Donde δ es la función Delta de Dirac y D es el coeficiente de difusión. En razón de que los sistemas de CM utilizan los mismos bloques funcionales para la recepción y la decodificación molecular, y como un proceso de Poisson de conteo molecular (acción probabilística en la que un punto espacial aleatorio cumple un pro-

ceso de Poisson[iv]), se puede expresar mediante la función de salida del sistema $Y(t)$, en tales eventos probabilísticos de Poisson se tendría, entonces [1]:

$$p_{r_{\{Y(t)|\bar{\rho}(t)\}}}(N) = \frac{(\bar{\rho}(t)V_R)^N}{N!}\exp - \bar{\rho}(t)V_R \qquad (2.17)$$

Donde $\bar{\rho}(t)$ es la distribución de partículas promedio dentro de un receptor esférico cuyo volumen es V_R, y suponiendo por simplificación que tal promedio es igual al valor de la distribución de la partícula en el centro de V_R, p_{Rx}, el que se indica como $\rho(p_{Rx}, t)$ [1].

Por otra parte, la entropía de la distribución de la partícula ρ analíticamente se puede expresar como [1]:

$$\rho(p_{Rx}, t) = h_{Adv}(p_{Tx}, p_{Rx}, t) * N_T(t) \qquad (2.18)$$

Donde $h_{Adv}(p_{Tx}, p_{Rx}, t)$ es la respuesta impulsiva de la Ecuación 2.16, y se expresa así [1]:

$$h_{Adv}(p_{Tx}, p_{Rx}, t) = \frac{e^{-\frac{|p_{Rx} - p_{Tx} - v\,t|^2}{4Dt}}}{(4\pi Dt)^{3/2}} \qquad (2.19)$$

Como la segunda ley de Fick, también el fenómeno de advección-difusión descrito en las Ecuaciones 2.16 y 2.19 corresponden a un filtro lineal e invariante en el tiempo aplicado al número de modulaciones $N_T(t)$ de moléculas emitidas. El término $H_{Adv}(f)$ representa la transformada de Fourier de la respuesta impulsiva en la Ecuación 2.19, y, en consecuencia, la siguiente expresión debe ser resuelta numéricamente [1]:

$$H_{Adv}(f) = \int h_{Adv}(p_{Tx}, p_{Rx}, t)\, e^{-j2\pi f t} dt \qquad (2.20)$$

---

iv Los procesos de Poisson de puntos ubicados aleatoriamente en el espacio asignan en forma randómica la posición de partículas que se transmiten de acuerdo a la distribución $\rho(\boldsymbol{p}, t)$ en cada instante de tiempo $\boldsymbol{t}$. En este proceso el valor esperado corresponde justamente a la distribución de la partícula mediante [1]:

$$\boldsymbol{p}_n(t) \sim Poiss(\rho(\boldsymbol{p}, t)) \quad \forall n \in \mathcal{N}_T(t) \qquad (C)$$

Donde, $\mathcal{N}_T(t)$ es el set que contiene todos los índices de las partículas emitidas desde el tiempo 0 al tiempo $\boldsymbol{t}$, por lo que $\mathcal{N}_T(t) = \left\{\int_0^{t'} N_T(\tau)d\tau \,|0 < t' < t\right\}$ siendo $N_T \sum_z n_z(t_n)$ el número de moléculas que se transmiten al tiempo $\boldsymbol{t}_n$, desde el emisor, y $\boldsymbol{z}$ es la característica de una propiedad intensiva de las moléculas.

De este modo, la entropía $H(\rho)$ de la distribución de la partícula ρ se obtendría de la siguiente ecuación [1]:

$$H(\rho) = 2WH'(N_T) + \int_W log_2|H_{Adv}(f)|^2 df \qquad (2.21)$$

La entropía condicional $H(\rho|\mathrm{P})$ de la distribución de la partícula viene dada por la señal recibida y se define [1]:

$$H\{\rho|\mathrm{P}\} \cong \frac{2}{3}\frac{E[N_T]R_{V_R}}{W\,d} + ln\left(\Gamma\left(\frac{2}{3}\frac{E[N_T]R_{V_R}}{W\,d}\right)\right) + \left(1 - \frac{2}{3}\frac{E[N_T]R_{V_R}}{W\,d}\right)\psi\left(\frac{2}{3}\frac{E[N_T]R_{V_R}}{W\,d}\right) \qquad (2.22)$$

Donde $E[N_T]$ es el valor promedio de las moléculas emitidas en un intervalo de tiempo igual a *1/(2W)*, W es el ancho de banda de la señal transmitida X, $\psi(\cdot)$ es la función Digamma, d es la distancia entre el transmisor y el receptor, R_{V_R} es el radio del receptor esférico de volumen V_R [1].

Finalmente, en el análisis para la máxima velocidad de transmisión del canal molecular, se debe notar que la información mutua $I(E;P)$ de la señal transmitida E y de la señal recibida P se puede obtener de la suma de la información mutua del sistema de comunicación, lo cual incluye solo la ecuación de Fokker-Planck (información mutua $I(E;\rho)$) de la señal transmitida, la distribución de la partícula y la entropía condicional $H\{\rho|P\}$ de la distribución de la partícula dada la señal recibida [1]:

$$\begin{aligned} I(E;P) &= H(E) + H(P) - H(E|\rho) - -H(P|\rho) - H(\rho) \\ &= I(E;\rho) + I(P;\rho) - H(\rho) \\ &= H(\rho) + H(\rho|E) + H(\rho) - H(\rho|P) - H(\rho) \\ &= H(\rho) - H(\rho|P) \end{aligned} \qquad (2.23)$$

Luego del análisis de la propagación física molecular y de las pertinentes funciones estadísticas asociadas, se puede retomar la determinación de la capacidad del canal mediante la sustitución de las Ecuaciones 2.21 (multiplicada por $2W$) y 2.22 en la Ecuación 2.23 y la posterior maximización de acuerdo al promedio de la potencia termodinámica $\overline{P_{\mathcal{H}}}$, por lo que el límite superior de la velocidad de transmisión de un canal molecular con arrastre sería [1]:

$$C \cong 2W\left(1 + log_2\frac{\overline{P_{\mathcal{H}}}}{3WK_bT}\right) + \int_W log_2|H_{Adv}(f)|^2 df - 2W\frac{2\overline{P_{\mathcal{H}}}R_{V_R}}{9W^2dK_bT} - 2W\,ln\left(\Gamma\left(\frac{2}{9}\frac{\overline{P_{\mathcal{H}}}R_{V_R}}{W^2dK_bT}\right)\right) - 2W\left(1 - \frac{2\overline{P_{\mathcal{H}}}R_{V_R}}{9W^2dK_bT}\right)\psi\left(\frac{2\overline{P_{\mathcal{H}}}R_{V_R}}{9W^2dK_bT}\right) \qquad (2.24)$$

Donde $\psi(\cdot)$ es la función Digamma, d es la distancia entre el transmisor y el receptor, R_{V_R} es el radio del receptor esférico de volumen V_R [1].

2.3.4 Caso de estudio de la determinación de la capacidad de un canal molecular

En [15] se considera un sistema de CM entre un par de nanomáquinas definidas como Transmisor Tx y Receptor Rx (los que se asumen completamente sincronizados), y se suponen están en posiciones unidimensionales en un eje en el cual la distancia $d>0$ se define en el rango $(-\infty; d]$, así el Tx se encuentra en $x = 0$ y Rx en $x = d$. El tiempo τ dividido en slots como $n \epsilon \{1,2, \dots\}$ y se refieren a periodos de tiempo $[(n-1)\tau, n\tau]$; adicionalmente se asume un canal binario. El transmisor cuenta con un número suficientemente grande de moléculas y las emite al inicio de cada slot de tiempo, transportando la señal de información $X \in \{0,1\}$. Las moléculas se propagan a través de movimiento Browniano y se degradan en el tiempo. El receptor realiza un conteo de las moléculas que arriban a él en cada slot y producen reacciones químicas para especificar la decodificación de la información $Y \in \{0,1\}$ al final de cada slot de tiempo. Todas las moléculas que alcanzan el receptor se absorben inmediatamente y ya no se propagan en el entorno.

Las moléculas que se transmiten llegan al receptor en forma estocástica, la probabilidad de que una molécula emitida en el slot $i \in \{1,2, \dots, n\}$ arribe en el slot n se puede expresar como [15]:

$$q_m = \int_{m\tau}^{(m+1)\tau} f(t) \int_t^{\infty} g(u) du dt \tag{2.25}$$

Donde $m = n\text{-i}$, $f(t)$ es la función de densidad de probabilidad del tiempo de primer paso de la molécula, $g(u)$ es la función de densidad de probabilidad de la expectativa del tiempo de vida de la molécula (o de la estabilidad de la molécula en su entorno). Teniendo una escala de dominio establecida en una sola dirección la función $f(t)$ se puede expresar como [15]:

$$f(t) = \begin{cases} 0 & (t = 0) \\ \dfrac{d}{\sqrt{4\pi D t^3}} e^{-\frac{d^2}{4Dt}} & (t > 0) \end{cases} \tag{2.26}$$

Donde D es el coeficiente de difusión y $g(u) = \lambda e^{-\lambda u}$ es la función exponencial de distribución con media $1/\lambda$. La probabilidad de éxito en la transmisión de un bit en el slot n se puede afectar, eventualmente, por las moléculas transmitidas en los slots *{1,2,...,n-1}*. La descripción de la probabilidad en mención como una función de n corresponde a [15]:

$$P_r = [Y_n = 1 | X_n = 1] \underset{D}{=} s_n \tag{2.27}$$

$$P_r = [Y_n = 0 | X_n = 0] = t_n \tag{2.28}$$

Con lo cual la información mutua en el slot n se representa así [15]:

$$\begin{aligned} I(X_n; Y_n) &= H(Y_n) - H(Y_n|X_n) \\ &= \mathcal{H}\big((1-p)t_n + p(1-s_n)\big) - \{p\mathcal{H}(s_n) + (1-p)\mathcal{H}(t_n)\} \end{aligned} \tag{2.29}$$

Donde se asume que $p = P_r[X_n = 1]$ y $\mathcal{H}(\xi) = -\xi log_2 \xi - (1-\xi) log_2 (1-\xi)$. La máxima información mutua obtenida en los slots de 1 a n se expresa como [15]:

$$C_n = \max_p \sum_{i=1}^{n} \frac{I(X_i; Y_i)}{n} \quad \left(\frac{bits}{slot}\right) \tag{2.30}$$

La cual define la capacidad del canal cuando n se aproxima a ∞. El esquema que se utiliza en [15] especifica que el transmisor emite una molécula al inicio del slot de tiempo para enviar un 1-lógico, o no realiza ninguna transmisión molecular para enviar un 0-lógico. El destino molecular en un slot de tiempo dado recibe un 1 si una o más moléculas arriban a él en el slot, caso contrario, recibe un 0 si existe la ausencia de moléculas. Para $n = 1$ la probabilidad de suceso en la transmisión de un bit será $s_1 = q_0$ y $t_1 = 1$ (es decir, la comunicación de 0 es siempre exitosa), sustituyendo en la Ecuación 2.29 se tiene [15]:

$$I(X_n; Y_n) = log_2 \frac{(1-p)^{p(1-q_0)}}{p^{pq_0}(1-pq_0)^{1-pq_0}} \tag{2.31}$$

Si $\left.\frac{dI(X_1;Y_1)}{dp}\right|_{p=p_{max}} = 0, C_1 = I(X_1; Y_1)|_{p=p_{max}}$ se puede derivar de la Ecuación 2.27.

La Figura 2.8 muestra p_{max} y C_1 como una función de q_0, la cual indica que si $q_0 = 0$ resulta en una información mutua nula. Cuando q_0. se incrementa desde *0*, C_1 y p_{max} se incrementan también. Cuando $q_0 = 1$ (es decir, no se producen errores), se consigue 1 bit/slot cuando p_{max} = *0,5*. Si C_1 se aplica a todos los slots, el canal de comunicación molecular se torna equivalente a un canal *Z* con una probabilidad de error $1 - q_0$ [15].

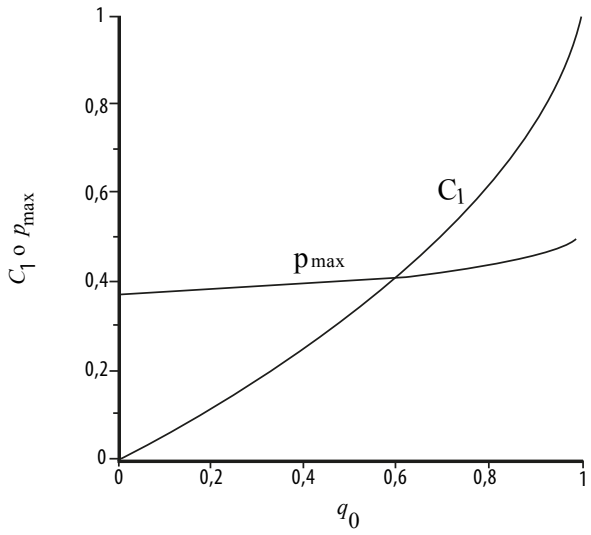


Figura 2.8. Representación de C_1 y p_{max} para el slot 1 como una función de q_0 [15].

Para $n \geq 2$ se considera una relación de recurrencia para s_n y t_n, y se tiene [15]:

$$s_n = 1 - (1 - q_0) \prod_{i=1}^{n-1} (1 - pq_i) \tag{2.32}$$

$$t_n = \prod_{i=1}^{n-1} (1 - pq_i) \tag{2.33}$$

Sustituyendo las dos últimas ecuaciones en la Ecuación 2.29 se deriva $I(X_n; Y_n)$.

La Figura 2.9 describe $\sum_{i=1}^{n} \frac{I(X_n;Y_n)}{n}$ en la Ecuación 2.30 como una función de p cuando se usan los valores parametrizados que se indican en la propia figura; adicionalmente tal figura revela que C_n decrece cuando n se incrementa bajo las condiciones exhibidas en la misma figura [15].

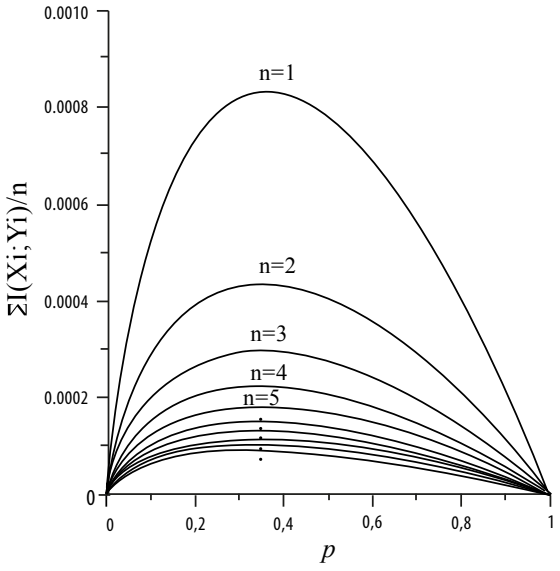


Figura 2.9. $\sum_{i=1}^{n} \frac{I(X_n;Y_n)}{n}$ para $n \in \{1,2,\dots,10\}$ como una función de p, $D = 1\left(\frac{\mu m^2}{s}\right)$, $d = 20\ (\mu m), \tau = 20\ (s)$, y $\lambda = 0\ (1/s)$ [15].

La Figura 2.10 [15] define C_n para valores grandes de n, donde diversos valores de λ se han empleado, aquí se puede notar que C_n, en todos los casos, decrece cuando n se incrementa mientras, eventualmente, converge. La misma figura muestra que la expectativa de vida se convierte en un parámetro importante en la determinación de la capacidad del canal. Cuando el promedio de tiempo de vida es grande $(\lambda = 0 \text{ y } 0{,}01)$, las moléculas permanecen en el entorno e interfieren futuras transmisiones. En este caso C_n, gradualmente decrece con el incremento de n. Cuando el promedio de la expectativa de vida molecular es corto $(\lambda = 0{,}2)$, la probabilidad de que una molécula alcance su destino decrece. Lo cual impacta negativamente C_n. Estos resultados demuestran que existe una óptima expectativa de vida que maximiza la capacidad del canal (cuando $n \to \infty$) [15].

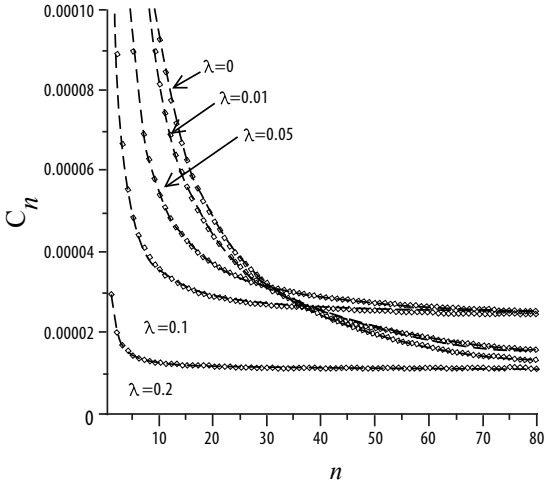


Figura 2.10. C_n como una función de n con $\lambda \in \{0,\ 0{,}01,\ 0{,}05,\ 0{,}1,\ 0{,}2\}$ $D = 1\left(\frac{\mu m^2}{s}\right), d = 20\ (\mu m), \tau = 20\ (s)$, y $\lambda = 0\ (1/s)$ [15].

2.4. Tipos de receptores moleculares

Para analizar brevemente los diferentes tipos de receptores moleculares se tendrá en cuenta un enlace comunicacional punto a punto en un entorno de difusión, en el que existen receptores perfectamente esféricos en un espacio tridimensional; en tal enlace no existen obstáculos entre el transmisor y el receptor, y se asume el canal como invariante en el tiempo (es decir los extremos comunicacionales no son móviles, y no existen cambios de temperatura en el enlace). Se denota a r_r como el radio del receptor, la distancia del punto al centro entre el transmisor y el receptor es r_0, D es el coeficiente de difusión del medio en el que se encuentran los Mensajeros Moleculares MM (que es otra forma que usa la literatura para referirse a las moléculas de información), y la densidad del tiempo de llegada de las moléculas se precisa mediante [14]:

$$f_{hit}(t) = \frac{r_r}{d + r_r} \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} \frac{d}{t} e^{-\frac{d^2}{4Dt}}, t \in (0; \infty) \tag{2.34}$$

Donde $d = r_0 - r_r$. Tomando la integral de la Ecuación 2.34 con respecto al tiempo, la función acumulativa de arribo se puede obtener a partir de [14]:

$$F_{hit}(t) = \frac{r_r}{r_0} erfc\left(\frac{r_0 - r_r}{\sqrt{4Dt}}\right), t \in (0; \infty) \tag{2.35}$$

Donde $erfc()$ es el complemento de la función de error para una variable estándar aleatoria de Gauss con media cero y varianza pertinente a uno. $F_{hit}(t)$ denota la función de probabilidad de una molécula que arriba en el intervalo $(0; t]$; además, la Ecuación 2.36 denota una importante consideración [14]:

$$\lim_{t \to \infty} F_{hit}(t) = \frac{r_r}{r_0} \tag{2.36}$$

Lo cual implica que en un espacio tridimensional existe una probabilidad no nula $1 - \frac{r_r}{r_0}$ de que una molécula nunca alcance el receptor. Se debe notar que este fenómeno se traduce como una inherente pérdida en la propagación desde el punto de vista típico de los sistemas de comunicación [14].

Como lo indica el párrafo previo el proceso de detección molecular en el punto de recepción implica la presencia de errores. Desde el punto de vista físico, las limitaciones existentes en la energía de las nanomáquinas, la memoria del canal de transmisión molecular (como fuente de ISI *Inter*

Symbol Interference), la naturaleza estocástica del movimiento Browniano, el muestreo de los mensajes discretos de las portadoras de información, las diversas formas de ruido, así como enlaces químicos inadecuados en el receptor son, entre otros, las restricciones a los canales moleculares están expuestas. Con tales antecedentes, en forma general, la detección de señales de información se realiza a través de receptores moleculares, los que se pueden dividir en pasivos, absorbentes y reactivos. Los receptores moleculares se encuentran físicamente en el extremo de recepción de una comunicación biológica al nivel nano [16].

2.4.1 Detección molecular mediante receptores pasivos y absorbentes

Para los receptores pasivos (PA) la literatura molecular define comúnmente simplificaciones, las cuales se establecen como suposiciones que los especifican como dotados de una estructura esférica cuya membrana es transparente para todo tipo de moléculas, y se los considera como observadores perfectos del número de moléculas en la región que circunda su esfericidad, como se visualiza en la Figura 2.11 [16]. Se asume que los receptores PA no producen ningún impacto en la propagación de las moléculas en el canal de transmisión. Los receptores PA consideran, también, la inclusión de ligandos-receptores que se encuentran distribuidos en forma homogénea en el espacio de recepción, en el cual existe altas concentraciones y velocidades de enlace en los ligandos, de modo que cada molécula que alcanza el espacio de recepción es efectivamente enlazada por el receptor en el tiempo de muestreo [16]:

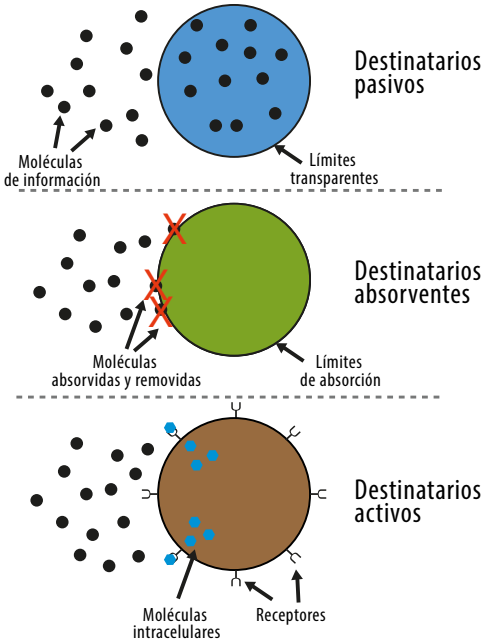


Figura 2.11. Modelos de receptores moleculares para el desarrollo de métodos de detección de moléculas.

Otro enfoque en los métodos de recepción molecular consiste en los receptores absorbentes (AB), los cuales se definen como esféricos (generalmente) y capaces de absorber y degradar cada molécula que golpea su superficie como se visualiza en la Figura 2.11 [16]. Este paradigma se considera más realista e incluye una interacción entre el receptor y el canal de comunicaciones. En contraste con los receptores PA, los receptores AB se pueden considerar localizados en la superficie del receptor. Para una "perfecta" absorción se asumen altas concentraciones de receptores moleculares y tasas de absorción tales que cada molécula que golpea su superficie es enlazada y consumida en forma instantánea [16].

2.4.2 Detección molecular mediante receptores activos

Esta clase de receptor muestrea la concentración de moléculas en los mensajes de información entrantes, lo cual ocurre mediante un conjunto de reacciones que se lleva a cabo vía receptores especializados de proteínas o enzimas, como se presenta en la Figura 2.11 [16].

El enfoque de un receptor activo es mucho más realista en el sentido de las células biológicas; esto es, en neuronas, señales de detección de CM en la superficie de la membrana celular, y en muchos tipos de bio-sensores artificiales. Los sistemas de CM por difusión con receptores activos, en la gran mayoría de casos, se estudian como si fueran de reacción-difusión (RD) con un número específico en cuanto a la velocidad de reacción. Para habilitar los métodos de detección y evaluar su rendimiento, el enfoque para los receptores RD los supone dotados de ligandos-receptores que cuentan con un solo sitio para el enlace, realizándose esta reacción para un solo receptor expuesto a la variación de tiempo en el que la concentración de tales ligandos $cL(t)$ se puede esquemáticamente demostrar como sigue [16]:

$$U \underset{k_-}{\overset{cL(t)k_+}{\rightleftarrows}} B \tag{2.37}$$

Donde k_+ y k_- corresponden al enlace ligando-receptor, U y B denotan los estados de desenlace (*unbinding*) y enlace (*binding*), respectivamente. Suponiendo que los receptores N_R se exponen a la misma concentración de ligandos, la velocidad de la reacción química para el número de receptores se expone como [16]:

$$\frac{dn_B(t)}{dt} = k_+ \, cL(t)(N_R - n_B(t) - k_- n_B(t)) \tag{2.38}$$

El proceso de enlace corresponde a una reacción de segundo orden dependiendo de la concentración de ligandos y de receptores; el estado de desenlace define, en cambio, una reacción de primer orden y solo depende del número de enlaces en el receptor. En la mayoría de casos, el ancho de banda de un sistema de CM se puede asumir como suficientemente bajo para impulsar una reacción de enlace cercana al equilibrio, y permitir la aplicación de un estado cuasi-estático para el sistema en general, en cuyo caso, la concentración variante en el tiempo $cL(t)$ se puede tratar como constante; esto es, $cL(t) = cL$ y $\frac{dn_B(t)}{dt} = 0$, lo cual resulta en una expresión para el número límite de receptores enlazados [16]:

$$E[n_B] = \frac{cL}{cL + K_D} N_R \tag{2.39}$$

Donde, $K_D = k_-/k_+$ es la constante de disociación, lo que determina la afinidad entre ciertos tipos de ligandos y sus respectivos receptores. Incluso en el estado de equilibrio los receptores fluctúan aleatoriamente entre los estados enlazados y desenlazados. El número de receptores enlazados $\boldsymbol{n_B}$ en el punto de equilibrio es una variable aleatoria binomial con una probabilidad de suceso $p_B = cL/(cL + K_D)$, cuya varianza se calcula a través de la ecuación [16]:

$$V_{ar}[n_B] = p_B(1 - p_B)N_R \tag{2.40}$$

Se puede obtener más información al examinar el historial de eventos continuos de enlaces y desenlaces. La probabilidad de observación de una serie de $\boldsymbol{n}$ eventos de enlace-desenlace en equilibro se puede dar como [16]:

$$p(\{\tau^B, \tau^U\}_n) = \frac{1}{Z} e^{-\sum_{j=1}^{n} \tau_j^U (\sum_{i=1}^{M} k_i^+ c_i)} \prod_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{M} k_i^+ c_i k_i^- e^{-k_i^+ \tau_j^B} \tag{2.41}$$

Donde $\boldsymbol{Z}$ es el factor de normalización, τ_j^U y τ_j^B son los ***j-ésimos*** intervalos de tiempo de los enlaces y desenlaces respectivamente; $\boldsymbol{c_i}$, $\boldsymbol{k_i^+}$, y $\boldsymbol{k_i^-}$ son la concentración, la velocidad de enlace y desenlace respectivamente, $\boldsymbol{M}$ es el número de tipos de ligandos que existen en el canal. Se debe notar que el análisis probabilístico es igualmente válido para los casos en donde existen múltiples receptores, así como para $\boldsymbol{n}$ muestreos para los intervalos de tiempo de enlaces y desenlaces independientes [16].

2.5. Tipos de modulación en Comunicaciones Moleculares

Existen diferentes técnicas de modulación en CM, las cuales, fundamentalmente, se dividen en cinco grupos que serán analizados a continuación [2], [7], [17]:

1. *Técnicas basadas en concentración*. La información en esta clase de modulación se representa mediante la variación de la cantidad de sustancia o concentración molecular.
2. *Técnicas basadas en el tipo de moléculas*. La información se define a través de los diferentes tipos de moléculas.
3. *Técnicas basadas en parámetros de tiempo*. La representación de la información se esquematiza mediante parámetros que emplean dependencia del tiempo en la señal a ser transmitida.
4. *Técnicas basadas en parámetros espaciales*. Las características a ser incorporadas en la información se supeditan a parámetros establecidos mediante la localización espacial de las moléculas emitidas en la transmisión.
5. *Técnicas híbridas*. Se refiere a la combinación de más de una de las técnicas mencionadas previamente y, por tanto, más de una característica molecular a ser instaurada en la señal de información.

2.5.1 Modulación con base en la concentración molecular

La idea principal detrás de las técnicas de modulación que se basan en la concentración de sustancia, consiste en el transporte de la información mediante la presencia de grados de concentración de Mensajeros Moleculares MM (moléculas de información) en slots de tiempo discretos (es decir slots de símbolos de información), donde cada slot, se emplea para portar un símbolo en el mensaje molecular; en la mayoría de la literatura cada slot de tiempo consiste en un periodo fijo [18].

En su forma más simple, cada símbolo representa un solo bit (denominando a esta técnica de modulación, OOK *On-Off Keying*), si el bit correspondiente es 1 (en cuyo caso se le definirá mediante la señal ***S[k]***), el transmisor $\boldsymbol{Tx}$ libera un número fijo de MM (es decir $\boldsymbol{n_1}$). Por otra parte, si el bit pertinente es 0, el transmisor no libera ninguna molécula. En el extremo destino, el receptor $\boldsymbol{Rx}$ cuenta el número de MM que arriban en cada slot de tiempo y el consecuente símbolo transportado $(N^{Rx}[k])$, por tanto, tomará una decisión basada en un umbral para decodificar el valor del bit en un slot dado $(\hat{S}[k])$. Si $N^{Rx}[k] \geq \lambda$, $\hat{S}[k]$ se decodifica como el valor 1 para el bit, caso contrario se codifica como 0, donde λ es el valor umbral para la señal de detección [2], [7], [17].

Una versión más generalizada de la modulación OOK se denomina CSK (*Concentration Shift Keying*), en la cual, dependiendo del diseño del sistema, cada símbolo se representa por *m*-bits de información. Si un símbolo representa un bit de información, esta técnica se denomina modulación CSK binaria o BCSK (*Binary CSK*) y si un símbolo representa 2 bits de información, se le llama CSK por cuadratura o QCSK (*Quadrature CSK*), y así, sucesivamente. En CSK, para el ***k-ésimo*** símbolo en el mensaje, el transmisor libera $N^{Tx}[k]$ número de MM dependiendo del valor actual del símbolo como [2], [7], [17]:

$$N^{Tx}[k] = n_{S[k]}, \quad S[k] \in \{sym_0, sym_1, \dots, sym_{2^m-1}\} \tag{2.42}$$

Donde $n_{S[k]}$ denota el número de moléculas a ser emitidas para el valor del símbolo $S[k]$ que puede tomar uno de los 2^m valores de símbolo (por ejemplo, sym_0, sym_1). Como se podrá notar, para representar la palabra *símbolo* se empleará ***sym*** (del inglés *symbol*) con el objeto de lograr una homogenización en la notación matemática, la cual, en su mayoría se basa en el idioma inglés.

Para demodular $\hat{S}[k]$ de la señal recibida, el receptor usa $2^m - 1$ umbrales (es decir, $\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_{2^m-2}$) como:

$$\hat{S}[k] = \begin{cases} sym_0, & N^{Rx}[k] < \lambda_0 \\ sym_i, & \lambda_{i-1} \leq N^{Rx}[k] < \lambda_i, \quad 1 \leq i \leq 2^m - 2 \\ sym_{(2^m-1),} & \lambda_{2^m-2} \leq N^{Rx}[k] \end{cases} \tag{2.43}$$

Donde $N^{Rx}[k]$ denota el número de moléculas recibidas durante el ***k-ésimo*** slot de símbolo [2], [7], [17].

En la literatura existen numerosas variantes de la modulación CSK, que se han propuesto para mejorar el rendimiento y reducir errores probabilísticos en el sistema comunicacional; la mayoría de tales esquemas considera que el ***Tx*** debe liberar todos los MM basados en el valor seleccionado de $N^{Tx}[k]$ al principio del correspondiente slot de símbolo [2], [7], [17].

2.5.2 Modulación con base en el tipo de moléculas

Esta clase de modulación se enfoca en la utilización de múltiples tipos de MM en el sistema de comunicación. Así, el transmisor es capaz de liberar diferentes *tipos* (del inglés ***type***) de MM (mm_{type}) los cuales son similares entre sí en cuanto a composición pero que solo pueden ser recibidos por una clase particular de receptores, cada uno pertinente a un tipo particular de MM.

Tal receptor puede captar múltiples señales de información en un slot de símbolo, las señales en la práctica son ortogonales entre sí. Las características cuantitativas de dichas señales ortogonales definen la representación de valores de bits dependientes de cada tipo molecular [2], [7], [17], [18].

Esta técnica de modulación se denomina MoSK (*Molecular Shift Keying*) en la cual cada tipo de símbolo ($S[k]$) se representa por una clase específica de MM. MoSK utiliza dos tipos de MM para modular un bit de información en un símbolo (denominándose así MoSK Binaria, *Binary MoSK*), o cuatro tipos de MM para modular dos bits de información en un símbolo, y lleva el nombre de MoSK Cuádruple (*Quadruple MoSK o QMoSK*). Considerando BMoSK por cada slot de símbolo, el receptor $\boldsymbol{Rx}$ cuenta el número de MM que ha llegado y para cada uno de ellos, de entre los diferentes tipos arribados, se demodula mediante $\hat{S}[k]$. Las decisiones para la interpretación correspondiente de cada mensajero molecular emplean un umbral establecido por [2], [7], [17]:

$$\hat{S}[k] = \begin{cases} sym_0, & N_{mm_a}^{Rx}[k] \geq \lambda \wedge N_{mm_b}^{Rx}[k] < \lambda \\ sym_1, & N_{mm_b}^{Rx}[k] \geq \lambda \wedge N_{mm_a}^{Rx}[k] < \lambda \\ e, & en\ cualquier\ otro\ caso \end{cases} \quad (2.44)$$

Donde $\boldsymbol{a}$ y $\boldsymbol{b}$ representan los tipos de MM que se usan en el proceso de modulación, $MM_1 \in (mm_a, mm_b)$ y $N_{mm_{type}}^{Rx}[k]$ representa el número de MM definidos por mm_{type} captados en el receptor durante el slot de tiempo k-*ésimo* [2], [7], [17].

Una variedad del método anterior en el que no se emplea un umbral, sino características en la recepción que se basa en la mayoría de MM, en cuyo caso y teniendo en cuenta una modulación binaria, la señal $\hat{S}[k]$ se decodifica como [2], [7], [17]:

$$\hat{S}[k] = \begin{cases} sym_0, & N_{mm_a}^{Rx}[k] > N_{mm_b}^{Rx}[k] \\ sym_1, & N_{mm_b}^{Rx}[k] \geq N_{mm_a}^{Rx}[k] \end{cases} \quad (2.45)$$

2.5.3 Modulación basada en tiempo

Este tipo de técnica de modulación codifica la información a través de los tiempos que se emplean para la emisión de MM. A diferencia de los otros tipos de modulación hasta el momento analizados, la entrada del canal de tiempo es fundamentalmente continua en lugar de discreta [18]. En su forma más simple un Canal de Sincronización Molecular MTC (*Molecular Timing*

Channels, siendo estos una subclase de canales moleculares) consiste en la transmisión de un solo mensajero molecular liberado por el Tx al tiempo t_r con información codificada en el tiempo (*RT*). Los MM viajan mediante propagación aleatoria, cuya llegada al destino se produce al tiempo [2], [7], [17]:

$$t_y = t_r + t_n \tag{2.46}$$

Donde t_n corresponde a un retardo aleatorio en función de la propagación de MM. A diferencia de los otros tipos de modulación estudiadas, en las que el conjunto de símbolos es finito, en canales de tiempo el set de símbolos es un intervalo continuo [18].

2.5.4 Modulación híbrida

2.5.4.1 Ejemplo 1

En [19] los Autores consideran un enlace molecular mediante difusión entre un Tx (representado como un punto espacial) y un receptor Rx esférico tipo absorbente en un entorno tridimensional. En las mencionadas circunstancias esta modulación híbrida establece la combinación de las técnicas PPM (*Pulse-position Modulation*) convencional y CSK, definiendo al resultado como MCPM (*Molecular Concentration-Position Modulation*), la cual plantea que la constelación de concentración especifica el control de errores en la detección de la concentración o en la constelación posicional misma [19].

La modulación MCPM sugerida representa la optimización referente a problemas presentados en la diferencia de los niveles de intensidad en la concentración que se encuentran en las constelaciones, manteniendo constante el número medio de moléculas emitidas. MCPM combina BCSK con las constelaciones de PPM para producir la transmisión de un solo tipo de moléculas. En el extremo de emisión, una secuencia de bits u se define en grupos de $(1 + log_2 k)$ bits, donde k corresponde al orden en la modulación PPM. Los primeros $(log_2 k)$ bits determinan la posición en la constelación, lo cual establece la liberación de moléculas en un sub intervalo. Posterior a la selección de la posición provisional de la molécula emitida, el último bit del grupo decide sobre los símbolos BCSK para también modular la intensidad de la señal a ser transmitida, resultando, entonces, una concentración posicional conjunta de los símbolos. Derivado de los elementos descritos, el esquema de modulación se denominará k-MCPM pertinente a la ***k-ésima*** concentración posicional que denota el nivel de modulación PPM ***k-ésimo*** [19].

Para proveer una comparación entre los esquemas para el análisis de errores en CM vía difusión, los diferentes casos MCPM se estudian bajo la misma velocidad de transmisión $(1/t_b)$ y del promedio del número de moléculas por bit (M) en donde la modulación k-MCPM transmitirá símbolos con una duración individual $t_{sym} = (1 + log_2 k)t_b$, y en promedio con una cantidad de moléculas establecidas por $(1 + log_2 k)M$. El tiempo $(1 + log_2 k)M$ denota la duración total de un solo símbolo MCPM. La duración de los sub intervalos de bit en la presente constelación posicional es t_s, lo cual conlleva a $t_{sym} = kt_s$ [19].

Las restricciones impuestas en la modulación en mención asumen equiprobables la presencia de un bit-0 o un bit-1, la diferencia de concentraciones entre tales bits en el caso de la constelación BCSK en el esquema MCPM, se restringe al diseño del sistema de comunicación. Cuando la emisión molecular se supedita a los valores $2 \propto (1 + log_2 k)M$ y $2(1-\propto)(1 + log_2 k)M$ para el bit-1 y el bit-0, respectivamente, el valor de $\propto$ requiere la optimización en la región correspondiente a $(\propto \in [0{,}5\ ;\ 1])$ para asegurar que el sistema logre emitir $(1 + log_2 k)M$ moléculas en promedio. Cuando el valor de $\propto$ se aproxima a *0,5*, las constelaciones de concentración se acercan mucho unas a otras, lo cual dificulta su detección en el receptor. En tanto que los valores de $\propto$ cercanos a *1* dificultan la detección de símbolos PPM en el punto de recepción ya que si el bit que modula el esquema BCSK es cero, una cantidad de moléculas cercanas a cero mismo se emitirán al canal de comunicaciones. La demostración del esquema MCPM de [19] se visualiza en la Figura 2.12 [19].

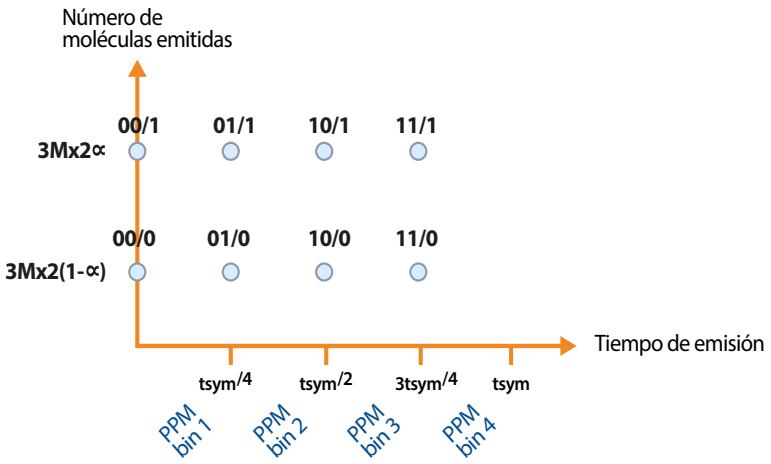


Figura 2.12. Transmisión tipo 4-MCPM, los primeros dos bits determinan el tiempo de emisión molecular, mientras los dos últimos definen la intensidad de la señal emitida.

Para la detección de la concentración posicional en el esquema MCPM, los detectores PPM y BCSK se utilizan consecutivamente. En MCPM la recepción establece la detección del ***j-ésimo*** símbolo de la concentración posicional, denotado por s_i en dos pasos [19]:

1. Se detecta la constelación PPM en la cuenta de moléculas entre los intervalos PPM, utilizando una operación de argumento máximo en los sub intervalos pertinentes. En los ***i-ésimos*** símbolos de la concentración posicional, el detector de cuenta máximo se puede obtener de la constelación PPM, $\hat{j}_i$, a través de [19]:

$$\hat{j}_i = arg \underset{j\in\{(i-1)k+1,\ldots,ik\}}{max} R_j \tag{2.47}$$

2. Considerando que el $\hat{j}_i$ ***-ésimo*** sub intervalo produce el componente PPM descubierto $\hat{s}_j$, el detector MCPM ejecuta una detección de umbral fijo en el conteo de llegada en el $\hat{j}_i$ ***-ésimo*** sub intervalo en la determinación del símbolo en la concentración, formulando una hipótesis correspondiente al componente BCSK $\hat{S}_i{}'s$ de un bit-1 o bit-0 en H_1 y H_0, respectivamente; así, el detector (sin memoria que solo considera los sub intervalos k***-ésimos*** para la detección) MCPM se obtiene de la concentración de símbolos mediante la comparación del umbral γ como [19]:

$$R_{\hat{j}} \underset{H_0}{\overset{H_1}{\gtrless}} \gamma \tag{2.48}$$

2.5.4.2 Ejemplo 2

En [20], los Autores consideran un sistema de CM en el que existen múltiples transmisores y receptores (ambos tipos de elementos comunicacionales son referidos como bio nanomáquinas) en un entorno tridimensional; aquí, el esquema de modulación híbrida combina las modulaciones MoSK y CSK.

La ubicación espacial de las bio nanomáquinas es aleatoria y se modela como un proceso de Poisson de puntos aleatorios en el espacio tridimensional en el volumen que rodea al receptor. En esta propuesta la modulación híbrida en cada enlace comunicacional que une transmisores y receptores (Tx-Rx) usa una modulación CSK $M-aria$ con

diferentes tipos de moléculas. Consecuentemente, el esquema propuesto utiliza diferentes tipos de moléculas en cada enlace con el objeto de evitar la interferencia entre los enlaces de diversos receptores en el destino de comunicación. En razón de la ausencia de ILI (*Interlink Interference*) se puede emplear la expresión analítica para la respuesta del canal de transmisión al sistema, en lugar de resultados numéricos obtenidos mediante simulación. Adicionalmente, las moléculas del mismo tipo de otras fuentes de interferencia que arriban al receptor se reducen, y así la interferencia MUI (*Multi-user Interference*) disminuye también comparado con sistemas de clase MIMO (*Multiple Input Multiple Output*) que usan un solo tipo de moléculas para todos los enlaces [20].

El sistema de CM de [20] se concreta con el empleo de múltiples fuentes y un receptor, donde de manera aleatoria solamente una fuente se comunica con el destino y las demás actúan como fuentes de interferencia en la estructura tridimensional homogénea definida en un medio de transmisión en el que se produce la propagación molecular vía difusión. La Figura 2.13 [20] representa un diagrama que se sustenta en un solo par origen-destino; cada par origen-destino consiste en una bio nanomáquina fuente conteniendo N puntos de transmisión asociados a ella y una bio nanomáquina destino con N receptores esféricos totalmente absorbentes. El n-*ésimo* receptor posee un radio r_n y un volumen V_n. Un enlace típico transmisor-receptor entre el n-*ésimo* transmisor y el n-*ésimo* receptor utiliza una modulación CSK $M-aria$ y emplea n diferentes tipos de moléculas.

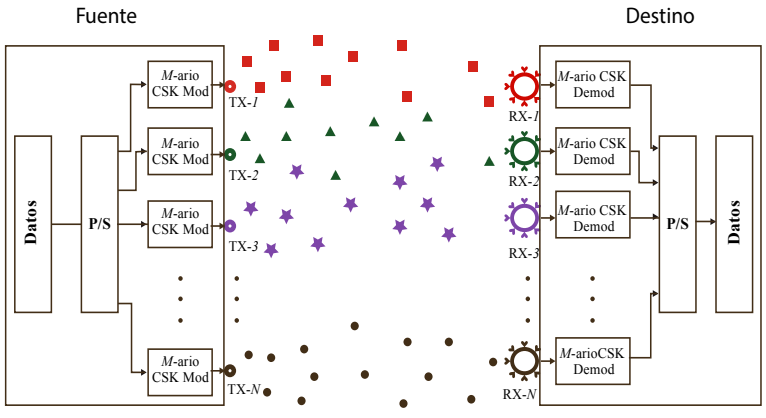


Figura 2.13. Diagrama pertinente a la dupla transmisor-destino, donde diversos colores representan enlaces tipo emisor-receptor empleando diferentes tipos de moléculas.

Como se observa en la Figura 2.13 [20], el primer emisor transforma en cada slot de tiempo, una transmisión serial (representada por ***S***) de bits en una de tipo paralelo (representada por ***P***) de N bits con secuencias de longitud de ($log_2 M$), y, entonces, cada punto transmisor emite moléculas al medio de propagación de acuerdo con una modulación CSK $M - aria$. Por lo que la velocidad de transmisión del sistema (R_b) corresponde a un valor de $R_b = N log_2(M)$ por periodo de símbolo [20].

En el destino, los N receptores esféricos (que se enlazan solo a un tipo de moléculas) cuentan el número de moléculas absorbidas y, luego, en la demodulación, la secuencia captada (recibida) se convierte nuevamente en una en formato serial de bits. El emparejamiento transmisor-receptor que produce un enlace comunicacional se asume como perfectamente sincronizado y, así, los receptores esféricos podrán contar todas las moléculas absorbidas. Las suposiciones preestablecidas se toman en cuenta porque se considera que el número de moléculas de un tipo, en particular, pueden ser identificadas por una bio nanomáquina en razón de las restricciones de tamaño y complejidad. La gran ventaja asociada a esta modulación híbrida radica en la eliminación de ILI, la cual prevalece en sistemas de comunicación con múltiples transmisores-receptores que usan un solo tipo de moléculas de información. Además, la separación entre receptores esféricos no genera ningún impacto en el sistema en razón de la ausencia de ILI [20].

La posición de las fuentes se modela como un proceso homogéneo de Poisson de puntos HPPP (*Homogeneous Poisson Point Process*) en un espacio tridimensional $\mathbb{R}^3$ con densidad λ. $\Phi_j = \{x_{ji},\ i \in \mathbb{N}\}$ es el proceso cuyos puntos espacialmente definen la ***j-ésima*** posición del transmisor $\mathcal{T}_{\mathcal{S}_i, x_{ji}}$ de todas las fuentes $\mathcal{S}_i$. El ***i-ésimo*** destino denotado por $\mathcal{K}_i$ se emparejará con $\mathcal{S}_i$. El desplazamiento independiente de los puntos en un proceso de Poisson corresponderá a la respuesta probabilística que establecerá que también Φ_j se comporte como un punto de ubicación aleatoria en un proceso de Poisson [20].

Los Autores en [20] contemplan un típico par $\mathcal{S}_0 - \mathcal{K}_0$, en el cual el ***j-ésimo*** receptor $\mathcal{R}_{\mathcal{K}_0,0}$ se referencia en el destino **0** o el origen. El receptor señalado Φ_j se puede modelar como punto espacial aleatorio en un proceso de Poisson en el entorno fuera del receptor ($\mathbb{R}^3 \setminus V_j$) y con una intensidad Λ. El transmisor involucrado en el evento $\mathcal{T}_{\mathcal{S}_0, x_{j0}}$ desde la Fuente $\mathcal{S}_0$ es parte del proceso de Poisson de puntos aleatorios Φ_j de acuerdo al teorema de Slivnyak [20]. Otro aspecto evidente a tener en cuenta en este ejemplo es la degradación molecular que una señal sufre; así, para una fuente

puntual que se encuentra a una distancia r del centro de la esfera receptora de radio r_n, la tasa de impacto de moléculas en el receptor viene dada por la siguiente ecuación [20]:

$$q(t'|r) = \frac{r_n}{r}\frac{r - r_n}{\sqrt{4\pi D t'^3}} exp\left\{-\frac{(r - r_n)^2}{4Dt'}\right\} \tag{2.49}$$

Donde D representa el coeficiente de difusión, el cual depende de las características moleculares así como de las propiedades del fluido circundante. El rendimiento en la detección se puede mejorar a través del control adecuado de la cantidad de moléculas degradadas (para evitar interferencias tipo ISI); sin embargo, previo a dicha degradación, las moléculas deben llegar a los alrededores del receptor. La velocidad de degradación de las moléculas μ_d depende de su vida media $\Lambda_{1/2}$ definida en la degradación $\mu_d = \ln(2)/\Lambda_{1/2}$ [20].

La fracción de moléculas no degradadas absorbidas por un receptor esférico en un tiempo arbitrario t posterior a la transmisión se puede obtener mediante la siguiente ecuación [20]:

$$\begin{aligned} f(\mu_d, t\,|\,r) &= \int_0^t q(t'|r) e^{-\mu_d t'} dt' \\ &= \frac{1}{2}\frac{r_n}{r}\exp\left(-\sqrt{\frac{\mu_d}{D}}(r - r_n)\right) \\ &\quad * \left[exp\left(2\sqrt{\frac{\mu_d}{D}}(r - r_n)\right) erfc\left(\frac{r - r_n}{\sqrt{4Dt}} + \sqrt{\mu_d t}\right)\right. \\ &\quad \left. + erfc\left(\frac{r - r_n}{\sqrt{4Dt}} - \sqrt{\mu_d t}\right)\right] \end{aligned} \tag{2.50}$$

La Ecuación 2.50 demuestra que la fracción de moléculas absorbidas por receptores esféricos se reduce al incrementarse μ_d. Cuando no existe degradación μ_d=0, la expresión simplificada obedece a la ecuación [20]:

$$f(0, t|r) = \frac{r_n}{r} erfc\left(\frac{r - r_n}{\sqrt{4Dt}}\right) \tag{2.51}$$

Para el análisis pertinente del modelamiento del canal, es esencial tener en cuenta que cada uno de los enlaces transmisor-receptor utiliza modulación CSK $M - aria$; en el instante k el ***j-ésimo*** $(1 \le j \le N)$ transmisor $\mathcal{T}_{s_i, x_{ji}}$ de la ***i-ésima*** nanomáquina origen $\mathcal{S}_i$ situada aleatoriamente en $x_{ji} = x$, que emite $u_x^j[k] = Q_m, 0 \le m \le M - 1$ moléculas al comienzo de cada periodo de símbolo T_s corresponde al mensaje para el símbolo $s_x^j[k] = s_m$ [20].

Por ejemplo, para el caso OOK el ***j-ésimo*** transmisor no emite ninguna molécula (Q_0=0) o Q_1 números de moléculas pertinentes al bit 0 o 1 [20]. Se considera un ***j-ésimo*** receptor típico del par $\mathcal{S}_0$-$\mathcal{K}_0$ colocado en el origen y se asume el modelado de un canal de tiempo discreto con memoria cuya longitud sea L, donde $h_x^j[l]$ representa la respuesta impulsiva del canal al instante de tiempo l***-ésimo*** entre el receptor y el ***j-ésimo*** transmisor de la fuente $\mathcal{S}_i$, la cual se localiza aleatoriamente en un dominio uniforme en el punto x en un proceso de Poisson. La respuesta impulsiva del canal al l***-ésimo*** instante que consiste en una fracción de moléculas absorbidas entre lT_s y $(l+1)T_s$, se puede obtener de la Ecuación 2.50 por la Ecuación 2.52 [20]:

$$h_x^j[l] = f\left(\mu_d, (l+1)T_s \,\middle|\, \|x\|\right) - f\left(\mu_d, lT_s \,\middle|\, \|x\|\right) \qquad (2.52)$$

Si el ***j-ésimo*** transmisor del par de la fuente $\mathcal{S}_0$ se encuentra en x^*, y considerando el impacto de las moléculas de información en el receptor, el número de moléculas que fueron transmitidas desde $\mathcal{T}_{\mathcal{S}_0,x}$ y detectadas por el ***j-ésimo*** receptor al k***-ésimo*** instante sigue una distribución binomial con parámetros $u_x^j[k-l], h_x^j[l]$, situación similar a la de la distribución de Poisson asumiendo que el número de moléculas de información $u_x^j[k-l]$ es grande y la probabilidad de impacto $h_x^j[l]$ es pequeña. Es indispensable notar que la suma de variables aleatorias independientes de Poisson obedece a la distribución de Poisson. Consecuentemente, el número total de moléculas recibidas en el ***j-ésimo*** receptor al instante $y_0^j[k]$ cumple con la distribución de Poisson con parámetros $\sum_{x\in\Phi_j}\sum_{l=0}^{L} h_x^j[l]u_x^j[k-l]$, esto es [20]:

$$y_0^j[k] \sim \mathcal{P}\left(\overbrace{h_{x^*}^j[0]u_{x^*}^j[k]}^{Desired} + \overbrace{\sum_{l=1}^{L} h_{x^*}^j[l]u_{x^*}^j[k-l]}^{ISI} + \overbrace{\sum_{x\in\Phi_j\setminus\{x^*\}}\sum_{l=0}^{L} h_x^j[l]u_x^j[k-l]}^{MUI}\right) \qquad (2.53)$$

Donde $\mathcal{P}(.)$ representa la distribución de Poisson. El número de moléculas recibidas en el receptor señalado que se localiza en el origen corresponde a la suma de moléculas pertinentes al símbolo esperado, los símbolos previos causan ISI y las moléculas del mismo tipo de otros transmisores se interfieren entre sí y generan MUI (*Multi-user Interference*) [20].

El análisis pertinente de la probabilidad de error de los símbolos, por simplicidad considera que el ***j-ésimo*** transmisor de todas las fuentes de los múltiples pares que envían el mismo símbolo $s^j[k]$ con la probabilidad de envío $\mathcal{S}_m$como

$\mathcal{P}_{\mathcal{S}_m}$ a cualquier instante k. Las bio nanomáquinas destino usan un umbral de detección fijo en el cual en cada periodo de símbolo se cuenta el número de moléculas comparadas con los valores de umbral $(\mathcal{T}_0, \mathcal{T}_1, \ldots, \mathcal{T}_M)$ y con una decodificación establecida como $\mathcal{S}_m$ si el número de moléculas definidas se encuentra entre $\mathcal{T}_m$ y $\mathcal{T}_{m+1}$. Los símbolos decodificados en el instante ***k-ésimo*** son $\hat{s}^j[k]$ y $P^j_{m,se}[k] = P^j\left(\hat{s}^j[k] \neq \mathcal{S}_m \,\middle|\, s^j[k] = \mathcal{S}_m, s^j[k-L-1:K-1]\right)$ al ***k-ésimo*** instante con una probabilidad de falla en la decodificación $\hat{s}^j[k] = \mathcal{S}_m$ correspondiente al receptor señalado j dado el símbolo transmitido como $s^j[k] = \mathcal{S}_m$ y el símbolo previo como $s^j[k-L-1:K-1]$. La probabilidad de error de símbolo $P^j_{se}[k]$ durante el instante de tiempo k en el receptor señalado se condiciona en los L símbolos previos por [20]:

$$P^j_{se}[k] = \sum_{m=0}^{M-1} P_{s_m} \underbrace{P^j\left(\hat{s}^j[k] \neq \mathcal{S}_m \,\middle|\, s^j[k] = \mathcal{S}_m, s^j[k-L-1:K-1]\right)}_{\triangleq P^j_{m,se}[k]} \quad (2.54)$$

Teniendo en cuenta las consideraciones establecidas previamente en un sistema de múltiples fuentes y un destino, las Figuras 2.14 [20] y 2.15 [20] exhiben la probabilidad de error de símbolo para varios tipos de modulaciones moleculares [20].

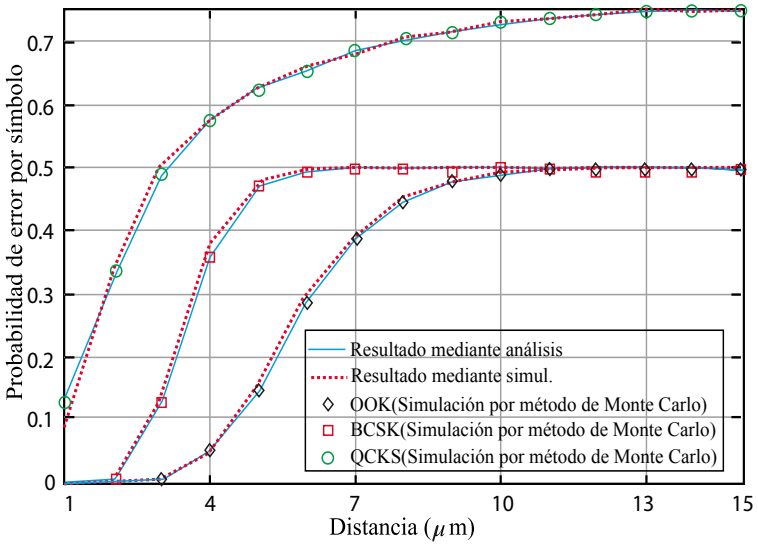


Figura 2.14. Probabilidad de error de símbolo con relación a la distancia entre el punto de transmisión y un receptor esférico (r-r_j) en un sistema de un solo enlace.

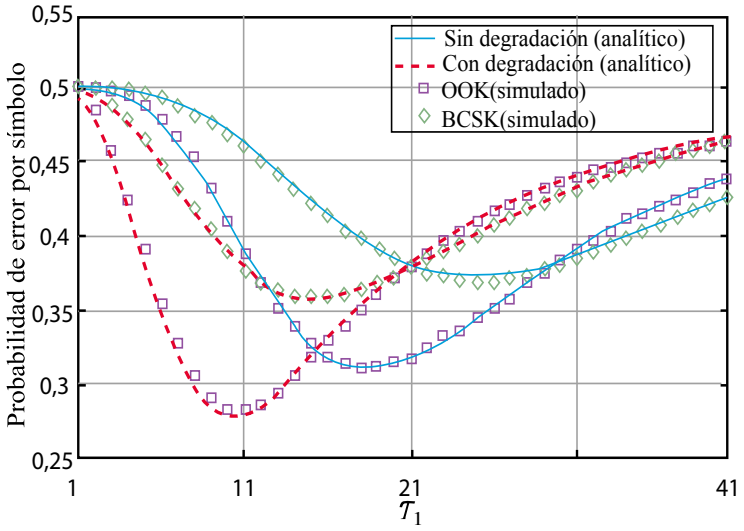


Figura 2.15. Probabilidad de error de símbolo de umbral T_1 empleada para la detección del símbolo **0** y **1**.

Referencias bibliográficas

[1] I. F. Akyildiz, M. Pierobon, and S. Balasubramaniam, "An information theoretic framework to analyze molecular communication systems based on statistical mechanics," *Proc. IEEE*, vol. 107, no. 7, pp. 1230–1255, 2019.

[2] Y. Huang *et al.*, "Frequency Domain Analysis and Equalization for Molecular Communication," *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 69, pp. 1952–1967, 2021.

[3] T. Nakano, T. Suda, Y. Okaie, M. J. Moore, and A. V Vasilakos, "Molecular communication among biological nanomachines: A layered architecture and research issues," *IEEE Trans. Nanobioscience*, vol. 13, no. 3, pp. 169–197, 2014.

[4] A. Gohari, M. Mirmohseni, and M. Nasiri-Kenari, "Information theory of molecular communication: Directions and challenges," *IEEE Trans. Mol. Biol. Multi-Scale Commun.*, vol. 2, no. 2, pp. 120–142, 2016.

[5] N. Farsad, Y. Murin, A. W. Eckford, and A. Goldsmith, "Capacity limits of diffusion-based molecular timing channels with finite particle lifetime," *IEEE Trans. Mol. Biol. Multi-Scale Commun.*, vol. 4, no. 2, pp. 88–106, 2018.

[6] T. Nakano, M. J. Moore, F. Wei, A. V Vasilakos, and J. Shuai, "Molecular communication and networking: Opportunities and challenges," *IEEE Trans. Nanobioscience*, vol. 11, no. 2, pp. 135–148, 2012.

[7] N. Farsad, "Molecular communication: Interconnecting tiny nanobio devices," *GetMobile Mob. Comput. Commun.*, vol. 22, no. 2, pp. 5–10, 2018.

[8] M. Biletic, F. H. Juwono, and L. Gopal, "Nanonetworks and Molecular Communications for Biomedical Applications," *IEEE Potentials*, vol. 39, no. 3, pp. 25–30, 2020.

[9] P. Manocha and G. Chandwani, "Design Methodology of Passive In-Line Relays for Molecular Communication in Flow-Induced Microfluidic Channel," *Biosensors,* vol. 11, no. 3, p. 65, 2021.

[10] Y. Cevallos *et al.*, "Theoretical Basis for Gene Expression Modeling Based on the IEEE 1906.1 Standard," in *International Conference on Bio-inspired Information and Communication Technologies*, 2021, pp. 145–162.

[11] W. Haselmayr, N. Varshney, A. T. Asyhari, A. Springer, and W. Guo, "On the impact of transposition errors in diffusion-based channels," *IEEE Trans. Commun.*, vol. 67, no. 1, pp. 364–374, 2018.

[12] Y. Cevallos, L. Molina, A. Santillán, F. De Rango, A. Rushdi, and J. B. Alonso, "A digital communication analysis of gene expression of proteins in biological systems: A layered network model view," *Cognit. Comput.*, vol. 9, no. 1, pp. 43–67, 2017.

[13] T. Nakano, A. W. Eckford, and T. Haraguchi, *Molecular communication*. Cambridge University Press, 2013.

[14] M. C. Gursoy, M. Nasiri-Kenari, and U. Mitra, "Towards High Data-Rate Diffusive Molecular Communications: Performance Enhancement Strategies," *arXiv Prepr. arXiv2101.02869*, 2021.

[15] T. Nakano, Y. Okaie, and J.-Q. Liu, "Channel model and capacity analysis of molecular communication with Brownian motion," *IEEE Commun. Lett.*, vol. 16, no. 6, pp. 797–800, 2012.

[16] M. Kuscu, E. Dinc, B. A. Bilgin, H. Ramezani, and O. B. Akan, "Transmitter and receiver architectures for molecular communications: A survey on physical design with modulation, coding, and detection techniques," *Proc. IEEE*, vol. 107, no. 7, pp. 1302–1341, 2019.

[17] M. \cSükrü Kuran, H. B. Yilmaz, I. Demirkol, N. Farsad, and A. Goldsmith, "A survey on modulation techniques in molecular communication via diffusion," *IEEE Commun. Surv. Tutorials*, vol. 23, no. 1, pp. 7–28, 2020.

[18] X. Chen, Y. Huang, L.-L. Yang, and M. Wen, "Generalized Molecular-Shift Keying (GMoSK): Principles and Performance Analysis," *IEEE Trans. Mol. Biol. Multi-Scale Commun.*, vol. 6, no. 3, pp. 168–183, 2020.

[19] M. C. Gursoy, D. Seo, and U. Mitra, "Concentration and Position-Based Hybrid Modulation Scheme for Molecular Communications," in *ICC 2020-2020 IEEE International Conference on Communications* (ICC), 2020, pp. 1–6.

[20] N. V Sabu, N. Varshney, and A. K. Gupta, "On Hybrid MoSK-CSK Modulation based Molecular Communication: Error Rate Performance Analysis using Stochastic Geometry," *arXiv Prepr. arXiv1904.09736*, 2019.

CAPÍTULO 3

Análisis comunicacional de los estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1

COMUNICACIONES MOLECULARES
Un análisis desde el paradigma protocolario de IEEE

En este capítulo se analizarán los estándares de comunicaciones que el Instituto de Ingenieros Eléctricos y Electrónicos IEEE (*Institute of Electrical and Electronics Engineers*) ha generado con relación a las Comunicaciones Moleculares (CM). Así, se abordará el porqué de la necesidad de definir un conjunto protocolario comunicacional para las CM, lo cual, fundamentalmente, se debe a la heterogeneidad presente en los diferentes enfoques individuales para el análisis, simulación e implementación de condiciones para casos de estudio de CM. En tales circunstancias, la presencia de un estándar para la industria, la academia y su aplicabilidad en casos de alta delicadeza como en la medicina, se convierte en un requerimiento preponderante de la nanotecnología (las nanocomunicaciones son una parte de la nanotecnología) en la ciencia.

Consecuentemente este capítulo detallará los estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1 que determinan definiciones, elementos y componentes de comunicación, un marco referencial protocolario y software de simulación (*NS-3 Network Simulator-3*) para CM. Adicionalmente, al final del capítulo se utilizará el código abierto que los estándares IEEE contienen para generar simulaciones: este código es parte de los dos ejemplos de nano comunicaciones que proporcionan dichos estándares, el primero se orienta a las comunicaciones electromagnéticas a nanoescala, y el segundo, se refiere a un caso de estudio de CM[V] propiamente.

V A lo largo del libro se analizarán las nanocomunicaciones desde el enfoque de las CM, el otro tipo de nanocomunicaciones, es decir, las del tipo electromagnético, no serán abordadas.

3.1. Prospectiva de la necesidad para establecer un estándar de nanocomunicaciones

Las redes de nanocomunicaciones se han discutido ampliamente desde hace aproximadamente quince años, cuando dichas redes empezaron a ser observadas como un nuevo paradigma de comunicación, en el que existía la expectativa de la eventual aplicación de las técnicas de transmisión/recepción de la información de las telecomunicaciones y de las tecnologías de la información. El enfoque de análisis de "esta nueva forma de comunicación" a nivel nano (o molecular, propiamente) no ha causado, sin embargo, el mayor de los impactos en la ciencia, esta situación se produce, básicamente, por dos razones. La primera se debe a la carencia de un marco referencial protocolario común que denote la posibilidad de unificar esfuerzos individuales, de manera que cada investigación en el tema se solidifique y se torne en el punto de inicio de la siguiente. La segunda razón radica en el hardware que sustenta la experimentación en CM, era imprescindible su validación universal, además de su coherencia pertinente en los entornos de simulación correspondientes. Por otra parte, el desarrollo de nuevas tecnologías requiere el apoyo y la aceptación de la industria y la academia para poder garantizar la sobrevivencia y sustentar la vigencia de tal tecnología. Este núcleo conceptual comunicacional, que amalgama industria, academia y tecnología (definida para aplicaciones útiles para la humanidad), demanda un marco referencial común o estandarizado para asegurar que todas y cada una de las aristas de tal núcleo se logren consolidar en consenso a través de definiciones precisas de diferentes elementos de comunicación a nivel nano que intervienen en la transferencia de información biológica o molecular [1], [2].

La ausencia de un estándar origina que investigadores de diferentes áreas científicas se encuentren aparentemente dispersos en el establecimiento de conceptos en los que, por ejemplo, el término "comunicación" llegue a significar para la biología "el manejo de entidades moleculares que se encuentran en contacto directo, priorizando siempre los mecanismos en los que se deben comprender los sistemas y su causalidad, la interacción de fenómenos y procesos que producen efectos medibles"; en tanto, el mismo término "comunicación" parecería ser definido en forma diversa para la ingeniería de las teorías de la información, en las que la importancia se centra en la entropía de la información inmersa en una comunicación y la eventual posibilidad de obtener simulaciones y el entendimiento de los sistemas de comunicación subyacentes [1], [2].

Otra motivación importante para propender a una estandarización es el direccionamiento del problema originado en el desarrollo de componentes de simulación de redes de comunicación a nanoescala con interfaces diferentes, pero no interoperables, además del aparecimiento de módulos de simulación que no se pueden reusar en otras investigaciones [1], [2].

Teniendo en cuenta toda la connotación precedente que vislumbra la ineludible necesidad de generar la estandarización de procesos inmersos en comunicaciones a nanoescala (de tipo electromagnético y molecular), en el año 2015, IEEE establece un marco de referencia conceptual para las nanocomunicaciones, mediante el estándar 1906.1, en el documento denominado "*Recommended Practice for Nanoscale and Molecular Communication Framework*" [3] y, posteriormente, en el año 2020 con el estándar 1906.1.1, en el documento titulado "*IEEE Standard Data Model for Nanoscale Communication Systems*", el cual adjunta un modelo de información YANG (*Yet Another Next Generation*) para la puesta en marcha del modelo conceptual establecido en el estándar 1906.1 [4]. Una vez definidos los protocolos IEEE en el área de las nanocomunicaciones, se optimiza el tiempo en el desarrollo de prototipos y, colaboraciones de investigación, y se minimiza el riesgo inmerso en pruebas de tecnologías y sus aplicaciones, en particular, en lo que respecta a situaciones clínicas y de la salud de seres vivos [1], [2], [5]–[20]. El objetivo de IEEE con la estandarización incluye la especificación de características y definiciones únicas (sin explicitar algún protocolo comunicacional en específico) que se encuentran en las comunicaciones al nivel nano mientras se potencia la compatibilidad y la interdisciplinariedad científica (las nanocomunicaciones moleculares son un puente entre las comunicaciones en ingeniería, sistemas digitales, y las redes de computadoras con la biología molecular y la bioingeniería [11], [12]) enfocadas hacia la implementación [1], [2].

Con la presencia de los estándares 1906.1 y 1906.1.1, las redes de comunicación creadas por humanos se extienden al nivel nano, lo cual incluye experimentos en vivo, simulaciones, CM, materiales inteligentes, sensores moleculares, además de la habilidad de operar en entornos realmente imposibles para comunicaciones macro (por ejemplo, cavidades del cuerpo humano) [8]. Para alcanzar tales objetivos de comunicación los estándares de tipo nano de IEEE se estructuran mediante cuatro aspectos [21]:

1. Definiciones.
2. Marco referencial.
3. Métricas.
4. Modelo de capas protocolarias [21].

3.2. Análisis general de los estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1

La información que proveen los dos estándares de IEEE de comunicaciones al nivel nano se presenta, básicamente, desglosada en secciones, cada una de ellas complementa a las demás; el empleo de esta perspectiva seccional permite que se estratifique el complejo marco informativo y de procesos de simulación de una manera metódica, comprensible y simplificada, centrándose, particularmente, en el contenido de cada sección, con lo que la densa cantidad de información global de las nanocomunicaciones de los estándares 1906.1 y 1906.1.1 se exhibe en forma modular, clara y precisa. A continuación, se consideran, brevemente, cada una de tales secciones para concebir una connotación general de la amplia información proporcionada por los estándares y, a partir de la Sección 3.2.4 del presente capítulo, se explican detalladamente cada uno de los diversos elementos que integran tales estándares.

3.2.1 Sección de definiciones

La primera parte de la documentación de los estándares IEEE de tipo nano denota una completa y detallada sección referente a las definiciones de redes de nanocomunicaciones, dichas definiciones son el soporte para futuros estudios en el área, y propenden, de forma estricta, a establecer los fundamentos conceptuales de las comunicaciones a nivel nano (tanto para comunicaciones electromagnéticas como para CM). Por lo que, lógicamente, la primera especificación de ambos estándares se enmarca en puntualizar que el término "nano" hace referencia al rango dimensional entre 1 (*nm*) y 100 (*nm*), el límite inferior del rango se selecciona, simplemente, para excluir el uso de átomos aislados en los sistemas nano. En contraste, el límite superior corresponde al tamaño al cual las propiedades de los materiales varían sustancialmente de macro a nanoescala. Por consiguiente, los nodos que transferirán información a nivel nano deberán enmarcarse en dicho rango dimensional. Los elementos básicos de un sistema de comunicaciones, transmisor, receptor, canal de comunicaciones, mensajes de información y portadoras[vi] (o moléculas portadoras propiamente) de mensajes, también se explicitan en la sección de definiciones de los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906, aunque no son estrictamente detallados [21].

vi A diferencia de las telecomunicaciones (que distinguen claramente entre la señal portadora y la señal de información), en las CM, las señales de información o moléculas de información son ellas mismas sus propias portadoras, ya que tales moléculas definen y ejecutan mecanismos para viajar en el entorno que las rodea hacia el receptor (Capítulo 1).

3.2.2 Sección de marco referencial (*framework*)

La segunda sección de los estándares de nanocomunicaciones de IEEE provee un marco de referencia (*framework*) comunicacional conceptual, general y a nanoescala, el cual consiste en un número específico de componentes interoperables entre sí y con funciones definidas con precisión. En la Sección 3.4 del presente capítulo se analizarán dichos componentes, los cuales son [21]:

1. *Componente de portadora*[vii] *de mensajes*. Se describe como una entidad física que transporta los mensajes (información) a través del medio de transmisión.
2. *Componente de movimiento*. Representa el fenómeno físico que efectiviza el movimiento de la portadora de mensajes; este componente puede producir una propagación aleatoria de movimiento, este grado de aleatoriedad se controla mediante el componente de campo.
3. *Componente de campo*. Organiza y guía el movimiento del componente previo.
4. *Componente de perturbación*. Se refiere al mecanismo necesario para adecuar el componente de portadora de mensajes al medio de transmisión, para transferir la señal asociada al contenido de la información del mensaje.
5. *Componente de especificidad*. Establece los requerimientos para la recepción pertinente de la información en el destino comunicacional.

Este marco de referencia conformado por los cinco componentes mencionados se compara con el modelo de referencia de siete capas protocolarias ISO/OSI (*International Organization of Standardization/Open Systems Interconnection*) lo cual se puede notar en la Figura 3.1 [21] y, en razón de la escala dimensional y sus correspondientes aspectos físicos, el marco de referencia de los estándares IEEE de nivel nano se sitúa en las capas inferiores del modelo ISO/OSI [21].

vii Se emplea el término "portadora" y no portador para que exista coherencia entre los sistemas de comunicación nano y los tradicionales en cuanto al género femenino al hacer referencia a la "señal" portadora del mensaje.

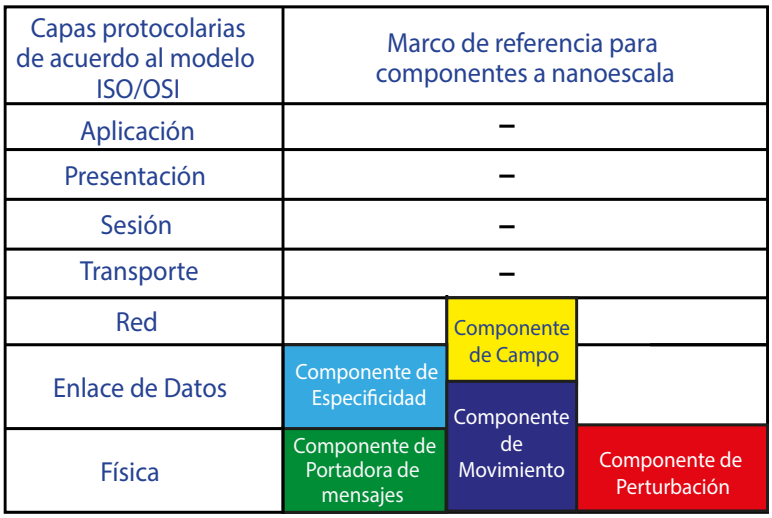


Figura 3.1. Mapeo de los componentes del marco de referencia de los estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1 con las capas protocolarias del modelo de referencia ISO/OSI.

En razón de la funcionalidad de los componentes del marco de referencia y de los elementos de comunicación de los sistemas al nivel nano, tales sistemas resultan menos complejos y de programación más simple que sus contrapartes de telecomunicaciones a macro escala. Además, el marco de referencia nano de IEEE resulta ser en realidad representativo con relación a los elementos que existen en los sistemas naturales a nanoescala que se presentan en los sistemas de comunicación biológicos. Así, por ejemplo, el componente de perturbación tiende a estar supeditado a la parte de la mecánica en la implementación; el componente de movimiento, ciertamente, es de tipo aleatorio adyacente a fenómenos resultantes de fuerzas Brownianas, por lo que se requiere cierta clase de direccionalidad o gradiente por parte del componente de campo para generar movimientos controlados, de alguna manera el grado de control adicional se produce a través del componente de especificidad (particularmente referente a funciones de direccionamiento de la información) [3].

Un problema con la utilización del modelo de referencia ISO/OSI consiste en la carencia de un marco de referencia detallado que permita que se pueda describir explícitamente la matemática detrás de una red de comunicaciones a nanoescala, por lo que los estándares de IEEE 1906.1 y 1906.1.1 han diseñado su *framework* lo más minuciosamente posible como prerrequisito para el diseño protocolario y sus eventuales aplicaciones. La relación entre las capas protocolarias ISO/OSI y el *framework* nano se especifican así [3]:

a. *Mensaje*. En razón de que el mensaje se refiere al elemento comunicacional a ser transmitido se relaciona con una PDU (Protocol Data Unit) convencional de las redes de computadoras tradicionales, por lo que se lo puede interpretar en el contexto de una trama, paquete o cualquier unidad informativa protocolaria.
b. *Componente de portadora de mensajes*. Se denomina componente 0 en los estándares IEEE de tipo nano, y se relaciona con cualquier característica de codificación de la señal de información (capa 1[viii]).
c. *Componente de movimiento*. Se denomina componente 1 y su accionar corresponde (aproximadamente[ix]) a funciones de propagación de una señal de información, es decir, de capa 1.
d. *Componente de campo*. Se denomina componente 2, y sus funciones se asocian con tareas de capa 2 en lo que concierne a asegurar que la información fluya entre nodos en enlaces de comunicaciones que se encuentran en un rango directo (adyacente) de distancia, y se le otorga cierta funcionalidad de direccionamiento a nivel de capa 3.
e. *Componente de perturbación*. Se denomina componente 3 y se lo puede vincular con tareas que se realizan en la capa 1, en lo relativo a la modulación o cambios que ocurren en la señal a ser transmitida.
f. *Componente de especificidad*. Se denomina componente 4 y sus funcionalidades se supeditan al direccionamiento que se lleva a cabo en la capa 2.

3.2.3 Sección de métricas

La tercera sección de los estándares a nanoescala de IEEE denota la definición de métricas comunes para proporcionar la información de cómo operan entre sí los elementos de un sistema de comunicación, los mecanismos de cómputo y los parámetros que determinan el rendimiento de una red de nanocomunicación. Evaluando estas métricas, los investigadores pueden medir y comparar objetivamente el grado de optimización de sus diseños [3], [4].

viii En este libro se hará alusión a las capas del modelo de referencia ISO/OSI.
ix Para poder aplicar las TIC en los sistemas de comunicación biológicos o moleculares se deben suponer ciertas abstracciones debido a que, siendo sistemas de comunicación de naturaleza diversa, las analogías y el comportamiento comunicacional no son idénticos.

El estándar clasifica las métricas en función de cada componente del *framework*. En consecuencia, las métricas relacionadas con el componente de portadora de mensajes se encargan de la medición de cómo se transmite la información. Métricas de *internetwork* típicas como "El tiempo de vida" o TTL (*Time To Live*) ocasionan que el componente en mención opte por descartar la información cuando se excede este valor de tiempo; la energía asociada a la señal de información se traduce a nivel nano como la energía requerida para transportar la información desde el emisor hasta la portadora de mensajes, lo cual también es una métrica [3], [4].

Por otra parte, las métricas referentes al componente de movimiento difieren de las métricas usuales de las redes de computadoras y se enfocan en la física detrás del transporte de la información del componente 0 (o portadora de mensajes) a través del canal de comunicación. Se debe notar que tales métricas, principalmente, evalúan la comunicación molecular al nivel físico, este hecho también ocurre en las métricas para el componente de campo, en el cual es preponderante el control del mecanismo que permite que el componente 0 se pueda guiar (bajo un gradiente, por ejemplo). Las métricas para el componente de especificidad se orientan hacia la capacidad del componente 0 para producir el transporte de información a un destino en particular (direccionamiento) de forma que las métricas de este componente gestionan los porcentajes de componente 0 que no se direccionan a un destino puntual, y, por tanto, no son procesados como información al llegar al receptor [21].

Los estándares para nanocomunicaciones de IEEE proporcionan otras métricas generales para examinar el rendimiento de la nanored en conjunto, por ejemplo, la métrica "relación ancho de banda-volumen" (Sección 3.2.4.5.5 del presente capítulo) se emplea para la evaluación de la cantidad total de información que intercambian los nanonodos que conforman la nanored encontrándose en un volumen específico del total de la distribución espacial de nanonodos [21].

Para proveer una herramienta de programación de nanoredes, los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906 establecen el empleo del simulador de eventos discretos de código abierto y de estructura modular NS-3 (*Network Simulator-3*) como el entorno común de desarrollo, el cual integra todos los componentes y elementos de nanocomunicaciones que los estándares sustentan. El objetivo de la utilización de NS-3 es que cada aplicación realizada en él puede ser reusada por otros investigadores [21].

3.2.4 Parámetros informacionales es- tablecidos en las secciones de los estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1

La amplia documentación proporcionada por los dos estándares de tipo nano de IEEE determina definiciones y conceptos precisos para no generar ambigüedad en el contexto del análisis y diseño de los escenarios de comunicaciones a nivel nano para los investigadores, la academia y la industria, así como su correspondiente interacción. En los párrafos siguientes se discuten estos parámetros de comunicación que fundamenta el análisis genérico de un sistema de comunicación de tipo nano.

3.2.4.1 Sección de introducción en el estándar IEEE 1906.1

En la transferencia de información de un sistema de CM (o sistema de comunicación biológico) se deben tener en cuenta las siguientes especificaciones [3], [8]:

a. En comunicaciones nano se asume que las moléculas se desplazan en el medio de transmisión obedeciendo las leyes de Fick; es decir, se propagan mediante el movimiento omnidireccional (Sección 2.3 del Capítulo 2).
b. El número de moléculas que se transmiten en cada pulso de una comunicación se debe conocer explícitamente, este parámetro se puede, por ejemplo, determinar por medio del tipo de modulación (Sección 2.4 del Capítulo 2).
c. Se debe evaluar el retardo de propagación en el enlace molecular (Secciones 2.5.3 del Capítulo 2 y 3.5 del presente capítulo).
d. Se requiere estimar la máxima capacidad del canal de transmisión (Sección 2.3.4 del Capítulo 2), según el tipo de CM.

3.2.4.2 Sección de definiciones en los estándares IEEE 1906.1 (Secciones 3 y 4 de la documentación del estándar) y 1906.1.1 (Sección 3 de la documentación del estándar)

En la transferencia de información de un sistema de CM (o sistema de comunicación biológico) se deben tener en cuenta las siguientes especificaciones [3], [4], [8].

a. Una red molecular consiste en un sistema diseñado por humanos para la comunicación al nivel nano, usando para este propósito principios de la física cuántica que se adecuan pertinentemente a los sistemas a nanoescala.
b. La comunicación se puntualiza mediante el acto de transmitir un mensaje desde una entidad emisora a una entidad receptora que se encuentra en el destino de tal comunicación, lo cual incluye los elementos mensaje, transmisor, receptor, medio de transmisión, y portadora de mensajes, elementos necesarios para proveer un servicio de comunicación propiamente en la red. Al menos uno de tales componentes debe tener dimensiones nano.
c. Una red activa es un sistema en el que se transfieren paquetes a través de una red de comunicaciones, la cual modifica dinámicamente su operación. Un paquete es una unidad de información encapsulada para ser transportada por dicha red de comunicación.
d. Los mensajes se refieren a la información a ser transmitida entre los extremos de la comunicación, la cual es conocida por el emisor y desconocida, pero reconocible para el receptor. Un mensaje se relaciona con las unidades de información de las redes de computadoras convencionales; es decir, tramas, paquetes o cualquier tipo de PDU (*Protocol Data Unit*).
e. La portadora de mensajes es una entidad física que transporta un mensaje a través del medio de comunicación, este componente se relaciona con las características de una señal de información (o su representación) que se modificarán en la transmisión.
f. Transmisor (emisor o fuente) es un dispositivo (nodo) que se emplea para transferir un mensaje a un receptor.
g. El destino molecular es un dispositivo que recolecta los mensajes desde varias fuentes.
h. Receptor[x] es un elemento que recibe varias señales.
i. Repetidor es un componente que facilita la comunicación entre el extremo origen y el extremo destino y entre nodos intermedios. La motivación de los estándares para mencionar este elemento de comuni-

x El término "receptor" es ampliamente empleado en telecomunicaciones con relación al extremo destino o extremo comunicacional al que se le transmite la información desde un origen, fuente o emisor; sin embargo, debido a que en los estándares de tipo nano de IEEE se refieren a "receptor" como "aquellos elementos biológicos (generalmente proteínas) que se encuentran en la superficie de una célula", en este libro se enfatizará el contexto para determinar en cuál de los dos escenarios se hace referencia a dicho término; es decir, en telecomunicaciones o como "receptores celulares" en el extremo destino de un sistema celular.

cación es posibilitar el envío de mensajes a través de enlaces a larga distancia a nivel nano, lo cual puede producirse, por ejemplo, mediante amplificación de la señal de información (Sección 5.3.2 de la documentación estándar 1906.1).

j. El medio de transmisión se refiere al entorno molecular de tipo gaseoso, gel o líquido que permite la conexión entre los extremos de la comunicación.
k. Especificidad es la medida de la proporción de ocurrencia de aquellos eventos en las señales portadoras de mensajes que arriban a un destino sin estar direccionadas explícitamente y, por tanto, no se procesará la información que portan.
l. La sensibilidad evalúa la proporción de aquellos eventos en las señales portadoras de mensajes que arriban a un destino estando direccionadas explícitamente y, por tanto, se procesará la información que portan. La especificidad y la sensibilidad son ampliamente analizadas en la Sección 6.12 de la documentación del estándar 1906.1, y se tratan en la Sección 3.2.4.5.4 del presente capítulo.
m. La señalización molecular y los receptores que se encuentran en la superficie de una célula biológica actúan como mensaje y procesador de la información, respectivamente, en el punto de recepción final de los datos moleculares.

3.2.4.3 Sección de marco de referencia (*framework*) en los estándares IEEE 1906.1 (Secciones 5.2 de la documentación del estándar) y 1906.1.1 (Sección 3.1 de la documentación del estándar)

En la transferencia de información de un sistema de comunicación molecular (o sistema de comunicación biológico) se deben tener en cuenta las siguientes especificaciones [3], [4], [8]:

a. *Componente 0 (Portadora de mensajes).* Provee los servicios de transporte del mensaje; así, una portadora puede ser una onda o partícula, o una combinación de las dos. La estructura molecular puede codificar la información que transporta la portadora a través de cualquier cambio molecular como, por ejemplo, concentración, número de moléculas, tiempo de liberación molecular, etcétera. En el estándar 1906.1.1 se definen las especificaciones para el caso de motores moleculares como portadoras de mensajes (Sección 5.3.3.3.2 de la documentación del estándar).

b. *Componente 1 (Movimiento).* Define la capacidad de movimiento del componente 0 (portadora de mensajes); el componente 1 (movimiento) brinda el servicio de movilidad en cualquier dirección como resultado de una fuerza o empuje aplicados al componente 0 (portadora de mensajes). Adicionalmente el componente 1 (movimiento) otorga el potencial pertinente para la transferencia de información a través del canal de comunicaciones, independientemente del tipo de transporte generado por la portadora de mensajes (transporte activo-generando su propio movimiento o pasivo-propagación en función del medio). Los ejemplos en este componente incluyen la difusión molecular mediante fluidos, movimiento Browniano o de autopropulsión. En el estándar 1906.1.1 (Sección 5.3.3.3.2 de la documentación del estándar) se puntualizan especificaciones de este componente, los cuales incluyen los procesos de difusión.
c. *Componente 2 (Campo)*. Organiza el desplazamiento del componente 1 (movimiento). El componente 2 (campo) establece un servicio direccional en el movimiento para el componente 0 (portadora de mensajes), lo cual es similar a una guía de onda virtual en las comunicaciones convencionales. El componente 2 (campo) se puede implementar interna o externamente con relación al medio de transmisión. Los ejemplos de este componente incluyen implementaciones internas con movimiento de enjambre o comportamiento de bandadas. Entre las implementaciones externas se cuentan los flujos de fluido no turbulento, campo EM (Electro Magnético), gradiente químico liberado para orientar el movimiento de bacterias, motores moleculares guiados por microtúbulos. En el estándar 1906.1.1 (Sección 5.3.3.3.2 de la documentación del estándar) se precisan especificaciones para este componente, las cuales incluyen concentraciones de gradientes.
d. *Componente 3 (Perturbación).* Define la señal transportada por el componente 0 (portadora de mensajes), y genera el servicio de variación de las características de la portadora de mensajes, proceso imperioso para representar una señal, lo cual se puede efectuar, por ejemplo, mediante modulación. Los ejemplos en la documentación de los estándares IEEE de la familia 1906 incluyen señales que se basan en el número de portadoras de mensajes recibidas, concentraciones de densidades (en mayor grado referidas como densas propiamente o de menor grado referidas como escasas) moleculares controladas y empleo de ADN (Ácido Desoxirribonucleico) para representar múltiples estados. En el estándar 1906.1.1 (Sección 5.3.3.3.2

de la documentación del estándar) se definen las especificaciones para el componente de perturbación las cuales incluyen las estructuras moleculares.

e.. *Componente 4 (Especificidad).* Efectúa la recepción precisa o de direccionamiento explícito de la información del componente 3 (componente de perturbación), el componente 4 (especificidad) proporciona el servicio de captación o recepción de la información que provee la portadora de mensajes en el extremo destino. Los ejemplos que se incluyen en este componente determinan la afinidad de una molécula con un destino objetivo (por ejemplo, un órgano objetivo), la complementariedad del ADN para la hibridación, etcétera. En la Sección 5.3.3.3.2 de la documentación del estándar 1906.1.1 se establecen algunas especificaciones para este componente, entre las que se encuentran la sensibilidad de un receptor molecular.

La Tabla 3.1 indica ejemplos de los componentes del *framework* al nivel nano de los estándares IEEE 1906.1 (Sección 5.4 de la documentación del estándar) y 1906.1.1 (Secciones 5.4.1, 5.5.1 y, 5.5.3 de la documentación del estándar).

Tabla 3.1. Ejemplo de los componentes en el *framework* de tipo nano de IEEE [3], [4].

Componentes IEEE 1906.1 y 1906.1.1	Ejemplo 1: Ondas de Calcio	Ejemplo 2: Ligandos-Receptores	Ejemplo 3: Motores Moleculares	Ejemplo 4: Bacterias flageladas
Portadora de mensajes	Concentración de ondas de calcio	Concentración de ligandos	Motores moleculares y su carga	Carga bacteriana
Movimiento	Difusión	Difusión	Caminata y difusión dirigida	Orientación a objetivos (alimento/luz)
Campo	Gradiente de concentración dirigida	Gradiente de concentración dirigida	Polaridad de microtúbulos y conectividad	Concentración química de partículas de alimento e intensidad de luz
Perturbación	Tasa de transmisión o cambios de concentración	Tasa de transmisión o cambios de concentración	Cambio en el número y tipo de moléculas en la carga	Cambio en el número y tipo de moléculas en la bacteria
Especificidad	Sensores de recepción de calcio Sensibilidad al Ca+	Sensibilidad del receptor al ligando	Sensibilidad del receptor a la carga	Sensores de recepción de bacterias o carga

3.2.4.4 Sección de interfaces de los componentes en el marco de referencia (*framework*) en los estándares IEEE 1906.1 (Sección 5.3.5 de la documentación del estándar) y 1906.1.1 (Secciones 5.5.1 y 6.2.2 de la documentación del estándar)

Para proveer un servicio, cada componente del marco de referencia cuenta con una interfaz general, pero claramente definida, así se tienen las interfaces [3], [4], [8]:

a. Mensaje-a-portadora de mensajes (codificación de la información).
b. Portadora de mensajes-a-movimiento (rango de movimiento).
c. Movimiento-a-campo (movimiento controlado-guiado).
d. Campo-a-perturbación (rápido control del campo).
e. Perturbación-a-especificidad (habilidad para modificar dinámicamente la especificidad con el objeto de codificar el mensaje).
f. Especificidad-a-portadora de mensajes (portadora de mensajes y capacidad de producir enlaces moleculares).
g. Portadora de mensajes-a-receptor en el destino comunicacional (decodificación de la información).

3.2.4.5 Sección de métricas en los estándares IEEE 1906.1 (Sección 6 de la documentación del estándar) y 1906.1.1 (Sección 6.2.3 de la documentación del estándar)

En esta sección se indican las métricas comunes que se emplean en las redes de nanocomunicaciones y en las nanocomunicaciones propiamente para presentar la información de interoperabilidad entre los componentes de un sistema, así como para la comparación del rendimiento entre varios sistemas de comunicaciones a nanoescala. En los párrafos posteriores se detallan dichas métricas [3], [4].

3.2.4.5.1 Métricas para el componente de portadora de mensajes

Las métricas para este componente analizan la codificación de la información en un mensaje y la influencia que ejercen el medio de comunicación y el destino molecular en el mensaje. Estas métricas son [3], [4]:

a. *Capacidad de entrega del mensaje*. Su notación es MD (*Message Deliverability*), esta métrica se encarga de la medición de la posibilidad de si una portadora de mensajes subsiste el tiempo suficiente para suministrar su información al receptor pertinente. La métrica *MD* se define como la capacidad del transmisor para aumentar la probabilidad de que el mensaje a ser transferido pueda ser entregado al receptor a través del medio de comunicación antes de su expiración; esto es, en el tiempo en el que el receptor pueda utilizar el contenido del mensaje o antes de que el mensaje expire, o que las características de movimiento, de flujo o del canal sean alteradas. La capacidad de entrega se mide como una probabilidad (de que el mensaje pueda ser entregado al receptor previsto antes de que expire) asumiendo una transmisión libre de errores, sus unidades son un valor de probabilidad, la métrica asume que los mensajes tienen un tiempo de vida finito (*TTL Time-to-live*). Por lo tanto, $MD = P(t_r < TTL)$, donde t_r es la duración del mensaje en el momento de la recepción.

b. *Tiempo de vida del mensaje (duración del mensaje)*. Mide la vida útil de una portadora de mensajes. Una portadora de mensajes se puede diseñar para desintegrarse o volverse ineficaz después de un tiempo de vida específico (*TTL*). La vida útil se define como la cantidad de tiempo que un mensaje persiste antes de degradarse o sufrir modificaciones que alteren su contenido. Por consiguiente, una red de comunicación debe proporcionar la entrega oportuna de algunos mensajes mientras que otros pueden tener una vida útil más larga (durabilidad).

c. *Densidad de información*. Se refiere a la cantidad de información codificada de una portadora de mensajes por unidad de volumen. Las teorías de la información de Shannon se asumen por defecto, y se incluyen, además, otras formas de medición de la información como la complejidad de Kolmogorov[xi], o las basadas en

[xi] La complejidad de Kolmogorov k se define como una función de una cadena binaria finita de longitud arbitraria correspondiente al conjunto de los números naturales $\mathbb{N}$. Así, $k: \{0,1\}^* \rightarrow \mathbb{N}$ es una función definida en objetos representados por la cadena binaria [30].

la teoría algorítmica de la información[xii]. El volumen incluye tanto el volumen del mensaje como la portadora de mensajes. Las unidades de esta métrica son ***bits*** por ***nanómetro cúbico***. La densidad de información se relaciona con la relación ancho de banda-volumen[xiii], la densidad transportada por una portadora de mensajes puede permitir un mayor ancho de banda dentro de un volumen menor.

d. *Producto ancho de banda-retardo*. Su acrónimo es $B \times D$ (en ***bits***), donde B (*Bandwidth*) representa el ancho de banda (en bits/segundos) y D (*Delay*) es el retraso del enlace de comunicación (en ***segundos***). El producto de ancho de banda y retardo es proporcional al número máximo de portadoras de mensajes que se pueden enviar por el canal de transmisión. Para el manejo apropiado de protocolos y algoritmos de comunicación es necesario el conocimiento de esta métrica para contar, así, con un diseño de comunicación óptimo. El producto de ancho de banda y retardo determina la cantidad máxima de bits que se puede transferir por un enlace de comunicación a nanoescala en cualquier momento.

e. *Energía de la información y comunicación*. La portadora de mensajes requiere energía para su movimiento, propulsión (si se usa movimiento activo) y arrastre (si se utiliza movimiento pasivo), se requiere energía para causar un flujo de fluido circundante o para crear un gradiente de campo. Asimismo, se puede requerir energía en el transmisor y en el receptor para la liberación y recepción de la portadora de mensajes, respectivamente. Esta energía puede ser el resultado de la síntesis de la portadora de mensajes en el transmisor o de las características moleculares de recepción. Esta es la métrica que cuantifica la energía utilizada en la comunicación a

---

xii Es la provisión de métodos para la medición de la información intrínseca relacionada con objetos a través de la longitud de su descripción algorítmica.

xiii La relación ancho de banda-volumen tiene en cuenta y combina dos esencias fundamentales de la comunicación molecular y a nanoescala a saber; su tamaño y ancho de banda. La relación ancho de banda-volumen se define como el ancho de banda en bits por segundo que ofrece el sistema dividido por el volumen total del sistema, incluidos el transmisor, el receptor y la portadora de mensajes [3], [4].

nanoescala, corresponde a la energía por bit de información transmitida por el componente de movimiento. Se puede considerar como la eficiencia de la portadora de mensajes, y se representa en la Ecuación 3.1.

$$\frac{E_{mc}}{I_{mc}} \tag{3.1}$$

Donde E_{mc} es la energía requerida para transmitir un mensaje, e I_{mc} es la información por portadora de mensajes en ***bits***.

3.2.4.5.2 Métricas para el componente de movimiento

Se refiere a las métricas que describen el movimiento de la portadora de mensajes, y son [3], [4]:

a. *Comportamiento de la colisión*. El comportamiento de la colisión determina el resultado físico de la colisión entre portadoras de mensajes. Al ocurrir una colisión, el impacto puede producir la unión, fusión, absorción, rebote o reflexión entre portadoras. Esta métrica tiene un impacto significativo sobre si las portadoras de mensajes se dispersan y cómo lo hacen, además de precisar su eficiencia para llegar a sus receptores destino. El comportamiento de la colisión es una medida de la interacción entre las portadoras de mensajes en la colisión misma. Las colisiones pueden ser elásticas, conservando el impulso y la energía cinética, o inelásticas, lo que significa que se conserva solamente el impulso. El grado en que una colisión es elástica o inelástica se cuantifica mediante el coeficiente de restitución, valor que generalmente oscila entre cero y uno. Perfectamente la colisión elástica tiene un coeficiente de restitución de uno, en tanto una colisión perfectamente inelástica posee un coeficiente de restitución de cero, el coeficiente de restitución se cuantifica en la Ecuación 3.2.

$$C_R = \frac{V_{AC}}{V_{BC}} \tag{3.2}$$

Donde C_R es el coeficiente de restitución, V_{AC} es la velocidad relativa (energía, masa) entre las portadoras de mensajes después de la colisión (las siglas *AC corresponden al inglés After Collision*); V_{BC} es la velocidad relativa (energía, masa) entre las portadoras de mensajes antes de la colisión (las siglas *BC* corresponden al inglés *Before Collision*).

b. *Desplazamiento de masa*. Las CM pueden asumir que las portadoras de mensajes están compuestas de masa, la cual sufre pequeñas variaciones cuando ocurre la comunicación, especificadas en un cambio continuo de masa, u oscilación de masa. Esta métrica cuantifica los cambios relativos de masa en función del tiempo. La desviación estándar de las fluctuaciones de frecuencia de masa $\sigma_y(M,T,\tau)$ y (M,T,τ), o varianza de una muestra M se indica en la Ecuación 3.3.

$$\sigma_y^2(M,T,\tau) = \frac{1}{M-1}\left\{\sum_{i=0}^{M-1}\left[\frac{x(iT+\tau)-x(iT)}{\tau}\right]^2 - \frac{1}{M}\left[\sum_{i=0}^{M-1}\frac{x(iT+\tau)-x(iT)}{\tau}\right]^2\right\} \quad (3.3)$$

Donde $x(t)$ es la masa en el tiempo t, T es el periodo de tiempo de muestreo (el tiempo entre cualquier muestra), τ es el tiempo de muestreo y M es el número de muestras.

El promedio fraccional de series de tiempo de frecuencia de masas se detalla en la Ecuación 3.4.

$$\sigma_y^2(M,T,\tau) = \frac{1}{M-1}\left\{\sum_{i=0}^{M-1}\bar{y}_i^2 - \frac{1}{M}\left[\sum_{i=0}^{M-1} y\right]^2\right\} \quad (3.4)$$

Donde M es el número de muestras de frecuencia usadas para el computo de la varianza, T es el tiempo entre cada muestreo, τ es la duración de tiempo de cada frecuencia estimada.

c. *Precisión en el posicionamiento de las portadoras de mensajes*. Se pueden controlar múltiples grupos de portadoras de mensajes como si fueran organismos unificados, para ser dirigidos a lo largo de rutas predeterminadas hacia el receptor mediante una macro unidad externa. Resultará útil localizar los grupos de portadoras de mensajes desde tal macro unidad. Esta información de ubicación se puede emplear para controlar de forma adaptativa el movimiento futuro de los grupos, para mejorar la eficiencia de la entrega de mensajes al reducir el retardo de propagación y la incertidumbre del entorno. La información de ubicación también se puede utilizar para evaluar la capacidad de control remoto y la rastreabilidad de los grupos. Esta métrica cuantifica la precisión de posicionamiento de los grupos de portadoras de mensajes, y se define como el radio del círculo cuyo centro se posiciona en la media y contiene un porcentaje dado de la mitad de las realizaciones de las estimaciones de ubicación (es decir, la medida del rendimiento del error circular probable en el contexto de geolocalización clásico). Todas las coordenadas de ubicación se deben medir con referencia a un marco global que abarca el supersistema donde reside la nanored IEEE 1906. Las unidades de esta métrica son unidades de ***longitud*** estándar. La implementación de esta métrica requiere información detallada sobre los mecanismos de control y seguimiento utilizados por la macro unidad.

3.2.4.5.3 Métricas para el componente de campo

Esta métrica se refiere al grado de control (dirección-gradiente) sobre la portadora de mensajes, el flujo de difusión se emplea en ese sentido para "dirigir" el movimiento Browniano, el flujo de difusión se puede modelar mediante un proceso de Wiener [xiv] o Levy[xv], y puede ser descrito a través de un proceso de ruido de Langevin (que se detalla en el literal c) [3], [4]:

a. *Longitud de persistencia.* Es una medida del grado en que una estructura en forma de cadena es blanda (como cilindrillos de espagueti cocido) o rígida (como varillas de metal). Esto tiene un impacto significativo en las portadoras de mensajes que viajan a lo largo de caminos trazados por hebras (*strands*). Si no hay es-

---

xiv Un proceso de Wiener es un modelo simple del movimiento Browniano en el que la fricción es mínima, y se define en términos de una distribución Gaussiana con notación $x \sim N(m, \sigma^2)$, en donde x es la distribución Gaussiana de media m y varianza σ^2. La función de densidad de probabilidad de x viene dada por la Ecuación *D* [31], [32]:

$$f_X(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} exp\left(-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (D)$$

Siendo $\exp(t) = e^t$. Además, si $B(t)$ representa la posición de un suceso Browniano al tiempo $t \geq 0$ donde $B(0)$ constituye la posición inicial, entonces, $B(t)$ es un proceso de Wiener (en una dimensión) si se satisface las dos condiciones siguientes:

1. Para cualquier tiempo t_1 y t_2 con $t_2 > t_1 \geq 0$ y σ^2 cualquier valor constante:

$$B(t_2) - B(t_1) \sim N(0, \sigma^2(t_2 - t_1)) \quad (E)$$

2. Para dos intervalos de tiempo cualquiera $[t_1, t_2]$ y $[t_3, t_4]$ los incrementos $B(t_4) - B(t_3)$ y $B(t_2) - B(t_1)$ son estadísticamente independientes si los intervalos de tiempo no se superponen.

xv Un proceso estocástico $(B_t)_{t \geq 0}$ es un movimiento Browniano si:
- Casi seguro, $t \mapsto B_t$ se define en forma continua.
- $\forall s, t > 0, B_{s+t} - B_t$ tiene la misma distribución que B_s.
- $\forall\, (n \geq 1) y\, t, 0 \leq t_0 \leq t_1 \leq \cdots \leq t_n$, las variables aleatorias $B_{t_0}, B_{t_1} - B_{t_0}, \ldots, B_{t_n} - B_{t_{n-1}}$ son independientes.

Con tales antecedentes, un proceso estocástico $(X_t)_{t \geq 0}$ en $\mathbb{R}^d$ es un proceso de Levy si cumplen las siguientes condiciones:
1. Los incrementos independientes: $\forall\, (n \geq 1)$ y t, $0 \leq t_0 \leq t_1 \leq \cdots \leq t_n$ las variables aleatorias $X_{t_0}, X_{t_1} - X_{t_0}, \ldots, X_{t_n} - X_{t_{n-1}}$ son independientes.
2. Los incrementos estacionarios: $\forall s,\ t \geq 0$, la distribución $X_{s+t} - X_s$ no depende de s.
3. Casi seguro, $X_0 = 0$.

Se tiene la continuidad estocástica $\mathbb{P}(|X_s - X_t| > \varepsilon) \underset{s \to t}{\longrightarrow} 0$.

tructuras en forma de cadena que componen el entorno, entonces este parámetro será cero. La longitud de persistencia se establece en unidades de ***nanómetros***, donde longitudes más largas definen estructuras más rígidas. La longitud de persistencia es la velocidad a la que las tangentes tomadas a lo largo de cada segmento de una cadena lineal en una red llegan a ser descorrelacionadas de otras. Si $R(s)$ es un punto en un segmento s, entonces $u(s)$es el vector unitario tangente en la Ecuación 3.5.

$$u(s) = \frac{\partial R}{\partial s} \tag{3.5}$$

Donde $R(s)$ es un punto en el segmento s. Las orientaciones del vector unitario tangente para todos los segmentos s se cuantifican por el producto interno en la Ecuación 3.6.

$$\langle u(s) \times u(0) \rangle = e^{-s/\zeta_p} \tag{3.6}$$

Donde $\langle x \rangle$, generalmente, se usa para denotar al valor de expectativa de la variable x, $u(s)$ es el vector unitario tangente en el punto s dentro del conjunto de segmentos conectados, $u(0)$ es el vector unitario tangente en el origen o en el comienzo de la cadena de segmentos conectados, ζ_p es la longitud de la persistencia (expresado en la Ecuación 3.7).

$$\zeta_p = \frac{B_S}{k_B \times T} \tag{3.7}$$

Donde B_S es la rigidez a la flexión, k_B es la constante de Boltzmann, y T es la temperatura. La rigidez a la flexión se relaciona con el módulo de Young como se define en la Ecuación 3.8.

$$B_S = Y \times I \tag{3.8}$$

Donde Y es el módulo de Young e I es el momento de inercia del área dada por la Ecuación 3.9.

$$I = \frac{\pi \times r^4}{64} \tag{3.9}$$

Donde r es el radio del momento de inercia. Así, el módulo de Young se relaciona con la longitud de persistencia por medio de la Ecuación 3.10.

$$Y = \frac{64 \times k_B \times T}{\zeta_p \times \pi \times r^4} \tag{3.10}$$

El módulo de Young es la relación entre el esfuerzo (*presión*) y la deformación (adimensional) y, por lo tanto, sus unidades corresponden a las de *presión*. El conocimiento del módulo de Young permite estimar el grado en que un cilindro (o una estructura tubular) se extenderá por la tensión o se doblará bajo compresión.

b. *Flujo de difusión*. La primera ley de Fick (Capítulo 2) es una de las leyes que gobierna el proceso de difusión, la cual es muy común en la forma de transmitir la información en CM. Esta ley relaciona el flujo de difusión con la concentración bajo el supuesto de un estado estacionario, además, postula que el flujo es transferido de regiones de alta a baja concentración, con una magnitud proporcional al gradiente de concentración. Si se utiliza un sistema referencial de una dimensión, esta ley se expresa en la Ecuación 3.11.

$$J = -D \times \frac{\delta \phi}{\delta x} \tag{3.11}$$

Donde J es el flujo de difusión, el cual es la cantidad de sustancia por unidad de área por unidad de tiempo ($mol/m^2.s$); J mide la cantidad de sustancia que atravesará una pequeña área durante un pequeño intervalo de tiempo. D es el coeficiente de difusión o la difusividad de masa en dimensiones de $longitud^2 \times tiempo^{-1}$ o (m^2/s). Para mezclas ideales ϕ es la concentración en dimensiones de cantidad de sustancia por unidad de volumen (mol/m^3); x es la posición ($longitud$).

c. *Ruido de Langevin*. El movimiento aleatorio tiene un impacto significativo en el rendimiento de las portadoras de mensajes (aquellas en forma de partículas) cuando intentan arribar a sus receptores objetivo. El movimiento aleatorio influye en la medida en que el movimiento

Browniano por mencionar un ejemplo (ecuación de Langevin) de tipo Random Walk (Sección 2.3.2 del Capítulo 2), implica un proceso de Levy, que, por lo tanto, implica un proceso de Poisson, y permite que la teoría de colas clásica proporcione resultados válidos. La métrica específica de interés es el término de ruido $\eta(t)$. El ruido de Langevin describe el movimiento aleatorio de una partícula en un fluido debido a colisiones con las moléculas del fluido expresado en la Ecuación 3.12.

$$m \times \frac{d^2x}{dt^2} = -\lambda \times \frac{dx}{dt} + \eta(t) \qquad (3.12)$$

Donde m es la masa, t es el tiempo, x es la posición, λ es el coeficiente de amortiguamiento. La fuerza que actúa sobre la partícula se describe como la suma de una fuerza viscosa proporcional a la velocidad de la partícula, y un término de ruido $\eta(t)$ (nombre dado en contextos físicos a términos en ecuaciones diferenciales estocásticas que involucran procesos estocásticos) que representa el efecto de las colisiones con las moléculas del fluido. La fuerza $\eta(t)$ tiene una distribución de probabilidad Gaussiana con función de correlación que se manifiesta en la Ecuación 3.13.

$$\langle \eta_i(t) \times \eta_j(t') \rangle = 2 \times \lambda \times k_B \times T \times \delta_{ij} \times \delta(t - t') \qquad (3.13)$$

Donde $\langle x \rangle$ denota, comúnmente, el valor esperado de una variable x, k_B es la constante de Boltzmann, T es la temperatura, y δ es la forma de función δ de las correlaciones en el tiempo, e indica la suposición de que la fuerza en un tiempo t no está correlacionada con la fuerza en cualquier otro momento. Esto es una aproximación, la fuerza aleatoria real tiene una correlación temporal distinta de cero con el tiempo de colisión de las moléculas. Sin embargo, los parámetros que se especifican mediante el ruido de Langevin se usan para describir el movimiento de una partícula "macroscópica" en una escala de tiempo mucho mayor, y en este límite, la correlación δ y el ruido de Langevin se vuelven exactos. Por lo que, el incremento de la temperatura o el coeficiente de amortiguamiento amplía el componente aleatorio.

3.2.4.5.4 Métricas para el componente de especificidad

Estas métricas analizan la afinidad de las portadoras de mensajes con su receptor pertinente en el extremo destino, y se describen a continuación [3], [4].

a. *Especificidad.* A menudo, la especificidad, sensibilidad y afinidad se confunden, pero son métricas muy diferentes. La especificidad (a veces denominada tasa de verdaderos negativos) mide la proporción de negativos que se han identificado como tales (por ejemplo, el porcentaje de portadoras de mensajes no dirigidas a un nodo objetivo previsto y que, por tanto, no son aceptadas por el mismo). La sensibilidad (también llamada tasa de verdaderos positivos) evalúa la proporción de verdaderos positivos que se identifican correctamente (por ejemplo, el porcentaje de las portadoras de mensajes dirigidas a un nodo destino previsto y que consecuentemente son reconocidas y aceptadas por el mismo y procesadas en forma correcta). Estas dos medidas son complementarias de la tasa de falsos positivos y la tasa de falsos negativos, respectivamente. La especificidad se define en la Ecuación 3.14.

$$\frac{T_N}{T_N + F_P} \tag{3.14}$$

Donde T_N es el número de verdaderos negativos, y F_P es el número de falsos positivos.

b. *Afinidad.* Es una medida de la afinidad química; sin embargo, se aplica de manera más amplia en los estándares IEEE de la familia 1906, y así se habla de la afinidad de las portadoras de mensajes con sus destinos objetivo previstos, los medios de transmisión y otras portadoras de mensajes. Esta métrica es un elemento clave del componente de especificidad IEEE de la familia 1906. La afinidad es el fenómeno por el cual ciertos átomos o moléculas tienen tendencia a agregarse o unirse. La definición de la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada IUPAC (*International Union of Pure and Applied Chemistry*) para

la afinidad A es la derivada parcial negativa de la energía libre G de Gibbs con respecto al grado de la reacción ξ a presión y temperatura constantes como lo sugiere la Ecuación 3.15.

$$A = -\left(\frac{\partial G}{\partial \xi}\right)_{P,T} \tag{3.15}$$

Donde A es la afinidad, G es la energía libre de Gibbs, ξ es la reacción cuando la presión y temperatura permanecen constantes.

c. *Sensibilidad*. Esta métrica se establece en función del tiempo y se puntualiza con base en la cantidad de enlaces moleculares. La sensibilidad del receptor molecular se podría reducir en presencia de un gran número de moléculas enlazadas. En cambio, se puede incrementar una vez que los enlaces moleculares se liberan del receptor. Estos aspectos pueden tener un efecto significativo en el rendimiento de la comunicación a nivel nano. La sensibilidad se expresa en la Ecuación 3.16.

$$\frac{T_P}{T_N + T_P} \tag{3.16}$$

Donde T_N es el número de verdaderos negativos, T_P es el número de verdaderos positivos.

d. *Espectro angular (ángulo de llegada)*. Cuantifica la distribución de la intensidad de las señales de comunicación a nanoescala recibidas por el receptor en función del ángulo de llegada. Para las comunicaciones EM a nanoescala, esta métrica es idéntica al espectro angular de potencia utilizado en los canales inalámbricos convencionales. Para las CM, esta métrica se establece de la siguiente manera: se considerará un receptor bidimensional genérico definido como una curva que encierra un área conectada por puntos, y que incluye el punto de referencia (centro) del área de recepción. Se establece el retardo τ y el azimut φ como la hora de llegada y el ángulo de llegada de una portadora de mensajes al receptor.

El retraso se refiere al momento en que el transmisor emitió la portadora que contiene la información, y el azimut se referencia con el centro del área de recepción. La intensidad de la señal recibida dada por el número de portadoras absorbidas por el receptor es una variable aleatoria en el espacio y el tiempo de recepción, en razón de la incertidumbre durante el proceso de propagación causada por movimientos Brownianos aleatorios, degeneración inesperada de las portadoras, etcétera. Se desarrolla una descripción espacio-temporal de los canales de comunicación molecular mediante la introducción del espectro de retardo-azimut $\Xi_{\tau,\varphi}(\tau,\varphi)$, definido como el promedio de conjunto de la intensidad de la señal recibida en τ y φ específicos sobre múltiples realizaciones del proceso de propagación. El espectro de azimut se determina en la Ecuación 3.17.

$$\Xi_{\varphi}(\varphi) = \int_{\tau} \Xi_{\tau,\varphi}(\tau,\varphi) d\tau \qquad (3.17)$$

Donde τ es el tiempo de llegada al receptor, φ es el ángulo de arribo al receptor, $\Xi_{\tau,\varphi}(\tau,\varphi)$ es el espectro de retardo-azimut definido como la intensidad media de la señal recibida en valores específicos de τ y φ.

Esta métrica se puede cuantificar empíricamente o derivarse teóricamente. También se la puede utilizar para extraer otros parámetros del canal de comunicación a nanoescala, como la dispersión angular, que mide la cantidad de dispersión de la señal en el dominio angular. La dispersión de ángulo viene dada por la Ecuación 3.18.

$$\sigma_{\varphi} = \sqrt{\int_{\varphi} \left|\exp(j\varphi) - \mu_{\varphi}\right|^2 \times \Xi_{\varphi}(\varphi) d\varphi} \qquad (3.18)$$

Donde $\mu_{\varphi} = \int_{\varphi} \exp(j\varphi) \times \Xi_{\varphi}(\varphi) d\varphi$, es el espectro de azimut especificado en la Ecuación 3.17.

Esta métrica es una función de densidad de probabilidad. Para las CM, la implementación de esta métrica requiere promediar el número de portadoras de mensajes recibidos dentro de un ángulo diferencial sobre un número suficiente de realizaciones del proceso de propagación.

e. *Espectro de retraso (hora de llegada).* Cuantifica la distribución de la intensidad de las señales de comunicación a nanoescala recibidas por el receptor en función del tiempo de llegada. Similar al espectro angular, el espectro de retardo se especifica en la Ecuación 3.19.

$$\Xi_{\tau}(\tau) = \int_{\varphi} \Xi_{\tau,\varphi}(\tau,\varphi) d\varphi \qquad (3.19)$$

Donde $\Xi_{\tau,\varphi}(\tau,\varphi)$ es el espectro de retardo-azimut.

Esta métrica se puede evaluar empíricamente o derivarse teóricamente. También se puede utilizar para extraer otros parámetros del canal de comunicación a nanoescala, como la dispersión del retardo, que cuantifica la cantidad de dispersión de la señal en el dominio temporal. Si el espectro de retardo es una función no creciente con retardo, la dispersión del retardo viene dada por la Ecuación 3.20.

$$\sigma_{\tau} = sup\left\{\Delta\tau \ \epsilon \ [0, \tau_{max} - \tau_{min}] : \int_{\tau_{min}}^{\tau_{min}+\Delta\tau} \Xi_{\tau}(\tau) d\tau \ < \ \varepsilon \right\} \qquad (3.20)$$

Donde τ_{min} es el retardo mínimo, τ_{max} es el retardo máximo, $\Delta\tau$ es el valor posible de la dispersión del retardo en el rango entre 0 y $\tau_{max} - \tau_{min}$, $\Xi\tau(\tau)$ es el espectro de retardo dado en la Ecuación 3.19; finalmente, ε es un porcentaje suficientemente grande pre especificado. Esta métrica es una función de densidad de probabilidad. Para las CM, la implementación de esta métrica requiere promediar el número de portadoras de mensajes, recibidas dentro de un retardo diferencial sobre un número suficiente de realizaciones del proceso de propagación.

3.2.4.5.5 Métricas para todo el sistema de comunicación

Las métricas para el sistema de comunicación influyen en todos los componentes de una nanored, todas estas métricas se han de implementar [3], [4]:

a. *Programabilidad de red activa.* Las portadoras de mensajes se pueden programar o codificar para que modifiquen los medios subyacentes de propagación (por ejemplo, microtúbulos) a medida que transportan la información. Cuando se diseñan específicamente para cumplir este propósito, y los cambios son transitorios o permanentes en los medios de transmisión, se las denomina "como portadoras de mensajes activas". Esta métrica proporciona una medida estándar de cuán "activa" es una portadora de mensajes. Si las portadoras de mensajes no producen modificaciones en el medio, entonces el valor de esta métrica es cero; las unidades de la métrica son cambios en el *flujo* de la portadora de mensajes a través de una *superficie* determinada durante un *tiempo* específico. Una red activa se diseña para permitir, intencionalmente, la transmisión de mensajes e información para modificar y mejorar la propia red.

   La portadora de mensajes se puede diseñar para realizar modificaciones en la nanored. En razón de que este tipo de diseños es autorreferencial (elementos de red que construyen/mejoran la red que cambia a su vez el movimiento/comportamiento de los elementos de la red, etcetéra.), su estudio y cuantificación son notoriamente difíciles. La programabilidad de la red activa se basa en la cantidad y duración del cambio en el estado de la red que una portadora de mensajes individual puede ejercer en la topología de red. Su cuantificación se precisa en la Ecuación 3.21.

$$A = \oint_S \int_t \Delta f(t) dt dS \qquad (3.21)$$

   Donde t es el tiempo, S es una superficie virtual que define el volumen a través del cual la variación del flujo de portadoras de mensajes debe especificarse claramente. El flujo de portadoras de mensajes como función del tiempo es $f(t)$, el cual es la razón de cambio del flujo que atraviesa una unidad de área. El cambio intencional $\Delta f(t)$ en $f(t)$ es ocasionado por una portadora de mensajes a través de una superficie S.

   El impacto de la variación en el flujo de la portadora de mensajes puede tardar para implementarse y puede no ser permanente, por lo que la

integral en el tiempo captura los aspectos temporales de la variación. Una versión discreta de esta métrica es simplemente el cambio en el flujo de la portadora de mensajes a través del espacio cuando un cambio en la topología de la red ocurre intencionalmente por la acción de una portadora de mensajes. Por ejemplo, una portadora de mensajes podría ocasionar que las particiones de un microtúbulo se unan, separen o reorienten de otra forma. Este efecto se puede medir empleando la teoría de grafos como el cambio en el grafo Laplaciano, una forma discreta del concepto representado por esta métrica. Si A es el flujo de portadoras de mensajes acumulado a través de un área de superficie dada en un tiempo específico, y si se conocen los bits transportados por la portadora de mensaje, entonces A puede utilizarse para obtener el ancho de banda a través de un área de superficie definida en el medio de transmisión. Se debe, por tanto, multiplicar A con los bits por portadora de mensajes y dividir para el tiempo durante el cual se realizó la integración. Si la superficie biseca el medio, se reduce al ancho de banda del canal. La función $f(t)$ puede ser sustituida por cualquiera de las métricas definidas para el componente de campo.

b. *Tasa de perturbación*. La tasa de perturbación es una medida tanto de la tasa como del control de cualquier tipo de perturbación empleada para enviar una señal en el sistema. Esta métrica se diseña para cuantificar la capacidad de controlar la generación de señales; normalmente, la calidad de la señal se degrada a medida que aumenta la tasa de perturbación. Esta métrica captura el cambio en la calidad de la señal en función de la velocidad. El término perturbación se usa para ser intencionalmente amplio en las diferentes aplicaciones, y se refiere a la variación en cualquiera de los otros componentes de los estándares IEEE de la familia 1906, para de esa manera producir la transmisión de una señal. Una tasa mayor de perturbación podría permitir más ancho de banda de la comunicación, sin embargo, esto puede producir una pérdida de precisión en el control de la perturbación o causar efectos nocivos como resonancia no intencionada con otros componentes del sistema. El error de perturbación es la diferencia entre la tasa de perturbación prevista y la tasa de perturbación real. Esta métrica es una curva de tasa de cambio versus precisión.

El error en la recepción de la señal también depende de la configuración del receptor definida por su sensibilidad, y especificidad (Sección 3.2.4.5.4 del presente capítulo). Sin embargo, la precisión de la tasa de perturbación se mide asumiendo una sensibilidad y especificidad perfectas para distinguir los problemas de transmisión de los de recepción.

c. *Degradación del supersistema*. El supersistema es el sistema en el que se establece la red nano de los estándares IEEE de la familia 1906, por ejemplo, un organismo biológico. Esta métrica cuantifica el impacto de la nanored sobre el supersistema con respecto a su funcionamiento normal. Es decir, la métrica determina cuánto reduce la nanored IEEE 1906 el rendimiento del sistema original. La degradación del supersistema es una medida del impacto de establecer la comunicación a nanoescala dentro de un sistema. Esta métrica captura la influencia negativa de la implementación en el sistema más grande. Y puede ser simplemente el porcentaje de reducción con base en la función principal del sistema debido a la implementación a nanoescala dentro del sistema. La Ecuación 3.22 define la métrica.

$$d_S = \frac{S_{pn}}{S_p} \tag{3.22}$$

Donde d_S es la degradación del supersistema, S_{pn} es el rendimiento del supersistema con la red de comunicación a nanoescala embebida, S_p es el rendimiento del supersistema original (sin la red de comunicación a nanoescala embebida).

La métrica se ha proyectado de modo que pueda ser establecida como una función del ancho de banda de la red de comunicación a nanoescala embebida, $S_{pn}(bw)$, como se expresa en la Ecuación 3.23, misma en la que ya se han especificado previamente las variables.

$$d_S(bw) = \frac{S_{pn}(bw)}{S_p} \tag{3.23}$$

La degradación del supersistema está vinculada a la relación ancho de banda-volumen (que se explica en el siguiente párrafo), en razón de que el ancho de banda es una medida del rendimiento del sistema de comunicación y el volumen de los elementos de comunicación puede afectar el rendimiento del supersistema.

d. *Relación ancho de banda-volumen*. Se fundamenta en dos parámetros esenciales que caracterizan a las CM y a nanoescala; estos son: tamaño y ancho de banda. La relación ancho de banda-volumen se define como el ancho de banda en *bits por segundo* que suministra el sistema, dividido por el *volumen total* de tal sistema, lo cual incluye al transmisor, al receptor y a la portadora de mensajes. El contexto de estos elementos y parámetros se ilustra en la Figura 3.2 [3,4] en la que se resaltan las escalas de longitud, indicadas por L, y en la que las propiedades físicas relevantes para el desempeño de la comunicación varían en un orden de magnitud que se conoce como cambio de régimen. Los ejemplos de una comunicación de cambio de régimen son:

   1. La escala de longitud en la que el ancho de banda de la oscilación mecánica (perturbación) se acerca a las frecuencias EM comerciales (escalas de frecuencia mecánica por L^{-1}).
   2. La escala de longitud en la que el movimiento Browniano gobierna el movimiento de la portadora de mensajes (escalas de tiempo de difusión por L^2).

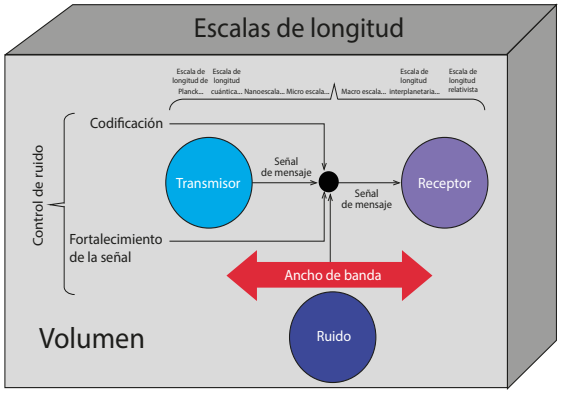


Figura 3.2. Ilustración de la relación ancho de banda-volumen que muestra un espectro de escalas de longitud compuesto de las escalas de longitud de Planck, cuántica, nano, micro, macro, interplanetaria y relativista con respecto a la señal y el ruido.

El objetivo en las nanocomunicaciones debería ser el de obtener un volumen total pequeño (V) y un gran ancho de banda (BW), por lo que la relación (BW/V) de un sistema ideal debería acercarse al infinito. V se puede dividir en los términos que se refiere la Ecuación 3.24.

$$V = V_{trans} + V_{rec} + V_{mc} \tag{3.24}$$

Donde V_{trans} es el volumen del transmisor, V_{rec} es el volumen del receptor y V_{mc} es el volumen de la portadora de mensajes (mc, *del inglés message carrier*).

El ancho de banda (BW) se puede dividir en varias ecuaciones de capacidad del canal (Sección 2.3.4 del capítulo anterior). Para lograr incrementar esta métrica, el diseño de la nanored puede elegir qué volumen de los elementos de la familia protocolaria IEEE 1906 reducir en lugar de intentar incrementar el ancho de banda, para aumentar el valor de la métrica. Sus unidades son ($bits/sec \times nm^3$).

La relación ancho de banda-volumen se relaciona con la degradación del supersistema (métrica previamente definida), debido a que es una función del ancho de banda y puede verse afectada por el volumen del sistema de comunicación integrado en él.

3.3. Modelo de datos para sistemas de comunicación a nanoescala según los estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1

Las redes moleculares requieren el desarrollo de un nuevo paradigma protocolario que se adecue apropiadamente a las comunicaciones que ocurren en la naturaleza (es decir en la biología). Los elementos del *networking* tradicional y sus protocolos se deben direccionar hacia la adaptación (como resultado del estudio e inspiración de la observación de eventos de comunicación y procesos de transmisión/recepción de información en la naturaleza) en los componentes de una nanored biológica. Por otra parte, el esquema clásico de los principios de comunicación de las redes de computadoras se tendrá que modificar para lograr la adaptación conveniente de tales principios a los sistemas naturales, sintéticos o híbridos de las nanoredes de comunicación [22].

Como se sugiere en [13], [22]–[27], las TIC (Tecnologías de la Información y Comunicación) se convierten en el fundamento para la investigación y desarrollo de los "protocolos" que se presentan en las CM, tomando en cuenta este paradigma para las CM (o comunicaciones biológicas), IEEE justamente ha impulsado a nivel mundial los dos protocolos de nanocomunicaciones analizados hasta el momento.

En su primera versión el estándar IEEE 1906.1 incorpora un modelo conceptual y terminología estándar para redes de tipo *ad hoc* y moleculares a nanoescala. Específicamente, las recomendaciones del estándar establecen los siguientes elementos [3]:

1. La definición de componentes que tienen lugar en las comunicaciones a nivel de nanoredes.

2. Un modelo conceptual de networking (marco de referencia-*framework*) operando a nanoescala, el cual consta de a) definiciones puntuales para canales de transmisión en entornos nano, b) interfaces abstractas de canales de comunicación a nanoescala con sistemas de transferencia de información a nivel molecular, c) métricas de rendimiento comunes a las redes de comunicación enfocadas a redes a nanoescala *ad hoc* y moleculares, d) mapeo entre las redes de comunicación tradicionales y aquellas a nanoescala, incluidos los mecanismos necesarios de alto nivel, como codificación, encapsulación, direccionamiento, enrutamiento, parámetros de confiabilidad y funciones de capas protocolarias.

De acuerdo con [3] un modelo abstracto (marco de referencia-*framework*) común posibilita la operatividad teórica entre disciplinas científicas diferentes (que se encargan de procesos de análisis de comunicación de la información), manteniendo un lenguaje y, por tanto, comprensión comunes entre tales disciplinas. El marco de referencia provisto por IEEE 1906.1 cimienta una práctica recomendada para estándares adicionales de redes de comunicación a nanoescala, en la que la industria se involucra más profundamente en la integración comercial de la tecnología, gracias a lo cual, por ejemplo, la industria biomédica puede utilizar estándares de comunicación a nanoescala para crear métodos innovadores de diagnóstico y tratamiento.

En una nueva versión del estándar precedente, el IEEE 1906.1.1 instrumenta un conjunto adicional de elementos denominado YANG (*Yet Another Next Generation*) para el modelo informacional del estándar original. YANG se compone de módulos que describen los procesos físicos asociados a las comunicaciones en los sistemas de tipo nano considerados en el estándar IEEE 1906.1 de este modo, las propiedades físicas distintivas de las nanocomunicaciones se representan en el nuevo estándar; además la configuración y gestión remotas para la operación y el análisis remotos de los sistemas de comunicación a nanoescala están definidos por el modelo; así, el modelo para el almacenamiento de información y repositorios de datos experimentales de comunicación a nivel nano, especifica una estructura

de datos auto descriptiva que permite una comprensión común de la información transferida a través de una amplia variedad de medios y tecnologías de comunicación a nanoescala. El modelo de datos YANG precisa un modelo de información de configuración y gestión de red común para nanosistemas de comunicación, y, consecuentemente, se llevan a cabo los siguientes propósitos [4]:

1. Cumplimiento de los requerimientos señalados en el modelo del estándar IEEE 1906.1.
2. Representación de la física fundamental que impacta los sistemas nano descritos en el estándar IEEE 1906.1.
3. Puntualización en la configuración y administración en la simulación y análisis.
4. Definición de una estructura de datos auto descriptiva que se emplea en repositorios de datos experimentales de comunicación a nanoescala.

Un modelo de datos estándar es pertinente para garantizar que los sistemas y simulaciones se ajusten al estándar IEEE 1906.1. En razón de que los sistemas de nanocomunicación interactúan directamente con la física detrás de elementos en una escala de 1 (nm) a 100 (nm), se demanda un modelo de datos que represente la física fundamental para tales escenarios. Adicionalmente, un modelo de datos común es oportuno para realizar comparaciones de manera precisa y justa en los sistemas IEEE 1906.1. Los repositorios de datos experimentales de sistemas de comunicación a nivel nano requieren una documentación clara y precisa para que los datos resulten significativos. Consiguientemente, este modelo de datos común proporciona un modelo de datos auto descriptivo que aborda este propósito [4].

3.4 Características de nanocomunicaciones establecidas en los estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1

En la documentación proporcionada por los estándares de nanocomunicaciones de IEEE se determina, apropiadamente, el contexto de la transferencia de información a escala molecular, de manera que se produce un posicionamiento conveniente, con relación a sus características comunicacionales únicas (aunque similares a los sistemas de comunicación tradicionales, pero específicas de los sistemas de comunicación a nivel nano) en la tecnología misma. Un aspecto fundamental en la documentación de los estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1 radica en la diferencia explícita entre las propiedades físicas a nivel nano y las propiedades a macro escala. Además, otro aspecto clave en los requerimientos establecidos en las definiciones de las nanocomunicaciones de los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906 consiste en el mapeo de los elementos básicos de un sistema de comunicación nano a un sistema de comunicación convencional, lo cual incluye los elementos [1]–[4]:

- Transmisor.
- Receptor.
- Medio de transmisión.
- Portadora de mensajes.
- Mensajes.

La mayoría de los elementos citados son intuitivamente obvios; sin embargo, los dos últimos se deben especificar en los sistemas nano. Los "mensajes" esencialmente se refieren a la información a ser transmitida, aunque su significado puntual podría ser definido de manera diferente en diferentes campos. Las portadoras de mensajes describen la instanciación física utilizada para transportar el mensaje [1]–[4].

El requerimiento final en la documentación de los estándares mencionados señala que al menos uno de los componentes de las redes de comunicación a nanoescala tendría que ser sintético. Esto se incluye para facilitar el desarrollo comercial y no simplemente describir un fenómeno natural [1]–[4].

Enseguida se analiza el marco de referencia (*framework*) que se detalla en los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906.

3.4.1 Marco de referencia: Descomposición de tareas

Los estándares IEEE de nanocomunicaciones describen un marco referencial en lugar de un protocolo en particular, este hecho ocurre de esa forma pues se prevé que los protocolos se pueden definir en el futuro. En consecuencia, el marco de referencia debe ser lo suficientemente amplio para abarcar los posibles casos generales de los diversos tipos de transporte de mensajes moleculares, cuyas propiedades, lógicamente, se exhiben al nivel nano. Este sentido de amplitud es necesario para permitir que la academia y la industria desarrollen componentes individuales a nanoescala que logren la interoperación entre sí. Los módulos de simulación al nivel nano también deben ser formalizados en esa misma línea, posibilitando que el código sea reutilizado fácilmente [1]–[4].

Los componentes del marco de referencia operan e incluyen los elementos comunicacionales [1]–[4]:

1. Componente de portadora de mensajes.
2. Componente de movimiento.
3. Componente de campo.
4. Componente de especificidad.
5. Componente de perturbación.

La portadora de mensajes (que se menciona en el acápite de definiciones de los estándares) representa la entidad física que "porta" o transporta el mensaje informativo, de manera similar a como en la mecánica cuántica se realiza por parte de una partícula o forma de onda (es decir una señal) [1]–[4].

El componente de movimiento se instaura mediante el servicio que proporciona la fuerza para que la portadora de mensajes cuente con movimiento para el transporte de la información. El componente de movimiento suministra el potencial necesario para el transporte de la información a través del canal de comunicaciones [1]–[4], [28].

El componente de campo provee el servicio pertinente para "guiar" a la portadora de mensajes; por ejemplo, el movimiento puede ser aleatorio mientras el componente de campo organiza la direccionalidad; adicionalmente, el componente de campo se puede aplicar interna o externamente. Por ejemplo, una implementación interna incluye comportamiento grupal de movimiento, mientras implementaciones externas pueden incluir flujo de fluido no turbulento, campo EM, un gradiente químico liberado para guiar el movimiento de bacterias o motores moleculares guiados por microtúbulos [1]–[4], [28].

El componente de perturbación facilita el control en los cambios que se realizan para la creación de una señal, lo cual es análogo a los procesos de modulación en las señales tradicionales de telecomunicaciones, de modo que este último componente puede tomar muchas formas incluyendo cambios en la estructura molecular o variaciones en la concentración de las portadoras moleculares, tipos de moléculas a transmitirse, o la frecuencia de transferencia de moléculas [1]–[4], [28].

Finalmente, el componente de especificidad controla la afinidad de los receptores de las portadoras de mensajes en el extremo destino de la nanocomunicación. Es análogo al direccionamiento en los sistemas de comunicación clásicos. La especificidad se puede ver en la forma de una molécula o su afinidad por una diana, como el ADN complementario para la hibridación [1]–[4], [28].

La Tabla 3.2 muestra un ejemplo de los cinco componentes definidos en los estándares de tipo nano de IEEE [28].

Tabla 3.2. Ejemplo de los cinco componentes de los estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1 [28].

Nombre del Componente	Explicación	Ejemplo
Especificidad	Detectar correctamente mensajes verdaderos versus falsos	Forma o afinidad de la molécula con su ADN complementario, objetivo particular para la hibridación, etcétera.
Perturbación	Variación de la concentración o el movimiento según sea necesario para la señal	Concentraciones de moléculas densas versus escasas, motores moleculares, cambios conformacionales en moléculas, etcétera.
Campo	Dirección de flujo organizada	Campo EM aplicado mediante líquidos (fluidos), motores moleculares unidos a microtúbulos, gradiente de concentración de moléculas químicas, movimiento de enjambre, etcétera.
Movimiento	Canal de comunicación potencial en la naturaleza	Campo EM aplicado mediante líquidos (fluidos), motores moleculares unidos a microtúbulos, gradiente de concentración de moléculas químicas, movimiento de enjambre, etcétera.
Portadora de Mensajes	Masa y energía	Cadena de moléculas, etcétera.

Los cinco componentes precedentes y su interrelación se conocen como “Modelo estándar”, y operan a través de interfaces explícitamente definidas (Sección 3.2.4.4 del presente capítulo), situación que permite una división del trabajo (o descomposición de tareas) de cada uno de tales componentes; de manera que, por ejemplo, una organización puede desarrollar portadoras de mensajes mientras que otra puede desarrollar componentes de campo, y todos estos componentes pueden cooperar exitosamente [1]–[4].

El componente pertinente a la portadora de mensajes transfiere (transporta) la información (mensaje), el componente de especificidad produce el direccionamiento (a destinos adyacentes) y, por tanto, esta tarea se puede asociar con las tareas de capa 2, en razón de que se debe asegurar que la portadora de mensajes establezca un “enlace” específicamente solo a un cierto destino. El componente de movimiento representa la operación física de la aplicación de una fuerza sobre el componente de portadora de mensajes, esto asegura que dicha portadora se pueda desplazar de un nodo a otro a través del direccionamiento adyacente o propio de capa 2. El componente de campo proporciona el nivel de direccionalidad al movimiento de la portadora de

mensajes y, así posibilita que se lleve a cabo el direccionamiento de capa 2 y, además, que se complete una ruta en una nanored no solo a distancias adyacentes; es decir, también existe otro tipo de direccionamiento, aquel que permite arribar a destinos no cercanos y que corresponde consecuentemente a un direccionamiento de capa 3. Por último, el componente de perturbación produce variaciones de un subconjunto de componentes con el objetivo de generar una señal que sea comprendida por el receptor [1]–[4].

Los componentes de los estándares de tipo nano de IEEE se consideran más generales que los del modelo ISO/OSI, y se aplican, igualmente, a redes activas (Sección 3.2.4.2 del presente capítulo) como se indica en la Figura 3.3 [1]–[4].

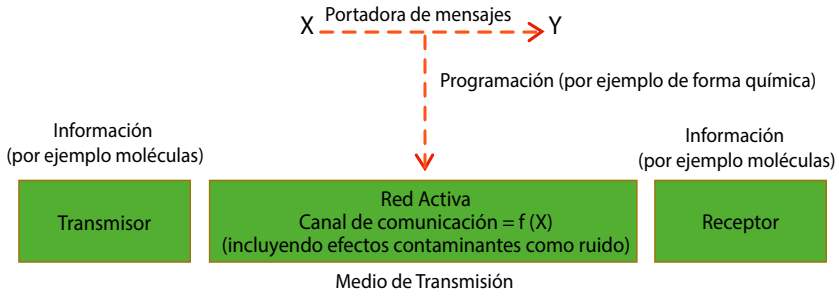


Figura 3.3. Relación de los componentes de los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906 en una red activa, si se considera que se realizan cambios programados en la red. Esta optimización cambia la probabilidad de Y; es decir, la salida del canal de transmisión para que se reciba correctamente cuando se transmite X.

La portadora de mensajes puede ser "activa" en el sentido que se generan cambios programados en la red subyacente conforme la información viaja por dicha red. En ese caso, la portadora de mensajes se "programa" para realizar cambios permanentes en el canal de la red subyacente, de modo que ejerza una influencia que afecte a futuras portadoras de mensajes que viajen por el canal. Por lo que, si X y Y son variables aleatorias que representan las señales entrantes y salientes del canal de comunicaciones, respectivamente, entonces el funcionamiento del canal se modifica de modo que cualquier función $f(X)$ que impacta la probabilidad condicional de Y, siga siendo reconocida correctamente cuando X es transmitida. Aunque una red activa es un concepto poderoso también produce una clara violación a la estricta separación de las capas que el modelo ISO/OSI establece [1]–[4].

3.4.2 Mapeo del marco referencial y definiciones: Aplicaciones

Como ya se mencionó, los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906 no especifican un protocolo o aplicación en particular. En su lugar se emplean mapeos del marco referencial y las definiciones pertinentes para ilustrar cómo se pueden utilizar los estándares para varios protocolos, así como proveer lineamientos para el desarrollo de futuros protocolos y aplicaciones [3,4].

Los ejemplos de tecnologías incluyen, por supuesto, CM que comprenden casos de transporte activo y pasivo, por lo que en la Figura 3.4 [1]–[4] se puede observar un ejemplo de comunicación nano en la que se tiene un sistema de ligandos-receptores. Este sistema cumple con la definición de comunicación a nanoescala porque el ligando es un elemento esencial del sistema y sus dimensiones se encuentran en el orden de decenas de *nanómetros*. El pequeño tamaño de los ligandos causa que sobre ellos se ejerzan fuerzas (incluyendo las del movimiento Browniano) que difieren de aquellas a una escala macro. Adicionalmente, el mapeo se proyecta a elementos fundamentales de una comunicación como son transmisor, receptor, medio de comunicación, mensaje, y portadora de mensajes al sistema de comunicación de ligandos-receptores que se encuentran por tanto, incorporados en un enlace al nivel nano [1]–[4].

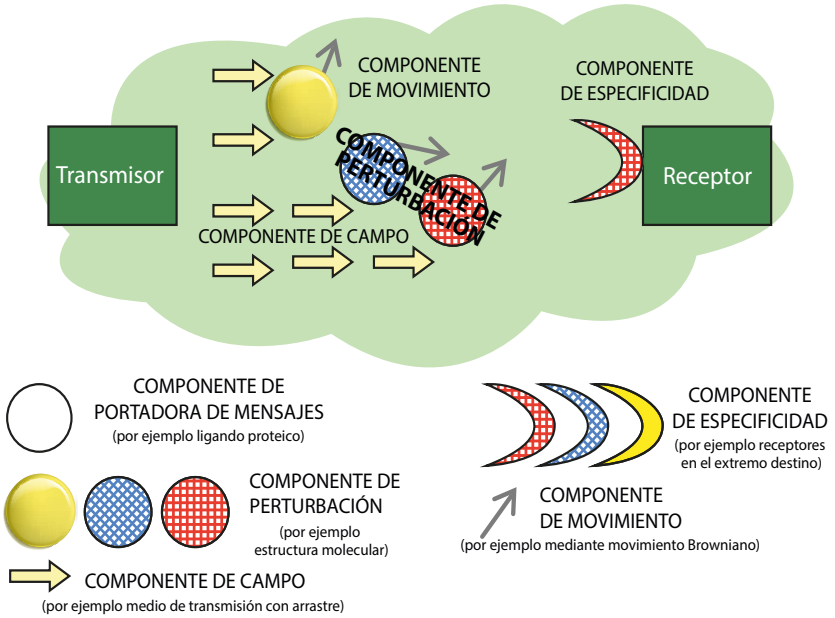


Figura 3.4. Ejemplo de una comunicación molecular en la que la portadora de mensajes es un ligando de proteína, que en este diagrama siempre se encuentra bajo la influencia de los diferentes componentes de los estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1.

Otras aplicaciones en las que se pueden usar las características de los sistemas nano de los estándares IEEE se encuentra en la práctica de las nanoterapias. El objetivo es administrar medicamentos directamente al tejido maligno mientras se minimiza la toxicidad en todo el cuerpo. Otra aplicación biomédica de las comunicaciones a nanoescala se implementa en lo que se denomina "*lab-on-chip*". Para estudiar el microambiente del tumor y los efectos de gradientes químicos particulares en diferentes tipos de células, los ensayos se realizan típicamente con un quimioatrayente para crear un gradiente [1]–[4].

3.4.3 Código de referencia: Modelo de funcionamiento

Una plataforma modular de simulación es proporcionada por los estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1 con el objeto de posibilitar la investigación. Aunque están disponibles algunas plataformas preliminares (e incluso posteriores), estas generan una brecha (a tal punto que la gran mayoría de herramientas de simulación no son compatibles entre sí), y realmente ninguna de ellas cuenta con todas las características de comunicación que las que establece el marco de referencia de IEEE. Para cerrar esta brecha IEEE usa la potencialidad y disponibilidad en línea de la plataforma de simulación en código abierto *Network Simulator-3* (NS-3), el núcleo (*core*) del simulador modela los componentes descritos en el marco de referencia de los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906, y provee parámetros básicos y funcionalidad común para todos los esquemas de comunicación al nivel nano, y así ofrece soporte a la interacción de tales componentes durante el intercambio de mensajes [1]–[4].

Un mensaje que puede ser generado e intercambiado entre dispositivos (nodos) se implementa en los elementos de carga en la simulación mediante la clase ***P1906MessageCarrier***. Por defecto este componente solo posee un puntero (dato miembro) al objeto ***ns3:Packet*** y representa una cadena de bits (es decir el tipo de PDU son paquetes) que se almacena en el mensaje. Parámetros adicionales se deben añadir para especificar la definición de la portadora de mensajes para el caso de estudio en particular que se emplee [1]–[4].

La clase ***P1906NetDevice*** modela los recursos de red que participan en el proceso de comunicación, y almacena la interfaz (que se modela por la clase ***P1906CommunicationInterface***) de comunicación en el dato miembro *m_interface*, la cual se compone de las clases ***P1906TransmitterCommunicationInterface*** y ***P1906ReceiverCommunicationInterface*** que gestionan la transmisión y recepción de procedimientos, respectivamente. El elemento clave de los procesos de comunicación en el me-

dio de transmisión se modela a través de la clase *P1906Medium*, la cual administra la transferencia de los mensajes por medio de los mensajes adjuntos a la misma, además adopta la clase *P1906Motion* para la implementación de los modelos de propagación y retardo. Los componentes perturbación, especificidad y campo se modelan a través de las clases *P1906Motion*, *P1906Perturbation, P1906Specificity, y P1906Field* [1]–[4].

La operación de una comunicación al nivel nano se ilustra en la Figura 3.5 [1]–[4], en la cual, un elemento de red emisor-fuente (con numeración de 1 en la Figura 3.5 [1]–[4]) recibe un mensaje desde las capas superiores. El mensaje se transfiere a la interfaz de comunicación (con numeración de 2 en la Figura 3.5 [1]–[4]), el componente de perturbación se usa para crear la portadora de mensajes (con numeración de 3 en la Figura 3.5 [1]–[4]).

La interfaz de comunicación del transmisor genera la propagación en el medio al accionar los componentes pertinentes a portadora de mensajes, perturbación y campo (con numeración de 4 en la Figura 3.5 [1]–[4]); se debe tener en cuenta que el componente de movimiento modifica las propiedades de la portadora de mensajes. En el sistema también existen elementos de pérdidas de propagación y retardo (con numeración de 5 en la Figura 3.5 [1]–[4]). Posteriormente, la portadora de mensajes se entrega al receptor y el componente de especificidad verifica la compatibilidad (con numeración de 6 en la Figura 3.5 [1]–[4]) y cuando la mencionada compatibilidad ocurre, el mensaje se entrega a las capas superiores (con numeración de 7 en la Figura 3.5 [1]–[4]) y el mensaje es recibido por las capas superiores [1]–[4].

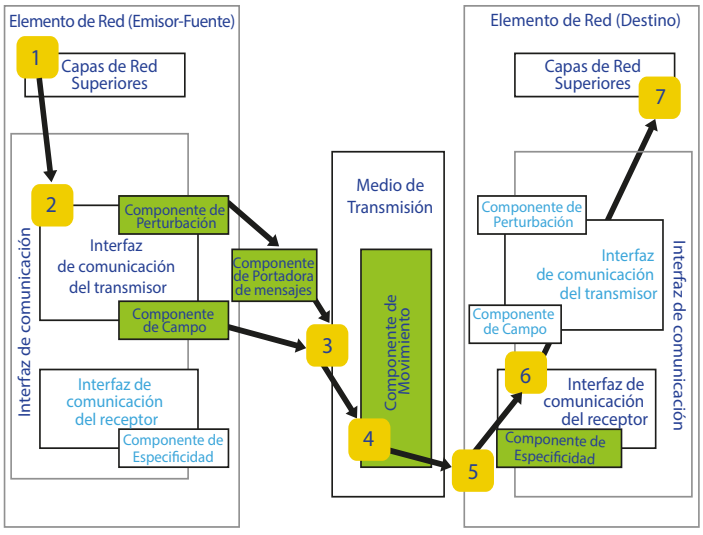


Figura 3.5. Pasos en la transmisión de información en un sistema de comunicación nano que se organiza de acuerdo al modelo de simulación establecido en NS-3, en los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906.

3.5 Ejemplo de simulación genérica proporcionado por los estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1

Los ejemplos que provee el marco de referencia de los estándares protocolarios IEEE 1906.1 y 1906.1.1, son genéricos en el sentido de que no se particularizan valores para los elementos que constituyen el sistema de comunicación a nanoescala, que ejecutan los cincos componentes que el *framework proporciona*. La documentación de los estándares IEEE de nanocomunicaciones considera ejemplos de simulación en escenarios que se componen de pares transmisor-receptor que mantienen un enlace de comunicación empleando modulación de tipo OOK (*On-Off Keying*, Sección 2.5.1 del Capítulo 2), se asume un modelo en el que gobierna el movimiento Browniano en un entorno de difusión caracterizado por la ley de Fick (Capítulo 2) y se define una concentración de moléculas como una función de:

- La distancia del enlace (transmisor-receptor).
- El intervalo de tiempo desde el instante en el cual las moléculas se han transmitido.
- El número de moléculas (Q) que han sido enviadas.
- El valor del coeficiente de difusión D.

La ley de Fick se puede utilizar para evaluar el retardo de propagación y la distancia mínima entre dos pulsos consecutivos. Los modelos matemáticos que se desprenden del fenómeno físico de difusión, así como los datos miembro que almacenan el valor del coeficiente de difusión, se han implementado en los componentes de movimiento y especificidad. En el primer caso se puede evaluar el retardo de propagación mediante la ley de Fick, y en el segundo caso se usa para verificar que la tasa de transmisión no exceda el valor permitido. La información pertinente al número de moléculas que se han transmitido en cada pulso y el intervalo de tiempo entre dos pulsos consecutivos se almacenan en el componente de perturbación y en el de la portadora de mensajes [1]–[4].

Para demostrar la efectividad de la herramienta de simulación (es decir NS-3) y el diseño del marco de referencia se realiza un análisis de esquemas de comunicación representado en términos de máxima capacidad del canal, por lo que para este efecto el ejemplo de CM que proporcionan los estándares de tipo nano de IEEE establecen el número de moléculas que se liberan en cada pulso y el coeficiente de difusión, correspondiendo estos valores a ***50.000*** y ***1,0*** (nm^2/s), respectivamente. En la Figura 3.6 [1]–[4] se observa la capacidad del canal como una función de la distancia entre los puntos de transmisión y recepción, la cual ha sido calculada con base en los modelos de comunicación de los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906 [1]–[4].

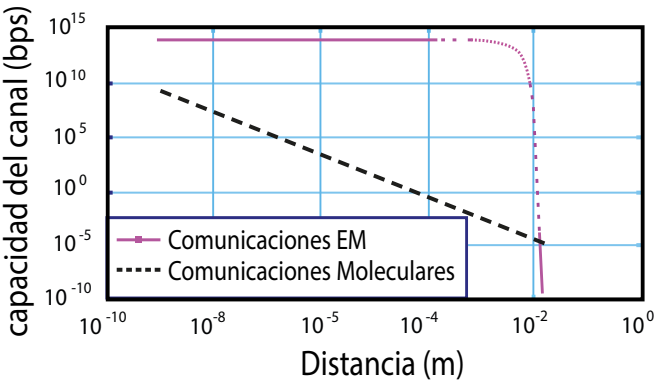


Figura 3.6. Capacidad del canal versus la distancia para comunicaciones EM y CM implementadas en NS-3 de acuerdo a los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906.

3.6 Ejemplo de la ejecución de código abierto de NS-3 definido en los estándares nano de IEEE para el caso de Comunicaciones Moleculares

El ejemplo genérico de la sección previa, permite comprender cuáles son los parámetros y el entorno de simulación general para CM que ofrecen los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906; con tales fundamentos en [29] el Autor realiza la compilación de un caso de análisis de CM con base en el código abierto definido en NS-3 que proporcionan tales estándares.

Para evaluar el comportamiento de una comunicación al nivel nano, en [29] se consideran las variables que intervienen e influyen en cada uno de los elementos que constituyen un sistema de CM. Estos resultados se presentan a partir de valores y características específicas de información que se han de establecer para ejecutar el código fuente provisto por los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906. Consecuentemente, se deberán puntualizar parámetros como:

1. El número de moléculas que se transmiten, que en este caso son $Q = 50.000$.
2. La distancia entre el transmisor y receptor $r = 0{,}001\ (m)$.
3. El coeficiente de difusión $D = 1\ (nm^2/ns)$.
4. El intervalo del pulso molecular igual a $1\ (ms)$.

Estos valores se introducen para poder conocer el comportamiento de la simulación y pueden ser modificados para el análisis del mismo. Además, se evalúan características de la simulación con diferentes parámetros para realizar comparaciones entre varios escenarios de simulación. De este modo, se implementan las clases (programadas) que permiten simular

los componentes de los estándares de nanocomunicaciones de IEEE, con base en ellas se logra medir el rendimiento del enlace, según la modificación en las variables indicadas en el párrafo precedente, a través de las cuales se determina el rendimiento de la comunicación mediante [29]:

a. El pulso molecular.
b. El pulso de retardo en el medio.
c. El ancho del pulso molecular.
d. La velocidad de transmisión de la información.
e. La relación de señales moleculares obtenidas.
f. La capacidad del canal molecular.

La implementación del enlace molecular de los estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1 en NS-3 se puede dividir en los siguientes pasos (como se observa en la Figura 3.7):

1. Crear el ayudante P1906.
2. Crear los nodos.
3. Crear el medio y el componente de movimiento.
4. Crear los componentes/entidades además de los dos extremos comunicacionales (transmisor y receptor) que participan en el enlace.
5. Establecer las posiciones de los extremos comunicacionales (transmisor y receptor).
6. Conectar los extremos comunicacionales, nodos, medio, componentes y entidades.
7. Crear un mensaje para ser transmitido.
8. Transferir los mensajes.

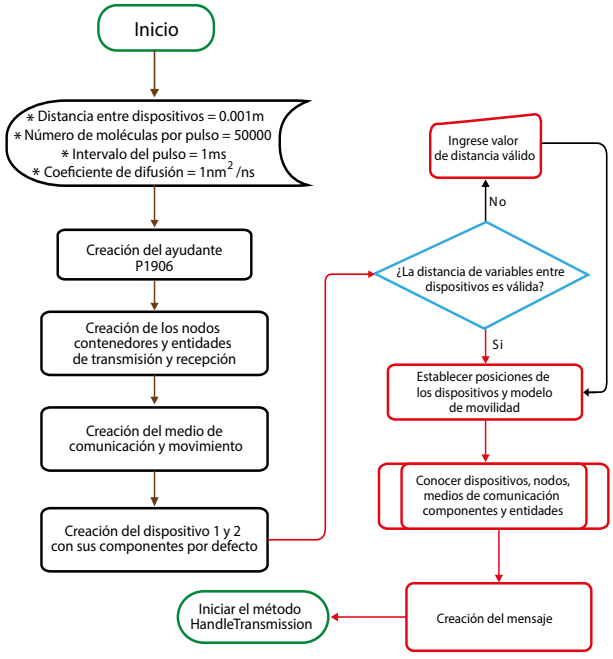


Figura 3.7. Diagrama esquemático del archivo EjemploMolecular.cc [29].

3.6.1 Implementación del enlace molecular

3.6.1.1 Creación del ayudante P1906

El ayudante del marco de referencia P1906 de los estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1 se encarga de gestionar y crear objetos de nanomáquinas y habilitar todos los componentes de registros relacionados con el marco de referencia P1906, la función más importante de esta clase es conectar los componentes y atributos de los extremos comunicacionales. Para visualizar el proceso de comunicación se utilizan registros implementados en el método ***EnableLogComponents*** (con sus funciones correspondientes), el cual permite exhibir mensajes de depuración del programa [29].

El método ***connect*** del ayudante P1906 permite conectar los componentes, atributos y dispositivos (nodos) que intervienen en la comunicación; el objetivo principal del método es facilitar la implementación e interacción de todos los componentes del enlace molecular. Otros ***ayudantes*** definidos por el software NS-3 permiten la ejecución de las mismas funciones que las clases ***PointToPointHelper, CsmaHelper***, entre otras [29].

3.6.1.2 Creación de los nodos

Los nodos se pueden crear mediante las clases ***NetdeviceContainer*** o ***NodeContainer***. La clase ***NetDeviceContainer*** permite el establecimiento de varios extremos comunicacionales con las mismas características, además de dar soporte cuando se necesita definir una gran cantidad de componentes de red. La clase ***NodeContainer*** se emplea para instalar un cierto número de nodos que comparten las mismas características, esta clase contiene múltiples nodos definidos en el parámetro ***Ptr<Node>***, el cual se usa para hacer referencia a cada uno de los nodos que esta contiene [29].

3.6.1.3 Creación del medio de propagación y del componente de movimiento

Para crear los componentes y entidades del módulo P1906 se utilizan punteros, los cuales especifican una dirección de memoria. Estos punteros contienen el tipo de variable al cual apuntan [29].

3.6.1.4 Creación de componentes y sus dispositivos (nodos)

Al igual que el caso anterior, la creación de nuevas variables se efectúa por medio de punteros. Las variables que se crean en esta sección del código, se refieren a los extremos comunicacionales de red, la interfaz de comunicación, el componente de especificidad, campo y perturbación. Los métodos y atributos de cada uno de estos valores se discuten en la Sección 3.6.2 del presente capítulo [29].

3.6.1.5 Establecimiento de la posición y el modelo de movilidad de los extremos comunicacionales (transmisor y receptor)

Escoger un modelo de movilidad para los nodos dependerá de la aplicación a la cual está destinada la simulación. Estos modelos de movilidad generalmente se agregan a los nodos para proporcionarles las características de movimiento [29].

Las posiciones de los nodos se establecen mediante el parámetro ***PositionAllocator*** y generalmente, solo se emplean al comienzo de la configuración de la información en la simulación, para determinar la posición inicial de los nodos. En el caso del ejemplo de simulación molecular especificada en los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906 existe una lista de opciones que cuentan con dos posiciones correspondientes a las entidades de transmisión/recepción, a las cuales se les asigna un modelo de movilidad constante; consecuentemente, los nodos permanecerán en la posición inicial [29].

3.6.1.6 Conexión de los extremos comunicacionales, nodos, medios, componentes y entidades.

Para realizar la conexión de los elementos de la nanored y sus características existen ayudantes que permiten efectuar esta tarea de una forma simplificada; así, la clase ***helper***, por medio de su método ***connect***, posibilita realizar esta función a través de la cual se especifica información de conexión pertinente al nodo, transmisor, receptor, medio de comunicación y componentes que se utiliza en la topología a ser simulada [29].

3.6.1.7 Creación de la PDU (*Protocol Data Unit*) paquete

La información que se transferirá en el enlace se implementa por medio de la clase ***Packet***, la misma que permite la creación de paquetes a ser transmitidos entre nodos. En el caso del ejemplo de simulación molecular especificada en los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906, se crea una cadena de caracteres compuesta por ceros lógicos (equivalentes a un byte de información); dicha cadena se enviará mediante la interfaz del transmisor [29].

3.6.1.8 Transferencia de mensajes

El envío de mensajes se lleva a cabo por medio de la interfaz de comunicación del transmisor; esta interfaz inicia el proceso de comunicación, el cual accederá a todos los componentes y métodos que intervienen en la comunicación [29].

3.6.2 Proceso de comunicación entre componentes

En el marco de referencia de los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906 el proceso de comunicación entre los diferentes componentes que integran la red de comunicación a nanoescala se efectiviza mediante la ejecución del siguiente procedimiento [29]:

1. La clase ***NetDevice*** recibe un mensaje desde las capas superiores y lo remite a la interfaz de comunicación del transmisor.
2. Se crea la portadora de mensajes con la ayuda del componente de perturbación.
3. La interfaz de comunicación del transmisor activa la propagación en el medio de transmisión y transfiere los componentes de portadora de mensajes, perturbación y campo.
4. El componente de movimiento modifica las propiedades de la portadora de mensajes.
5. La portadora de mensajes arriba al receptor y el componente de especificidad verifica la compatibilidad.
6. Si el mensaje es compatible se remite a las capas superiores.
7. Las capas superiores reciben el mensaje.

3.6.3 Proceso de implementación de las clases que ejecutan los componentes del marco de referencia IEEE a nanoescala

3.6.3.1 Clase portadora de mensajes (*Message Carrier*)

En un sistema de comunicación a nanoescala, la portadora de mensajes puede ser una simple partícula cuyo movimiento se puede definir, por ejemplo, por difusión libre y, de esta manera proporciona el servicio para contener y transportar la información de un mensaje. La clase (extendida del módulo núcleo del código NS-3) para las funciones previamente señaladas corresponde a ***MolMessagecarrier***, en la que se añaden la portadora propiamente y la duración e intervalo del pulso en que se liberan las moléculas. Adicionalmente, se configuran mediante la misma clase, el tiempo de inicio en el que se transmite la información y el número de moléculas por cada intervalo de pulso. Los métodos ***SetMessage*** y ***GetMessage*** son funciones heredadas del modelo núcleo del código NS-3 que capturan el mensaje y lo almacenan en la portadora [29].

3.6.3.2 Clase perturbación (*Perturbation*)

Esta clase implementa el componente de perturbación del módulo P1906 y define la señal transportada por la portadora de mensajes. El componente de perturbación se puede considerar como aquel que realiza la modulación de la señal de información y produce la variación de la concentración o el movimiento para la señal, según sea necesario. Para generar el componente pertinente a la variación en la portadora de mensajes, el componente de perturbación utiliza el método ***CreateMessageCarrier*** el cual codifica la información a transmitir y lo asocia con la portadora. En el caso del ejemplo de simulación molecular especificada en los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906 se añaden funcionalidades que posibilitan la creación de la portadora de mensajes con las características pertinentes a las de una señal molecular. Este componente permite almacenar la información sobre el número de moléculas transmitidas por cada pulso y el intervalo de tiempo entre dos pulsos consecutivos, esta información se coloca en la portadora de mensajes en el inicio de la comunicación [29].

En la Figura 3.8 se realiza la transmisión de un paquete de información cuya extensión corresponde a un byte; en consecuencia, existirán *8* pulsos en los que se produce o no se produce la transferencia de moléculas, para remitir el valor especificado en la simulación (valor del mensaje igual a *136* en la Figura 3.8) se expedirán dos pulsos activos en los cuales se liberan las moléculas y seis pulsos inactivos [29].

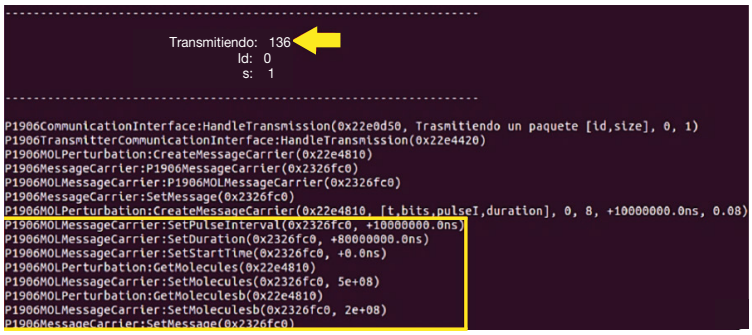


Figura 3.8. Diagrama de flujo del archivo del ejemplo de Simulación Molecular.cc del marco de referencia de los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906 [29].

La simulación en referencia cuenta con un esquema de modulación OOK basado en pulsos, donde el transmisor remite un pulso de moléculas para representar el bit-1 y no envía moléculas para representar el bit-0. Este tipo de modulación se especifica a través de la Ecuación 3.25:

$$f(t) = \begin{cases} Q_1 \prod(t), bit\ 1 \\ 0, bit\ 0 \end{cases} \tag{3.25}$$

Donde Q_1 representa la concentración molecular y $\prod(t)$ denota un pulso rectangular con amplitud unitaria; la amplitud del pulso es la unidad de tiempo desde que termina un pulso y comienza el siguiente [29].

3.6.3.3 Clase movimiento (*Motion*)

Esta clase implementa el componente de movimiento del módulo P1906, y fundamenta un modelo de propagación usando técnicas de detección molecular en términos de un proceso de difusión ideal. Este componente proporciona el servicio de movimiento para la portadora de mensajes en cualquier dirección, y permite obtener el potencial necesario para transportar la información a través de un canal de comunicación. El movimiento de cada una de las moléculas liberadas por el transmisor se modela mediante mo-

vimiento Browniano, que representa un movimiento libre en el espacio. En la simulación se considera que no existen obstáculos entre los extremos comunicacionales, y, en consecuencia, se trata de un movimiento ideal en el que no se produce afectación de otras entidades. El movimiento en mención se puede modelar a través de un proceso de Wiener (Sección 3.2.4.5.3 del presente capítulo) de notación de $x \sim N(m, \sigma^2)$. Cuando el transmisor debe emitir información se libera un pulso de moléculas, lo cual genera picos de concentración molecular en la ubicación del transmisor que luego se propagan por todo el espacio; la propagación del pulso en referencia se modela analíticamente mediante las ecuaciones que gobiernan las leyes de difusión de Fick (Capítulo 2) puntualizada por la Ecuación 3.26 [29]:

$$c(r,t) = \frac{Q}{(4\pi D t)^{3/2}} e^{-\frac{r^2}{4Dt}} \tag{3.26}$$

Donde D es el coeficiente de difusión del medio, t es el tiempo, r es la distancia desde el transmisor y Q es el número de moléculas. Esta ecuación se conoce como ecuación de pulso, y permite modelar métricas de CM en el módulo P1906, tales como retardo, ancho de pulso mínimo y capacidad del canal [29].

El componente de movimiento del módulo P1906 emplea la ley de Fick para evaluar el retraso de propagación en el medio, mismo que se calcula en el instante de tiempo en el cual el pulso alcanza su máximo valor y se expresa en la Ecuación 3.27 [29]:

$$t_d = \frac{r^2}{6D} \tag{3.27}$$

Donde r corresponde a la distancia del transmisor al receptor y D es el coeficiente de difusión.

Con la ayuda del módulo ***Mobility*** de NS-3 se obtiene un movimiento basado en las propiedades estocásticas del movimiento y leyes de Fick, dada una concentración de moléculas, la potencialidad del módulo posibilita además el cálculo del retardo de propagación por medio de modelos matemáticos y produce que el mensaje se propague a través del medio [29].

3.6.3.4 Clase campo (*Field*)

Este componente organiza al componente de movimiento; es decir, guía al movimiento en una dirección. El componente de campo del módulo P1906 que se implementa en [29] es nulo; entonces, el movimiento molecular no tendrá una dirección en particular y, en consecuencia, la difusión de moléculas de información se convierte en omnidireccional.

3.6.3.5 Clase de especificidad (*Specificity*)

Esta clase implementa el componente de especificidad del módulo P1906 y proporciona el servicio de detección o recepción de una portadora de mensajes; adicionalmente, verifica que la interfaz física pueda recibir e interpretar correctamente el mensaje transmitido, mediante la utilización del método ***CheckRxCompatibility*** retornando como resultado un dato booleano (verdadero o falso), en caso de que exista la compatibilidad correspondiente entre el transmisor y el receptor. En el caso de que ocurra esta compatibilidad, el componente de especificidad verifica que la capacidad del canal sea mayor o igual a la velocidad de transmisión. La velocidad de transmisión (v_t) se calcula como la inversa del intervalo de pulso molecular (l_p) , como se indica en la Ecuación 3.28 [29].

$$v_t = \frac{1}{l_p} \tag{3.28}$$

Mediante el cálculo de la velocidad de transmisión, el componente de especificidad determina la capacidad del canal, asumiendo el uso de un esquema de detección de amplitud de pulso, el cual tiene un impacto clave en la detección de las señales moleculares. Para calcular la capacidad del canal es importante conocer el ancho del pulso molecular, debido que este será la principal limitación en la velocidad de transmisión alcanzable. La inversa del ancho de pulso será igual a la capacidad máxima que el canal soporta. Este valor se debe tener en consideración para la comprobación de los límites de Fick en el medio de comunicación. El modelo molecular de los estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1 produce un valor booleano pertinente a verdadero en caso de que el límite de Fick se cumpla, y un valor booleano correspondiente a falso si la capacidad del canal molecular es menor a la velocidad de transmisión, por lo que, el límite de Fick no se respeta, y, en consecuencia, el enlace falla. Esta comprobación le permite al receptor la determinación de la compatibilidad del mensaje con su interfaz [29].

3.6.4 Topología de comunicación para la realización de la simulación

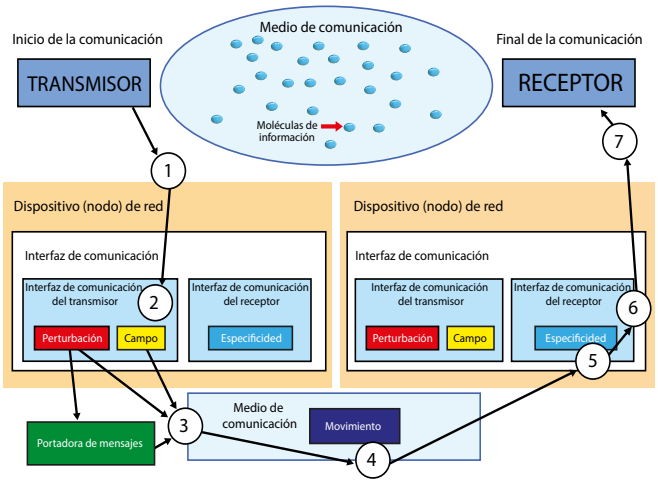


Figura 3.9. Distribución topológica de los elementos de comunicación empleados en la simulación del ejemplo molecular de los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906.

La topología de la Figura 3.9 [1]–[4] denota una conexión punto a punto, en la que el medio de comunicación, los nanotransmisores y nanoreceptores no presentan ningún obstáculo ni agentes externos que interfieran en el enlace, en el cual el componente de campo establece un movimiento omnidireccional de las portadoras moleculares. Tal topología viabiliza el análisis de métricas de rendimiento como son la propagación del pulso molecular, el pulso de retardo en el medio de propagación, el ancho del pulso molecular, la velocidad de transmisión de la información, la relación de señales moleculares obtenidas y la capacidad del canal. En la topología varían ciertos valores como el número de moléculas a transferirse, el intervalo del pulso, la distancia entre nodos y el coeficiente de difusión en los diferentes componentes de los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906, y su consecuente variabilidad de valores en función de la especificación de los valores iniciales de los parámetros en mención [29].

Por otra parte, en [29] se emplean los programas *Matlab* y *Mathematica* con el objeto de analizar los resultados obtenidos de la simulación del ejemplo molecular establecido en el marco de referencia de los estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1, y por medio de las librerías científicas (GSL-GNU *Scientific Library*) habilitadas en NS-3 se logra exportar archivos con los resultados de la simulación efectuada del ejemplo molecular, y así se posibilita graficar los mismos. Además, se implementan archivos con extensión ***.sh***, en los que se declaran un cierto número de comandos que permiten insertar valores por defecto en la simulación y, en consecuencia, comparar los resultados obtenidos.

3.6.5 Rendimiento de la comunicación

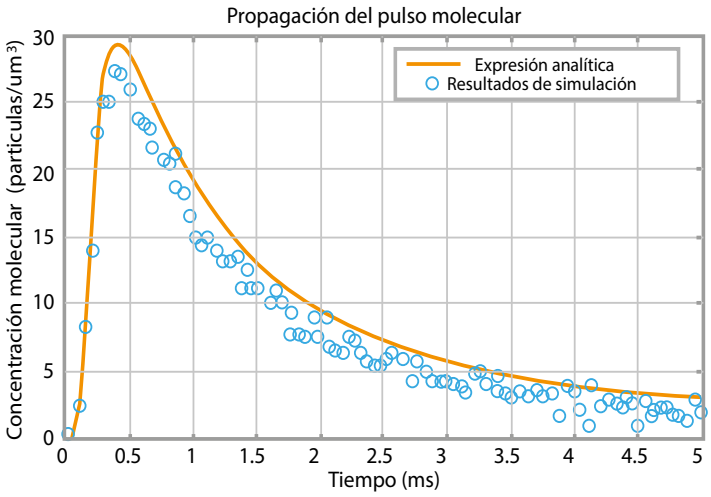
Cuando se analiza el rendimiento de un enlace de comunicación se debe examinar cada uno de los elementos que intervienen en dicho enlace, los cuales definen la forma en la que la información se transfiere en el sistema de comunicación. Luego se discuten los resultados que se han obtenido al realizar la simulación del ejemplo de CM establecido en los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906 para nanocomunicaciones, teniendo en cuenta todos los aspectos comunicacionales de las secciones previas [29].

3.6.5.1 Propagación del pulso molecular

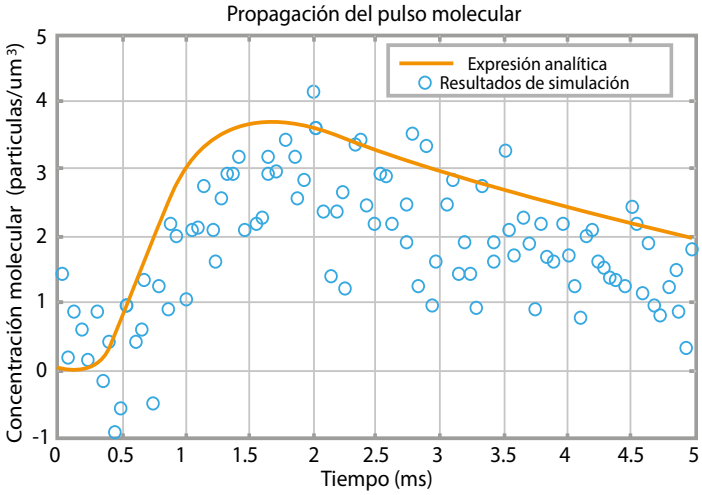
La propagación del pulso molecular que se obtiene a partir de las leyes de Fick produce un impacto importante en el rendimiento de la comunicación, como se muestra en la Ecuación 3.26; tal propagación depende de varios parámetros, la alteración de uno de ellos generaría un cambio importante en el rendimiento del enlace [29].

Uno de los parámetros más importantes, es precisamente, la distancia existente entre el transmisor y el receptor (ambos considerados como nodos de comunicación o nodos simplemente), porque a una mayor distancia entre estos nodos, el rendimiento en la comunicación podría verse afectado inherentemente por el ruido de difusión (Sección 2.1 del Capítulo 2). Para analizar el comportamiento de la propagación en [29] se ha modificado la distancia entre los nodos, y así, determinar la distancia máxima a la cual, la comunicación molecular pueda ser exitosa a través del control adecuado de parámetros como el intervalo del pulso, el número de moléculas y el coeficiente de difusión.

En la Figura 3.10 [29] se visualizan los resultados de la simulación del ejemplo molecular de los estándares a nanoescala de IEEE, en cuanto al pulso molecular obtenido en la transmisión. Se puede notar que existen pérdidas en la propagación de dicho pulso, la razón de estas pérdidas se encuentra en la presencia del ruido de difusión que se presenta como consecuencia de la naturaleza estocástica del movimiento Browniano, esta afectación contaminante en la señal de información se hace más evidente conforme la distancia entre los nodos es mayor, degradando severamente el rendimiento de la comunicación [29].



a)



b)

Figura 3.10. Pulso molecular resultante en función del tiempo obtenido a partir de la simulación en NS-3 del ejemplo molecular de los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906.

Las leyes de Fick permiten conocer los valores máximos a los cuales un nodo transmisor puede estar distanciado de su receptor sin que este último presente fallos en la detección de las señales moleculares. Si, por ejemplo, un nodo receptor posee un esquema de detección de concentración molecular, el nivel de detección dependerá de la densidad en la concentración (que se asocia con la distancia) y, consecuentemente, estos parámetros establecerán la efectividad o no de la comunicación. En este sentido, si un nodo de recepción se ubica a una gran distancia del nodo transmisor, la concentración molecular no sobrepasará un

nivel de umbral determinado y necesario para la adecuada detección molecular y, por consiguiente, no se recibirá el mensaje. En la Figura 3.11 [29] se representa la concentración molecular que se obtiene en la simulación del ejemplo molecular de los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906, misma que se fundamenta en condiciones de difusión ideales en el medio de propagación; por tanto, cada una de las moléculas liberadas cuenta con la misma probabilidad de ser dirigida hacia la derecha o hacia la izquierda desde su posición anterior [29].

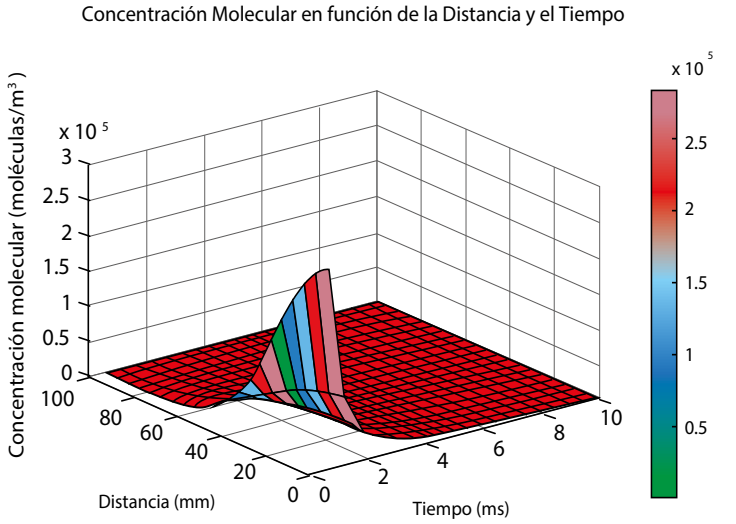


Figura 3.11. Pulso molecular resultante en función del tiempo obtenido a partir de la simulación en NS-3 del ejemplo molecular de los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906.

En la simulación del ejemplo a nanoescala de IEEE se utiliza modulación OOK para la transmisión de información, su implementación se consigue a través del componente de perturbación que encapsula en la señal portadora las características de una señal modulada por amplitud; así, el umbral de detección del receptor determinará la concentración molecular y la consecuente decisión de si la información que ha arribado corresponde a un bit-1 o bit-0 de acuerdo a los tiempos de intervalos de cada bit [29].

La Figura 3.12 [29] permite la visualización de la transmisión de la información molecular empleando diferentes distancias del enlace; en la parte a) de la figura se puede notar que la comunicación fue exitosa en razón de que se han superado las limitaciones establecidas por el umbral de concentración molecular; en tanto en la parte b) de la figura, la cantidad de moléculas que captura el receptor no es suficiente para superar el umbral de concentración; en consecuencia, la transmisión falla y el mensaje no se recibe [29].

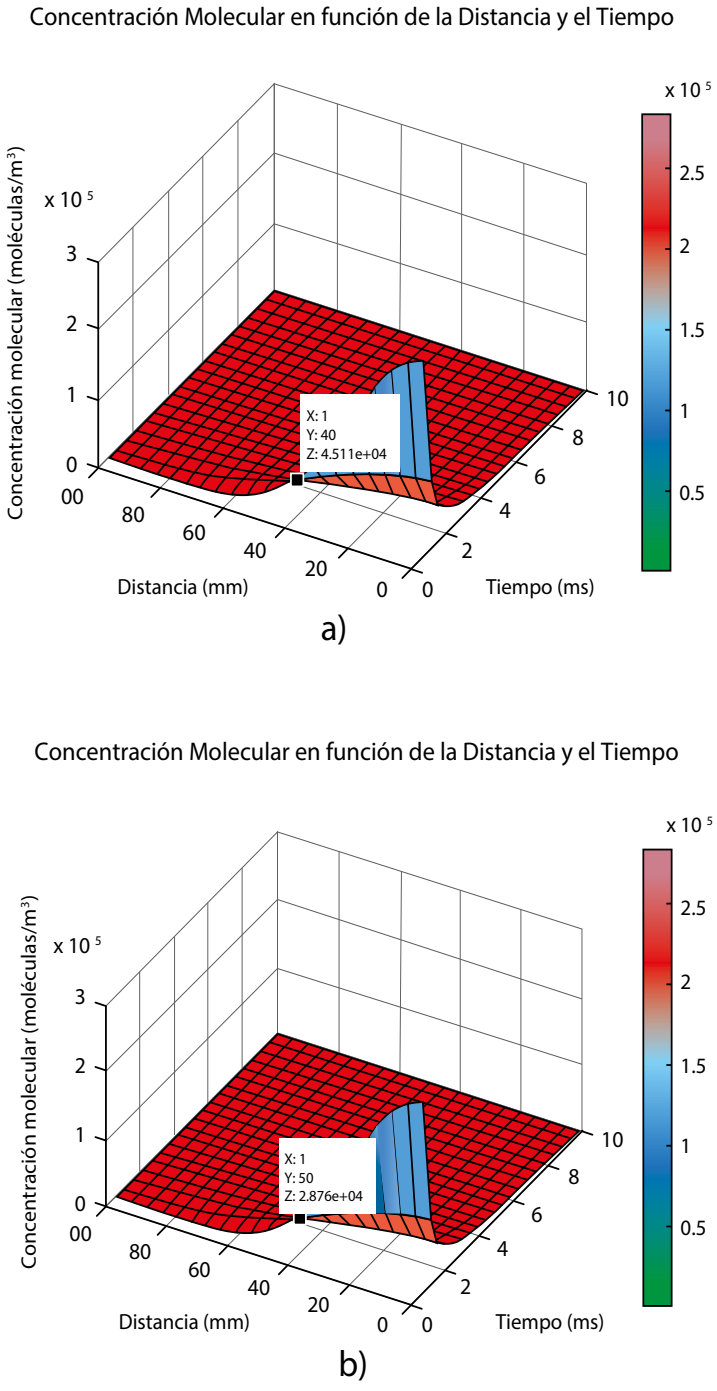


Figura 3.12. Gráficos de comunicación molecular obtenidos de la simulación en NS-3 del ejemplo molecular de los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906, establecidos a diferentes distancias: a) **0,04 (m)** y b) **0,05 (m)**.

3.6.5.2 Pulso de retardo

En la simulación del ejemplo molecular de los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906 existen métricas importantes que se han implementado para conocer el rendimiento de la comunicación. Una de estas (que se fundamenta en la transferencia de señales moleculares) es el pulso de retardo entre el transmisor y el receptor. Para el estudio del retraso se usa la Ecuación 3.23 que se implementa mediante el componente de movimiento del marco de referencia de los estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1 [29].

El retardo en el pulso de transmisión se mide por cada distancia a la cual se coloca el nodo receptor, por lo que el resultado de cada una de las distancias permite conocer cómo afecta este retardo en la comunicación. Para obtener estos resultados se ejecutan archivos cuya extensión es ***.sh***, los cuales facilitan la realización de varias simulaciones y la captura de los valores deseados, en este caso el pulso de retardo [29].

La Figura 3.13 [29] exhibe el resultado del retraso de pulso que se obtiene a partir de la simulación del ejemplo molecular de los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906, en donde se ha transmitido un pulso de ***50.000*** moléculas con un coeficiente de difusión igual a 1 (nm^2/ns) [29].

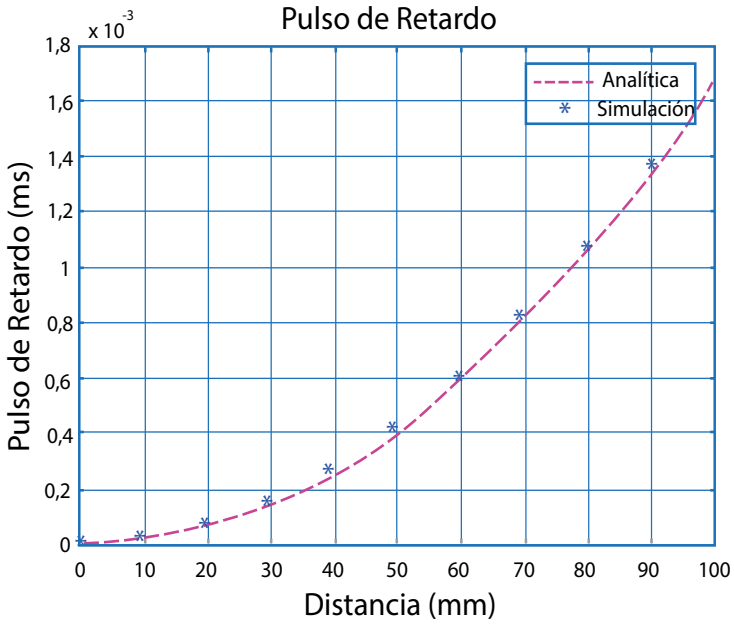


Figura 3.13. Pulso de retardo obtenido de la simulación del ejemplo molecular de los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906 con base en un rango de comunicación contemplado entre **0 (m)** y **0,1 (m)**.

3.6.5.3 Ancho del pulso molecular y velocidad de transmisión

El ancho del pulso molecular es un parámetro altamente relevante en la simulación del ejemplo molecular de los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906, debido a que determina la velocidad de transmisión que se puede alcanzar en la comunicación. Uno de los objetivos que tiene el enlace molecular es conseguir la tasa de transferencia de bits más alta posible entre el nanotransmisor y el nanoreceptor, tal velocidad se relaciona con la duración de los símbolos que se envían. El ancho de pulso se obtiene del componente de especificidad y permite conocer la capacidad de canal molecular; para el análisis de esta métrica se debe discutir la función W de Lambert, misma que se define como la inversa de la función $f(w) = We^w$, donde e^w es una función exponencial natural y W es cualquier número complejo. Por lo anterior, la variable de tiempo se expresa como [29]:

$$t = -\frac{r^2}{6DW\left(-\frac{1}{2^{\frac{2}{3}}e}\right)} \tag{3.29}$$

Donde r es la distancia en el enlace, W es la función de Lambert y D es el coeficiente de difusión. Las soluciones de la ecuación en referencia son dos, en las que se toman valores de tiempo en los que la amplitud del pulso molecular corresponde a la mitad del valor máximo, y se expresan en la Ecuación 3.30. La diferencia de los dos tiempos puntualizados en la Ecuación 3.30 especifica el ancho del pulso [29]:

$$t_1 = \frac{0{,}0728\, r^2}{D}, \quad t_2 = \frac{0{,}5229\, r^2}{D} \tag{3.30}$$

La Figura 3.14 [29] denota los resultados del ancho de pulso en función de la distancia de transmisión adquiridos a partir de la simulación del ejemplo molecular de los estándares a nanoescala de IEEE, en tanto en la Figura 3.15 [29] se observa el resultado de la velocidad de transmisión en el canal molecular cuando se utilizan diversos valores de intervalos de pulso ($Q(t)$) [29].

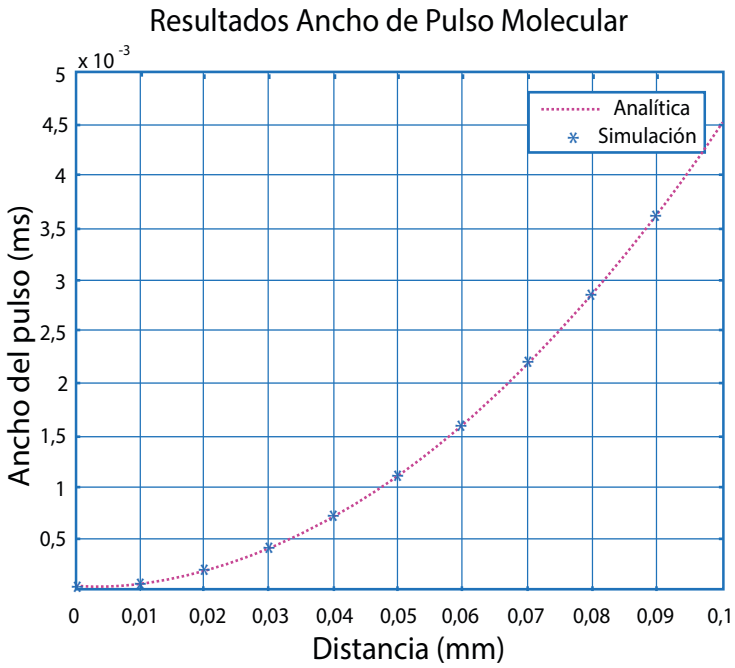


Figura 3.14. Ancho de pulso molecular obtenido en la simulación del ejemplo molecular de los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906 para 100 realizaciones a diferentes distancias.

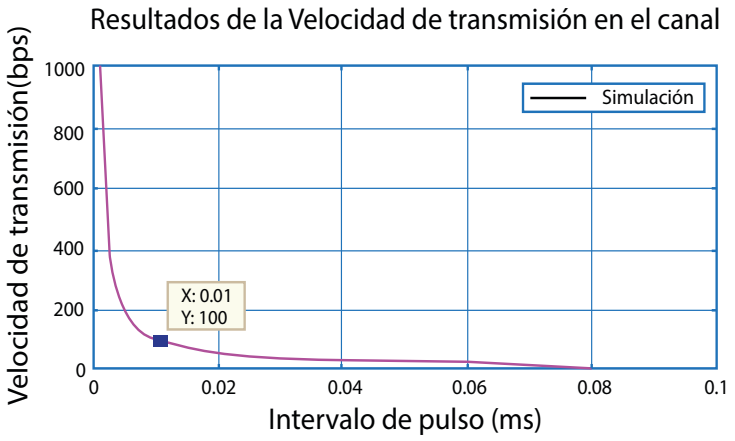


Figura 3.15. Resultados de la velocidad de transmisión en el canal molecular en la simulación del ejemplo molecular de los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906.

3.6.5.4 Relación de señales

En la simulación del ejemplo molecular de los estándares a nanoescala de IEEE se establece un entorno de difusión en el canal de comunicaciones; por tanto, el modelado de este canal se fundamentará en las ecuaciones que gobiernan el proceso de difusión. En estos canales las moléculas se desplazan aleatoriamente, evento que podría generar interferencia de tipo ISI. Con el fin de reducir el efecto de contaminación de la señal se emplean ciertos parámetros de tiempo para la determinación de la duración de cada símbolo. En el caso de la simulación efectuada en [29] se añaden intervalos de pulso que señalan el tiempo en el que un símbolo se transmite, para propender que el siguiente símbolo no presente fallos de lectura. Así, un mensaje de 1 byte de información se compondrá de ***8*** pulsos de ***0,001 (s)*** y por lo tanto para transmitir el mensaje, el componente de portadora de mensajes indicará el tiempo de duración del mensaje mencionado en ***0,008 (s)*** [29].

Una de las dificultades más importantes para el procesamiento del componente de perturbación cuando se usa modulación OOK es la presencia de las moléculas residuales que se mantienen en el medio durante más tiempo del que le corresponde a un solo bit, este problema es evidente cuando el coeficiente de difusión es bajo y las moléculas remanentes interfieren en la detección del siguiente bit [29].

Como se observa en la Figura 3.16 [29] el transmisor libera moléculas a una tasa fija de ***50.000*** moléculas por cada ***0,001 (s)*** con base en la secuencia de bits que se ha emitido. El componente de perturbación implementa una modulación OOK en la señal portadora de mensajes; por lo tanto, para medir el rendimiento de esta señal se analiza la relación de intensidad de señal deseada (E_S) y la intensidad de interferencia recibida (E_l) [29]:

$$E_S = \int_0^{T_{obs}} S_{out}(t)dt \tag{3.31}$$

$$E_l = \int_0^{T_{obs}} i(t)dt \tag{3.32}$$

Las señales $S_{out}(t)$, e $i(t)$ corresponden a la señal de salida del transmisor y a la señal de interferencia captada por el receptor respectivamente [29].

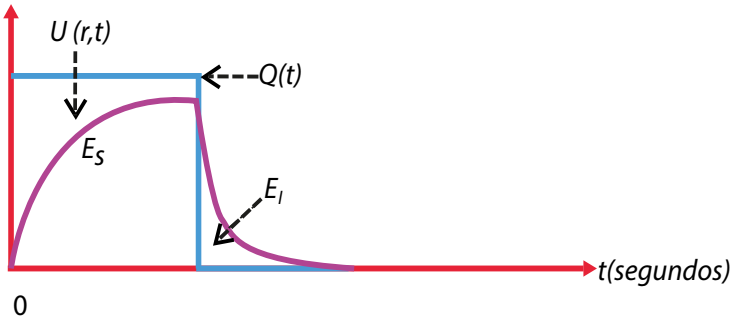


Figura 3.16. Vista general de la relación de señales en un enlace molecular del ejemplo molecular de los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906.

El tiempo de observación (T_{obs}) corresponde al producto del número total de bits a transmitir y la duración del bit. Para la obtención de la Figura 3.16, el tiempo de observación se ha configurado en la portadora de mensajes el valor pertinente a *8.000.000* (ns) [29].

3.6.5.5 Capacidad del canal

El último parámetro comunicacional analizado en [29] corresponde a la capacidad del canal de comunicación, el cual puede variar en función de las características físicas establecidas en la implementación del enlace; por ejemplo, a través de la configuración del número de moléculas o el coeficiente de difusión. La Figura 3.17 [29] expone la capacidad del canal como resultado de la simulación del ejemplo molecular de los estándares a nanoescala de IEEE con las características expuestas en la Sección 3.6.1 del presente capítulo, especificando diferentes distancias en la transmisión. Como se puede apreciar en esta figura, cuanto mayor es la distancia del enlace, el canal no se muestra apropiado para lograr una comunicación adecuada, de manera completamente análoga a lo que ocurre en los sistemas de comunicación tradicionales [29].

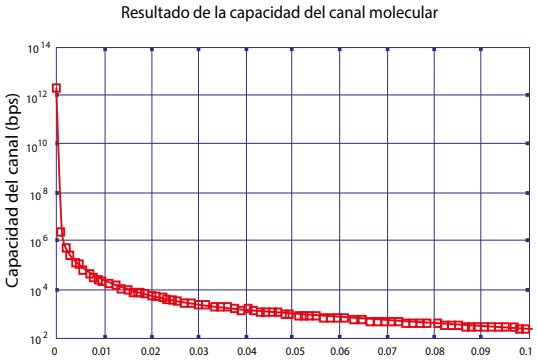


Figura 3.17. Capacidad de canal obtenida a partir de la simulación del ejemplo molecular de los estándares de la familia protocolaria IEEE 1906.

Referencias bibliográficas

[1] S. F. Bush, J. L. Paluh, G. Piro, V. Rao, R. V. Prasad, and A. Eckford, "Defining communication at the bottom," *IEEE Trans. Mol. Biol. Multi-Scale Commun.*, vol. 1, no. 1, pp. 90–96, 2015.

[2] S. F. Bush, "Interoperable nanoscale communication [future directions]," *IEEE Consum. Electron. Mag.*, vol. 6, no. 2, pp. 39–47, 2017.

[3] "IEEE Recommended Practice for Nanoscale and Molecular Communication Framework," *IEEE Std 1906.1-2015,* pp. 1–64, 2016, doi: 10.1109/IEEESTD.2016.7378262.

[4] "IEEE Standard Data Model for Nanoscale Communication Systems," *IEEE Std 1906.1.1-2020*, pp. 1–142, 2020, doi: 10.1109/IEEESTD.2020.9285373.

[5] K. R. Pilkiewicz, P. Rana, M. L. Mayo, and P. Ghosh, "Molecular Communication and Cellular Signaling from an Information-Theory Perspective," *Nanoscale Netw. Commun. Handb.*, p. 235, 2019.

[6] D. B. Menendez, V. R. Senthivel, and M. Isalan, "Sender--receiver systems and applying information theory for quantitative synthetic biology," *Curr. Opin. Biotechnol.*, vol. 31, pp. 101–107, 2015.

[7] A. Gohari, M. Mirmohseni, and M. Nasiri-Kenari, "Information theory of molecular communication: Directions and challenges," *IEEE Trans. Mol. Biol. Multi-Scale Commun.*, vol. 2, no. 2, pp. 120–142, 2016.

[8] Y. Cevallos *et al.*, "Theoretical Basis for Gene Expression Modeling Based on the IEEE 1906.1 Standard," in *International Conference on Bio-inspired Information and Communication Technologies*, 2021, pp. 145–162.

[9] Y. Cevallos, L. Tello-Oquendo, D. Inca, D. Ghose, A. Z. Shirazi, and G. A. Gomez, "Health Applications Based on Molecular Communications: A Brief Review," in *2019 IEEE International Conference on E-health Networking, Application & Services (HealthCom)*, 2019, pp. 1–6.

[10] C. Koca, M. Civas, S. M. Sahin, O. Ergonul, and O. B. Akan, "Molecular Communication Theoretical Modeling and Analysis of SARS-CoV2 Transmission in Human Respiratory System," *arXiv Prepr. arXiv2011.05154*, 2020.

[11] M. T. Barros *et al.*, "Molecular Communications in Viral Infections Research: Modelling, Experimental Data and Future Directions," *arXiv Prepr. arXiv2011.00002*, 2020.

[12] M. Schurwanz, P. A. Hoeher, S. Bhattacharjee, M. Damrath, L. Stratmann, and F. Dressler, "Infectious Disease Transmission via Aerosol Propagation from a Molecular Communication Perspective: Shannon Meets Coronavirus," *arXiv Prepr. arXiv2011.00290*, 2020.

[13] M. Dong, W. Li, and X. Xu, "Evaluation and modeling of HIV based on communication theory in biological systems," *Infect. Genet. Evol.*, vol. 46, pp. 241–247, 2016.

[14] N. A. Ali and M. Abu-Elkheir, "Internet of nano-things healthcare applications: Requirements, opportunities, and challenges," in *2015 IEEE 11th International Conference on Wireless and Mobile Computing, Networking and Communications (WiMob)*, 2015, pp. 9–14.

[15] T. Nakano, M. Moore, A. Enomoto, and T. Suda, "Molecular communication technology as a biological ICT," in *Biological functions for information and communication technologies,* Springer, 2011, pp. 49–86.

[16] U. Chude-Okonkwo, R. Malekian, and B. T. Maharaj, "Internet of things for advanced targeted nanomedical applications," in *Advanced Targeted Nanomedicine*, Springer, 2019, pp. 113–124.

[17] Y. Cevallos, L. Molina, A. Santillán, F. De Rango, A. Rushdi, and J. B. Alonso, "A digital communication analysis of gene expression of proteins in biological systems: A layered network model view," *Cognit. Comput.*, vol. 9, no. 1, pp. 43–67, 2017.
[18] Y. Cevallos *et al.*, "Modeling Gene Expression and Protein Delivery as an End-to-End Digital Communication System," *Open Bioinforma. J.*, vol. 14, no. 1, 2021.
[19] Y. Cevallos, L. Tello-Oquendo, D. Inca, C. Palacios, and L. Renter\'\ia, "Genetic Expression in Biological Systems: A Digital Communication Perspective," *Open Bioinforma. J.*, vol. 12, no. 1, 2019.
[20] I. F. Akyildiz, M. Pierobon, and S. Balasubramaniam, "Molecular Communications and Networking [Scanning the Issue]," *Proc. IEEE,* vol. 107, no. 7, pp. 1227–1229, 2019.
[21] S. Canovas-Carrasco, A.-J. Garcia-Sanchez, and J. Garcia-Haro, "The IEEE 1906.1 standard: Nanocommunications as a new source of data," *2017 ITU Kaleidosc. Challenges a Data-Driven Soc. (ITU K),* pp. 1–7, 2017.
[22] I. F. Akyildiz, J. M. Jornet, and M. Pierobon, "Nanonetworks: A new frontier in communications," *Commun. ACM*, vol. 54, no. 11, pp. 84–89, 2011.
[23] A. El-taweel, S. M. Abd El-atty, and S. El-Rabaie, "Efficient Molecular Communication Protocol based on Mobile Ad-hoc Nanonetwork," *Menoufia J. Electron. Eng. Res.*, vol. 26, no. 2, pp. 427–443, 2017.
[24] Y. Cevallos *et al.*, "A brief review on DNA storage, compression, and digitalization," *Nano Commun. Netw., p.* 100391, 2021.
[25] Y. Cevallos *et al.*, "On the efficient digital code representation in DNA-based data storage," in *Proceedings of the 7th ACM International Conference on Nanoscale Computing and Communication,* 2020, pp. 1–7.
[26] A. Zadeh Shirazi *et al.*, "The Application of Deep Convolutional Neural Networks to Brain Cancer Images: A Survey," *J. Pers. Med.*, vol. 10, no. 4, p. 224, 2020.
[27] Y. Cevallos *et al.*, "Modelamiento comunicacional de la expresión genética y el transporte de prote{\'\i}nas mediante un sistema de transmisión digital extremo a extremo," 2022.
[28] K. Yang *et al.*, "A comprehensive survey on hybrid communication in context of molecular communication and terahertz communication for body-centric nanonetworks," *IEEE Trans. Mol. Biol. Multi-Scale Commun., vol.* 6, no. 2, pp. 107–133, 2020.
[29] A. G. Rivera Gaibor, "Simulación de nano sistemas de comunicaciones en NS3 en función a los componentes comunicacionales establecidos por el estándar IEEE 1906.1," Riobamba, Universidad Nacional de Chimborazo, 2021.
[30] P. D. Grünwald, P. M. B. Vitányi, and others, "Algorithmic information theory," *Handb. Philos. Inf.*, pp. 281–320, 2008.
[31] T. Nakano, A. W. Eckford, and T. Haraguchi, *Molecular communication.* Cambridge University Press, 2013.
[32] Y. Liu and C.-C. L. Huang, "Introduction to Lévy Processes," *Wiley Encycl. Oper. Res. Manag. Sci.*, pp. 1–7, 2011.

COMUNICACIONES MOLECULARES
Un análisis desde el paradigma protocolario de IEEE

escrito por:

Yesenia Cevallos, Deysi Inca, Ivone Santillán, Cristian Vacacela Gómez,
Talía Tene, Albert Espinal, Camilo Téllez, Nicolay Samaniego

Impreso en Digitals by CEDIA (Cuenca, Ecuador),
con un tiraje de 10 ejemplares.

El sello editorial de la Corporación Ecuatoriana para el Desarrollo de la Investigación y la Academia - CEDIA, nace con la finalidad de aportar a la creación y publicación de resultados, investigaciones y procesos académicos que fomentan el desarrollo de la ciencia y promuevan la innovación.

COMUNICACIONES MOLECULARES

Un análisis desde el paradigma protocolario de IEEE

PRIMERA EDICIÓN

2023

1ª Edición

El estudio científico de las Comunicaciones Moleculares (CM) se ha llevado a cabo desde hace quince años, aproximadamente, en razón de su potencial utilidad y aplicación en ámbitos tan diversos como el biomédico, el electrónico, el industrial, el ambiental agrícola y el militar. A partir de las numerosas investigaciones en el mundo de las CM, han surgido varios elementos para su análisis teórico, simulación y experimentación.

En este libro se analizan, a profundidad, los estándares de nanocomunicaciones moleculares definidos por el Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE), aportando a la difusión de obras científicas de CM en nuestro idioma; así, los contenidos de esta obra se han organizado en tres capítulos donde se introduce al lector en las CM, su importancia y relación con los estándares de nanocomunicaciones de IEEE; se estudian los parámetros de transmisión que rigen los sistemas de CM, necesarios para comprender la transferencia de información; finalmente, se detallan los estándares IEEE 1906.1 y 1906.1.1.

En consecuencia, este libro requiere el conocimiento ingenieril pertinente sobre programación informática, sistemas de comunicaciones, redes de computadoras, sistemas de comunicación molecular biológicos, y el manejo de las teorías de la información, matemáticas y técnicas probabilísticas subyacentes.

ISBN: 978-9942-8952-3-3

Unach
UNIVERSIDAD NACIONAL DE CHIMBORAZO