

UNIVERSITÉ DE SHERBROOKE  
Faculté de génie  
Département de génie électrique et de génie informatique

# Amélioration des performances de la communication moléculaire

SCA 772 Définition du projet de recherche au doctorat

Oussama Abderrahmane Dambri

Sherbrooke (Québec) Canada

Juin 2018



# MEMBRES DU JURY

Soumaya Cherkaoui

---

Directeur

---

Codirecteur



# RÉSUMÉ

Le domaine de la nanotechnologie a connu un développement très rapide et fascinant, arrivant à l'échelle nano, les nano-robots, nano-antennes et même les nano-batteries ont envahi le marché mondial, surtout dans le diagnostic médical et la livraison locale des médicaments. Néanmoins, la capacité individuelle de chaque nanomachine est très limitée, d'où la nécessité d'établir une nanocommunication entre eux pour la synchronisation et le travail en groupe. Il y a deux solutions pour créer un système de nanocommunication : soit on utilise le modèle classique de la communication électromagnétique avec le Terahertz band, ou on utilise la communication moléculaire inspiré par la nature. Dans ce projet de recherche, je m'intéresse à la communication moléculaire dans le but de mieux exploiter son potentiel utilisé par la nature il y a des millions d'années. Mais l'utilisation de ce nouveau paradigme n'est pas sans défis. L'affaiblissement sur le trajet et l'Interférence InterSymbole (IIS) sont les problématiques les plus influençant sur la qualité de la communication moléculaire, en diminuant le débit de transmission et en augmentant la probabilité d'erreur au niveau de la réception d'information. L'objectif principal de ce projet de recherche est de trouver des solutions à ces deux problématiques et améliorer ainsi les performances de la communication moléculaire. Pour ce faire, le travail est subdivisé en trois grandes parties. Dans la première partie, je propose une nouvelle méthode pour mieux atténuer IIS, en utilisant la Photo-réaction de la vitamine D au lieu d'utiliser les enzymes comme proposé dans la littérature. Ce qui cause l'interférence dans la communication moléculaire à base de diffusion est le nombre des molécules restantes dans le milieu qui vont interférer avec les molécules du prochain bit. L'élimination de ces molécules va atténuer l'interférence. Mais les éliminer à l'aide des photo-réactions sera plus rapide et plus efficace comparé à l'utilisation des enzymes et ainsi une meilleure performance du système de communication. Dans la deuxième partie, je propose un système MIMO pour résoudre le problème de l'affaiblissement sur le trajet. L'objectif de cette partie est d'optimiser la performance du receveur utilisé dans le système MIMO en choisissant judicieusement les paramètres de son design. Chaque paramètre va être modulé dans un problème d'optimisation, et résoudre le problème nous donne le choix optimum de chaque paramètre. La combinaison optimale des paramètres utilisé dans le design du MIMO receveur va améliorer son performance et ainsi améliorer la qualité de la communication moléculaire. La troisième partie est la plus importante dans ce projet de recherche, dans laquelle je propose un nouveau système de communication moléculaire à base de polymères auto-assemblés. Ces polymères (Actines) vont s'assembler pour construire un fil conducteur d'électricité et ainsi créer pour la première fois une communication moléculaire filaire.

**Mots-clés :** Communication moléculaire à base de diffusion, affaiblissement sur le trajet, Interférence InterSymbole, MIMO, Photo-réaction, Actine.



# TABLE DES MATIÈRES

<b>1</b>	<b>INTRODUCTION</b>	<b>1</b>
1.1	Motivation . . . . .	1
1.2	Organisation . . . . .	2
<b>2</b>	<b>ÉTAT DE L'ART</b>	<b>5</b>
2.1	Communication électromagnétique . . . . .	5
2.2	Communication moléculaire . . . . .	6
2.2.1	Méthodes de propagation . . . . .	6
2.2.2	Techniques de modulation . . . . .	10
2.3	Originalité du projet de recherche . . . . .	12
<b>3</b>	<b>PROBLÉMATIQUES ET OBJECTIFS</b>	<b>13</b>
3.1	Problématiques . . . . .	13
3.2	Objectifs . . . . .	14
3.2.1	Objectif général . . . . .	14
3.2.2	Objectifs intermédiaires . . . . .	15
<b>4</b>	<b>HYPOTHÈSES ET APPROCHES PROPOSÉE</b>	<b>16</b>
4.1	Première approche . . . . .	16
4.2	Deuxième approche . . . . .	17
4.3	Troisième approche . . . . .	17
<b>5</b>	<b>MÉTHODOLOGIE ET ÉCHÉANCIERS</b>	<b>19</b>
5.1	Méthodologie . . . . .	19
5.1.1	Première et deuxième approches . . . . .	19
5.1.2	Troisième approche . . . . .	20
5.2	Échéanciers . . . . .	20
<b>6</b>	<b>CONCLUSION</b>	<b>21</b>
6.1	Étendue des travaux et type de projet . . . . .	21
6.2	Résultats . . . . .	21
6.2.1	Résultats obtenus . . . . .	21
6.2.2	Résultats attendus . . . . .	22
6.3	Contribution . . . . .	23
6.4	Impact . . . . .	23
<b>A</b>	<b>Article 1</b>	<b>25</b>
A.1	Résumé en français . . . . .	25
A.2	Abstract . . . . .	25
A.3	Introduction . . . . .	26
A.4	System Model . . . . .	28
A.4.1	Diffusion . . . . .	28

---

A.4.2	Photolysis Reaction . . . . .	29
A.4.3	Reveiver . . . . .	30
A.5	Performance Evaluation and Simulation Results . . . . .	31
A.5.1	Impulse Response . . . . .	32
A.5.2	UV Light Emission's Optimal Time . . . . .	34
A.5.3	ITR and Performance Evaluation . . . . .	35
A.6	Conclusion . . . . .	37
<b>B</b>	<b>Article 2</b>	<b>38</b>
B.1	Résumé en français . . . . .	38
B.2	Abstract . . . . .	38
B.3	Introduction . . . . .	39
B.4	System Model . . . . .	41
B.4.1	Diffusion . . . . .	41
B.4.2	MIMO Receiver . . . . .	42
B.4.3	Decision Rule and Error Probability . . . . .	44
B.5	Evaluation and simulation results . . . . .	45
B.5.1	Diameter of the detectors . . . . .	45
B.5.2	Distance between the transmitter and the receiver . . . . .	47
B.5.3	Distance between the detectors . . . . .	47
B.6	Conclusion . . . . .	50
	<b>LISTE DES RÉFÉRENCES</b>	<b>54</b>

---



# LISTE DES FIGURES

2.1	Les phases des mouvements bactériennes et le principe du Chimiotactisme	8
2.2	(a) La trajectoire intérieur de la propagation de $Ca^{2+}$ , (b) La trajectoire extérieur . . . . .	9
2.3	Communication moléculaire à base de protéine motrice (a) Premier système (b) Deuxième système . . . . .	10
2.4	Techniques de modulation (a) communication électromagnétique (b) communication moléculaire . . . . .	11
3.1	Système de communication moléculaire à base de diffusion . . . . .	13
6.1	Tableau de Stokes . . . . .	21
A.1	System model showing Provitamin molecules propagation (shown as blue circles), from the transmitter (Tx) to the 3D spherical receiver (Rx). The received molecules (shown as red stars) are inside the 3D receiver Rx. At time TU, The UV light Emitters (shown as black cubes) up and down Rx emit UV light waves (shown as violet arrows) hitting Provitamin $D_3$ molecules, which they absorb the light energy and instantly transform to Provitamin $D_3$ (shown as yellow squares). . . . .	28
A.2	7-dehydrocholesterol irradiation and transformation to Provitamin D3 . . .	29
A.3	Action spectrum of 7-DHC to Provitamin D3 conversion . . . . .	30
A.4	Photolysis rate coefficient as a function of the $\lambda$ and ISI effect . . . . .	32
A.5	Difference between Impulse responses of enzymatic and non-enzymatic systems wavelength . . . . .	33
A.6	Effect of the light emission time variation on the impulse response . . . .	35
A.7	Effect of the distance variation on the impulse response . . . . .	35
A.8	ITR comparison between the three simulated scenarios (Top), for different light emission times (Left) and for different distances (Right) . . . . .	36
B.1	System model of Molecular MIMO using 3 types of molecules . . . . .	41
B.2	Multi-User Interference (MUI) at the detector RX1 of the proposed MIMO system when using one type of molecules . . . . .	44
B.3	Impulse response of the designed MIMO receiver for different detectors diameter . . . . .	46
B.4	The function of the probability of error with the number of molecules released by each emitter as an input for different detectors diameter . . . . .	46
B.5	Impulse response of the designed MIMO receiver for different channel distances . . . . .	48
B.6	The function of the probability of error with the number of molecules released by each emitter as an input for different channel distances . . . . .	48
B.7	Impulse response of the designed MIMO receiver for different distances between detectors . . . . .	49

B.8	The function of the probability of error with the number of molecules released by each emitter as an input for different distances between detectors	49
-----	--	----

# LISTE DES TABLEAUX

5.1	Échéanciers . . . . .	20
A.1	System Parameters Used for Simulation Results . . . . .	34



# LISTE DES ACRONYMES

Acronyme	Définition
ISI	Interférence InterSymbole
CSK	Modulation avec changement de concentration
MoSK	Modulation avec changement du type des molécules
RTSK	Modulation avec changement du temps de libération des molécules
MAP	probabilité maximale a posteriori
ITR	interférences sur le nombre total des molécules reçues
MUI	Interférence multi-utilisateur
SISO	entrée unique à sortie unique
MIMO	entrée multiple à sortie multiple



# CHAPITRE 1

## INTRODUCTION

### 1.1 Motivation

Les mots du physicien Richard Feynman « There's plenty of room at the bottom » ont inspiré les scientifiques d'explorer l'échelle nanométrique, et développer une nano-technologie qui a non seulement fait une révolution industrielle, mais elle a créé une voie prometteuse pour résoudre les problèmes de notre monde. Dans tous les domaines de la science et de l'industrie, la nanotechnologie a toujours un rôle à jouer et une solution à proposer. De la pollution de l'environnement jusqu'au domaine médical et militaire, cette nouvelle technologie offre toujours la meilleure solution avec le minimum coût possible. Cependant, les nanomachines ont une capacité individuelle très limitée et pour compenser cette limitation avec leur grand nombre, ils doivent synchroniser leur travail de groupe pour atteindre un seul objectif comme une colonie de fourmis, et pour faire ça ils ont besoin d'un système de nano-communication. L'application du paradigme classique de la communication électromagnétique à l'échelle nano est très difficile, puisque la taille nanométrique des antennes les oblige à envoyer des ondes avec une fréquence de Terahertz. Il est encore difficile d'utiliser le Terahertz puisqu'il reste toujours des problèmes à résoudre pour pouvoir contrôler et capturer cette bande de fréquence, surtout dans le domaine médical où il est nécessaire de confirmer la sécurité d'utiliser le Terahertz sans danger pour le corps humain. La solution la plus efficace et la plus prometteuse pour créer un système de nano-communication est d'imiter la nature qui a ingénieusement créé des nano biosystèmes qui communiquent entre eux en utilisant des molécules chimiques. C'est la capacité de ces biosystèmes à communiquer entre eux il y a des millions d'années qui a permis à des systèmes plus complexes d'apparaître, comme nous les humains et notre précieux cerveau. C'est ce qui a motivé l'apparition d'un nouveau paradigme qui, au lieu d'utiliser les ondes électromagnétiques, il utilise des molécules pour envoyer l'information. La communication moléculaire a attiré l'attention des chercheurs scientifiques dans les dix dernières années dans tous les domaines, surtout dans le domaine médical où elle peut résoudre des problèmes de diagnostics, de livraison local des médicaments et même aider à identifier et traiter des maladies comme le cancer et l'Alzheimer. De nombreuses méthodes sont proposées pour appliquer la communication moléculaire à l'échelle nano comme utiliser des nanomoteurs, des bactéries flagellées, des canaux de calcium dans les cellules vivantes, mais la plus simple

et la plus basique méthode proposé est la communication moléculaire à base de diffusion. Cette méthode tire profit de la diffusion naturelle des molécules à cause des fluctuations thermiques du milieu, ce mouvement brownien n'a besoin d'aucune énergie supplémentaire pour transformer les molécules de l'émetteur au receveur. Cependant, la diffusion a besoin d'un temps considérable pour atteindre son objectif, et elle est dépendante de la distance du canal. En outre, les molécules qui n'ont pas réussi à atteindre le receveur vont rester dans le milieu et interférer avec les nouvelles molécules émises ce qui créera l'Interférence InterSymbole. Ces challenges peuvent limiter la performance de la communication moléculaire en diminuant le débit et augmente la probabilité de l'erreur. Après chaque apparition d'une nouvelle technologie, il y aura toujours une étape d'amélioration. Dans ce projet de recherche, je m'intéresse à contribuer dans cette étape d'amélioration en proposant de nouvelles approches pour augmenter le débit réalisable et atténuer l'Interférence InterSymbole, ce qui peut diminuer la probabilité d'erreur et ainsi améliorer la performance de la communication moléculaire. Mes approches appliquées sont inspirées par les biosystèmes dans la nature profitant de mes connaissances en biologie, ce qui représente l'originalité dans ce projet de recherche. Ce projet de doctorat propose d'utiliser la photo-réaction des molécules sensibles à la lumière comme le Vitamine D dans notre peau pour éliminer les molécules restantes dans le milieu et ainsi atténuer l'Interférence InterSymbole. Il Propose une optimisation du receveur utilisé dans la technique d'entrées multiples sorties multiples ou MIMO de la communication moléculaire en choisissant soigneusement les paramètres du design du receveur. Finalement, Ce projet met la base pour une nouvelle méthode de communication moléculaire jamais proposé avant, la communication à base des polymères auto-assemblés. Cette méthode va profiter de l'électricité pour envoyer l'information à travers des actines auto-assemblé et très conducteurs, et après l'application de cette nouvelle méthode, le débit réalisé avec la communication moléculaire peut être comparé avec le débit réalisé avec la communication filaire et électromagnétique.

## 1.2 Organisation

Le reste du document s'organise de la manière suivante. Dans le Chapitre 2, je résume l'état de l'art des méthodes proposées dans la littérature pour la communication moléculaire, leurs avantages et leurs inconvénients. Dans le Chapitre 3, je vais citer les problématiques à surmonter avec plus de détail ainsi que les objectifs visés dans ce projet de recherche. Dans le Chapitre 4, je vais discuter les hypothèses et les nouvelles approches que je propose pour surmonter les problématiques expliquées dans le Chapitre 3. Quant à la méthodologie utilisée ainsi que l'échéancier de ce projet de recherche, ils vont être clarifiés dans le

---



---

Chapitre 5. La conclusion du projet et le rapport à ce jour des résultats obtenus et ceux en attente vont être présentés dans le Chapitre 6.



# CHAPITRE 2

## ÉTAT DE L'ART

### 2.1 Communication électromagnétique

La communication électromagnétique est un paradigme qui utilise des ondes électromagnétique pour envoyer l'information. Ces ondes sont une propagation de l'énergie dans l'espace sous forme de champ électrique couplé à un champ magnétique. La modulation de l'information se fait en changeant les propriétés de l'onde, sa fréquence, son amplitude et sa phase. Les ondes électromagnétiques sont émises par un émetteur, et la taille de cet émetteur influe sur la fréquence de l'onde émis, plus la taille de l'émetteur est petite, plus la fréquence de l'onde est grande. Avec un émetteur à une échelle nanométrique, la fréquence de l'onde émis sera dans la bande de Terahertz (THz).

THz est l'une des bandes spectrales les moins explorées, et avec la vitesse de propagation de ses ondes et sa très large bande de fréquence, les chercheurs la considère comme la clé pour surmonter l'augmentation du trafic des données sans fil. Toutefois, malgré ces avantages, THz est encore très difficile à contrôler à l'échelle nano, il existe encore des challenges à surmonter et des problèmes à résoudre, spécialement dans les applications médicales. Le défi le plus important est l'affaiblissement sur le trajet très élevé de la bande THz. En effet, les pertes d'absorption et de diffusion dans les fréquences de THz sont très élevé pour les molécules d'eau, le corps humain qui contient plus de 60% d'eau, ainsi que la peau grasse qui varie dans l'épaisseur d'un humain à un autre absorbent l'énergie des ondes et rend la communication inter et intracorporelle très difficile. Un autre problème réside dans le design des émetteurs capables d'émettre des ondes avec des fréquences de THz, et le design des antennes capables de recevoir cette fréquence très rapide. La découverte du Graphene avec ses propriétés physico-chimiques extra-ordinaires est une étape clé pour résoudre le problème du design des nano-antennes, et qui donne de nouvelles solutions dans les applications médicales.

En plus de tous ces défis, la communication THz peut être dangereuse pour la peau humaine, et peut causer des brulures. Plus d'études sont nécessaires pour confirmer sa sécurité dans les applications médicales.

## 2.2 Communication moléculaire

La communication moléculaire est un nouveau paradigme très prometteur pour créer un système de communication biocompatible, qui peut être appliqué dans des milieux et des scénarios considéré impossible avant, comme dans les milieux acides, dans les océans, et dans des échelles nanométriques. Inspiré par la nature, ce système utilise des molécules comme porteuses de l'information au lieu d'utiliser des ondes électromagnétiques. La communication moléculaire est applicable à l'échelle nano comme à l'échelle macro, on peut voir ça dans la communication entre les cellules de notre cerveau, ou dans la communication entre des insectes très lointaines en utilisant des phéromones. Le système contient un émetteur qui émet des molécules, un receveur qui peut détecter ces molécules, et un canal de communication, un milieu aqueux ou gazeux qui permet aux molécules de se propager librement de l'émetteur jusqu'au receveur. Les molécules utilisé dans ce système de communication peuvent être biologiques comme des protéines, ADN, sucres, vitamine, ou chimique comme des nano particules des minéraux et des atomes. Un mécanisme de propagation est nécessaire pour transporter les molécules à travers le canal jusqu'au receveur, ce mécanisme peut être simple comme la diffusion basique, ou complexe comme les systèmes de transport qui utilise des moteurs moléculaires. Dans cette section, je souligne les types de propagation proposés dans la littérature, les différentes techniques de modulations proposés pour la communication moléculaire et l'originalité de mon projet de recherche.

### 2.2.1 Méthodes de propagation

#### A. Propagation via diffusion

La diffusion est un mouvement aléatoire des molécules, appelée « mouvement brownien », où les molécules porteuses de l'information utilisent les fluctuations thermiques qui existe dans le milieu pour se mettre en mouvement dans une direction aléatoire et arriver à la destination. Elle peut être moduler mathématiquement en utilisant la deuxième loi de Fick présenté dans l'équation (1) :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \nabla^2 C \quad (2.1)$$

Où  $C$  est la concentration des molécules dans le milieu,  $t$  est le temps, et  $D$  représente le coefficient de diffusion qui peut être calculé avec l'équation (2) :

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta R} \quad (2.2)$$


---

Où  $k_B$  est la constante de Boltzmann,  $T$  est la température en Kelvin,  $\eta$  est la viscosité dynamique du fluide,  $R$  est le rayon des molécules diffusées. Le désavantage de cette méthode de propagation est qu'elle est très lente avec un débit de transmission très faible, et elle est dépendante de la distance du canal de transmission. Une solution est proposée pour accélérer la propagation de la diffusion, elle consiste à ajouter un flux dans la même direction de la communication, ce flux accélère la propagation des molécules et diminue la dépendance de la distance. Un autre problème est l'Interférence InterSymbole causé par les molécules restantes dans le milieu du précédent symbole et qui vont interagir avec les molécules du prochain symbole envoyé. Des solutions sont proposées dans la littérature pour résoudre ce problème, comme utiliser des enzymes et des receveurs voisins qu'on va voir avec détail dans la problématique du chapitre 3.

## B. Propagation via des bactéries

Les êtres vivants les plus anciens sur terre sont les premiers à s'adapter avec le changement dans la nature, ces bactéries flagellées ont créé une méthode de propagation qui les oriente vers les nutriments et les repousse loin des substances toxiques. Cette propriété appelé Chimio-tactisme permet aux bactéries de se mouvoir vers ou dans le sens opposé suivant un gradient de concentration d'une substance chimique. Un tel comportement est avantageux pour les bactéries, puisque leur mouvement se compose de deux phases, une phase de nage et une phase de culbute avec un mouvement rotatoire comme illustré dans la Figure 2.1, et à cause du temps aléatoire entre ces deux phases, sans le guide du chimiotactisme la bactérie risque de se perd dans le milieu.

Dans la communication moléculaire, on peut tirer profit du chimiotactisme pour créer un système de communication où les bactéries représentent les porteuses de l'information. Pour guider les bactéries vers le receveur, ce dernier libère des molécules attractantes et les bactéries suivent le gradient de concentration de ces molécules qui les guident vers la destination. L'information envoyé sera codée dans les plasmides (ADN cycliques) à l'intérieur des bactéries, et une fois ces bactéries arrivent au niveau du receveur, ils livrent l'information via la conjugaison génétique bactérienne.<sup>1</sup>

L'avantage d'utiliser les bactéries est leur vitesse de transmission, les bactéries peuvent nager à une vitesse de 25-30  $\mu\text{m/s}$ , comparé à la vitesse de la diffusion aléatoire 2  $\mu\text{m/s}$  cette méthode de propagation est très rapide et avec moins de probabilité d'erreur.

---

1. La conjugaison bactérienne est un phénomène biologique que les bactéries utilisent pour échanger l'information génétique.

---

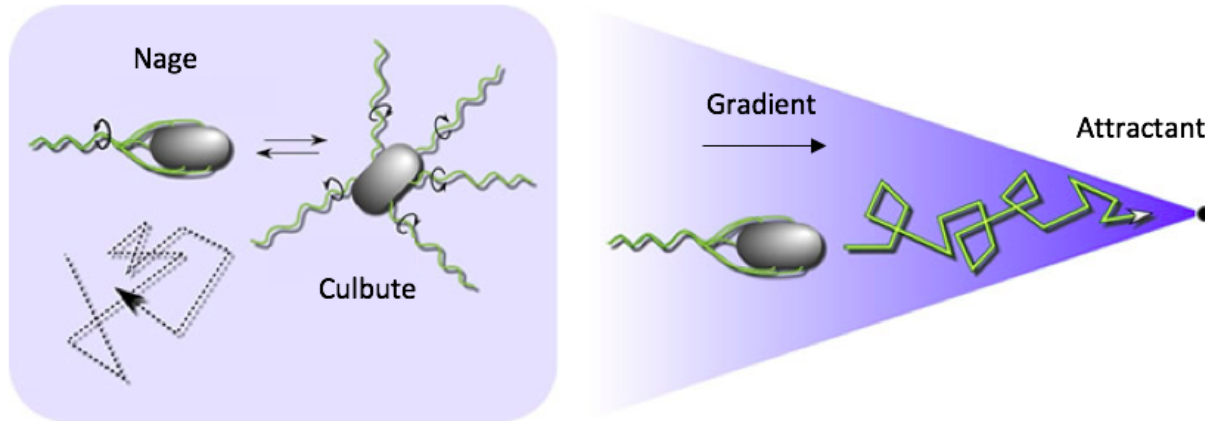


Figure 2.1 Les phases des mouvements bactériennes et le principe du Chimiotactisme

### C. Propagation via des jonctions lacunaires

Les jonctions lacunaires sont des canaux de diamètre très petit qui permettent une perméabilité sélective du passage des ions et des molécules entre les cytoplasmes de deux cellules adjacentes. Chez l'être humain, ces jonctions communicantes se situent principalement dans le système nerveux central, la rétine, le foie, les muscles lisses, les vaisseaux sanguins et le cœur. Les plus connus et les plus étudiés sont les canaux du calcium  $Ca^{2+}$ , qui facilitent la diffusion des ions de  $Ca^{2+}$  entre les cellules.

Des systèmes de communications moléculaires à base de ces jonctions lacunaires de calcium ont été proposés dans la littérature, après que la cellule est stimulée, elle génère une réponse à ce stimulus en augmentant la concentration du  $Ca^{2+}$ , plus le stimulus est puissant plus la concentration du  $Ca^{2+}$  est grande. Il y a deux types de trajectoires pour  $Ca^{2+}$ , intérieur et extérieur comme illustré dans la Figure 2.2. Dans le cas de la trajectoire intérieur,  $Ca^{2+}$  passe à travers les jonctions lacunaires vers les cellules adjacentes. Dans le cas de la trajectoire extérieur,  $Ca^{2+}$  cause une sécrétion des molécules d'ATP pour stimuler d'autres cellules qui à leur tour, ils augmentent la concentration du  $Ca^{2+}$  qui cause la sécrétion des molécules d'ATP. Ces deux cas sont complémentaires, mais le choix de la trajectoire utilisé dans la communication influe drastiquement sur l'efficacité du système. La trajectoire intérieur est préférable dans les communications fréquentes et rapides entre les cellules adjacentes, puisque la vitesse de propagation du  $Ca^{2+}$  peut atteindre  $27 \mu\text{m/s}$ . Cependant, la trajectoire extérieur est préférable dans la communication entre les cellules lointaines. L'information envoyé depuis la cellule stimulée jusqu'à la cellule cible sera encodé dans la concentration du  $Ca^{2+}$ .

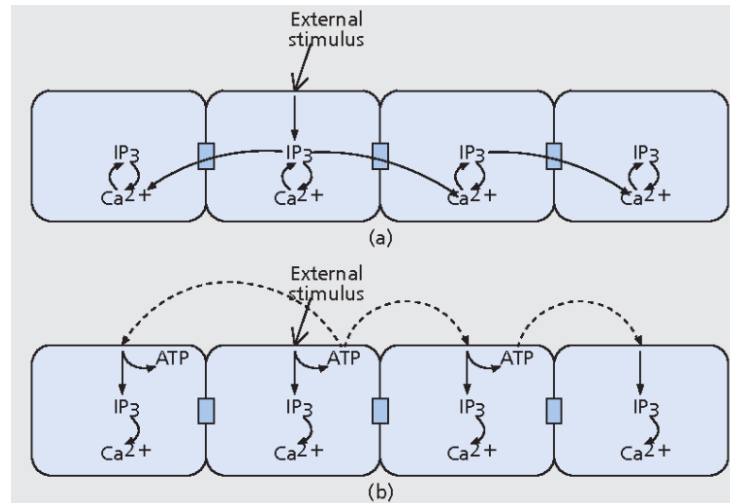


Figure 2.2 (a) La trajectoire intérieure de la propagation de  $Ca^{2+}$ , (b) La trajectoire extérieure

#### D. Propagation via des protéines motrices

La cellule biologique maintient sa forme grâce aux protéines appelées « Tubulines », qui s'auto-assemblent pour construire un Microtubule solide donnant la force à la paroi cellulaire pour créer une balance entre la force intérieure et la force extérieure et ainsi maintenir la forme de la cellule dans le milieu. Le rôle des Microtubules est essentiel aussi dans le transport des vésicules à l'intérieur des cellules, où il se sert comme une route entre la place de la cargaison voulu transporter et la destination. La Kinésine est l'une des protéines motrices les plus étudiées dans la cellule, elle a la capacité de marcher sur le microtubule en utilisant l'énergie de l'ATP, et transporter des cargaisons suivant une seule direction, elle joue aussi un rôle majeur dans la séparation des chromosomes lors des divisions cellulaires.

Deux systèmes de communications moléculaires à base de ces protéines motrices ont été proposés dans la littérature. Le premier système consiste à envoyer l'information dans des vésicules portées par des kinésines en se déplaçant sur un microtubule qui relie entre le transmetteur et le receveur. Le deuxième système consiste à inverser le processus, dans ce scénario, les porteurs de l'information sont des petits filaments de microtubules qui se déplacent sur des kinésines fixées sur un substrat. Les filaments de microtubules portent et livrent l'information en utilisant des bases d'ADN, qui couvre le transmetteur et le receveur, et quand le microtubule passe au proximité de l'un d'eux, les vésicules portant l'information vont se lier avec l'ADN complémentaire qui couvre les filaments de microtubules. Les deux systèmes proposés sont illustrés dans la Figure 2.3.

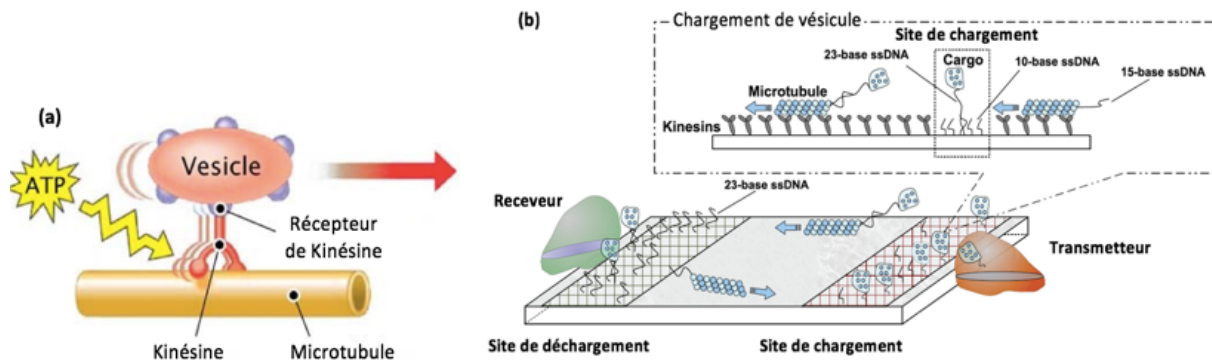


Figure 2.3 Communication moléculaire à base de protéine motrice (a) Premier système (b) Deuxième système

## 2.2.2 Techniques de modulation

La modulation est le processus de changer les propriétés du transporteur du signal, pour encoder l'information. Dans la communication électromagnétique, le transporteur du signal est une onde sinusoïdale, et il y a plusieurs techniques pour moduler l'information dans une onde, soit en changeant son amplitude qui affecte sa hauteur de crête à crête, sa fréquence qui affecte le nombre de cycles par seconde ou sa phase qui affecte la quantité de son décalage de l'origine. Dans la communication moléculaire, le transporteur du signal n'est pas une onde, mais une très petite molécule. Par conséquent, les techniques de modulation utilisées dans la communication traditionnelle ne peuvent pas être utilisées dans la communication moléculaire. Les techniques proposées dans la littérature pour moduler l'information dans la communication moléculaire sont les suivantes :

### A. Modulation dans le nombre des molécules

Dans cette technique, on peut utiliser le changement dans le nombre des molécules émises par le transmetteur pour encoder l'information, une modulation binaire où « 1 » représente le nombre maximal des molécules et « 0 » représente le nombre minimal des molécules. Cette technique est appelée en anglais Concentration Shift Keying (CSK).

### B. Modulation dans le type des molécules

Dans cette technique, on profite de la très grande variété des molécules dans la nature et la très grande sélectivité des récepteurs pour encoder l'information dans le type des molécules, « 1 » représente une molécule, et « 0 » représente un autre type de molécules. Cette technique est appelée en anglais Molecular Shift Keying (MoSK).



### C. Modulation dans le temps de libération des molécules

Dans cette technique, on peut séparer la libération des molécules avec un temps spécifié. L'information sera encodée dans le temps qui sépare deux libérations consécutives. Cette technique est appelée en anglais Release Time Shift Keying (RTSK). La Figure 2.4 ci-dessous illustre une comparaison entre les techniques de modulation utilisées dans la communication électromagnétique et les techniques proposées pour la communication moléculaire.

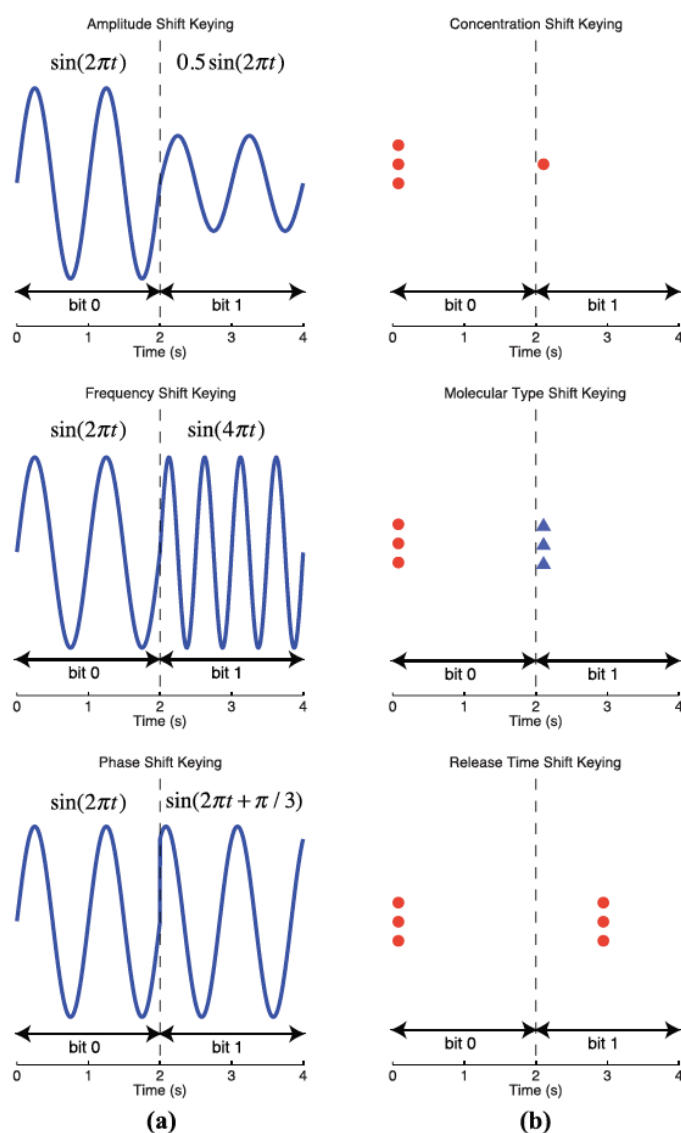


Figure 2.4 Techniques de modulation (a) communication électromagnétique (b) communication moléculaire

## 2.3 Originalité du projet de recherche

Malgré les nombreuses solutions proposées dans la littérature pour surmonter les challenges de la communication moléculaire, il reste encore des problèmes à résoudre, des améliorations à faire et d'autres méthodes de propagation inspiré par la nature à exploiter.

L'originalité de ce projet de recherche par rapport aux autres études dans la littérature se résume en trois points. (1) originalité dans l'approche : les Interférences InterSymbole ont été atténué en utilisant des enzymes ou des receveurs voisins. Dans ce projet, j'utilise de la lumière UV pour dégrader les molécules de Provitamine D inspiré par le processus de la construction du Vitamine D dans notre peau. (2) originalité dans les résultats : Les résultats obtenus en utilisant l'UV a permis d'atténuer l'interférence sans diminuer la puissance du signal, ce qui a été considéré comme un compromis dans la littérature. (3) originalité dans l'application : Les polymères auto-assemblés ont été étudiés beaucoup dans les domaines de la biologie et de la chimie, mais jusqu'à maintenant personne n'a proposé de les utiliser comme un fil conducteur d'électricité dans un système de communication à l'échelle nano.

---

# CHAPITRE 3

## PROBLÉMATIQUES ET OBJECTIFS

### 3.1 Problématiques

Bien que la communication moléculaire à base de diffusion présente une solution prometteuse pour communiquer à l'échelle nano, cette méthode contient deux problématiques principales : l'affaiblissement sur le trajet et l'Interférence InterSymbole liées à la distance et à la mémoire du canal consécutivement. L'impact de ces deux problématiques sur la performance du système est majeur, et pour améliorer la communication moléculaire, il est nécessaire de trouver des solutions pour surmonter ces challenges.

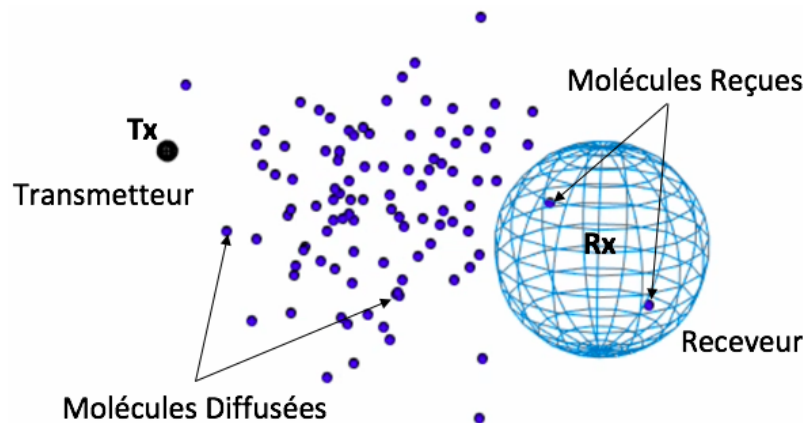


Figure 3.1 Système de communication moléculaire à base de diffusion

Pour mieux illustrer ces problématiques, considérons le scénario présenté dans la figure 3.1. Le principe de la communication moléculaire à base de diffusion est le suivant : le transmetteur (Tx) émet des molécules dans le milieu, ces molécules vont se diffuser aléatoirement en utilisant les fluctuations thermiques du milieu jusqu'au receveur. La probabilité pour que quelques molécules atteignent le receveur (Rx) dans ce mouvement aléatoire dépend de la distance, plus le receveur est proche, le plus probable qu'il reçoit des molécules. L'utilisation d'un flux dans la même direction que l'information -du transmetteur au receveur- peut accélérer la diffusion et permet d'augmenter la distance, mais ce flux diminue l'applicabilité du système, puisque on ne peut pas l'utiliser n'importe où, surtout dans le corps humain.

Le reste des molécules qui n'ont pas été absorbées par le receveur vont être distribuées aléatoirement autour de ce dernier et interférer avec les prochaines molécules émises par le transmetteur. Cette interférence augmente la probabilité d'avoir une information erronée, ce qui détériore la performance du système. Des solutions sont proposées dans la littérature pour résoudre cette problématique, à titre d'exemple : l'optimisation de l'intervalle entre les symboles pour éviter l'interférence, l'utilisation des receveurs voisins qui absorbe le reste des molécules, l'utilisation des enzymes catalyse la dégradation des molécules dans le milieu et par conséquent, élimine la source du problème. Toutefois, ces solutions ont soit résolu une partie du problème, soit ils l'ont résolu en créant d'autres problèmes.

L'optimisation de l'intervalle entre les symboles permet d'éviter l'interférence aux prix d'un délai plus grand. La solution des receveurs voisins vise à minimiser le nombre des molécules dans le milieu en les absorbant. Cependant, avec tous ces receveurs qui compliquent le système et le rend plus cher, il y'aura aussi une concurrence sur les molécules à absorber et ainsi une grande partie des molécules portant l'information vont être absorbées par les voisins, ce qui affaiblit le signal transmis. L'utilisation des enzymes est une bonne approche, d'ailleurs c'est la méthode adoptée par la nature pour éliminer cette interférence. Néanmoins, pour qu'ils soient efficaces, un grand nombre d'enzyme est nécessaire dans le milieu, également ces enzymes vont dégrader eux aussi les molécules portant l'information, ce qu'il cause l'affaiblissement du signal transmis. Les problématiques citées ci-dessus peuvent détériorer la performance du système et la qualité de la communication moléculaire à base de diffusion. D'autres méthodes plus complexes sont proposées dans la littérature pour éviter la diffusion aléatoire des molécules, tel que les bactéries, les canaux du calcium des cellules et les nanomoteurs, mais tous ces méthodes ont un problème en commun, c'est le nombre très faible des bits transmis, qu'il ne dépasse pas les dizaines de bits par seconde.

Donc ce projet de recherche pose la question fondamentale : Comment construire un système de communication moléculaire avec un grand débit et un minimum d'interférence entre les symboles tout en profitant des nano-biosystèmes ?

## 3.2 Objectifs

### 3.2.1 Objectif général

Ce projet de doctorat a un objectif principal d'améliorer les performances de la communication moléculaire en utilisant des systèmes biologiques pour qu'elle soit applicable dans le domaine médical.

---

### 3.2.2 Objectifs intermédiaires

Pour étudier un système de communication moléculaire, il est un peu tôt pour faire l'étude expérimentale à l'échelle nano, donc la simulation est la solution. Dans ce projet, j'ai choisi d'utiliser le simulateur AcCoRD à cause de sa capacité à combiner l'échelle microscopique et mésoscopique, ce qui rend la simulation plus flexible et plus réelle.

Le premier objectif intermédiaire de ce projet de doctorat est de maîtriser le simulateur AcCoRD, pour simuler mes approches, et si besoin ajouter quelques algorithmes dans le simulateur pour l'accommoder à mes méthodes proposées. Le deuxième objectif est de trouver une solution pour atténuer l'Interférence InterSymbole sans augmenter le délai et sans affaiblir le signal transmis, en utilisant un biosystème qui déjà existe dans notre corps.

Le troisième objectif est d'optimiser le receveur de la technique entrées multiples sorties multiples (MIMO) pour augmenter le débit et diminuer un peu les pertes et l'affaiblissement du trajet.

Le quatrième objectif est de construire une plateforme à l'échelle macro du système proposé pour atteindre le deuxième objectif.

Le dernier objectif est de créer un nouveau système de communication moléculaire à base des polymères auto-assemblés et très conducteurs d'électricité, pour construire pour la première fois une communication filaire à l'échelle nanométrique qui utilise les électrons comme porteurs d'information, et les molécules auto-assemblés comme une file conducteur d'électricité.

---

# CHAPITRE 4

## HYPOTHÈSES ET APPROCHES PROPOSÉE

Les approches proposés dans ce projet de doctorat sont inspirées par les systèmes biologiques, pour améliorer les performances de la communication moléculaire d'une façon à être appliqué naturellement et sans danger dans le domaine médical. Ces approches sont basées sur trois aspects qui représentent les trois derniers objectifs intermédiaires cités dans le chapitre 3.

### 4.1 Première approche

Les solutions proposées dans la littérature pour minimiser l'Interférence Inter-Symbole présentent d'autres limitations dans le système, soit en augmentant le délai, soit en diminuant la puissance du signal. Comme expliqué dans le chapitre précédent, l'approche d'optimiser l'intervalle entre les symboles va drastiquement augmenter le délai de la communication, puisqu'elle consiste à attendre plus longtemps avant d'envoyer le prochain symbole pour éviter l'interférence. Les autres approches qui utilisent des receveurs voisins et des enzymes qui catalysent la dégradation des molécules vont minimiser l'interférence, mais en même temps, ils diminuent sévèrement la puissance du signal envoyé, puisqu'ils diminuent non seulement les molécules qui causent l'interférence, mais même les molécules porteuses de l'information.

Pour pouvoir minimiser l'Interférence InterSymbole entre les molécules dans la communication moléculaire sans augmenter le délai, et sans affaiblir la puissance du signal, on a besoin d'une méthode plus rapide que les enzymes, et capable d'être allumée et éteinte, pour pouvoir dégrader que les molécules restantes dans le milieu et pas celles qui portent l'information, et ainsi le signal ne s'affaiblit pas. Le seul candidat qui satisfait à ces critères est la lumière.

Cette logique m'a conduit à énoncer l'hypothèse suivante :

Hypothèse 1. L'utilisation des molécules de Provitamine D comme porteuses de l'information, et la lumière UV comme le catalyseur de leur dégradation, peut minimiser l'Interférence Inter-

Symbole dans la communication moléculaire à base de diffusion avec un délai minimal et avec une puissance de signal maximal.

Par conséquent, l'amélioration des performances du système sera meilleur comparé aux autres méthodes proposées dans la littérature. De plus, les molécules des Provitamine quand elle absorbe l'énergie de la lumière UV, elles vont se transformer en Vitamine D, une réaction qui se produit dans notre peau chaque jour et son utilisation sera sans danger pour le corps humain.

## 4.2 Deuxième approche

La deuxième approche est complémentaire à la première, pour améliorer les performances de la communication moléculaire à base de diffusion. Mais ici, je m'intéresse à la problématique du débit très faible. Dans la littérature, la solution d'utiliser la technique d'entrées multiples et sorties multiples (MIMO) a été proposé. Les chercheurs ont montré que l'application du MIMO dans la communication moléculaire augmente le débit et diminue la probabilité de l'erreur. Cependant, ces résultats peuvent être améliorés en optimisant le MIMO receveur. Cette optimisation se caractérise dans le choix judicieux des paramètres du design de receveur, comme le diamètre des détecteurs constituant le receveur, et la distance entre eux. Donc ma contribution dans cette deuxième partie se résume dans l'hypothèse suivante :

Hypothèse 2. Par des choix judicieux des paramètres du design du receveur qui optimisent sa réponse impulsionnelle, la performance du MIMO dans la communication moléculaire à base de diffusion peut être optimisé et amélioré.

Pour trouver ces choix judicieux des paramètres, il suffit de résoudre les problèmes d'optimisations, que j'ai proposé dans cette approche.

## 4.3 Troisième approche

La communication moléculaire à base de diffusion est la plus simple et la plus basique, ce qui a encouragé les chercheurs à l'étudier plus que d'autres méthodes. Néanmoins, la communication à base de diffusion a un débit très limité malgré l'amélioration proposées dans les approches précédentes. D'autres méthodes proposées dans la littérature comme l'utilisation des bactéries et les nano-moteurs à base de la myosine proposent un débit plus grand. Dans l'approche qui utilise les bactéries, ils utilisent la technique de la chimiotaxie pour attirer les bactérie porteuses d'information jusqu'au receveur, la vitesse des bactéries

---

peut atteindre les  $30\text{ }\mu\text{m/s}$ . L'autre approche utilise la myosine comme une rue, le moteur marche sur la myosine en utilisant l'ATP comme énergie pour transporter l'information. Cependant, si on peut utiliser cette rue conductrice d'électricité qui s'auto assemble pour envoyer l'information avec des électrons, on peut avoir un très grand débit comparable aux débits trouvés dans la communication électromagnétique. Cette conclusion m'amène à énoncer l'hypothèse suivante :

Hypothèse 3. L'utilisation des polymères auto-assemblés comme un fil conducteur d'électricité pour envoyer l'information via des électrons, peut augmenter le débit de la communication moléculaire jusqu'à atteindre un débit similaire à la communication électromagnétique et la communication filaire.

Cette nouvelle approche va créer pour la première fois une communication moléculaire filaire à l'échelle nanométrique, qui peut être utilisé dans des distances courts et moyennes entre les nanomachines.

Les approches proposées dans ce projet de doctorat sont tous basé sur et inspiré par les systèmes biologiques, et leurs utilisations dans le domaine médical sera sans danger sur le corps humain.

---



# CHAPITRE 5

## MÉTHODOLOGIE ET ÉCHÉANCIERS

### 5.1 Méthodologie

#### 5.1.1 Première et deuxième approches

Les deux hypothèses mentionnées dans la première et la deuxième approche sont une amélioration de la communication moléculaire à base de diffusion. La première utilise la lumière pour dégrader les molécules restantes dans le milieu et ainsi atténuer l'interférence. La deuxième optimise le rendement d'un MIMO receveur pour augmenter le débit du système. Donc la méthodologie suivie sera la même dans les deux approches.

Premièrement, je commence avec une simulation stochastique en utilisant le simulateur AcCoRD pour créer le scénario à étudier en 3D, l'environnement, les molécules, et les réactions chimiques. Puis j'enregistre la simulation sous format vidéo pour voir si le scénario est correct. Après la vérification du scénario, je répète la simulation 100 fois et je transforme le data obtenu en un fichier MATLAB. Je simule les scénarios proposés dans la littérature et les scénarios proposés dans ce projet.

Deuxièmement, je modélise mon scénario proposé mathématiquement de tel sorte qu'il donne le même résultat que la simulation stochastique. Je plote le data obtenu dans les simulations et les modèles mathématiques de tous les scénarios étudiés dans un graphe qui montre le nombre des molécules absorbées par le receveur en fonction du temps.

Troisièmement, je calcule le seuil qui décide si l'impulsion des molécules reçu est un bit ou non. Puis, je calcule un critère de performance pour valider les résultats obtenus et pour conclure le meilleur scénario.

La méthodologie utilisé dans ce projet de doctorat est plus proche à la méthodologie utilisé dans la biologie et la physique que celle utilisé dans la télécommunication, puisque on est en train d'étudier un phénomène biologique, le simuler puis le modéliser mathématiquement. Donc la simulation sera avant le modèle et pas comme la télécommunication où le modèle est la première étape, et après la deuxième étape avec la simulation.

### 5.1.2 Troisième approche

L'hypothèse mentionnée dans la troisième approche n'est pas destinée à la communication moléculaire à base de diffusion, mais elle propose une nouvelle communication moléculaire à base de polymères auto-assemblés. Le simulateur utilisé dans les deux premières approches est limité, il peut simuler seulement le scénario de la diffusion. Donc la méthodologie de cette approche sera similaire aux deux autres, mais avec une étape supplémentaire dans laquelle nous allons modifier le simulateur, et ajouter l'idée proposée. Le code ajouté va changer les caractères des molécules pour qu'elles peuvent s'auto-assembler en un fil conducteur. Le modèle de ce système est une chaîne de Markov, qui décrit le dynamique des réactions biochimiques qui permet aux molécules de s'assembler.

## 5.2 Échéanciers

L'échéancier de ce projet de doctorat est présenté dans le tableau ci-dessous :

Tâches	$S_1$	$S_2$	$S_3$	$S_4$	$S_5$	$S_6$	$S_7$	$S_8$	$S_9$
Survey (État de l'art)									
Maîtrise du simulateur AcCoRD									
Simulation de l'hypothèse 1									
Article Conférence (IWCMC)									
Modèle Mathématique 1									
Article Journal 1									
Simulation de l'hypothèse 2									
Article Conférence (Globecom)									
Modification du simulateur									
Simulation de l'hypothèse 3									
Article Conférence (ICC)									
Modèle Mathématique 2									
Article Journal 2									
Construire une Macro plateforme									
Rédaction de Thèse									

Tableau 5.1 Échéanciers

# CHAPITRE 6

## CONCLUSION

### 6.1 Étendue des travaux et type de projet

Ce projet de recherche s'articule autour de deux axes principaux, améliorer un système pré-existant qui est la communication moléculaire à base de diffusion, et proposer un nouveau système de communication basé sur des polymères auto-assemblés. Fondamentalement, il s'agit d'améliorer les performances de la communication moléculaire en se basant sur des systèmes biologiques et appli-cables dans le domaine médical. Selon le tableau de Stokes [EFD 910, 2017] présenté ci-dessous, ce projet de doctorat se situe dans le cadre de la recherche fondamentale inspirée par une application.

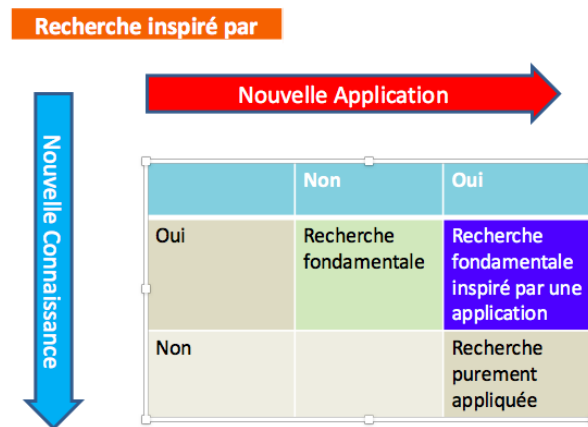


Figure 6.1 Tableau de Stokes

### 6.2 Résultats

#### 6.2.1 Résultats obtenus

Dans cette sous-section, je présente les résultats obtenus jusqu'à maintenant dans le cadre d'atteindre les cinq objectifs de ce projet, trois de ces cinq objectifs ont été déjà atteintes. Le premier objectif atteint et la maîtrise du simulateur AcCoRD pour simuler les approches proposées. Le deuxième objectif était d'atténuer l'Interférence InterSymbole en utilisant la lumière UV, les résultats obtenus sont présentés dans un article de conférence accepté et présenté (Annexe A). Le troisième objectif de ce projet était d'optimiser le MIMO receveur

de la communication moléculaire en optimisant le choix des 3 design paramètres, distance, diamètre et la distance entre les détecteurs. Les résultats obtenus sont présentés dans un article de conférence accepté mais pas encore présenté (Annexe B).

Dans l'article de l'Annexe A, nous avons proposé un système qui contient un émetteur qui émet des molécules de provitamine D, et un receveur qui contient un nano-laser UV. Nous avons étudié le temps optimal pour allumer le nano-laser de tel sort qu'il dégrade seulement les molécules restantes dans le milieu, et ainsi atténuer l'interférence sans diminuer la puissance du signal. Les résultats de la simulation montrent que l'approche proposée est meilleure que les autres proposées dans la littérature.

Dans l'article de l'Annexe B, nous avons simulé un scénario d'un système MIMO (3x3) de la communication moléculaire, 3 émetteurs qui construisent le transmetteur, et 3 détecteurs construisant le receveur. Nous avons proposé une optimisation des 3 paramètres du receveur design qui ont souvent négligés dans la littérature. Les résultats obtenus ont montré que le choix judicieux de ces paramètres est très important et influe drastiquement sur la performance du système. Donc une optimisation de la combinaison de ces paramètres va améliorer la performance de la communication moléculaire comme il a été prouvé avec les résultats obtenus.

### **6.2.2 Résultats attendus**

Les deux premières approches dans ce projet ont donné les résultats souhaités dans les hypothèses. Dans cette sous-section, je présente les résultats attendus de la troisième approche. Dans le but d'atteindre le cinquième objectif, une publication d'un article de conférence et un article de journal sont envisageables, qui vont expliquer la nouvelle méthode proposée de la communication moléculaire à base de polymères auto-assemblés. Une communication filaire en utilisant des polymères qui s'assemblent pour construire un fil entre le transmetteur et le receveur et en utilisant les électrons comme transporteurs d'information. Une très grande amélioration dans le débit de transfert de la communication moléculaire est attendu comme résultat de cette communication filaire.

Une plateforme à l'échelle macro du système proposé dans la première approche est envisageable aussi, pour une démonstration pratique des résultats obtenus dans les simulations et l'étude théorique.

Ce projet de recherche se terminera avec une thèse comme livrable principal, et qui sera une compilation de tous les autres livrables.

---

## 6.3 Contribution

Dans l'intention d'améliorer les performances de la communication moléculaire ce projet de recherche propose trois approches, deux approches pour améliorer le débit et l'atténuation de l'Interférence InterSymbole de la communication moléculaire à base de diffusion, et une approche qui propose une nouvelle méthode de communication moléculaire à base de polymères auto-assemblés. À cet effet,

- Je propose l'utilisation de la **lumière UV pour dégrader les molécules porteuses de l'information au lieu d'utiliser des enzymes** pour mieux atténuer l'Interférence InterSymbole sans diminuer la puissance du signal transmis, et ainsi diminuer la probabilité de l'erreur et augmenter le débit de transmission.
- Je propose une optimisation du receveur utilisé dans le MIMO moléculaire en **choissant judicieusement une combinaison optimale des paramètres de son design** qui sont : la distance entre transmetteur et receveur, le diamètre des détecteurs construisant le receveur et la distance entre eux, pour améliorer le débit de transmission de la communication moléculaire à base de diffusion.
- Je propose une nouvelle méthode de communication moléculaire qui utilise **des polymères auto-assemblés pour construire un fil conducteur entre le transmetteur et le receveur**, une communication filaire qui peut donner des résultats meilleurs comparé aux autres méthodes sans fil proposées dans la littérature jusqu'à maintenant.

## 6.4 Impact

La communication moléculaire est un nouveau paradigme prometteur pour créer une communication à l'échelle nano en utilisant des systèmes biologiques. Malgré les nombreuses solutions proposées dans la littérature pour surmonter les challenges de cette nouvelle méthode de communication, mais il reste encore des problèmes à résoudre et des améliorations à faire. L'originalité de ce projet de recherche par rapport aux autres études dans la littérature se résume en trois points. (1) originalité dans l'approche : les Interférences InterSymbole ont été atténué en utilisant des enzymes ou des receveurs voisins. Dans ce projet, j'utilise de la lumière UV pour dégrader les molécules de Provitamine D inspiré par le processus de la construction du Vitamine D dans notre peau. (2) originalité dans les résultats : Les résultats obtenus en utilisant l'UV a permis d'atténuer l'interférence sans diminuer la puissance du signal, ce qui a été considéré comme un compromis dans la littérature. (3) originalité dans l'application : Les polymères

---

auto-assemblés ont été étudiés beaucoup dans les domaines de la biologie et de la chimie, mais jusqu'à maintenant personne n'a proposé de les utiliser comme un fil conducteur d'électricité dans un système de communication à l'échelle nano. Ce projet de recherche aurait donc un impact significatif scientifique et technologique, spécialement dans le domaine pharmaceutique et médical. Un brevet et aussi envisageable pour la proposition de la communication moléculaire filaire.

# ANNEXE A

## Article 1

### Enhancing Signal Strength and ISI-Avoidance of Diffusion-based Molecular Communication

- Auteurs : Oussama Abderrahmane Dambri, et Soumaya Cherkaoui.
- Conférence : IEEE International Wireless Communications and Mobile Computing Conference IWCMC 2018, 25-29 Juin St. Raphael Resort , Marina, Limassol, Cyprus.
- Statut : Accepté.

#### A.1 Résumé en français

La communication moléculaire basée sur la diffusion est un système bio-inspiré, qui utilise des molécules de diffusion aléatoire comme supports de l'information entre l'émetteur et le récepteur. L'un des principaux défis de ce système est l'Interférence InterSymbole (IIS), causée par la mémoire de canal et représentée par une queue lourde dans la réponse impulsionnelle. Alors que la plupart des travaux antérieurs ont proposé l'utilisation d'enzymes pour catalyser la dégradation des molécules restantes, ce qui atténue l'IIS et augmente le débit de données, les enzymes diminueront la force du signal en dégradant également les molécules portant l'information. Dans cet article, nous proposons l'utilisation de réactions non enzymatiques pour ne dégrader que les molécules reçues, ce qui augmente l'amplitude du signal reçu et atténue en même temps l'IIS, améliorant ainsi la force du signal et le débit réalisable. Dans cette étude, nous nous sommes concentrés sur les réactions de photolyse, qui utilisent la lumière pour dégrader instantanément les molécules. Nous avons étudié le temps optimal d'émission de lumière avec des simulations stochastiques 3D, en utilisant un simulateur AcCoRD. Les résultats de la simulation montrent une amélioration du signal reçu lors de l'utilisation de réactions non enzymatiques, par rapport aux systèmes enzymatiques. Les performances de la méthode proposée ont été évaluées en utilisant interference-to-total-received molecules (ITR).

#### A.2 Abstract

Diffusion-based Molecular Communication is a bio-inspired system, which uses random walk diffusive molecules as carriers of the information between the transmitter and the receiver. One of the main challenges of that system is the Inter-Symbol Interference (ISI), caused by the channel memory and represented by a heavy tail in the impulse response. While most prior work has proposed the use of enzymes to catalyze the degradation of the remaining molecules, which miti-

gates ISI and increases the data rate, the enzymes will decrease the signal strength by degrading also the molecules carrying the information. In this paper, we propose the use of non-enzymatic reactions to degrade only the received molecules, which increases the amplitude of the received signal and at the same time mitigates ISI, enhancing by that the signal strength and the achievable throughput. In this study, we focused on photolysis reactions, which use light to instantly degrade the molecules. We studied the optimal time of light emission with 3D stochastic simulations, using AcCoRD simulator. Simulation results show an improvement of the received signal when using non-enzymatic reactions, compared to enzymatic systems. The performance of the proposed method was evaluated using interference-to-total-received molecules (ITR).

### A.3 Introduction

Nanotechnology is rapidly progressing, and nano-devices field is growing exponentially in every domain of science and industry, especially in the medical and pharmaceutical arenas. The use of nano devices in medical applications such as monitoring and drug delivery needs the design of nanonetworks to synchronize their work, and to expand their individual capabilities by establishing a communication among them. However, wireless communication at nanoscale level using the traditional electromagnetic field will be in Terahertz band, which is very challenging considering its high path loss, caused by molecular absorption and scattering losses [1]—[4]. Several other communication mechanisms have been suggested including mechanical and acoustic systems. Nevertheless, the most promising method to connect devices in the order of nanometers for medical applications is molecular communications, for the simple reason that it has been successfully used by our bodies and by nature millions of years ago.

Molecular Communication (MC) is a bio-inspired paradigm, where the carriers of information between the transmitter and the receiver are molecules instead of electromagnetic waves [5], [6]. The most basic proposed method to exchange these molecules is the diffusion, which uses the brownian motion to propagate molecules in the medium to reach destination [7], [8]. However, the main challenge of this method of communication is the Inter-Symbol Interference (ISI), caused by some of the molecules, which fail to arrive at the receiver and interfere with the new molecules released by the transmitter.

Several studies have been carried-out, and solutions have been proposed in literature to overcome this difficulty. In [9], a method for optimizing the symbol interval was proposed, to elude the trade-off between increasing the delay and avoiding ISI. Nonetheless, the method was tested only for channels with drift, and also assumes that transmitter can sense medium conditions, i.e. velocity, distance and signal power, to calculate the optimal symbol interval, which is a very difficult challenge. In [10], a new modulation scheme using short block-length was proposed to avoid ISI in a shorter delay. However, the scheme still entails a big delay and cannot be used with Concentration Shift Keying (CSK), which is the most used modulation technique for diffusion-based MC. To avoid ISI another study [11] proposed the



use of a single transmitter and multiple receivers where the receivers have the same distance from the receiver, and are optimally and equidistantly placed from each other forming an arc-like shape. Transmissions to each receiver therefore happen at different timeslots. In spite the fact that this proposed method increases the achievable throughput and decreases the ISI, which decreases the Bit Error Rate (BER), yet it has some drawbacks. First, the use of multiple receivers decreases the amplitude of the signal. Second, the choice of transmission timeslots entails a trade-off between BER and throughput. Increasing the delay between transmission timeslots decreases the achievable throughput, and decreasing it increases the BER. In addition, this method is used only with the scenario of fixed receivers, which limits its applications.

Another method was proposed in [12], where the authors use enzymes to remove excess information molecules from the environment, in the way nature does [13], [14]. What makes enzymes a judicious choice is that they are very selective, recyclable and consume less energy for performing the same biochemical reactions. The results of the study show that enzymes can decrease the probability of errors by avoiding ISI. However, this method reduces the transmitting signal, because enzymes degrade not only the remaining molecules in the medium, but also the molecules carrying the information, which will decrease the transmission rate. Moreover, the assumption of an infinite number of enzymes in the channel is unrealistic. Therefore, another study [15] proposed the use of a constant number of enzymes instead of an unlimited quantity of them, with two possible scenarios : enzymes deployed around the transmitter or enzymes around the receiver in a 3D channel system. The authors provided an optimal radius for enzyme position, and proved that using enzymes around the receiver is the best scenario. A limitation of the study is, however, that enzymes are assumed to be stationary, which is very difficult to achieve. Also, the power of the signal is decreased by using enzymes, which decreases the achievable throughput.

In this paper, we propose a method for using of non-enzymatic reactions for molecular diffusion-based MC. Precisely the method avails of photolysis reactions, which use light to instantly transform the molecules, so that they are no longer recognized by the receiver, without decreasing the signal power. The most studied photolysis reaction is the transformation of provitamin to previtamin using sun light, which happens daily in our skin to produce vitamin  $D_3$  [16], [17]. The advantage of the photolysis reaction is its ability to be switched On/Off, which allows us to decide when the degradation will occur. In addition, the reaction speed is much faster than enzymatic reactions as will be explained in section II. We studied the optimal time to enhance the signal strength and avoid ISI, of the light emission for different distances between the transmitter and the receiver, using 3D stochastic simulations with AcCoRD simulator. The performance of the proposed method was evaluated using interference-to-total-received molecules (ITR). The simulation shows an improvement of the received signal when using non-enzymatic reactions, compared to enzymatic systems.

The rest of the paper is organized as follows. In section II, the proposed system model is introduced, comprising a single transmitter using binary CSK modulation, and a single receiver, which can emit controlled UV light. In section III, the method performance evaluation and simulation results are discussed, and the optimal time of light emission is provided. Conclusion and future research are described in section IV.

## A.4 System Model

The modulation of signal in diffusion-based MC can be done by varying one or more of the molecule properties, number, type or time of release. In this paper, we used the number property, by shifting the concentration of the released molecules to send a binary message. The transmitter emits an impulse of molecules to represent bit “1”, and sends nothing to represent bit “0” reducing by that the energy consumption. The released molecules freely diffuse in the channel with a random propagation until they reach the receiver.

### A.4.1 Diffusion

The system studied in this paper is an unbounded 3D fluidic environment, with a fixed point as a transmitter and a spherical receiver as described in [18] and shown in Figure. A.1.

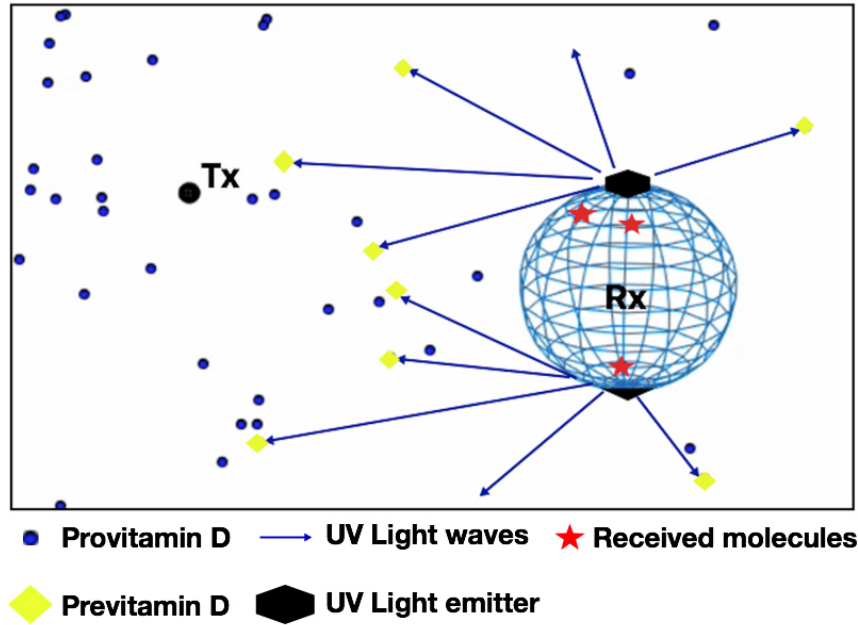


Figure A.1 System model showing Provitamin molecules propagation (shown as blue circles), from the transmitter (Tx) to the 3D spherical receiver (Rx). The received molecules (shown as red stars) are inside the 3D receiver Rx. At time  $T_U$ , The UV light Emitters (shown as black cubes) up and down Rx emit UV light waves (shown as violet arrows) hitting Provitamin  $D_3$  molecules, which they absorb the light energy and instantly transform to Previtamin  $D_3$  (shown as yellow squares).

The released molecules diffuse towards the receiver with an arbitrary motion described with Fick's second law :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \nabla^2 C \quad (\text{A.1})$$

Where  $D$  is the Diffusion coefficient of the released molecules.

We assume that all molecules have the same radius and all of them diffuse independently with the same constant diffusion coefficient calculated with the following equation :

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta R} \quad (\text{A.2})$$

Where  $R$  is the radius of the molecules,  $T$  is the temperature in kelvin,  $k_B$  the Boltzmann constant, and  $\eta$  is the viscosity of the medium. We took the same value for  $\eta$  as described in [12].

By assuming that all emitted molecules are identical and by neglecting the interaction among them, the propagation of these molecules in the channel follows a continuous-time stochastic process, which can be described mathematically by a Wiener process.

#### A.4.2 Photolysis Reaction

In this study, we propose the use of 7-dehydrocholesterol (7-DHC) as the molecule carrying the information. Known as provitamin  $D_3$ , (7-DHC) instantly transform to Previtamin  $D_3$  which after the exposure to the UV radiation, as shown in Figure. A.2.

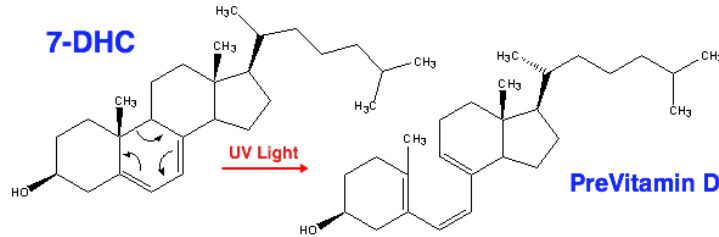


Figure A.2 7-dehydrocholesterol irradiation and transformation to Previtamin D3

This reaction is one of the best known examples of non- enzymatic reactions that occurs *in vivo* in our bodies. The 7-DHC synthesized and accumulated in our skin, when exposed to the sunlight, absorbs the UV spectral range between 250-320 nm with a maximum 298 nm as shown in Figure. A.3, [19]. That energy breaks a covalent link converting Provitamin D to Previtamin  $D_3$ , which will also convert to Vitamin  $D_3$  after several days thermodynamically, without any enzyme intervention. To calculate the reaction rate, let us consider the following photolysis reaction, where “Pro” is the 7-DHC, “Pre” is the Previtamin D3 and  $h\nu$  is the solar photon radiation :



The concentration of Pro,  $[Pro]$  will be degraded at a rate dependent on the intensity of solar light, this rate of loss is a first-order reaction decay constant :

$$\frac{d[Pro]}{dt} = -J[Pro] \quad (A.4)$$

The coefficient  $J$  is dependent on the photo-physical properties of the Provitamin  $D_3$ , and the intensity of the solar radiation, it can be calculated like described in [20-Chap 9], as :

$$J = \int_{\lambda} \Phi(\lambda, T) \sigma(\lambda, T) F(\theta, \lambda) d\lambda \quad (A.5)$$

Where  $F(\theta, \lambda)$  is the light point irradiance (actinic flux) as a function of the wavelength  $\lambda$ , and the light zenith angle  $\theta$ . The function  $\sigma$  is the absorption cross-section for a wavelength  $\lambda$  and a temperature  $T$ . the function  $\Phi$  is the quantum yield for photolysis of the 7-DHC. In [21], the value of the cross-section for the 7-DHC was approximated experimentally as ( $\sigma = 3 \times 10^{-17} cm^2$ ) for solar point per irradiated area ( $5 \times 10^{16} cm^{-2}$ ). In [22], the value of the quantum yield for a photo-degradation of 7-DHC was calculated using a proposed model and compared with the measurements as ( $\Phi = 0.42 \pm 0.1$ ). The values of the photolysis rate coefficient for 7-DHC photo-degradation will approximately follow the results of Figure. A.4.

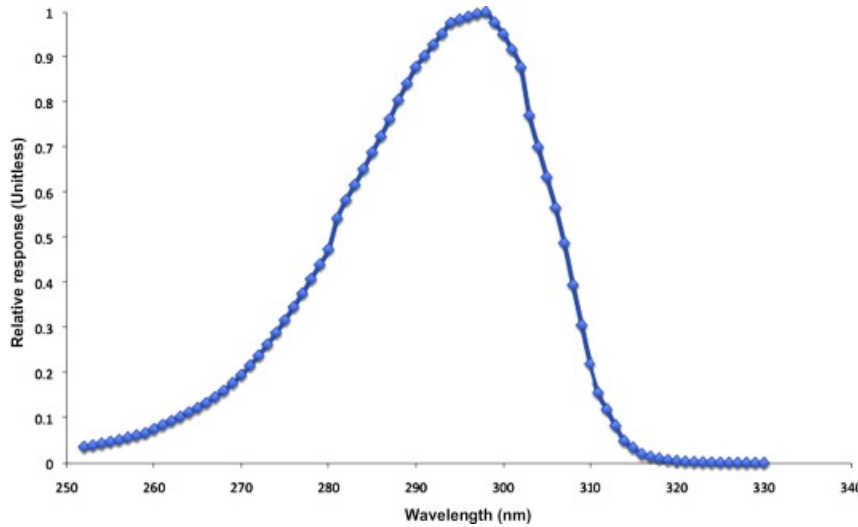


Figure A.3 Action spectrum of 7-DHC to Previtamin D3 conversion

### A.4.3 Reveiver

In this study, we considered a 3D spherical receiver, which can count the number of the received molecules. The amplitude of the signal demodulated at the receiver is the received concentration of the molecules over a symbol interval, which is interpreted as “1” if the amplitude overtops a predetermined threshold. The more the amplitude is higher in the bit interval, the smaller the threshold values, which decreases bit error rate. We assumed in our system model, illustrated in Fig. 1, that the top and the bottom of the sphere of the receiver are equipped with a UV light

nano-emitters, which can emit pulses with ( $4 \times 10^{-12} s$ ) duration. By considering a random orientation of 7-DHC molecules in a liquid, the study in [15] estimated experimentally, that 70% of the molecules can be excited by using one picosecond UV pulse, which is a promising result for our proposed model system. The pulse used in the experiment was a Gaussian temporal shape with 4 picosecond duration, which can be written mathematically as follows :

$$\phi(t) = \frac{\gamma}{(\sqrt{\pi T})} \exp \frac{-t^2}{T} \quad (\text{A.6})$$

Where  $\gamma$  is the number of incident photons per  $cm^2$ , and  $T$  is the pulse duration, which are set for the experimental studies.

The pulses are emitted after molecules are released by the transmitter in an optimal predetermined time, which we provide in section III using stochastic simulations. The impulse response at the receiver, which is the local concentration of the molecules at a distance  $d$  from the transmitter can be calculated as described in [12] :

$$f(t) = \frac{N}{(4\pi Dt)^{3/2}} \exp \frac{-d^2}{4Dt} \quad (\text{A.7})$$

Where  $N$  is the number of molecules released for one bit.  $D$  is the diffusion coefficient.  $d$  is the distance between the transmitter and the receiver, and  $t$  is the time of the first molecules hit the receiver. We assume that the receiver is a point observer, and the concentration throughout its volume is uniform and equal to the expected concentration in the center.

## A.5 Performance Evaluation and Simulation Results

To evaluate the influence of the UV light emission time and the distance between the transmitter and the receiver upon the signal strength and the Inter-Symbol Interference (ISI), we simulate our proposed system model for different UV light emission times and different distances between the transmitter and the receiver using AcCoRD simulator [23]. Actor-based Communication via Reaction-Diffusion (AcCoRD) is a new sand-box designed by Noel et al. to solve reaction-diffusion for molecular communication studies, which allows us to simulate 3D model systems for MC and evaluate their performance with more accuracy, because of its microscopic and mesoscopic hybrid algorithm.

In this section, we present the simulation results of a bounded environment, where molecules are released by a point transmitter and observed by a spherical receiver with a radius of ( $1 \mu m$ ). These results are the average of the received molecules number in each iteration, with a maximum number mean of  $24.78 \pm 0.49$  and 19 as a standard deviation. The confidence interval of the results is 99% with a margin error of 0.49, where the sample mean is approximated between [24.29 - 25.27].

To simulate the photolysis reaction, we used the environment and the biochemical choices that we have in AcCoRD simulator, a photolysis reaction was approximated as a first order degradation reaction with virtual and uniformly distributed enzymes around the receiver with radius ( $5 \mu\text{m}$ ) and with very fast and equal binding, unbinding and degradation rates as calculated in equations (4), (5) and showed in Figure A.4. In our simulations, the very fast virtual enzyme's first order degradation reaction plays the role of UV light degradation of 7-DHC molecules to Previtamin  $D_3$ , which it will be active only after the molecules release by the transmitter with a predetermined optimal time.

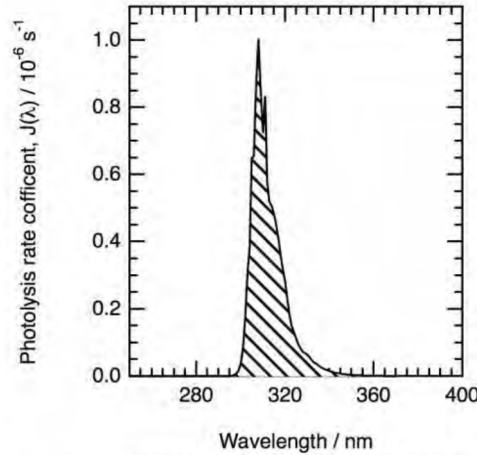


Figure A.4 Photolysis rate coefficient as a function of the  $\lambda$  and ISI effect

### A.5.1 Impulse Response

In our study, the impulse response at the receiver is the average time-varying number of 7-DHC molecules observed inside the spherical receiver. Figure. A.5 shows the impulse responses of three different scenarios of the same diffusion-based molecular communication system. The first scenario is a point transmitter releasing molecules in the medium without any degradation reaction to reach a spherical receiver at  $5 \mu\text{m}$  distance from the transmitter, like shown in Table A.1, which summarizes the simulated system parameters. The parameters of the environment in each studied scenario are chosen in a way that makes the results clear without increasing the calculation burden. However, the chemical parameters choice is based on biological studies and the equations cited above. We can see that the number of received molecules reaches a peak of 25 at time 0.04 second and then decreases till 12 at time 0.2 seconds and remain the same till the end of the simulation time. However, the heavy tail of this impulse response was expected, because the received molecules will not be degraded and stay in the proximity of the receiver, which creates the ISI problem. The second scenario is the same as the first one, except that the medium contains uniformly distributed diffusing enzymes, which they can degrade the released molecules with a very fast first order reaction rate. The simulation shows a decrease in the signal strength with a peak of 16 molecules at time 0.04 s, and that simulation shows a decrease in the

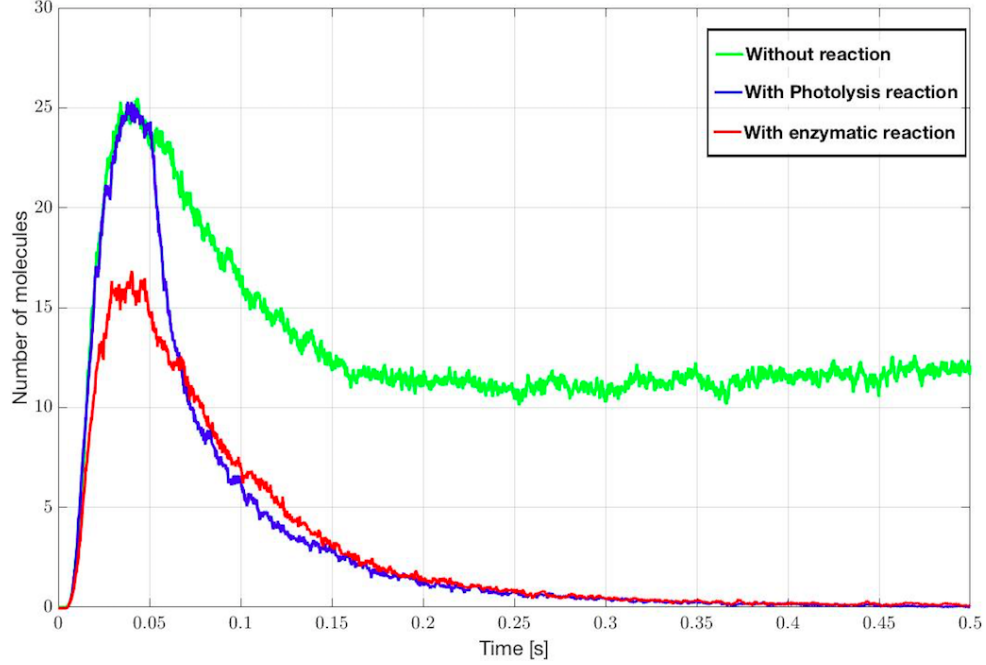


Figure A.5 Difference between Impulse responses of enzymatic and non-enzymatic systems wavelength

signal strength with a peak of 16 molecules at time 0.04 s, and that is because enzyme degradation starts from the beginning of the molecules release by the transmitter, so they degrade also the information decreasing by that the signal strength. In addition, we notice that the heavy tail disappeared and converged to zero at the end of the simulation time, which mitigates ISI. So there is a trade-off between the first scenario and the second one, the strong signal creates more ISI, and mitigating ISI weaken the signal. The third scenario, which is the proposed system in this study, is the same as the second one, except that virtual enzymes are distributing around the receiver with  $5 \mu\text{m}$  sphere and with a very fast reaction rate to mimic the photo-degradation of the molecules after UV light absorption. Simulation results show that the received number of molecules reaches a peak of 25 at 0.04 s like the first scenario, and after 0.05 s, the number decreased rapidly till 5 at 0.1 second, and then converge to zero at the end of the simulation time. The decrease started at 0.05 s because ( $T_U = 0.05$  s), which is the time we choose for the UV light to be emitted -as we will explain in the next subsection- and that gives time for a maximum number of molecules to reach the receiver and strengthen the signal. In an optimal time, the degradation of the molecules will be switched on by emitting UV light, which will mitigate ISI by degrading 7-DHC with the photolysis reaction. These results proved that our proposed system model is better, because it increased the signal strength with 36% and mitigated ISI faster, breaking the trade-off mentioned above, which can drastically increase the achievable throughput.

Parameters	<i>Scenario1</i>	<i>Scenario2</i>	<i>Scenario3</i>
Released molecules	10,000	10,000	10,000
Diffusion coefficient ( $m^2/s$ )	$10^{-10}$	$10^{-10}$	$10^{-10}$
Simulation repetition	100	100	100
Simulation time (s)	0.5	0.5	0.5
Distance ( $\mu m$ )	5	5	5
UV emission time $T_U$ (s)	—	—	0.01 ~ 0.3
Receiver radius ( $\mu m$ )	5	5	5
Number of enzymes	—	12980	12980
Binding rate ( $s^{-1}$ )	—	5	10
Unbinding rate ( $s^{-1}$ )	—	1	10
Degradation rate ( $s^{-1}$ )	—	1	10
Symbol period $t_s$ (s)	0.1	0.1	0.1
Simulation time step $\Delta t$ ( $\mu s$ )	0.2	0.2	0.2

Tableau A.1 System Parameters Used for Simulation Results

### A.5.2 UV Light Emission's Optimal Time

The time  $T_U$ , when the UV light emitter switch on and send the UV waves in the medium to degrade the molecules is the most important parameter in our proposed system model, because if it emits the light before the optimal time, the strength of the signal will decrease, and if it emits it after that time, the ISI mitigation will decrease as the results show in Figure A.6. The simulations are repeated 100 times with a fixed distance between the transmitter and the receiver (5  $\mu m$ ), and with different light emission times [0.01, 0.03, 0.04, 0.05, 0.06, 0.1, 0.2, 0.3 s]. The results showed that the more we approach the time 0.04 second, the more the received number of molecules increases, which increases the signal strength. However, when the emission time exceeds 0.04 seconds, the width of the signal start increasing, which decreases ISI avoidance. These results prove that the optimal time for UV light emission is the time when the signal reaches its maximum peak, which is 0.04 seconds after molecules release by the transmitter.

The distance between the transmitter and the receiver also influence the impulse response of the proposed system model, which we studied in Figure A.7. The simulations are repeated 100 times with a fixed UV light emission time ( $T_U = 0.05$  s), and with different distances between the transmitter and the receiver [5, 6, 7, 8, 9, 10  $\mu m$ ]. The results show that the more the distance increases, the more the received number of molecules decreases, which decreases the signal strength. However, we can see that the ISI mitigation is not effected by the distance and converge to zero at the end of the simulation, because the UV light was emitted at near optimal time. The weakness of the signal in long distances is explained by the random brownian motion of the released molecules, and the probability that the molecules reach the receiver is distance dependent. The more it is long, the less probable they reach their destination.



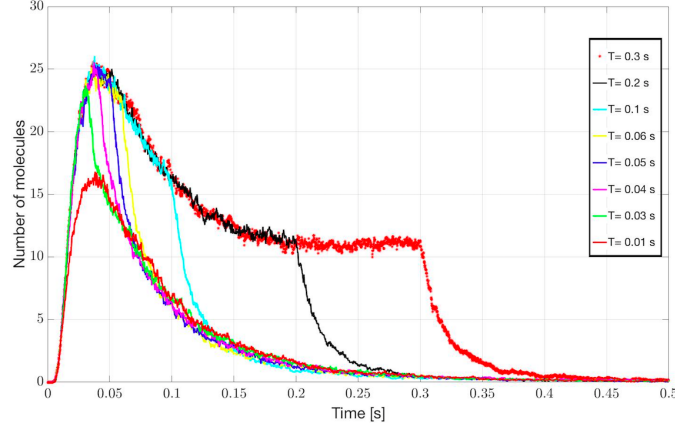


Figure A.6 Effect of the light emission time variation on the impulse response

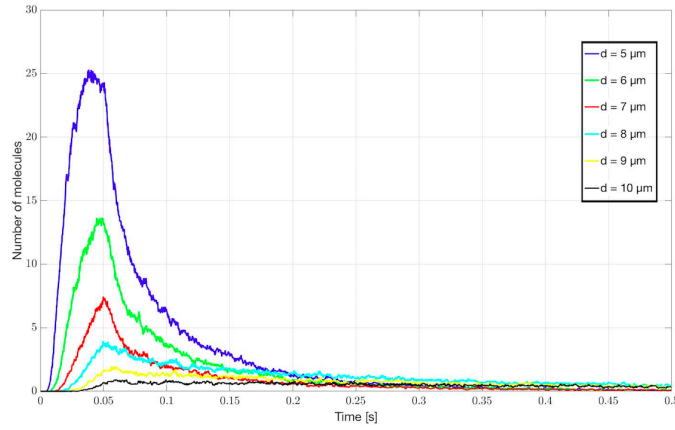


Figure A.7 Effect of the distance variation on the impulse response

### A.5.3 ITR and Performance Evaluation

To evaluate the performance of our proposed model system, we used the interference-to-total-received molecules (ITR). As described in [15], the ITR can be defined as :

$$ITR(t_s, t_{end}) = \frac{F(t_{end}) - F(t_s)}{F(t_{end})} \quad (A.8)$$

Where  $F(t_{end})$  is the total number of the received molecules at the end of the simulation, and  $F(t_s)$  is the total number of the received molecules at symbol period  $t_s$ . This metric parameter can separate the molecules absorbed before the symbol period, which we took it as 0.1 second in this study, and the molecules absorbed after it, which they represent the ISI problem. So the more molecules are absorbed before the symbol period and less absorbed after it, the more the signal is strong and the mitigation of ISI is better. Therefore, in our study, the smaller the ITR, the better the performance of the system.

The ITR analysis provides an in-depth understanding of the difference between the three studied scenarios, and the influence of the light emission time and dis-

tance variations. In Figure A.8 (Top), we see that the scenario with the photolysis reaction had the smallest ITR value, which was expected. However, what's surprising is that ITR value of "without reaction" scenario was smaller than the scenario with enzymatic reaction, even if this last one has a better ISI mitigation, which is explained by the decrease in the signal strength when using enzymes and that increased the ITR value. ITR analysis validates the simulations results in Figure A.5, and proves that the proposed model system's performance is better.

We applied the ITR analysis for light emission time in Figure A.8 (Left), and the results showed that the more we approach the optimal time (0.04 second), the smaller the ITR value, and then when we exceed the optimal time, the ITR value increases and reaches a steady state at the value 0.32. These results validate our optimal time we found in the simulation results in Figure A.6, which is 0.04 second with the smallest ITR value 0.099. The steady state in ITR value at 0.32 can be explained with the symbol period we choose in this study, which is (0.1 s), we notice that when light emission starts after the symbol period, the ITR values take the same value as the first scenario without reaction (0.32), which is logical because ITR compare the number of the received molecules before the symbol period and the total number at the end of the simulation, which will never exceed the non-reaction scenario. Therefore, emitting light after the symbol period will make any change in ITR value.

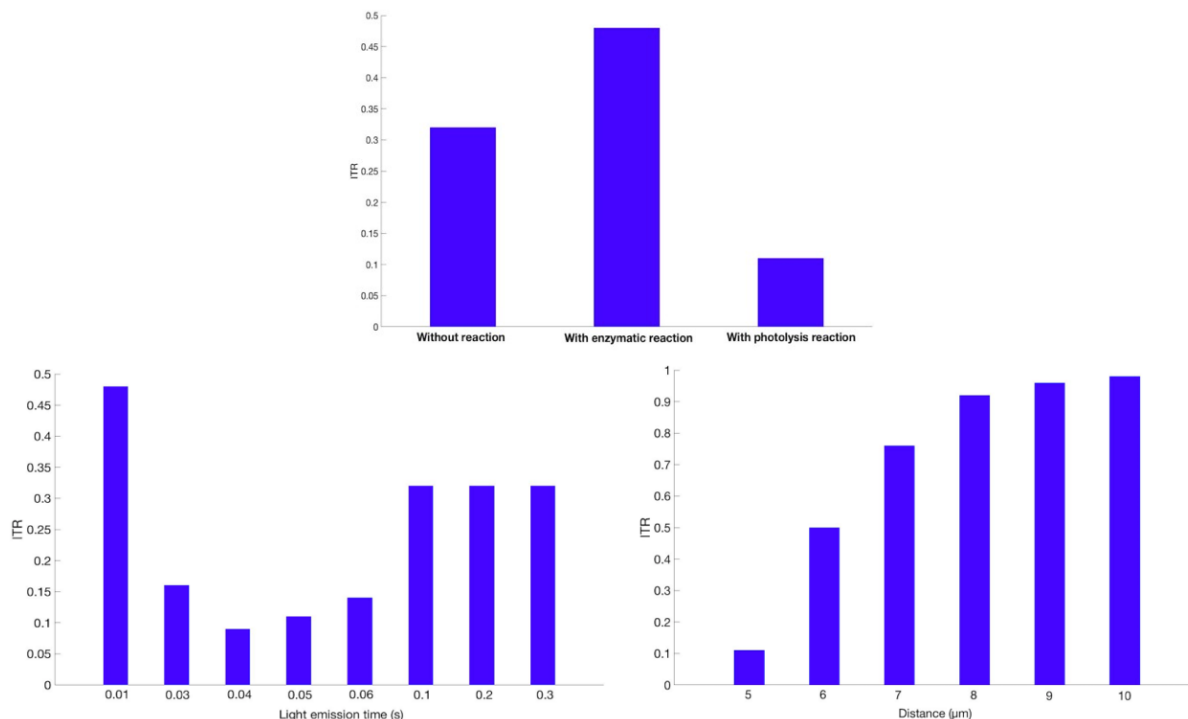


Figure A.8 ITR comparison between the three simulated scenarios (Top), for different light emission times (Left) and for different distances (Right)

By applying ITR also for different distances, and with fixed light emission time (0.05 s) in Figure A.8 (Right), we can see that the ITR value increases with

distance, which is also expected and validates the simulated results in Figure A.7. The performance of the proposed model system was evaluated and the results of ITR analysis validated our simulation results, and proved that its performance is better.

## A.6 Conclusion

Inter-Symbol Interference (ISI) has been the most important problem in diffusion-based Molecular Communication, and the use of enzymatic reactions help mitigating it, but it also drastically decreases the received signal strength. In this paper, we proposed a new system model using non-enzymatic and precisely photolysis reaction, which has the advantage of being able to be switched On/Off, and deciding the time of molecules degradation start, by emitting UV light in an optimal time after the molecules release, which gives more time for a maximum number of molecules to reach the receiver and strengthen the signal. The simulation results showed that the proposed system enhanced the signal strength and ISI avoidance, which increases the achievable throughput. The optimal time for UV light emission was provided, and the performance of the system was evaluated for different distances and for different light emission times using ITR, which validated the simulation results and the optimal light emission time. For future work, we will provide a mathematical framework to analyze these paper's results, and also considering different system parameters such as absorbing and reflective receivers. Another possible research would be the analysis of the impact of a flow on the proposed system model. Multiuser interference and external noise sources will also be investigated.

---

# ANNEXE B

## Article 2

### Design Optimization of a MIMO Receiver for Diffusion-based Molecular Communication

- Auteurs : Oussama Abderrahmane Dambri, et Soumaya Cherkaoui.
- Conférence : IEEE Global Communications Conference GLOBECOM 2018, 9-13 December Abu Dhabi, UAE.
- Statut :

#### B.1 Résumé en français

L'affaiblissement sur le trajet est un défi majeur dans les communications moléculaires. Lorsque les molécules transportent des informations basées uniquement sur une diffusion naturelle, le nombre des molécules reçues est inversement proportionnel à la distance carrée entre l'émetteur et le récepteur, ce qui a un impact considérable sur la force du signal reçu. L'utilisation d'une technique MIMO (Multi-Input Multi-Output) peut améliorer les performances des communications moléculaires en augmentant le débit de données. Dans cet article, nous avons étudié le récepteur utilisé dans les communications MIMO moléculaires. Nous nous sommes concentrés sur trois paramètres importants pour la conception du récepteur, à savoir la distance du canal, la distance entre les détecteurs construisant le récepteur et le diamètre des détecteurs. Pour optimiser la conception d'un récepteur MIMO (3x3), nous avons utilisé le simulateur AcCoRD pour obtenir des simulations stochastiques 3D pour chaque scénario. Nous avons évalué les résultats de la simulation en étudiant la probabilité d'erreur et le nombre de molécules reçues représentant la force du signal. L'étude montre qu'un choix judicieux d'une combinaison des trois paramètres peut optimiser la conception du récepteur MIMO, ce qui peut diminuer la probabilité d'erreur et améliorer les performances de la communication moléculaire.

#### B.2 Abstract

Path loss is a main challenge in Molecular Communications. When molecules carry information based only on a natural diffusion, the number of molecules that can be received is inversely proportional to the square distance between the transmitter and the receiver, thus hugely impacting the received signal strength. The use of a Multi-Input Multi-Output (MIMO) technique can improve the performance of molecular communications by increasing the data rate. In this paper, we studied the receiver used in molecular MIMO communications. We focused on three important parameters for the receiver design, which are the channel distance, the distance

between the detectors constructing the receiver and the detectors' diameter. To optimize the design of a (3x3) MIMO receiver, we used AcCoRD simulator to obtain 3D stochastic simulations for each scenario. We evaluated the simulation results by studying the error probability and the number of received molecules representing the signal strength. The study shows that a judicious choice of a combination of the three parameters can optimize MIMO's receiver design which can decrease the error probability and improve the performance of Molecular Communication.

## B.3 Introduction

Nanotechnology is being extensively used today in the medical, industrial and military fields. In particular, nano-machines are able to achieve very simple tasks at the nano-scale for different purposes. However, many of the most promising applications of nano-machines, that are yet to come, involve nano-machines communicating with each-other. Indeed, communication can allow these nano-machines to share information and cooperate to drastically expand their capabilities.

Nanonetworking is the paradigm that deals with communicating systems at the nanoscale level. Nanonetworking presents several engineering challenges. For example, designing a traditional electromagnetic communication system at such small level implies using nano antennas which generate waves at Terahertz frequency with all its peculiarities [1]—[4]. To circumvent such challenges, researchers have been studying the use of molecules as carriers of the information between nano transmitters and receivers. Indeed, nature has been using molecules to transmit information for millions of years. Bio-inspired Molecular Communication (MC) is one of the most promising solution ever proposed for nano-communication systems [5]. The most basic method proposed to exchange information using the bio-inspired MC is the diffusion-based MC [7]. With this method, based on the natural diffusion of molecules in the medium, the transmitter sends the information, which propagates in the medium randomly with Brownian motion to reach the receiver based on the natural diffusion process of molecules with a brownian motion to reach the receiver. The information to be transmitted can be coded by using the number of molecules (concentration), the type of molecules (isomers), the concentration ratio, or the frequency shift [24], [25]. It is a simple communication process with some obvious shortcoming. Some molecules can fail to reach the receiver, stay in the medium and interfere with the newly released molecules, thus creating an Inter-Symbol Interferences (ISI) [26]. Moreover, the slow propagation of molecules and the inversely proportional relationship between the diffusion and the communication channel distance causes a considerable path loss and drastically decreases the diffusion-based MC data rate [27].

The use of a Multi-Input Multi-Output (MIMO) technique is a good solution to increase the data rate and enhance MC performance. In [28], the authors investigated various scenarios of MIMO transmission techniques by using adapting the same concepts of used in the traditional electromagnetic communication (e.g. like diversity and Spatial Multiplexing (SM)), and applied them for the Diffusion-based MC. The study proved that with a well-known Channel State Information

---

(CSI) and with a proper allocation of the molecules among the transmission nodes, MIMO techniques can optimize the throughput of the system. The authors also suggested the use of a dynamic switch between the diversity mode and SM mode to have better results. However, this study did not take into account the ISI and the reception noise, and by assuming assumed them to be negligible, and by while focusing only on the Multi-User Interference (MUI). The authors of [29], on the other hand, proposed a 2x2 Molecular MIMO system model which included ISI and Inter-Link Interference (ILI) using 3D particle-based simulators. The study proposed four detection algorithms specific to the molecular MIMO, by using the simulation results and the derived ISI and ILI models. To demonstrate that the proposed model is practicable at the Macroscale macroscale level, the authors also presented a tabletop testbed with its measurement results. This The study showed that the data rate is increased by 1.7 times than compared to the using a Single-Input Single-Output (SISO) systems. However, both studies didn't did not take into account the distance between, and the diameter of, the detectors at the receiver. and their diameter, which these can influence the performance of the MIMO receiver.

In this paper, we study the design parameters of the receiver used in the molecular MIMO in order to optimize its performance. Using AcCoRD simulator [23], we designed a (3x3) system, where the transmitter comprises . 3 emitters and the receiver comprises 3 detectors. In this our study, we focused on 3 important parameters for the receiver design, which are : the distance between the transmitter and the receiver, the distance between the detectors at the receiver and the ir diameter of the receiver. We used a a different type of molecules for each emitter so that the receiver can differentiate between the signals coming from the other emitters and mitigating mitigate by that the multi-user interference in the channel. The 3D stochastic simulation result of each simulation scenario is an impulse response detected by the receiver, which vary varies with the parameters changes of the receiver design. We used the resulting statistical data from the simulations to calculate the detection threshold by applying the Maximum A posteriori Probability (MAP) criterion of the standard Bayesian detection framework. To evaluate the optimization of the designed receiver for each scenario, we used the function of the Probability of Error with the number of transmitted molecules as an input. A judicious choice of a combination of the 3 parameters can help to optimize the performance of the MIMO receiver for molecular communication as summarized in the presented optimization problems.

The rest of the paper is organized as follows. In section II, we introduce the proposed system comprising a (3x3) MIMO design using 3 types of molecules with binary Concentration Shift Keying (CSK) modulation. In section III, we discuss the results of the study and evaluate the optimization of the receiver design, in terms of Error Probability, for each scenario. Finally, we conclude the paper in section IV.

## B.4 System Model

The system studied in this paper is a 3D fluidic environment with 3 emitters TX1, TX2 and TX3 at the transmitter, and 3 detectors RX1, RX2 and RX3 at the receiver as shown in Figure B.1. The transmitter releases 3 types of molecules as carriers of the information ; each type is designed for a single emitter. We assume that the effect of collisions between the released molecules is negligible ; they diffuse in the medium with a random motion until they reach at least one detector at the receiver.

### B.4.1 Diffusion

We model the information with a binary Concentration Shift Keying (CSK). We allocate a quantity of molecules in each emitter, and we divide the information that we want to send into 3 bit sequences to increase the data rate. Because the Channel State Information (CSI) is not available, we assume a uniform molecule allocation as in [28] :

$$Q_n = \frac{1}{N}Q \quad (\text{B.1})$$

Where  $N$  is the number of the emitters at the transmitter. The Diffusion of the molecules in the medium follows a continuous-time stochastic process. This arbitrary motion can be described mathematically with Fick's second law :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\nabla^2 C \quad (\text{B.2})$$

Where  $D$  is the Diffusion coefficient of the released molecules. We assume that all molecules have the same radius and all of them diffuse independently with the same coefficient  $D$ . This constant diffusion coefficient  $D$  can be calculated an in Eq. B.3 :

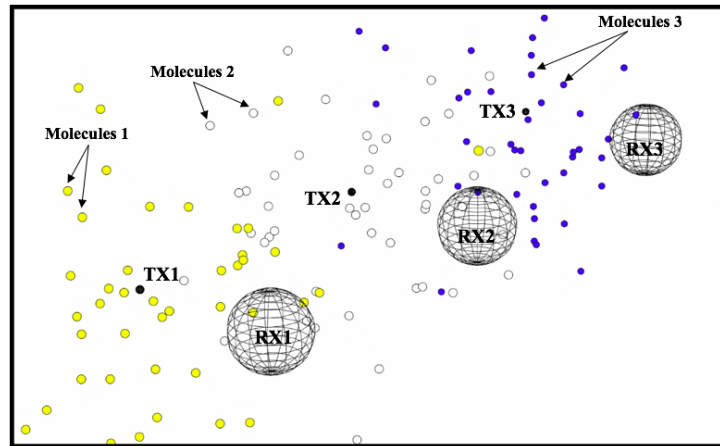


Figure B.1 System model of Molecular MIMO using 3 types of molecules

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta R} \quad (\text{B.3})$$

Where  $R$  is the radius of the molecules,  $T$  is the temperature in kelvin,  $k_B$  the Boltzmann constant, and  $\eta$  is the viscosity of the medium.

### B.4.2 MIMO Receiver

The MIMO receiver is constructed of 3 spherical detectors, which can count the number of the received molecules. The amplitude of the signal at the receiver is the average of the received concentration of one type of molecules at each detector over a symbol interval, which is demodulated and interpreted as “1” if the amplitude overtops the decision threshold. The local concentration of one type of molecules at a distance  $d$  from the transmitter is the impulse response received at each spherical detector, which can be calculated as described in [30] with Eq.B.4 :

$$f(t) = \frac{QV_R}{(4\pi Dt)^{3/2}} \exp \frac{-d^2}{4Dt} \quad (\text{B.4})$$

Where  $f(t)$  is the expected received number of molecules, is the number of molecules released for one bit by each emitter,  $D$  is the diffusion coefficient,  $d$  is the distance between the transmitter and the receiver, and  $t$  is the time that the first molecules hits the receiver and is the volume of the detectors which is defined in Eq.B.5 :

$$V_R = \frac{4\pi}{3}(r^3) \quad (\text{B.5})$$

Where  $r$  is the diameter of the detector.

We assume that the detectors at the receiver are point observers, and that the concentration throughout their spherical volumes is uniform and equal to the expected concentration in the detector center. To find the time when the peak concentration is expected in each detector, it is trivial to calculate the derivative of Eq.B.4 with respect to  $t$ . The solution of this derivative gives  $t_{max}$  as in Eq.B.6 :

$$t_{max} = \frac{d^2}{6D} \quad (\text{B.6})$$

The maximum number of each type of molecules expected to be received at each detector at time  $t_{max}$  which represents the signal strength, is inversely proportional to the distance between the transmitter and the receiver. The peak concentration of molecules is also independent of the diffusion coefficient as shown in the expression Eq.B.7 resulting from the substitution of Eq.B.6 in Eq.B.4 :

$$h = \left( \frac{3QV_R}{2\pi e} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{d^3} \quad (\text{B.7})$$

$h$  is the expected number of molecules received at time  $t_{max}$ . Although, the closed form expression in (B.4) is valid for SISO systems, a closed form expression is still an open problem for MIMO systems, because the probability of hitting the



detectors at the receiver becomes a probability of dependent events. Therefore, in this study we use 3D stochastic simulations to generate statistical data which help us to study MIMO systems. However, the application of the Spatial Multiplexing mode from the traditional electromagnetic communication for  $n \times n$  MIMO systems allows us to write a discrete final received concentration of molecules as [29] :

$$Y_{RX_n}[b] = h_{nn}[1].x_n[b] + I_n[b] + \sum_{k=2}^{b-1} (h_{nn}[k].x_n[b-k]) + h_{nm}[1].x_m[b] + \sum_{k=2}^{b-1} (h_{nm}[k].x_m[b-k]) \quad (\text{B.8})$$

Where  $h_{nn}$  is the number of molecules received from a corresponding emitter,  $h_{nm}$  is the number of molecules received from other links,  $b$  is the symbol time slot,  $I_n[b]$  is the noise generated from the reception process at the detectors,  $x_n[b]$  is the binary information received from a corresponding emitter, and  $x_m[b]$  is the binary information received from other links. Note that could be 0 or 1. To the Central Limit Theorem, we assume that  $b$  is sufficiently big such that  $I_n$  follows a Gaussian distribution  $\mathcal{N}(\mu_{I_n}, \sigma_{I_n}^2)$ . The sum expressions represent the ISI caused by the remaining molecules from previous symbols sent by a corresponding emitter and other links.

In this study, we assume that each detector has a specific receptor for each molecule type, and by differentiating between the 3 types of molecules, the receiver can mitigate MUI. At first, we simulate the same system using one type of molecules to capture MUI of the system in each detector like shown in Figure B.2. In the rest of the study, we use 3 types of molecules to mitigate MUI and assume it to be negligible, which makes (B.8) become :

$$Y_{RX_n}[b] = h_{nn}[1].x_n[b] + I_n[b] + \sum_{k=2}^{b-1} (h_{nn}[k].x_n[b-k]) \quad (\text{B.9})$$

We can write Eq. B.9 in a matrix form for the  $3 \times 3$  MIMO system as :

$$\begin{bmatrix} Y_{RX_1}[b] \\ Y_{RX_2}[b] \\ Y_{RX_3}[b] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_{11} & 0 & 0 \\ 0 & h_{22} & 0 \\ 0 & 0 & h_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1[b] \\ x_2[b] \\ x_3[b] \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \chi_1 + I_1[b] \\ \chi_2 + I_2[b] \\ \chi_3 + I_3[b] \end{bmatrix} \quad (\text{B.10})$$

Where  $\chi_n$  represents the sum of the ISI noise in Eq. B.9. Note that  $h_{nm}[1]$  is equal to 0 in the matrix form because we assumed it negligible. We can also write the matrix in Eq. B.10 in a short form as :

$$Y = Hx + 1 \quad (\text{B.11})$$

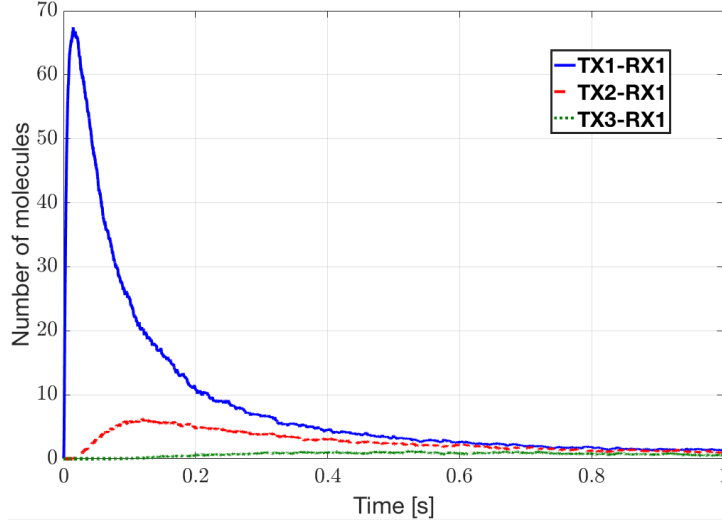


Figure B.2 Multi-User Interference (MUI) at the detector RX1 of the proposed MIMO system when using one type of molecules

Where  $H$  represents the number of molecules received at each detector from its corresponding emitter,  $x$  represents the binary information, and  $I$  represent the ISI and the noise of the reception process.

### B.4.3 Decision Rule and Error Probability

The optimization of the receiver for molecular MIMO requires the minimization of the average probability error, and in order to do that, we need to maximize the probability of a correct decision. The sent information is corrupted with a white Gaussian noise as shown in Eq. B.11, and the detectors at the receiver play the rule of a matched filter. Therefore, we applied the Maximum A posteriori Probability (MAP) criterion detection framework of the standard Bayesian as in [31] :

$$Y \underset{0}{\overset{1}{\geq}} \frac{\sigma^2}{2(\mu_1 - \mu_0)} \ln\left(\frac{1-p}{p}\right) \equiv \xi \quad (\text{B.12})$$

Where  $\xi$  is the decision threshold, and means  $\mu_1$ ,  $\mu_0$  and variance  $\sigma_{I_n}^2$  are calculated as in Eq. B.13, Where  $\mu_{I_n}$  and  $\sigma_{I_n}^2$  are the mean and the variance of a normal distribution, and  $p$  is the a priori probability.

$$\begin{aligned} \mu_0 &= \mu_{I_n} + \sum_{k=2}^{b-1} p(h_{nn}[k]) \\ \mu_1 &= \mu_0 + h_{nn}[1] \\ \sigma^2 &= \sigma_{I_n}^2 + \sum_{k=2}^{b-1} p(1-p)(h_{nn}[k])^2 \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

The average error probability is calculated as in Eq. B.14 :

$$P_e = pP_{Md} + (1 - p)P_{Fa} \quad (\text{B.14})$$

Where  $P_{Md}$  is the probability of Mis-detection, and  $P_{Fa}$  is the probability of False alarm, which can both be calculated as in Eq. B.15, where  $Q$  is the number of the released molecules for each emitter and  $\xi$  is the decision threshold calculated in (Eq. B.11).

$$\begin{aligned} P_{Md} &= Q\left(\frac{\mu_1 - \xi}{\sigma}\right) \\ P_{Fa} &= Q\left(\frac{\xi - \mu_1}{\sigma}\right) \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

## B.5 Evaluation and simulation results

To evaluate the optimization of the proposed MIMO receiver for molecular communication, we change the parameters of the receiver design and we simulate each scenario using AcCoRD simulator [23]. Actor-based Communication via Reaction-Diffusion (AcCoRD) is new sand-box designed by Noel et al. to solve reaction-diffusion for molecular communication studies, which allows us to simulate 3D model systems for MC and evaluate their performance with more accuracy, because of its microscopic and mesoscopic hybrid algorithm. In this section, we present the simulations results of the system described above and the error probability of each scenario. We used 1500 molecules for each molecule release;  $Q = 500$  molecules for each type. The diffusion coefficient  $D$  was calculated from Eq. 3 as  $D = 10 - 10\text{cm}^2/\text{s}$ , and we took the a priori probability  $p = 1/2$ . We took the same value for  $\eta$  of Eq. 3, as the one described in [12]. We assumed that the mean and variance of the normal noise are identical for all detectors as in [28], with a coefficient of variation of 0.3 such that  $\sigma_{I_n} = 0.3\mu_{I_n}$ , and the mean  $\mu_{I_n} = 2 \times 10^{16} \text{ molecules.cm}^{-3}$ . The parameters that we changed in the simulations are the Diameter of the detectors (1, 2, 3, 4  $\mu\text{m}$ ), the distance between the transmitter and the receiver (5, 7, 9, 11  $\mu\text{m}$ ) and the distance between the detectors (4, 7, 10, 15  $\mu\text{m}$ ).

### B.5.1 Diameter of the detectors

The MIMO receiver in our study uses three detectors, and the choice of the detectors diameter has proven to be so important for the system performance as shown in Figure B.3. We can see that when the diameter is 1  $\mu\text{m}$ , the maximum number of molecules is 3, and the more the diameter is increased, the more the signal strength increases too, from 3 to 81 molecules. With only 3  $\mu\text{m}$  increase in the diameter, the strength of the signal was increased 26 times.

This is logical because a bigger diameter of the detectors allows the MIMO receiver to detect a bigger number of molecules. We can also observe that the time to reach the maximum number of molecules is unchanged with the change of the diameter, and that is explained in Eq. B.6.  $t_{\text{max}}$  is only dependent on the distance of the channel and the constant diffusion coefficient  $D$ .

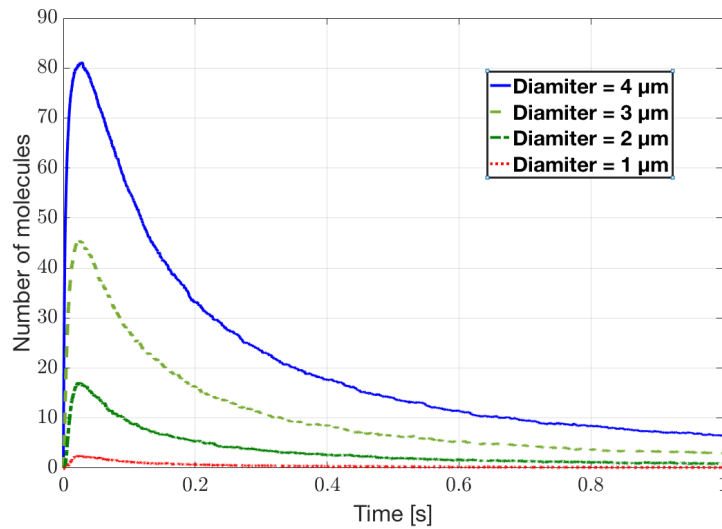


Figure B.3 Impulse response of the designed MIMO receiver for different detectors diameter

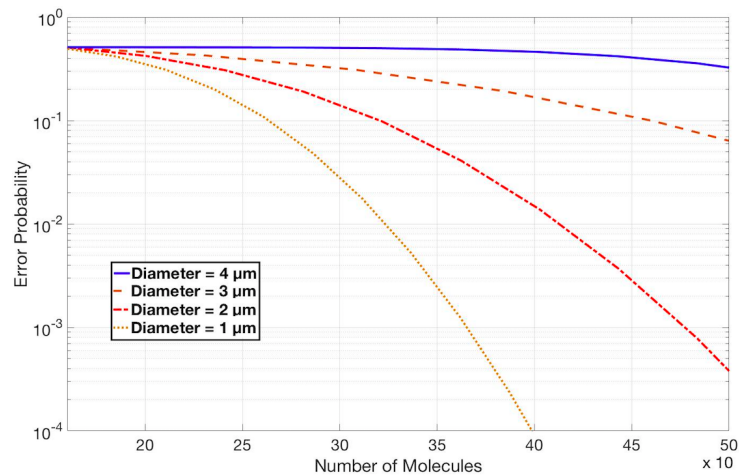


Figure B.4 The function of the probability of error with the number of molecules released by each emitter as an input for different detectors diameter

However, increasing the diameter has a disadvantage too. The more the diameter is big, the more the probability to get a mis-detection or false alarm, which increase error probability. We can see in Figure. B.4 that when the diameter is  $4\mu m$ , the error probability is 0.3, and the smaller the diameter, the smaller the error probability, till it reaches  $10^{-4}$  with  $1\mu m$  diameter when releasing 400 molecules. This is also logical because the small volume of the detector makes it hard to detect molecules which decreases the probability to make error and also decreases the ISI. This tradeoff between the strength of the signal and the error probability can be summarized in the optimization problem of Eq. B.16 :

$$\begin{aligned} \max \quad & f(r_1, \dots, r_n) \\ & P_e \leq P_{e\max} \end{aligned} \tag{B.16}$$

The solution of this optimization problem allows to make a choice of the diameter that can optimize the strength of the signal and at the same time minimize the average error probability.

### B.5.2 Distance between the transmitter and the receiver

One of the main reasons of the path loss in molecular communication is the distance  $d$  between the transmitter and the receiver. The Eq. 7 shows that the distance  $d$  has an inverse proportion to the maximum number of each type of molecules expected to be received at each detector at time  $t_{max}$ . Therefore, we should expect that the more the distance is big, the less the expected number of molecules at the receiver. This is indeed confirmed by the simulations results shown in Figure B.5. We can see that the number of the received molecules dropped from 45 molecules to 6 molecules with just  $6\mu m$  increase in the channel distance. We can also observe that  $t_{max}$  is changing with distance too, because molecules need more time to reach a far receiver, which is clear in the Eq. 6 where  $t_{max}$  is proportional to the square of the distance  $d$ .

Decreasing the distance increases the signal strength, but also decreases the error probability. As we can see in Figure B.6, small distances show less probability for the receiver to make mistakes. The results show also that we can conserve the same error probability in bigger distances by increasing the number of allocated molecules for each emitter. We can write this optimization problem as in Eq. B.17. [28] :

$$\min \quad P_e(Q_1, \dots, Q_n) \tag{B.17}$$

The solution of this optimization problems allows making a judicious choice of the distance and the number of allocated molecules in order to optimize the MIMO receiver.

### B.5.3 Distance between the detectors

Path loss is not the only challenge that needs to be overcome so as to enhance the link quality, ISI caused by the remaining molecules in the medium also decrease the data rate. In [11], the authors studied the influence of neighboring receivers

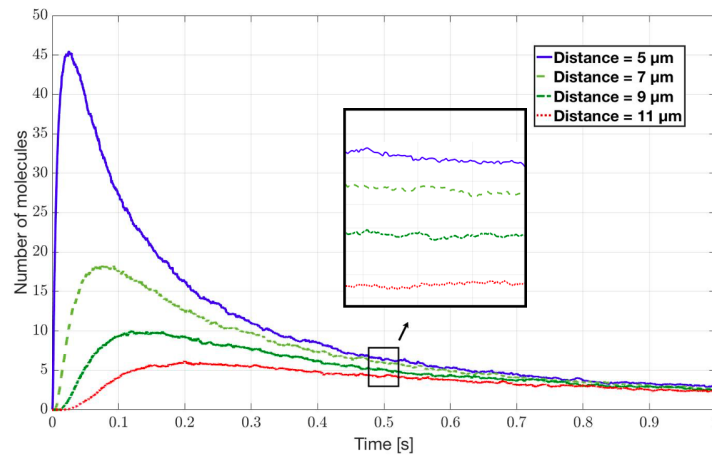


Figure B.5 Impulse response of the designed MIMO receiver for different channel distances

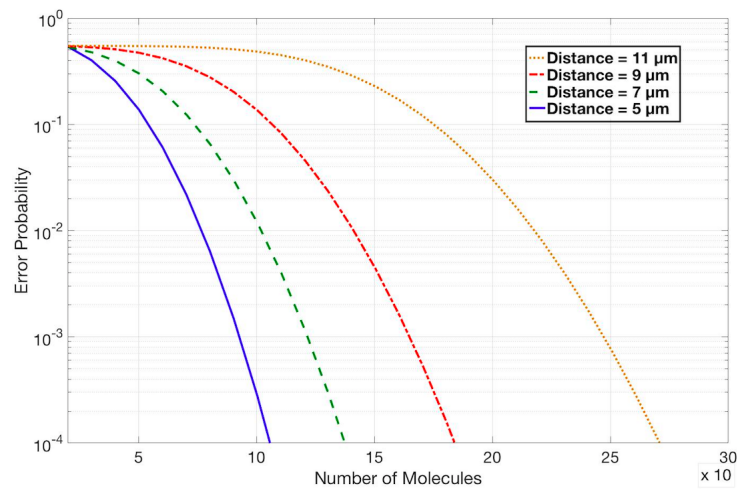


Figure B.6 The function of the probability of error with the number of molecules released by each emitter as an input for different channel distances

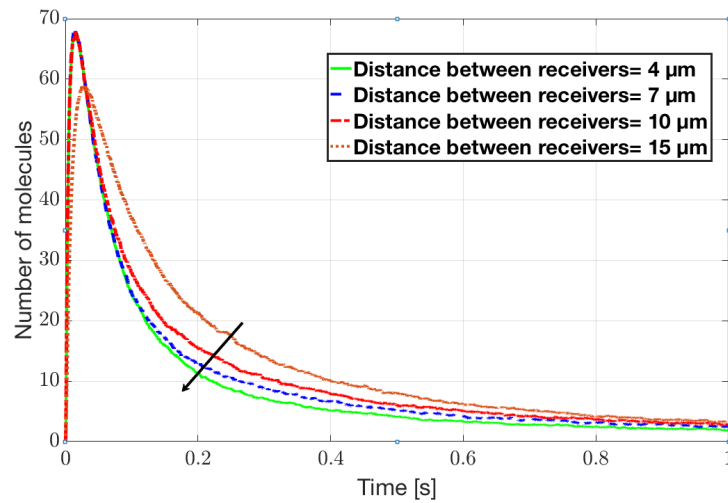


Figure B.7 Impulse response of the designed MIMO receiver for different distances between detectors

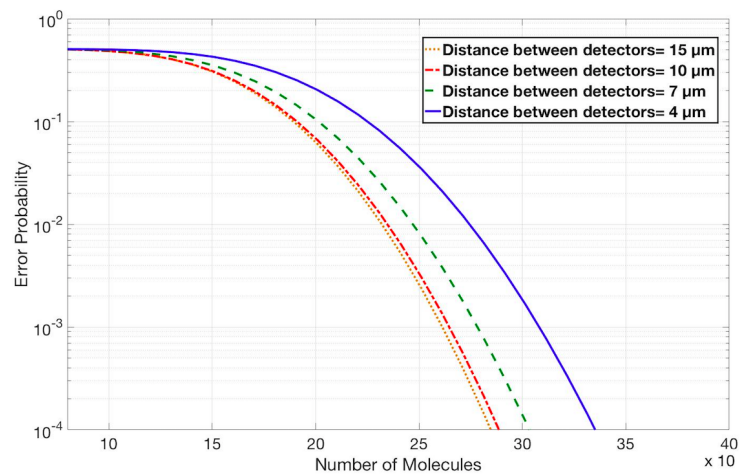


Figure B.8 The function of the probability of error with the number of molecules released by each emitter as an input for different distances between detectors

upon ISI, and they concluded that an optimal distance between these receivers can mitigate ISI by decreasing the width of the impulse response. Also, they found out that an optimal number of the neighboring receivers can increase the achievable throughput and decrease the error probability. However, the study in [11] assumed that all neighboring receivers should have the same distance between them and the transmitter (arc) in a Single-Input Multiple-Output (SIMO) system. In our study, the number of the neighboring detectors is 2, Figure B.7 shows the impulse response of the proposed MIMO system with different distances between the detectors. We can see that the more we increase the distance between the detectors, the more the width of the impulse response decreases. We can notice that the amplitude of the impulse with a  $4\mu m$  distance between detectors is smaller than the amplitude with the other distances. The explanation of this small decrease in the amplitude is that detectors that are too close to each other cover less space of the channel, and so, they miss some molecules which can remain in the medium and cause more ISI. Bigger distances between the detectors allow the receiver to cover bigger spaces to receive more molecules, and thus decrease ISI, as illustrated in Figure B.7 using an arrow.

The mitigation of ISI automatically decreases the probability of error, which is clear in Figure B.8. We see that bigger distances between the detectors gives a smaller errors probability with around 300 allocated molecules. The optimization of this parameter leads to a steady state in the maximum number of received molecules, and decreases the errors, which can increase the achievable throughput of the molecular MIMO system.

A judicious choice of an optimized combination of the 3 studied parameters of the proposed MIMO receiver design, can optimize the response of the receiver by mitigating ISI, decreasing the probability of making mistakes, and enhancing the link quality of diffusion-based molecular communication.

## B.6 Conclusion

The bio-inspired paradigm of diffusion-based MC is one of the most promising solutions for the nanocommunication. Path loss and ISI are the main challenges that needs to be tackled in order to enhance the link quality and increase the achievable throughput. In this paper, we studied the optimization of a MIMO receiver design by focusing on three important parameters : the channel distance, the distance between the three detectors constructing the receiver and the diameter of the detectors. A 3x3 MIMO system was simulated using AcCoRD simulator. In the simulations, we evaluated the function of the Probability of error with the number of the allocated molecules in each emitter as an input. The study showed that a judicious choice of an optimized combination of the three studied parameters, can optimize the MIMO receiver response by decreasing the probability of errors and increasing the achievable throughput. The use of a MIMO technique with an optimized receiver can enhance the link quality of molecular communication and increase its data rate.



# LISTE DES RÉFÉRENCES

- [1] I. F. Akyildiz, J. M. Jornet, et C. Han, “Terahertz band : Next frontier for wireless communications”, *Physical Communication*, vol. 12, no Supplement C, p. 16 32, sept. 2014.
- [2] J. Federici et L. Moeller, “Review of terahertz and subterahertz wireless communications”, *Journal of Applied Physics*, vol. 107, no 11, p. 111101, Jun 2010.
- [3] I. Khan, F. Belqasmi, R. Glitho, N. Crespi, M. Morrow, et P. Polakos, “Wireless sensor network virtualization : A survey”, *IEEE Communications Surveys Tutorials*, vol. 18, no 1, p. 553 576, First quarter 2016.
- [4] H. J. Song et T. Nagatsuma, “Present and Future of Terahertz Communications”, *IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology*, vol. 1, no 1, p. 256 263, sept. 2011.
- [5] N. Farsad, H. B. Yilmaz, A. Eckford, C. B. Chae, et W. Guo, “A Comprehensive Survey of Recent Advancements in Molecular Communication”, *IEEE Communications Surveys Tutorials*, vol. 18, no 3, p. 1887 1919, third quarter 2016.
- [6] L. Felicetti, M. Femminella, G. Reali, et P. Liò, “Applications of molecular communications to medicine : A survey”, *Nano Communication Networks*, vol. 7, p. 27 45, mars 2016.
- [7] M. Pierobon et I. F. Akyildiz, “A physical end-to-end model for molecular communication in nanonetworks”, *IEEE Journal on Selected Areas in Communications*, vol. 28, no 4, p. 602 611, Mai 2010.
- [8] S. Kadloor, R. S. Adve, et A. W. Eckford, “Molecular Communication Using Brownian Motion with Drift”, *IEEE Transactions on NanoBioscience*, vol. 11, no 2, p. 89 99, Jun 2012.
- [9] N. R. Kim, A. W. Eckford, et C. B. Chae, “Symbol Interval Optimization for Molecular Communication with Drift”, *IEEE Transactions on NanoBioscience*, vol. 13, no 3, p. 223 229, Sept. 2014.
- [10] H. Arjmandi, M. Movahednasab, A. Gohari, M. Mirmohseni, M. Nasiri-Kenari, et F. Fekri, “ISI-Avoiding Modulation for Diffusion-Based Molecular Communication”, *IEEE Transactions on Molecular, Biological and Multi-Scale Communications*, vol. 3, no 1, p. 48 59, Mars 2017.
- [11] H. Arjmandi, M. Movahednasab, A. Gohari, M. Mirmohseni, M. Nasiri-Kenari, et F. Fekri, “ISI-Avoiding Modulation for Diffusion-Based Molecular Communication”, *IEEE Transactions on Molecular, Biological and Multi-Scale Communications*, vol. 3, no 1, p. 48 59, Mars 2017.

- 
- [12] S. Assaf, S. Salehi, R. G. Cid-Fuentes, J. Solé-Pareta, et E. Alarcón, “Influence of neighboring absorbing receivers upon the inter-symbol interference in a diffusion-based molecular communication system”, *Nano Communication Networks*, vol. 14, no Supplement C, p. 40 47, Dec. 2017.
- [13] A. Noel, K. C. Cheung, et R. Schober, “Improving Receiver Performance of Diffusive Molecular Communication with Enzymes”, *IEEE Transactions on NanoBioscience*, vol. 13, no 1, p. 31 43, Mars 2014.
- [14] S. H. Snyder, “The Molecular Basis of Communication between Cells”, *Scientific American*, vol. 253, no 4, p. 132 141, 1985.
- [15] P. Mainil-Varlet, R. Curtis, et S. Gogolewski, “Effect of in vivo and in vitro degradation on molecular and mechanical properties of various low-molecular-weight polylactides”, *J. Biomed. Mater. Res.*, vol. 36, no 3, p. 360 380, Sept. 1997.
- [16] Y. J. Cho, H. B. Yilmaz, W. Guo, et C.-B. Chae, “Effective Enzyme Deployment for Degradation of Interference Molecules in Molecular Communication”, *arXiv :1703.06384 [cs]*, Mars 2017.
- [17] A. T. Khalid et al., “Utility of sun-reactive skin typing and melanin index for discerning vitamin D deficiency”, *Pediatric Research*, vol. 82, n 3, p. 444, Sept. 2017.
- [18] X. Q. Tian, T. C. Chen, L. Y. Matsuoka, J. Wortsman, et M. F. Holick, “Kinetic and thermodynamic studies of the conversion of previtamin D3 to vitamin D3 in human skin”, *J. Biol. Chem.*, vol. 268, n 20, p. 14888-14892, July. 1993.
- [19] A. Noel, K. C. Cheung, R. Schober, D. Makrakis, et A. Hafid, “Simulating with AcCoRD : Actor-Based Communication via Reaction-Diffusion”, *Nano Communication Networks*, vol. 11, p. 44-75, Mars 2017.
- [20] M. G. Kimlin, “Geographic location and vitamin D synthesis”, *Molecular Aspects of Medicine*, vol. 29, n 6, p. 453-461, Dec. 2008.
- [21] N. Gottfried, W. Kaiser, M. Braun, W. Fuss, et K. L. Kompa, “Ultrafast electrocyclic ring opening in previtamin D photochemistry”, *Chemical Physics Letters*, vol. 110, n 4, p. 335-339, Oct. 1984.
- [22] A. van Dijk, “Quantum yield for the photo-degradation of vitamin D3”, *Photochem. Photobiol. Sci.*, vol. 16, n 5, p. 690-693, Mai 2017.
- [23] “Actor-based Communication via Reaction-Diffusion” [Online]. Available : <https://github.com/adamjnoel/AcCoRD/>
- [24] H. Arjmandi, A. Ahmadzadeh, R. Schober, et M. N. Kenari, “Ion Channel Based Bio-Synthetic Modulator for Diffusive Molecular Communication”, *IEEE Transactions on NanoBioscience*, vol. 15, no 5, p. 418 432, juill. 2016.
-

- 
- [25] N. R. Kim et C. B. Chae, “ Novel Modulation Techniques using Isomers as Messenger Molecules for Nano Communication Networks via Diffusion”, IEEE Journal on Selected Areas in Communications, vol. 31, no 12, p. 847 856, déc. 2013.
  - [26] O. A. Dambri et S. Cherkaoui, “Enhancing Signal Strength and ISI-Avoidance of Diffusion-based Molecular Communication”, in Proc. IEEE IWCMC’18, June 2018.
  - [27] T. Nakano, M. J. Moore, F. Wei, A. V. Vasilakos, et J. Shuai, “Molecular Communication and Networking : Opportunities and Challenges”, IEEE Transactions on NanoBioscience, vol. 11, no 2, p. 135 148, juin 2012.
  - [28] L. S. Meng, P. C. Yeh, K. C. Chen, et I. F. Akyildiz, “ MIMO communications based on molecular diffusion”, in 2012 IEEE Global Communications Conference (GLOBECOM), 2012, p. 5380 5385.
  - [29] B. H. Koo, C. Lee, H. B. Yilmaz, N. Farsad, A. Eckford, et C. B. Chae, “ Molecular MIMO : From Theory to Prototype”, IEEE Journal on Selected Areas in Communications, vol. 34, no 3, p. 600 614, mars 2016.
  - [30] A. Noel, Y. Deng, D. Makrakis, et A. Hafid, “Active versus Passive : Receiver Model Transforms for Diffusive Molecular Communication”, in 2016 IEEE Global Communications Conference (GLOBECOM), 2016, p. 1 6.
  - [31] J. Proakis, “Digital Communications”, 4th ed. McGraw-Hill, Chapter 5, 2000.
-