Auto-assemblage

Florent Becker

3 avril 2015

Un modèle de calcul discret asynchrone, qui émerge depuis plusieurs questionnements :

- l'imitation d'un phénomène naturel (natural computing)
- la combinatoire / calculabilité (pavages de Wang)
- le calcul à adn

Principe de l'auto-assemblage

- Un grand nombre de particules,

Principe de l'auto-assemblage

- Un grand nombre de particules,
- simples,

Principe de l'auto-assemblage

- Un grand nombre de particules,
- simples,
- en interactions locales simples,

Principe de l'auto-assemblage

- Un grand nombre de particules,
- simples,
- en interactions locales simples,
- qui aboutissent à un résultat complexe / fonctionnel

Exemples naturels

- Croissance de cristaux

Exemples naturels

- Croissance de cristaux
- Coraux

Exemples naturels

- Croissance de cristaux
- Coraux
- Agglomération humaines

Hypothèses simplificatrices

- Un grand nombre de particules, une infinité
- simples,
- des interactions locales simples,
- qui aboutissent à un résultat complexe / fonctionnel

Hypothèses simplificatrices

- Un grand nombre de particules, une infinité
- simples, un nombre fini de types différents
- des interactions locales simples,
- qui aboutissent à un résultat complexe / fonctionnel

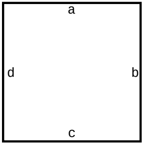
Hypothèses simplificatrices

- Un grand nombre de particules, une infinité
- simples, un nombre fini de types différents
- des interactions locales simples, sur $\mathbb{Z}^2$, à distance 1
- qui aboutissent à un résultat complexe / fonctionnel

Hypothèses simplificatrices

- Un grand nombre de particules, une infinité
- simples, un nombre fini de types différents
- des interactions locales simples, sur $\mathbb{Z}^2$, à distance 1
- qui aboutissent à un résultat complexe / fonctionnel avec lesquelles on implémente des algorithmes

Règle locales 2D : pavages de Wang



Definition (Jeu de tuiles de Wang)

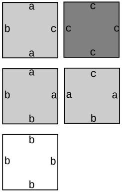
Un *jeu de tuiles de Wang* est défini par la donnée de :

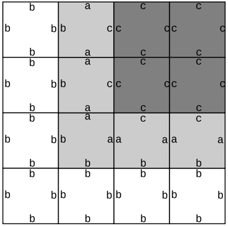
- un ensemble C de *couleurs*,
- un sous-ensemble de C^4, les *méta-tuiles*.

Indécidabilité du pavage du plan

Theorem (Indécidabilité du problème de pavages par tuiles de Wang)

Le problème suivant est indécidable : étant donné un jeu de tuiles de Wang, existe-t-il un pavage par ce jeu de tuiles ?





Algorithme locaux de pavage

- Les algorithmes de pavages sont une classe universelle d'algorithmes,
- avec une notion naturelle de localité.
- On s'intéresse aux plus locaux des algorithmes de pavage : on fait progresser le pavage à partir des voisins de chaque position,
- mais on s'autorise à dire ≪je ne sais pas quelle tuile vient ici≫

1. Introduction
   - Approche naturelle
   - Approche algo-combinatoire
   - Approche biologique
2. Le modèle
   - Définition
   - Exemples
3. Universalité
   - Compter
   - Calculer
   - Assemblage de formes arbitraires
4. Efficacité
   - Nombre de tuiles
   - Temps d'assemblage
5. Conclusion

Nano-inspiration

On veut assembler des nano-artefacts

- sans manipulations à trop petite échelle,
- donc avec des particules qui s'assemblent par interactions locales
- il nous faut des molécules capables d'attraction sélectives
- mais dont les interactions restent dans un plan...

Nano-inspiration

On veut assembler des nano-artefacts

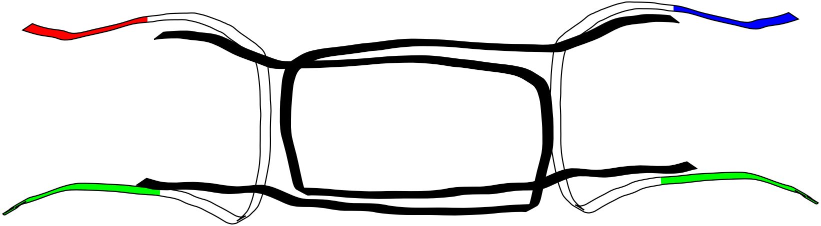
- sans manipulations à trop petite échelle,
- donc avec des particules qui s'assemblent par interactions locales
- il nous faut des molécules capables d'attraction sélectives
- mais dont les interactions restent dans un plan...
- l'adn convient parfaitement

DNA-computing

Les machines en silicium sont lentes mais pas très parallèle.
Pourquoi ne pas utiliser 10^{23} processeurs triviaux ?
Quelle molécule permet d'obtenir des interactions programmables ?

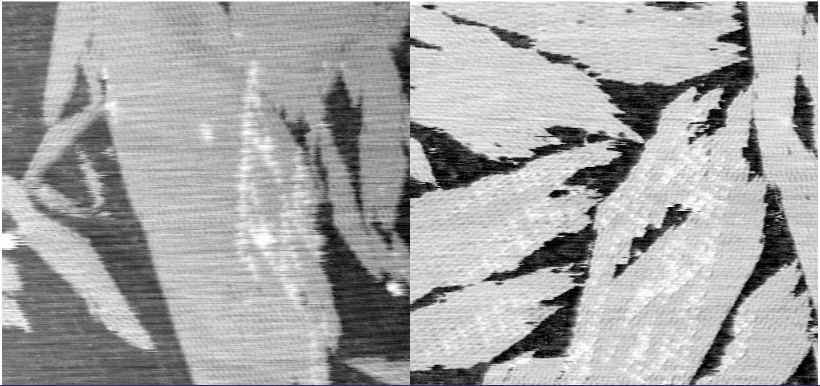
Des tuiles en adn

Avec 4 brins *simples* d'adn (*single strands*), il est possible de créer des objets ayant des interactions sélectives qui se placent sur des positions correspondant à une grille carrée.



Des tuiles en adn

Avec 4 brins *simples* d'adn (*single strands*), il est possible de créer des objets ayant des interactions sélectives qui se placent sur des positions correspondant à une grille carrée.

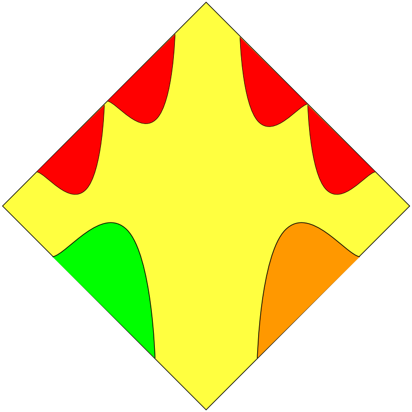


Les tuiles

Definition (Jeu de tuiles d'auto-assemblage)

Un *jeu de tuiles d'auto-assemblage* $\mathcal{S}$ est composé de :

- Un alphabet fini G
- Une fonction de *force*, $s : G \to \mathbb{N}$
- Un jeu de tuiles de Wang sur l'alphabet G

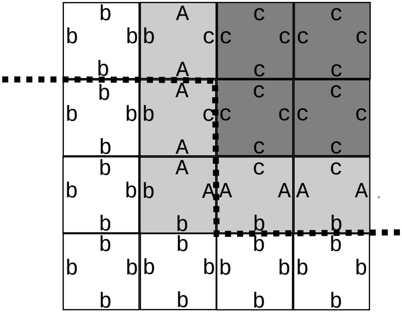


Lien

Definition

Soient t_1, t_2 deux méta-tuiles, et d une direction. Le *lien* entre t_1 et t_2 pour la direction d est :

- $\text{lien}(t_1, d, t_2) = 0$ si $d(t_1) \neq (-d)(t_2)$
- $\text{lien}(t_1, d, t_2) = f$ si $d(t_1) = d(t_2)$ et $\text{force}(d(t_1)) = f$

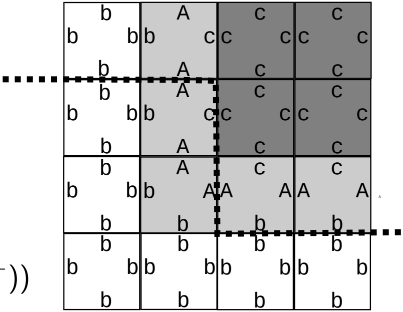


Lien

Definition

Soit S un jeu de tuiles d'auto-assemblage, et soit M un motif (au sens du jeu de tuile de Wang sous-jacent). Soit C une *coupe* de $dom(M)$; le lien le long de C est défini par :

$$\mathrm{lien}(C) = \sum_{e \in C} \mathrm{lien}(M(e^-), \mathrm{dir}(e), M(e^+))$$

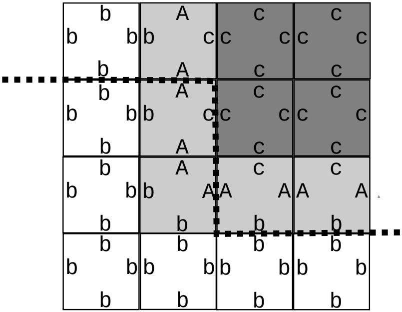


Lien

Definition (Stabilité)

On dit qu'un motif M de $\mathcal{S}$ est *stable à température* τ si pour toute coupe C de M,

$$\tau \leq \text{lien}(C)$$

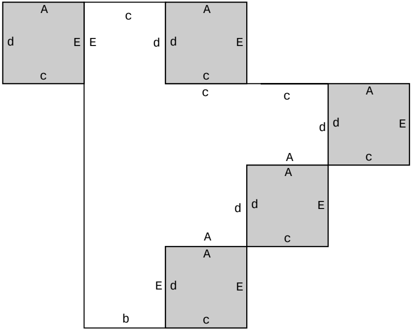


Dynamique

Definition

$\mathcal{S}$ a une transition entre deux motifs M et M' à température τ si :

- M et M' sont stables à température τ,
- $\mathrm{dom}(M') = \mathrm{dom}(M) \cup \{(x, y)\}$, $(x, y) \notin \mathrm{dom}(M)$ et M et M' coïncident sur $\mathrm{dom}(M)$.



Exemple d'ajouts à $\tau = 2$.

Caractéristiques du modèle

- Espace discret

Caractéristiques du modèle

- Espace discret
- Non-déterministe

Caractéristiques du modèle

- Espace discret
- Non-déterministe
- Temps discret

Caractéristiques du modèle

- Espace discret
- Non-déterministe
- Temps discret
- Asynchrone

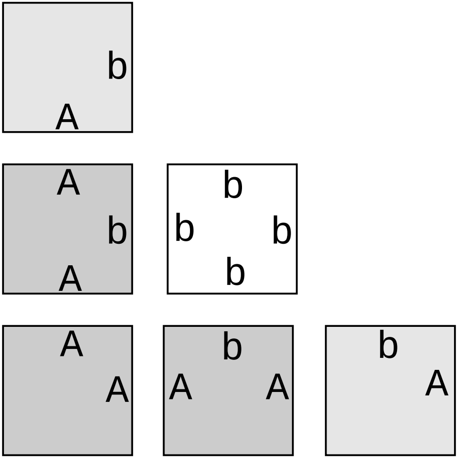
Deux non-déterminismes

- Deux ajouts sont possibles à la même position
- Deux positions ont des ajouts possibles

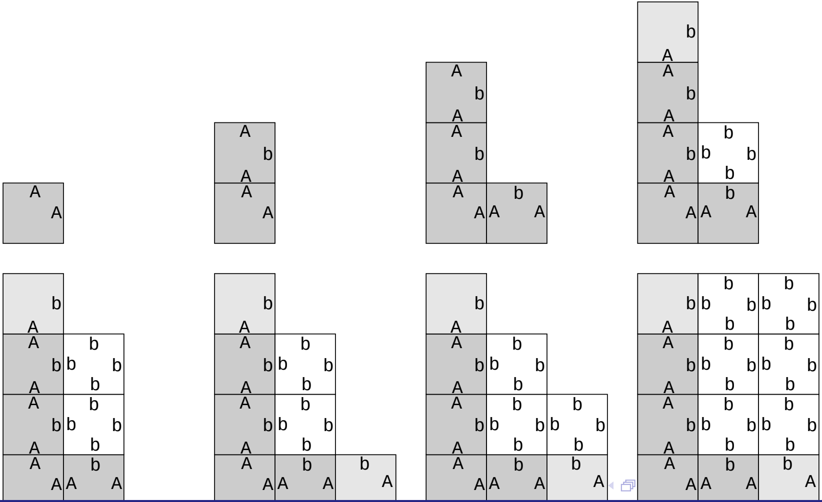
Ensemble de productions

La question la plus courante à propos d'un système d'auto-assemblage est la suivante : en itérant des transitions à partir d'un motif de départ ou *graine*, quel ensemble de motifs stables maximaux obtient-on ?
Une *production* est un motif obtenu par des transitions à partir de la graine.
De tels motifs sont les *productions finales* du système à partir de ce motif de départ, ou *graine*.

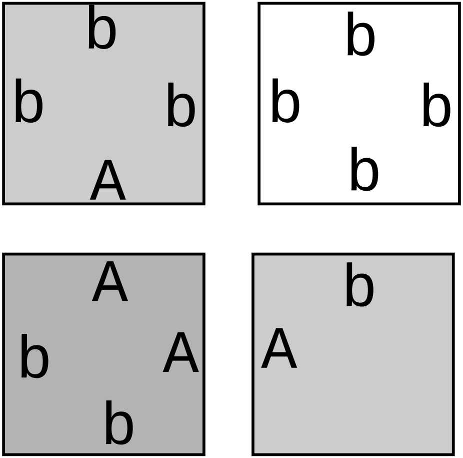
Assemblage d'un rectangle



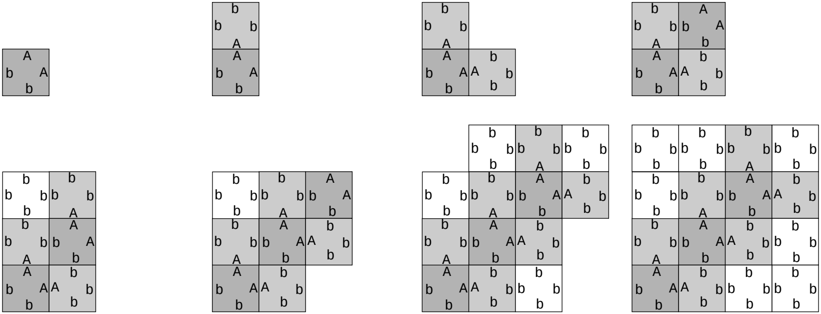
Assemblage d'un rectangle



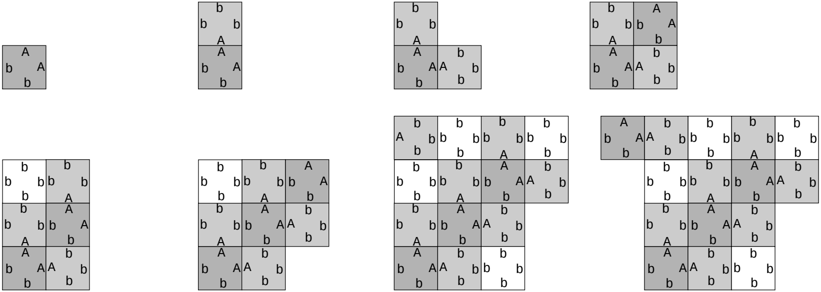
Assemblage d’un carré



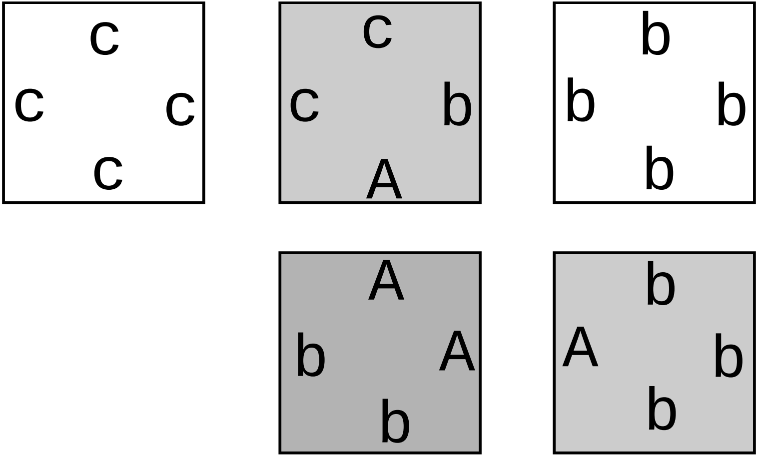
Assemblage d'un carré



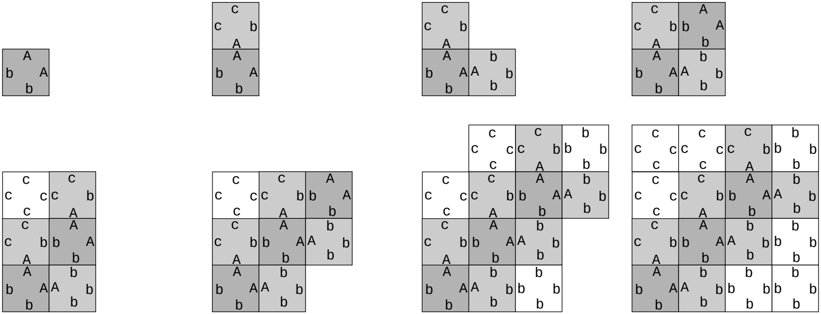
Assemblage d'un carré



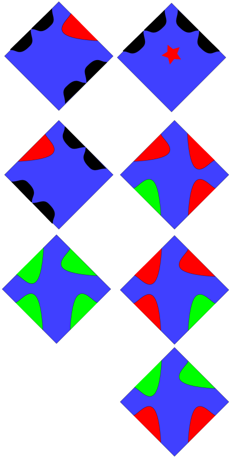
Assemblage d'un carré



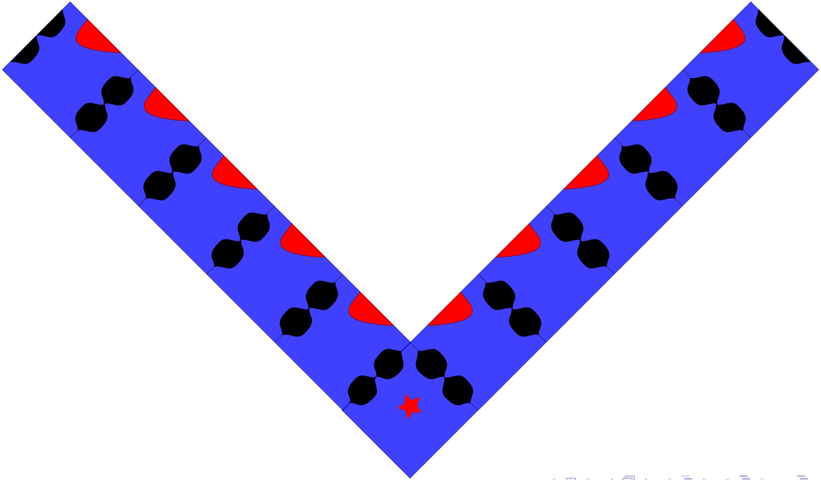
Assemblage d'un carré



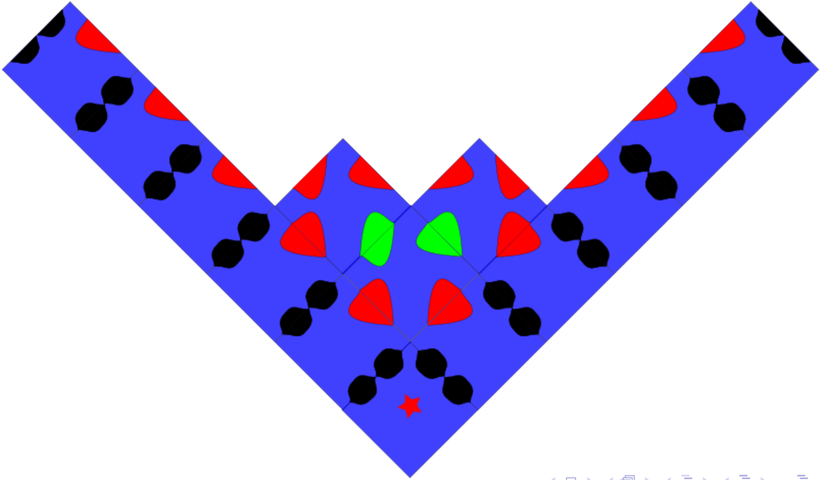
Sierpinski



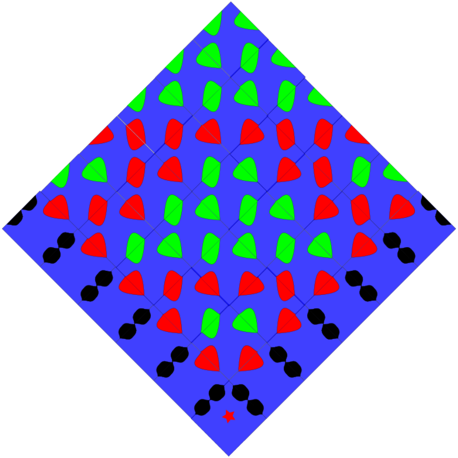
Sierpinski



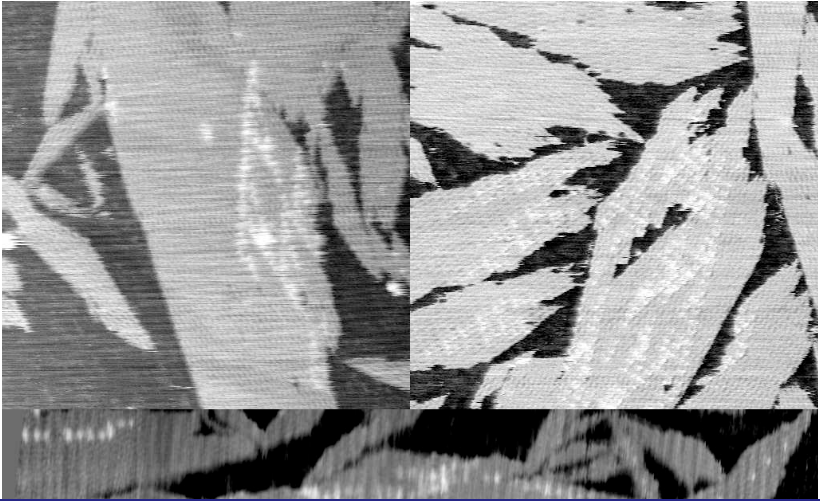
Sierpinski



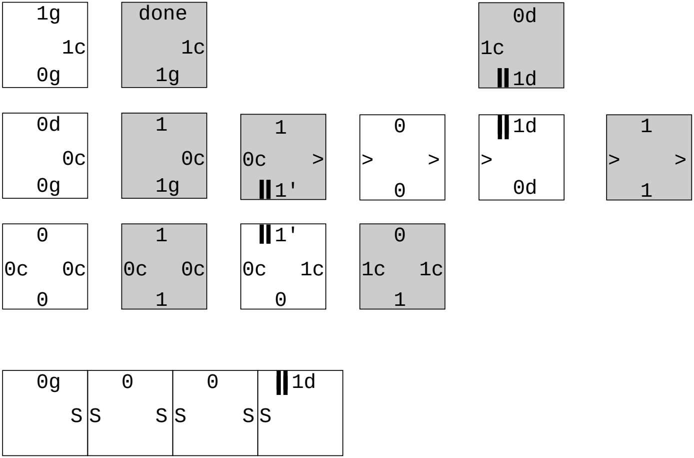
Sierpinski



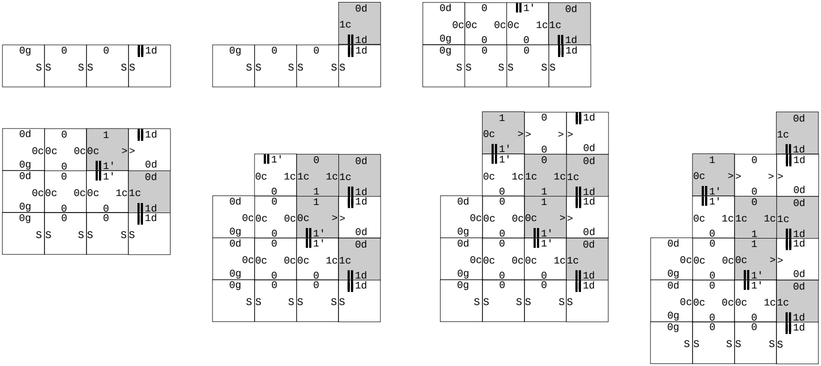
Sierpinski



Les tuiles du compteur



Fonctionnement du compteur



1. Introduction
   - Approche naturelle
   - Approche algo-combinatoire
   - Approche biologique
2. Le modèle
   - Définition
   - Exemples
3. Universalité
   - Compter
   - Calculer
   - Assemblage de formes arbitraires
4. Efficacité
   - Nombre de tuiles
   - Temps d'assemblage
5. Conclusion

Universalité de l'auto-assemblage

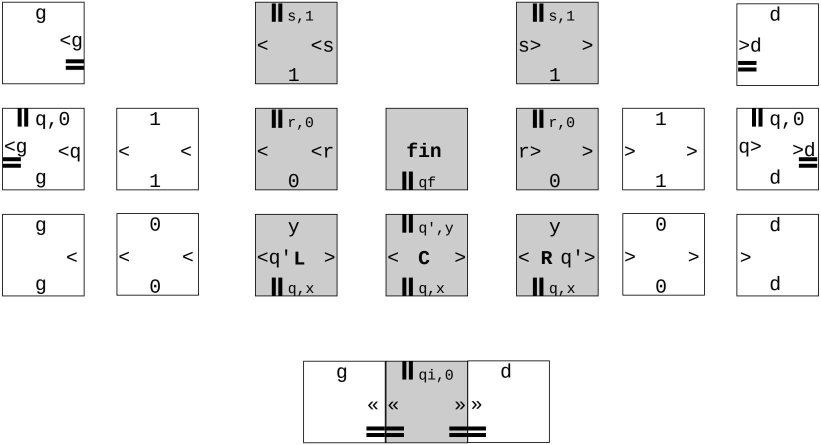
Theorem

Le problème de décider si un système d'auto-assemblage $\mathcal{S}$ à temparature 2 *a une production finale (de taille finie) est indécidable.*

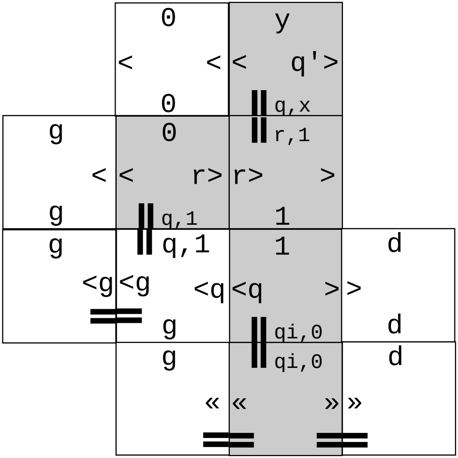
Démonstration.

Simulons une machine de Turing... Soit M une machine de Turing, nous allons définir un système d'auto-assemblage S dont les productions sont les diagrammes espace-temps de M. $\square$

Les tuiles de la simulation Turing



Simulation d’une machine de Turing



Le cas de la température 1

Dans le compteur comme dans la simulation de la machine de Turing, on a fortement utilisé la température 2 pour synchroniser le calcul, de sorte à ne pas avancer sans avoir toutes les entrées du calcul.

Conjecture

Le problème suivant est décidable : étant donné un système d'auto-assemblage à température 1, *a-t-il une production finale de taille finie ?*

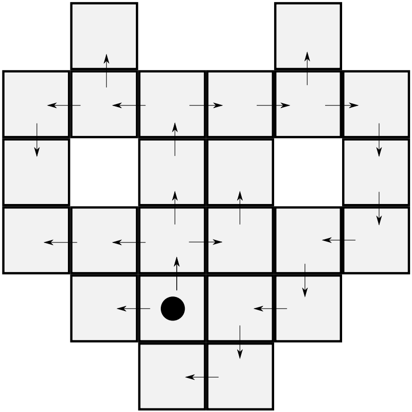
Assemblage d'un homothétique

Theorem

Pour toute forme 4-connexe du plan F, il existe un système d'auto-assemblage S_F dont l'unique production terminale à partir d'une graine réduite à une tuile est un homothétique de F.

D'une forme à un arbre

Comme F est 4-connexe, elle a un arbre couvrant t_F.

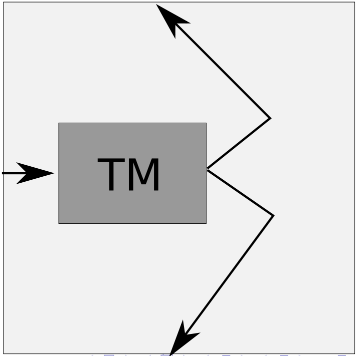


De l'arbre à la machine

Il existe une machine M_F qui, sur l'entrée (x, y) renvoie le sous-ensemble de $\{n, s, e, w\}$ indiquant lesquels des voisins de (x, y) sont ses descendants dans t_F.
Soit $t(F)$ le temps de calcul maximal de M_F sur les entrée $(x, y) \in F$.

De la machine aux tuiles

Pour un entier K suffisamment grand, il existe un système d'auto-assemblage qui simule M_F dans chaque carré $K \times K$.



Mesures d'efficacité

- Nombre d'ajouts de tuiles = surface...
- Nombre de tuiles dans le système = Kolmogorov
- Facteur d'échelle = temps Turing

Kolmogorov

Theorem

Il existe 4 constantes a_0, a_1, b_0, b_1 telles que pour toute forme 4-connexe finie du plan discret $F \subset \mathbb{Z}^2$, si $K_a(F)$ est la taille (en nombre de tuiles) du plus petit système d'auto-assemblage qui assemble un homothétique de F, alors

$$a_0\mathfrak{K}(F) + b_0 \leq K_a(F) \log K_a(F) \leq a_1\mathfrak{K}(F) + b_1$$

Kolmogorov (preuve)

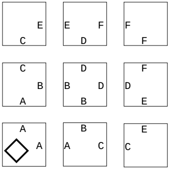
Démonstration.

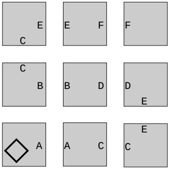
- Pour décrire un système d'auto-assemblage avec n tuiles, il faut $n \log n$ bits.
- Dans la construction précédente, une machine de Turing minimale donne la borne supérieure.

$\square$

Parallélisme

- Attachements à distance en parallèle
- Donner une horloge indépendante à chaque attachement
- Plus d'attachements indépendants ⇒ assemblage plus rapide





kTAM

Le modèle aTAM donné jusqu'ici peut se raffiner en un modèle cinétique (kTAM). On associe à tout système d'auto-assemblage S muni d'une graine g un processus de Markov en Temps Continu P_S ainsi :

- chaque tuile de S est munie d'un réel, sa concentration ;
- les états de P_S sont les productions de S ;
- il y a une transition (Markov) de p à p' avec un taux τ s'il y a une transition (aTAM) de p à p' qui ajoute une tuile de concentration τ.

Temps d'assemblage dans le kTAM

- Temps d'assemblage d'une forme = temps moyen pour l'obtenir par le kTAM
- Deux attachements éloignés ont lieu en parallèle (car ce sont des processus de Poisson)
- Mais le calcul de ce temps moyen peut être difficile.

Dynamique parallèle

Une autre proposition pour obtenir un temps d'assemblage : *considérer qu'un ensemble maximal de transitions compatibles* se déclenche à chaque instant.

- Donne bien un temps d'assemblage parallèle (le nombre de transitions parallèles)
- Ne préserve pas les productions (ni les productions finales)

Ordre de dépendances

Soit s une suite d'ajouts de tuiles aboutissant à une production p.

- s définit un ordre total $o(s)$ sur les positions de p.
- L'intersection de tous les $o(s)$ définit un ordre *partiel* $o(p)$ sur les positions de p.

Une production p est ordonnée (par $o(p)$) si tout ordre total compatible avec $o(p)$ correspond à une suite de transitions aboutissant à p.
Dans une production ordonnée, $o(p)$ capture les dépendances entre tuiles.

Dépendances et temps d'assemblage

Theorem

Soit $\mathcal{S}$ un système cinétique d'auto-assemblage où toutes les concentrations sont égales à 1, et dont la source est réduite à une seule tuile. Soit P une production ordonnée par $<_P$. Soit $p(<_P)$ la profondeur de $<_P$ (la taille de la plus longue suite croissnte de P, et $t(P)$ le temps d'assemblage de P. Alors $t(P) = \Omega(p(<_P))$.

Bilan

- Modèle à la croisée du *natural computing* et de la combinatoire
- Universalité ≪classique≫
- Problématiques de complexité propres
- Importance de la géométrie, en particulier des signaux

Autres problématiques

Nous n'avons pas évoqué d'autres problématiques actives dans le domaine :

- fiabilisation de l'assemblage
- les modèles à ≪plusieurs mains≫
- l'universalité intrinsèque
- les systèmes à signaux
- les modèles à dynamique restreinte
- l'assemblage de motifs infinis riches.