

Auto-assemblage de tuiles confluent en dimension 2 et température 1 : tout assemblage infini contient un chemin infini ultimement périodique

Jérôme Durand-Lose

Hendrik Jan Hoogeboom, Leiden University and
Nataša Jonoska, U. of South Florida



Laboratoire d'Informatique Fondamentale d'Orléans
ÉA 4022
Université d'Orléans, Orléans, FRANCE



GT GAMoC — 9 et 31 mai 2022 — LIFO

- 1 Introduction
- 2 Définitions
 - Modèle
 - Outils
- 3 Cas simple
- 4 Autre cas
- 5 Conclusion

- 1 Introduction
- 2 Définitions
- 3 Cas simple
- 4 Autre cas
- 5 Conclusion

Auto-assemblage de tuiles

Assemblage de tuiles ADN

- Florent Becker et shahrzad Heydarshahi ont déjà fait de très bon exposés
- mais il y a peut-être trop longtemps pour les jeunes

Papiers fondateurs du domaine

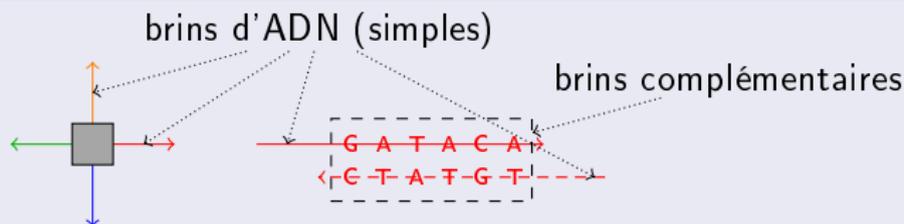
- [Chen and Seeman, 1991]
- [Adleman, 1994]

Papier fondateur du modèle [Rothemund and Winfree, 2000]

- définition du modèle
- capacité à calculer en dimension 2 à température 2 (simulation de machine de Turing)

Modèle — origine

Tuile d'ADN : grosse molécule



Liaison des brins plus ou moins solide

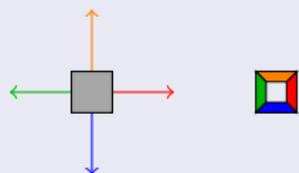
- dépend de la partie commune
- température

Dynamique : agrégation de tuiles

- part d'une *graine*
- ajout de proche en proche
- besoin de stabilité des liaisons

Modèle — température quelconque et variations

Modèle originel



Température 2 : besoin pour s'agréger

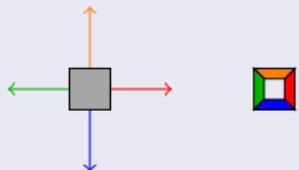
- lien de force 2 (ou plus)
- 2 (ou plus) connexions de force 1

Questions étudiées

- quelle forme est assemblage ?
- avec le moins de tuiles différentes possibles
- un jeu de tuiles pour simuler tous les autres
- ...
- peut-on calculer ?

Modèle — température quelconque et variations

Modèle originel



Température 2 : besoin pour s'agréger

- lien de force 2 (ou plus)
- 2 (ou plus) connexions de force 1

Questions étudiées

- quelle forme est assemblage ?
- avec le moins de tuiles différentes possibles
- un jeu de tuiles pour simuler tous les autres
- ...
- peut-on calculer ?

On peut calculer [Rothemund and Winfree, 2000]

- peut simuler une machine de Turing (**au tableau**)

Calculer (au sens de Turing)

On peut dès que...

- la température est 2
- la dimension est 3 (M. Cook, en fait $\mathbb{Z}^2 \times \mathbb{F}_2$ suffit)
- interdire les adjacents non compatibles
- colles négatives
- on fait par phase

Théorème [Doty et al., 2011, Meunier et al., 2020]

Les systèmes d'auto-assemblage de tuiles confluent en dimension 2 et température 1 *ne peuvent calculer*

Plus sur arXiv

[Meunier and Regnault, 2016]

[Durand-Lose et al., 2019, Durand-Lose et al., 2022]

Modèle ici — température 1 — directed / confluent



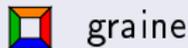
graine

Tile Assembly System (\mathcal{T})

- tuiles : carrés avec des colles typées de chaque côté
- colle : complémentarité et force
- graine (seed) : tuile spéciale
- assemblage (légaux) : graine en $(0,0)$ ou assemblage + tuile en plus tq :
 - tuile positionnée sur \mathbb{Z}^2
 - somme des colles compatibles adjacentes au moins égale à la température

- dimension 2 : espace d'assemblage
- température 1 : un adjacent complémentaire suffit
- adjacents non complémentaires autorisés (0 de colle)
- confluent : tous les assemblages sont « compatibles »

Modèle ici — température 1 — directed / confluent

Tile Assembly System (\mathcal{T})

- tuiles : carrés avec des colles typées de chaque côté
- colle : complémentarité et force
- graine (seed) : tuile spéciale
- assemblage (légaux) : graine en $(0,0)$ ou assemblage + tuile en plus tq :
 - tuile positionnée sur \mathbb{Z}^2
 - somme des colles compatibles adjacentes au moins égale à la température

- dimension 2 : espace d'assemblage
- température 1 : un adjacent complémentaire suffit
- adjacents non complémentaires autorisés (0 de colle)
- confluent : tous les assemblages sont « compatibles »

Modèle ici — température 1 — directed / confluent

Tile Assembly System (\mathcal{T})

- tuiles : carrés avec des colles typées de chaque côté
- colle : complémentarité et force
- graine (seed) : tuile spéciale
- assemblage (légaux) : graine en $(0,0)$ ou assemblage + tuile en plus tq :
 - tuile positionnée sur \mathbb{Z}^2
 - somme des colles compatibles adjacentes au moins égale à la température

- dimension 2 : espace d'assemblage
- température 1 : un adjacent complémentaire suffit
- adjacents non complémentaires autorisés (0 de colle)
- confluent : tous les assemblages sont « compatibles »

Modèle ici — température 1 — directed / confluent



graine

Tile Assembly System (\mathcal{T})

- tuiles : carrés avec des colles typées de chaque côté
- colle : complémentarité et force
- graine (seed) : tuile spéciale
- assemblage (légaux) : graine en $(0,0)$ ou assemblage + tuile en plus tq :
 - tuile positionnée sur \mathbb{Z}^2
 - somme des colles compatibles adjacentes au moins égale à la température

- dimension 2 : espace d'assemblage
- température 1 : un adjacent complémentaire suffit
- adjacents non complémentaires autorisés (0 de colle)
- confluent : tous les assemblages sont « compatibles »

Modèle ici — température 1 — directed / confluent



graine



ok

Tile Assembly System (\mathcal{T})

- tuiles : carrés avec des colles typées de chaque côté
- colle : complémentarité et force
- graine (seed) : tuile spéciale
- assemblage (légaux) : graine en $(0,0)$ ou assemblage + tuile en plus tq :
 - tuile positionnée sur \mathbb{Z}^2
 - somme des colles compatibles adjacentes au moins égale à la température

- dimension 2 : espace d'assemblage
- température 1 : un adjacent complémentaire suffit
- adjacents non complémentaires autorisés (0 de colle)
- confluent : tous les assemblages sont « compatibles »

Modèle ici — température 1 — directed / confluent

Tile Assembly System (\mathcal{T})

- tuiles : carrés avec des colles typées de chaque côté
- colle : complémentarité et force
- graine (seed) : tuile spéciale
- assemblage (légaux) : graine en $(0,0)$ ou assemblage + tuile en plus tq :
 - tuile positionnée sur \mathbb{Z}^2
 - somme des colles compatibles adjacentes au moins égale à la température

- dimension 2 : espace d'assemblage
- température 1 : un adjacent complémentaire suffit
- adjacents non complémentaires autorisés (0 de colle)
- confluent : tous les assemblages sont « compatibles »

- 1 Introduction
- 2 Définitions**
- 3 Cas simple
- 4 Autre cas
- 5 Conclusion

1 Introduction

2 Définitions

- Modèle
- Outils

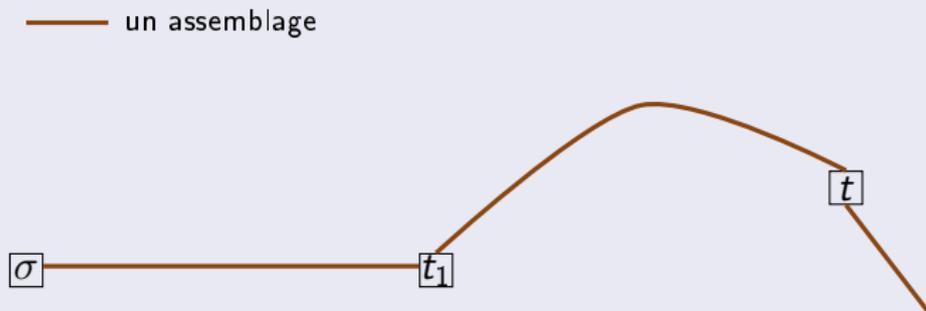
3 Cas simple

4 Autre cas

5 Conclusion

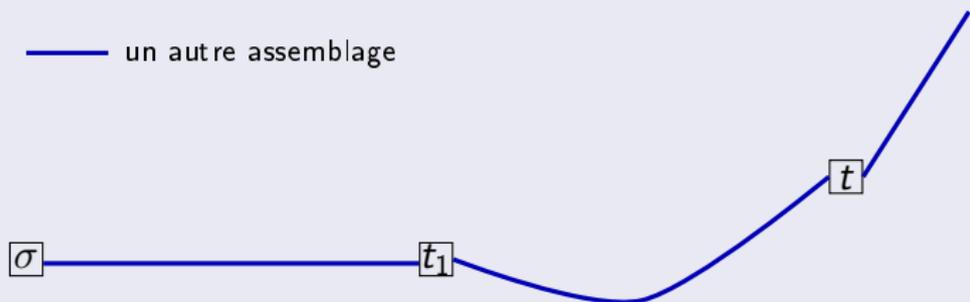
Confluent (a.k.a. directed)

Pour tout site (position de \mathbb{Z}^2), s'il y a une tuile dans deux assemblages, alors c'est la même tuile



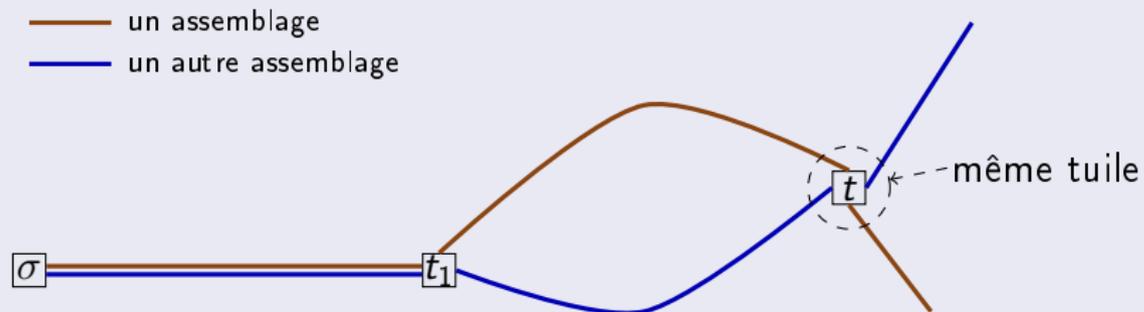
Confluent (*a.k.a. directed*)

Pour tout site (position de \mathbb{Z}^2), s'il y a une tuile dans deux assemblages, alors c'est la même tuile



Confluent (a.k.a. directed)

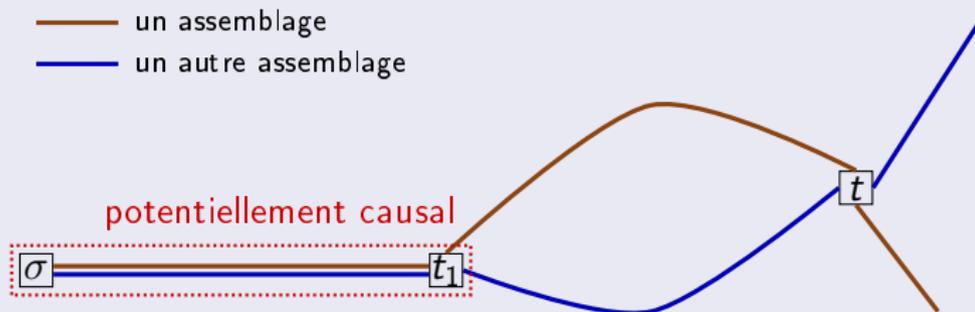
Pour tout site (position de \mathbb{Z}^2), s'il y a une tuile dans deux assemblages, alors c'est la même tuile



- \rightsquigarrow unique assemblage maximal (α_{max})

Confluent (a.k.a. directed)

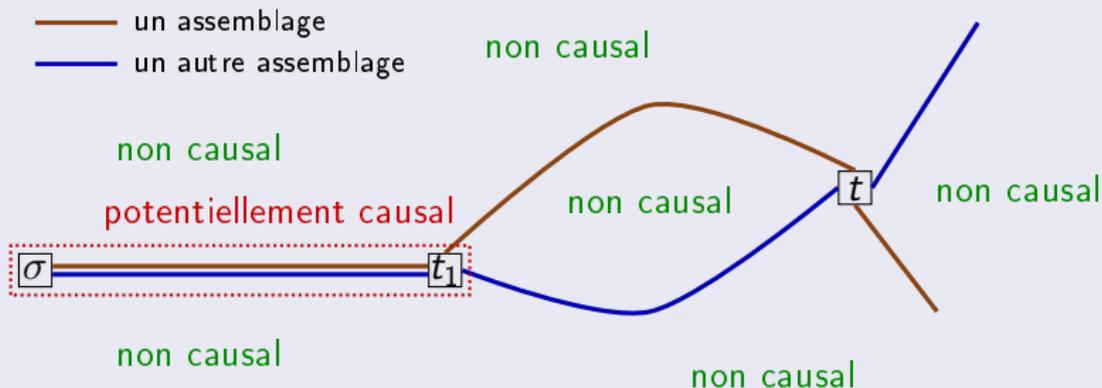
Pour tout site (position de \mathbb{Z}^2), s'il y a une tuile dans deux assemblages, alors c'est la même tuile



- \rightsquigarrow unique assemblage maximal (α_{max})
- causalité pour un site : « graine » sur espace non causal

Confluent (a.k.a. directed)

Pour tout site (position de \mathbb{Z}^2), s'il y a une tuile dans deux assemblages, alors c'est la même tuile



- \rightsquigarrow unique assemblage maximal (α_{max})
- causalité pour un site : « graine » sur espace non causal

1 Introduction

2 Définitions

- Modèle
- Outils

3 Cas simple

4 Autre cas

5 Conclusion

Chemin libres (*Free paths*)

- L'ensemble des sites est \mathbb{Z}^2
- \mathbb{Z}^2 est regardé comme un graphe (4-voisins)
- Les chemins peuvent être infinis de chaque coté

Chemin libre : chemin non attaché

- séquence de **n**, **e**, **s** et **w**
- forme un chemin si on fixe un premier site
- **nwnw** est un chemin libre
- **ns** et **nesw** n'en sont pas (marches et non chemins)

Retournement d'un chemin libre

- $\overleftarrow{\mathbf{s}} = \mathbf{n}$
- $\overleftarrow{\mathbf{sse}} = \mathbf{wnn}$

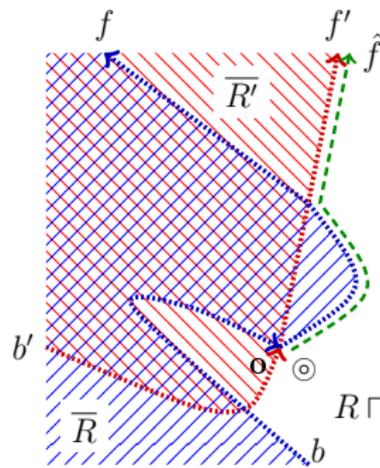
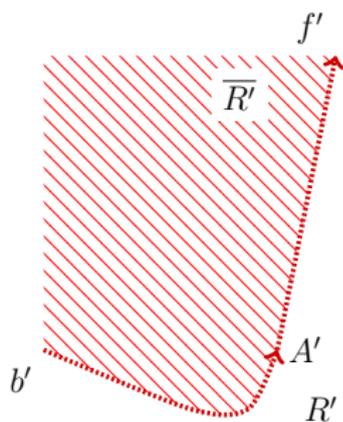
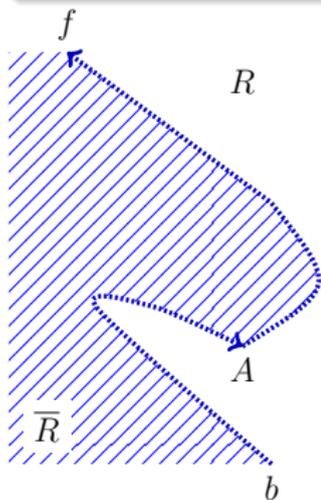
Attachement des chemins libres

- $(0,0).\mathbf{nes}$ chemin commençant en $(0,0)$
- $(0,0).\mathbf{nes}.\mathbf{(1,0).ss}$ est un chemin valide
- $(0,0).\mathbf{nes}.\mathbf{(10,10).ss}$ n'est pas un chemin

Croissance conjointe (*Co-growth*)

Entrée : b, f, b' et f' Sortie : chemin libre \hat{f}

- les 4 sont des chemins libres infinis
- bf et $b'f'$ sont des chemins bi-infinis
- f et f' ont le même premier déplacement élémentaire



Propriétés

Équivalents

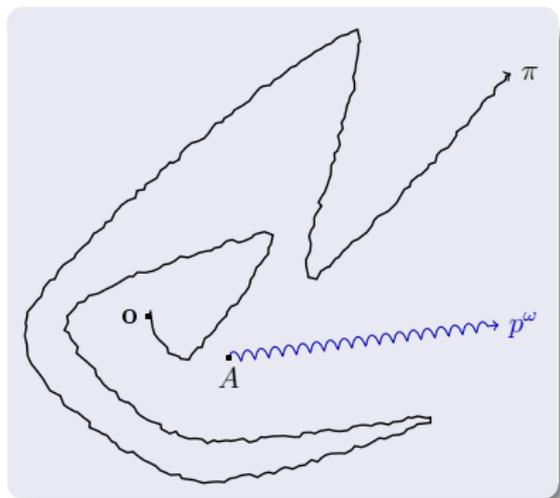
- \hat{f} est infini
- $\exists g$ chemin libre infini tel que $(0,0).g$ est dans R et R'

Lemme d'assemblage conjoint

- Si
 - f, f', b et b' vérifient les conditions de croissance conjointe
 - $A.f$ et $A'.f'$ sont dans (le graphe de) α_{max}
 - même tuile en A et en A'
 - la région droite de $b.A.f$ ne contient rien de causal pour A
 - la région droite de $b'.A'.f'$ ne contient rien de causal pour A'
- Alors
 - $A.\hat{f}$ et $A'.\hat{f}$ sont dans α_{max}

- 1 Introduction
- 2 Définitions
- 3 Cas simple**
- 4 Autre cas
- 5 Conclusion

- Si il existe
 - π chemin infini (depuis le graine) dans α_{max}
 - un site A et un chemin libre non nul p tel que $A.p^\omega$ existe et n'intersecte pas π
- Alors
 - α_{max} contient un chemin ultimement périodique

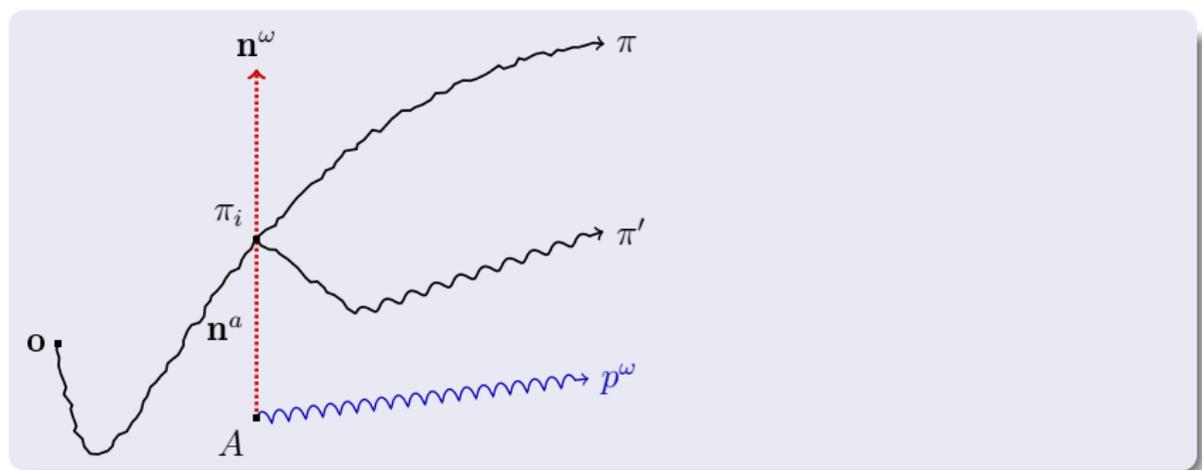


Sans perte de généralité

- p s'étend vers l'est
- π s'étend infiniment à l'est au nord de $A.p^\omega$

N.B.

- π peut aussi s'étendre infiniment dans toutes les directions

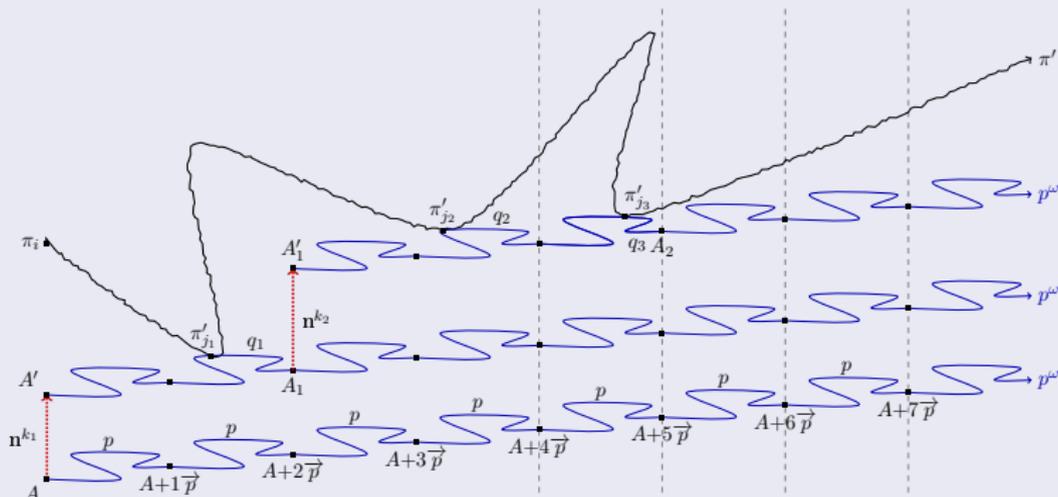


On définit

- π_i première (sur π) intersection entre π et $A.n^\omega$
- π' chemin infini
 - appartient à α_{max}
 - part de π_i
 - contenu dans la région droite de ${}^\omega \overleftarrow{p}.A.n^a.\pi_{i+}$
 - il n'existe pas d'autre chemin infini strictement contenu dans la région droite de ${}^\omega \overleftarrow{p}.A.n^a.\pi'$

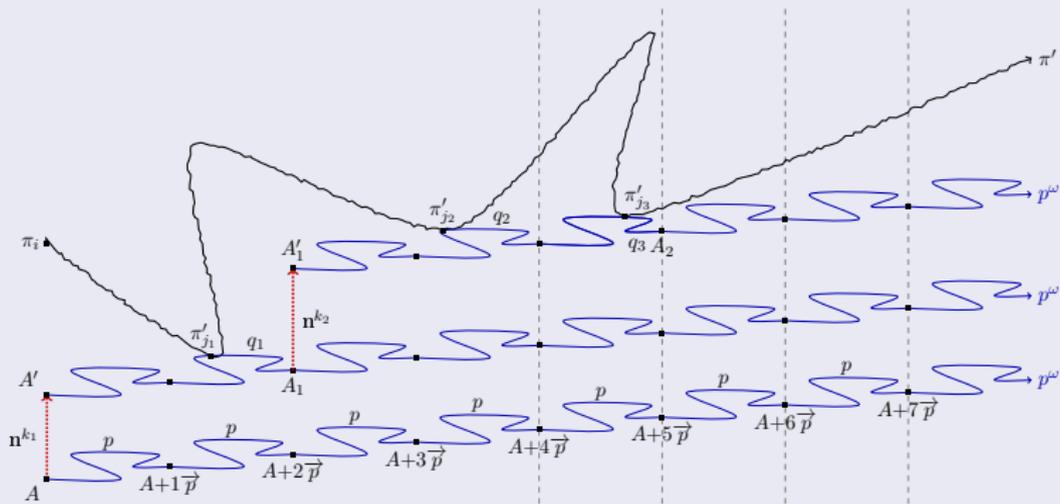
Points d'intérêt sur π

- touchent $(a + k.n).p^\omega$ mais π ne le traverse pas ensuite



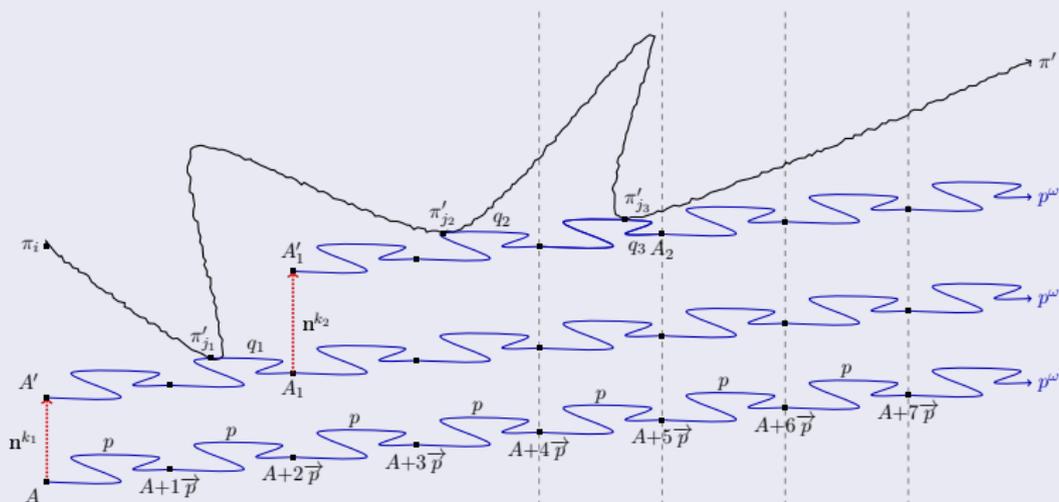
Points d'intérêt sur π

- touchent $(a + k \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{p}^\omega$ mais π ne le traverse pas ensuite



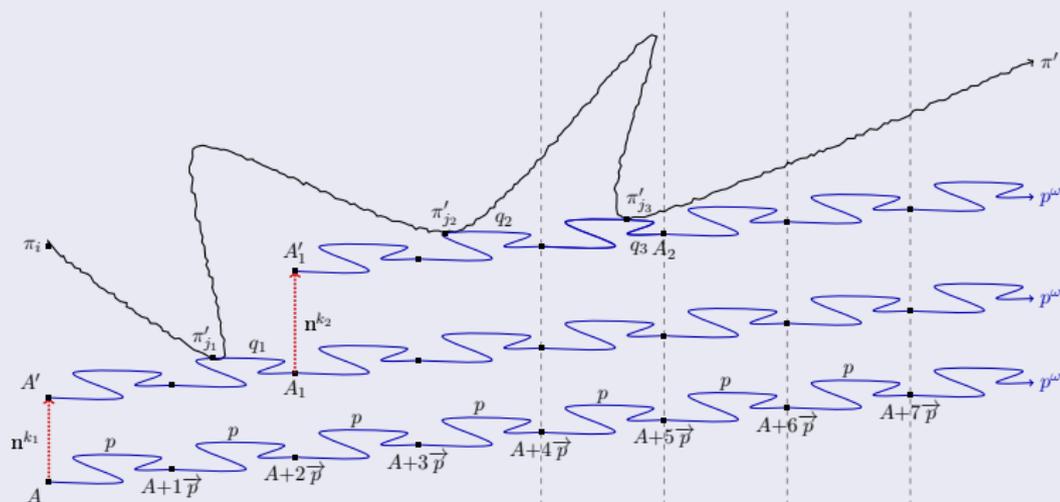
Infinité de points d'intérêt

- 2 avec même tuile, même sortie et même phase
- \rightsquigarrow indices k_1 et k_2



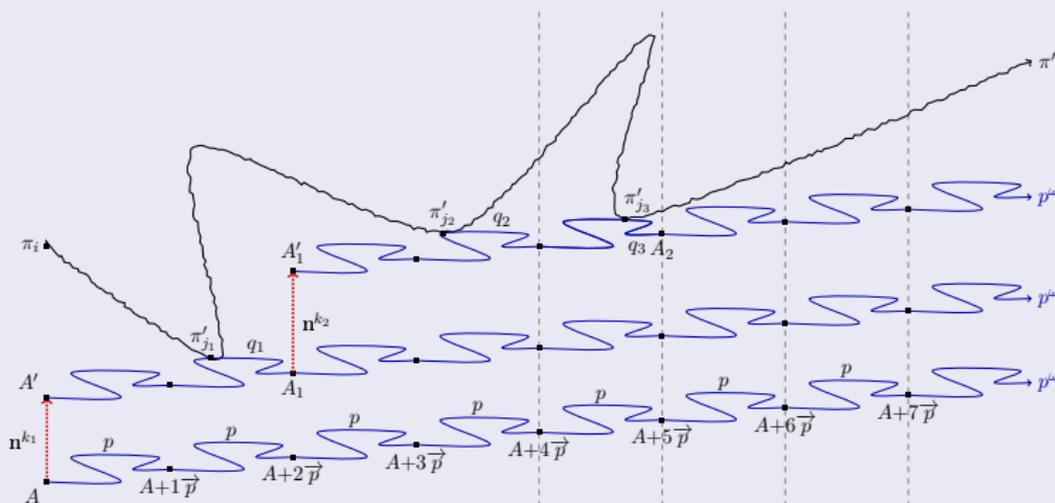
Croissance conjointe depuis k_1 et $k_2 \rightsquigarrow f$

- deux régions non causales
- $\pi'_{k_i} \cdot p^\omega$ dans les deux régions



Croissance conjointe depuis k_1 et $k_2 \rightsquigarrow f$

- deux régions non causales
- $\pi'_{k_i} \cdot p^\omega$ dans les deux régions
- $\pi'_{+k_1} \cdot f$ et $\pi'_{+k_2} \cdot f$ sont dans α_{max}



Croissance conjointe depuis k_1 et $k_2 \rightsquigarrow f$

- deux régions non causales
- $\pi'_{k_i} \cdot p^\omega$ dans les deux régions
- $\pi'_{+k_1} \cdot f$ et $\pi'_{+k_2} \cdot f$ sont dans α_{max}
- par définition de π' : $\pi' = \pi'_{+k_1} \cdot f = \pi'_{+k_2} \cdot f$
 $k_1 \neq k_2 \rightarrow \pi'$ ultimement périodique

- 1 Introduction
- 2 Définitions
- 3 Cas simple
- 4 Autre cas**
- 5 Conclusion

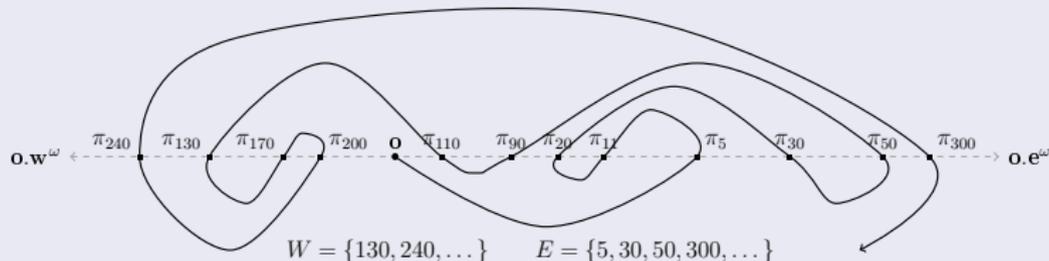
Contexte

α_{max} est infini

- il existe un chemin infini dans α_{max} (lemme de Kőenig)

Pas le cas simple

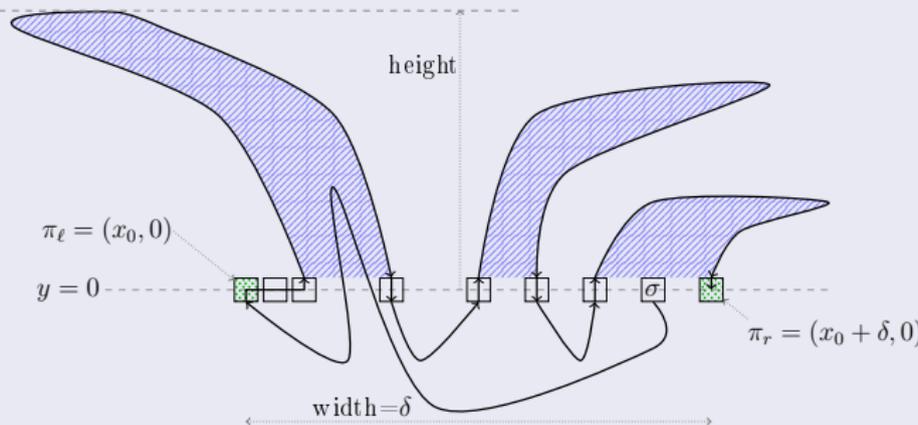
- il n'existe aucun chemins infinis dans α_{max} , A et $p \dots$
- en particulier
 - infinités d'intersections entre π et $\mathbf{o.w}^\omega$ ($\mathbf{o.e}^\omega$)



- infinité de chemins allant d'un coté à l'autre au dessus avec graine au dessous, aussi haut que l'on veut

Chemin dépassant le mur (x_0, δ) dans α_{max}

Définition



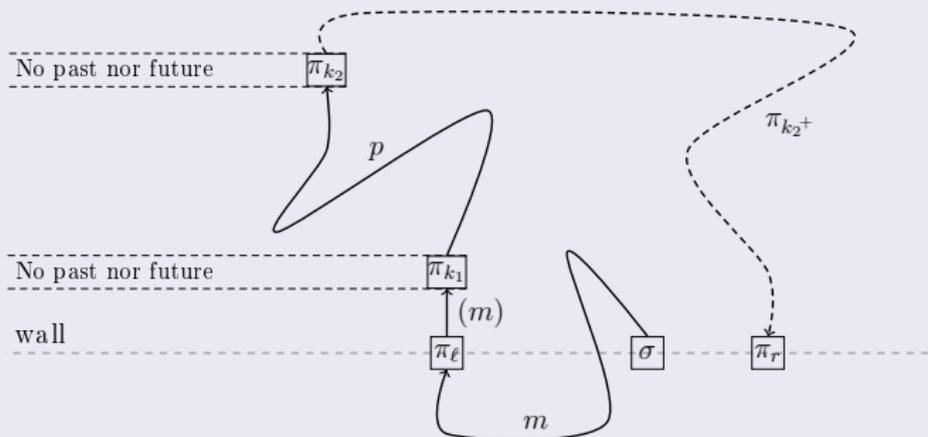
Propriété (retour au cas simple)

- si, pour x_0 et δ , l'aire des chemins dépassant le mur n'est pas bornée
- alors il y a un chemin infini de α_{max} qui intersecte finiment $\mathbf{o.w}^\omega$

Sinon, pour chaque x_0 et δ (par composition)

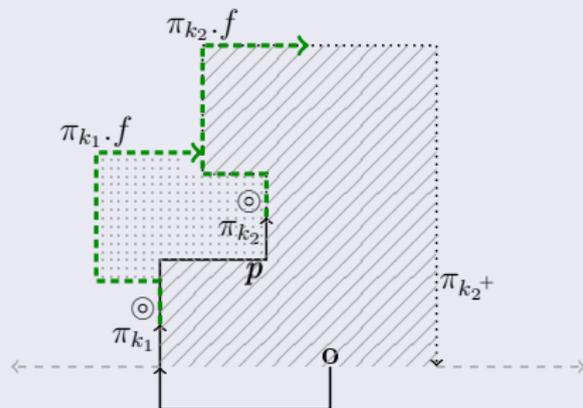
- il existe un unique chemin de surface maximale
- sa hauteur est aussi maximale

Points d'intérêt

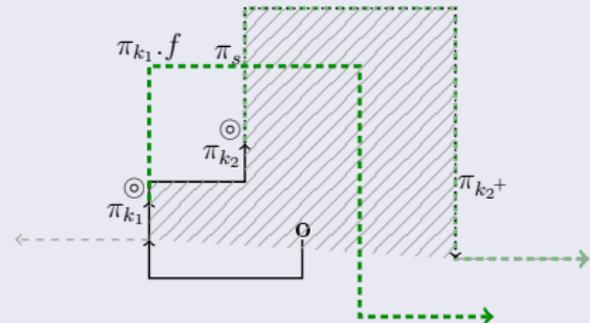


- x_0 et δ telle que la hauteur soit suffisamment haute pour en avoir deux compatibles pour croissance conjointe (ωe et e^ω)
- dans la partie non causale \Rightarrow chemins produits assemblables

Études de cas — 1

Différent de f et de f' 

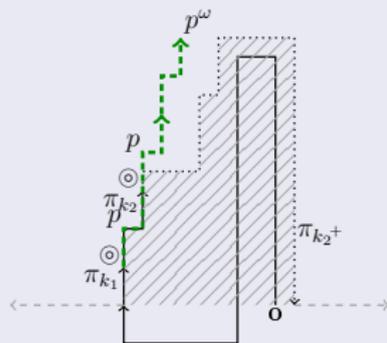
- aire plus grande

Égal à f' 

- impossible

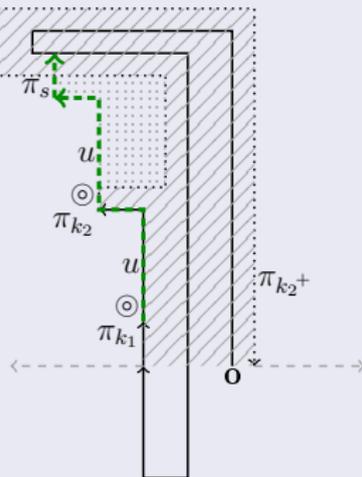
Études de cas — 2

- la partie entre les deux se répète et des donc pompable (dans \mathbb{Z}^2)

Pompable dans α_{max} 

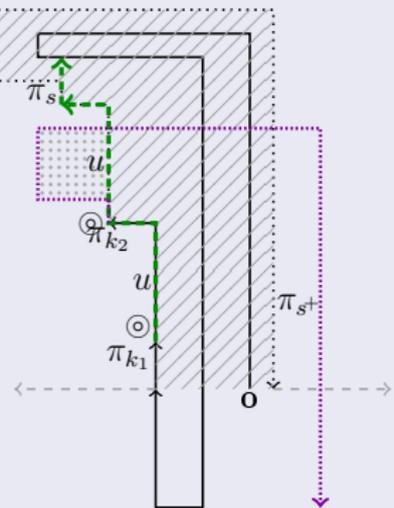
- CQFD

Élargie l'aire



- aire plus grande

Démarrer reste plus tôt



- aire plus grande

- 1 Introduction
- 2 Définitions
- 3 Cas simple
- 4 Autre cas
- 5 Conclusion**

Résultats

Théorème

- pour tout système d'auto-assemblage de tuiles confluent en dimension 2 et température 1, si l'assemblage maximal est infini alors il contient un chemin ultimement périodique.

Lemme utile

- pour tout système d'auto-assemblage de tuiles confluent en dimension 2 et température 1, dont l'assemblage maximal est infini
- il existe un chemin infini assemblable ultimement périodique entre tout chemin assemblable infini et un chemin périodique (ayant un nombre fini d'intersections)

Perspectives

Structures possibles (exhaustivité ?)

- bi-périodique sans deux dimensions avec une erreur finie
- union fini de peignes
- [Doty et al., 2011] les explorent très bien

Structure pour exploration gloutonne : quipu [Durand-Lose et al., 2019]

- algorithme pour découvrir la structure
- terminaison

Ne peut pas calculer [Durand-Lose et al., 2019]

- obtention d'une description finie d' α_{max} en temps fini
- tout est décidable (semi-linéarité)



Adleman, L. M. (1994).

Molecular computation of solutions to combinatorial problems.

Science, 266(5187):1021–1024.



Chen, J. and Seeman, N. C. (1991).

Synthesis from dna of a molecule with the connectivity of a cube.

Nature, 350(6319):631–633.



Doty, D., Patitz, M. J., and Summers, S. M. (2011).

Limitations of self-assembly at temperature 1.

Theoretical Computer Science, 412(1–2):145–158.



Durand-Lose, J., Hoogeboom, H. J., and Jonoska, N. (2019).

Deterministic 2-dimensional temperature-1 tile assembly systems cannot compute.

arXiv 1901.08575, 50 pages.



Durand-Lose, J., Hoogeboom, H. J., and Jonoska, N. (2022).

Deterministic non-cooperative binding in two-dimensional tile assembly systems must have ultimately periodic paths.

arXiv 2202.05165, 26 pages.



Meunier, P. and Regnault, D. (2016).

A pumping lemma for non-cooperative self-assembly.

arXiv 1610.07908, 205 pages.



Meunier, P., Regnault, D., and Woods, D. (2020).

The program-size complexity of self-assembled paths.

In Makarychev, K., Makarychev, Y., Tulsiani, M., Kamath, G., and Chuzhoy, J., editors, *Proceedings of the 52nd Annual ACM SIGACT Symposium on Theory of Computing, STOC 2020, Chicago, IL, USA, June 22-26, 2020*, pages 727–737. ACM.



Rothemund, P. W. K. and Winfree, E. (2000).

The program-size complexity of self-assembled squares (extended abstract).

In Yao, F. F. and Luks, E. M., editors, *Proceedings of the 32nd Annual ACM Symposium on Theory of Computing (STOC)*, pages 459–468. ACM.