维度、扩散和有向性对基于瓦片的自组装中跨模型内在模拟的影响

DanielHader ！计算机科学与计算机工程系，阿肯色大学，美国

Matthew J. Patitz ✉计算机科学与计算机工程系，阿肯色大学，美国

摘要

当一组杂乱无章的组件自主组合形成结构，并且根据其设计和系统动力学，被迫以内在方式遵循算法的执行时，就会发生算法自组装。受 DNA纳米技术应用的推动，算法基于瓦片的自组装理论研究已发展为一门成熟的理论；研究者广泛借助可计算性理论、复杂性理论、信息论和图论中的工具，开发出种类繁多的模型，并证明其中许多模型具有计算普适性，同时揭示了各模型的多种能力与局限。除了计算普适性之外，研究还证明抽象瓦片组装模型（aTAM）具有内在普适性（FOCS 2012）。这是一种强完备性概念，意味着单个瓦片集能够模拟该模型中所有系统的完整动力学；然而，这一结果从根本上依赖于非确定性瓦片附着。后来，当研究证明有向 aTAM 系统类并非内在普适时，这一条件也被证实是必要的。有向 aTAM 系统是指所有可能的瓦片附着序列最终都会产生相同终端组装体的系统（FOCS 2016）。此外，研究还证明，非协作aTAM（其中瓦片只需在一侧而非两侧或更多侧匹配即可结合）既不具有内在普适性（SODA 2014），也不具有计算普适性（STOC 2017）。在这些成果的基础上，为进一步研究其他动力学因素的影响，Hader等人考察了若干瓦片组装模型，这些模型在以下方面有所不同：（1）所用维度的数量；（2）对瓦片在空间中扩散的限制；（3）各系统是否有向；并确定了哪些模型具有内在普适性（SODA 2020）。这些成果让我们深入了解了瓦片组装动力学的不同方面所发挥的作用，以及它们对各模型普适性的影响。本文在先前工作的基础上，通过考察模型间的内在模拟，直接比较各种模型。我们的结果表明，在某些情况下，一个模型的能力严格强于另一个模型；而在另一些情况下，两个模型则各自具备对方不具备的能力。这种对模型的直接比较有助于揭示自组装系统这三个重要方面的影响，并进一步构建瓦片组装模型层级，与传统计算模型中研究的层级相类似。

2012 ACM学科分类 计算理论 → 问题、归约与完备性

关键词与短语 瓦片组装、瓦片、aTAM、内在模拟、模拟

数字对象标识符 10.4230/LIPIcs...

资助 *Daniel Hader*：部分获得美国国家科学基金会 CAREER-1553166 项目资助。*Matthew J. Patitz*：部分获得美国国家科学基金会 CAREER-1553166 项目资助。

©Daniel Hader 和 Matthew J. Patitz；根据知识共享署名 4.0 国际许可协议授权。莱布尼茨国际信息学会议录，达格施图尔城堡——莱布尼茨信息学中心，Dagstuhl 出版社，德国

LIPICS

arXiv:2305.01877v2 [cs.CG] 4 May 2023

XX:2 基于瓦片的自组装中的内在跨模型模拟

1 引言

自组装系统是指这样一类系统：无组织的简单组件集合通过随机运动和局部相互作用，自发结合形成复杂且有序的结构。从晶体化原子形成的整齐、周期性排列，到发育中生物体内分裂细胞之间稳健的协调，这类系统是自然界诸多复杂性的来源，也是许多研究领域高度重视的课题。其中包括DNA纳米技术领域：人工DNA链被用作结构单元，根据DNA碱基配对的动力学进行自组装。过去数十年间，该领域在利用自组装的力量以极高精度创造微观结构 [3, 10, 12, 18] ，乃至在纳米尺度执行算法任务 [4, 6, 13, 14, 17, 20, 24, 25]方面取得了巨大成功。由于难以准确且低成本地对DNA的化学过程建模，人们提出了各种简化模型，以促进基于DNA的自组装系统的设计。其中较为流行且有效的是瓦片组装（TA）模型。在这类模型中，由数条相互结合的DNA链构成的组件会暴露出一些较小的未结合部分，其他组件可与这些部分结合；这些组件被抽象表示为几何瓦片，其带有标记的侧面依据预先定义的亲和规则彼此连接 [5, 16, 22]。这类模型的优势不仅在于其作为设计工具的成功，还在于它们与计算机科学中已被广泛研究的现有模型（如王氏瓦片和元胞自动机）具有相似性。这种相似性也并非巧合；最早提出的瓦片组装模型——抽象瓦片组装模型（aTAM）——至少部分旨在证明，基于DNA的自组装动力学具有算法通用性 [22]。因此，DNA纳米技术与计算理论之间存在独特的联系；理论研究者经常借鉴复杂性、可计算性和信息论中的思想，研究诸多问题，例如哪些结构能够通过自组装形成、组装不同形状的相对难度，以及模型动力学的变化如何影响其算法能力。

本文尤其关注后一个问题。与较为传统的计算模型一样，我们通常通过证明一个模型是否能够模拟另一个模型的所有系统来研究这类问题。不过，我们必须谨慎定义“模拟”，因为证明许多 TA 模型具有通用计算能力通常相当简单。因此，大多数 TA 模型都能够“模拟”其他所有模型，因为它们可以模拟图灵机，而图灵机又能够模拟其他模型。要想了解两个模型相对能力的一些有用信息，

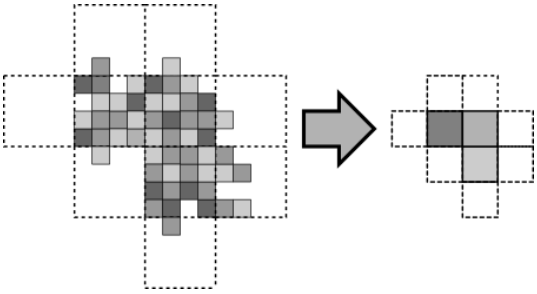

图 1 在内在模拟中，会模拟单个瓦片附着的动态过程，使得模拟系统中的瓦片块在相应尺度上“看起来像”单个瓦片。

因此，对于 TA 模型，我们必须考虑瓦片组装动力学的几何结构。为此，我们借鉴元胞自动机理论中的一种工具，即 内在模拟。为了使模拟具有 内在性，我们要求模拟不能仅仅是符号层面的（即图灵机通过在其纸带上将瓦片的内部表示存储为符号，从而模拟 aTAM 系统的方式），而必须是几何层面的，即模拟系统中的瓦片块与被模拟系统中的单个瓦片相对应，并且这些瓦片块中的瓦片附着顺序遵循被模拟系统中的相应顺序，其缩放因子为一个固定值。

换言之，如果我们充分“缩小视野”，这种模拟看起来就会与被模拟的系统完全相同。这种方法并非我们的结果所独有；事实上，瓦片组装中的内在模拟理论已经相当成熟，并由此形成了“某种关于自组装的计算复杂性理论” [23]。这类工作对于刻画 TA 模型的相对能力发挥了重要作用，也让人们更深入地理解了如何利用不同的动力学来实现相同的算法目的。

1.1 我们的结果

为了尝试扩展此前有关内在模拟的若干结果，我们在此考察 aTAM 的 3 种特定变体：维度，即同时考虑二维和三维系统；扩散，即瓦片不能附着在先前已附着瓦片所包围的区域中；以及有向性，即系统中的瓦片附着必须恰好产生一个终端组装体。需要指出的是，这些变体并非任意选取。有向系统与无向系统之间的差异，类似于确定性算法与概率算法之间的差异；除此之外，这一区别还在形状组装复杂性的研究中发挥作用 [21, 9]。另一方面，扩散限制常用于让三维瓦片组装模型更加“真实”，方法是将瓦片附着限制在瓦片能够合理扩散到达的位置（即不在被其他瓦片完全包围的区域中）。这些变体可以任意组合引入 aTAM，从而得到 8 种不同的模型；考虑这 8 种模型的所有有序对，便得到一个包含 64 个条目的表格，每个条目都代表一个模型是否能够对另一个模型的动力学进行内在模拟。总的来说，关于这些跨模型模拟 的结果十分复杂，涉及精巧的瓦片组装构造和反例；因此，过去的文献仅证明了其中少数条目。

在本文中，我们填补了相当数量的空缺项。表1列出了我们的结果，以及以星号标示的既有结果。其中，各项标记用于表示行标题中的模型是否能够模拟列标题中的模型。当然，有少数几项的答案显而易见；对于这些情况，我们将其作为带有论证的观察结果陈述，而不是完整的定理。不过，我们的许多结果都明显并非显然可得，其中一些甚至颇为出人意料。例如，尽管我们最初猜测，受扩散限制的 aTAM 版本（即平面异步瓦片组装模型或 PaTAM）正如其名称所暗示的那样，是 aTAM 的较弱版本，但我们发现，这两个模型都展现出了对方无法模拟的动力学。尽管该表仍缺少少数几项，我们的工作已将已知项的数量从此前已发表文献中的16项提升至52项（其中8项在技术上并未被明确陈述，但根据 [7] 中给出的瓦片集和证明，它们属于显然的观察结果）。[1] 本文其余部分的安排如下。第2节给出所使用的各种模型和概念的定义。随后，第3节明确陈述我们的结果，并概述其证明。该节或许是最重要的部分，因为我们将在其中直观地解释我们的结果，并描述这些结果如何由模型的动力学推导出来。然后，我们将在第4节给出结果的完整证明和技术细节。

[1] 还应注意，剩余未知项中大多数都涉及对有向扩散受限系统的模拟。虽然我们希望今后能补齐这些项，但我们猜想其证明会相当复杂，因为模拟扩散受限系统并不容易，而且在有向系统中通常更难找到反例。

XX:4 基于瓦片的自组装中的内在跨模型模拟

		aTAM		PaTAM	
		all	**dir**	**all**	**dir**
aTAM	**all**	是* [2]		no（定理 11，观察 5）	?
	dir	否（定理 9）	否* [8]		?
PaTAM	**all**	否（定理 10，观察 5）		否* [7]	是（定理 13）
	dir			否（定理 9）	否* [7]
3DaTAM	**all**	是†(观察 7)		?	?
	dir	否（定理 9）	是†(观察 7)	否（定理 9）	?
SaTAM	**all**	是†(观察 7)		?	?
	dir	否（定理 9）	是†(观察 7)	否（定理 9）	?

		3DaTAM		SaTAM	
		all	**dir**	**all**	**dir**
aTAM	**all**	否（观察 6）			
	dir				
PaTAM	**all**				
	dir				
3DaTAM	**all**	是* [7]		no（定理 12，观察 5）	?
	dir	否（定理 9）	是* [7]		?
SaTAM	**all**	是†(观察 8)		是* [7]	?
	dir	否 (定理 9)	是†(观察 8)	否（定理 9）	?

表1 我们的结果汇总表，说明行所对应的模型能否内在模拟列所对应的模型。PaTAM 是平面异步瓦片组装模型，3DaTAM 是三维抽象瓦片组装模型，SaTAM 是空间异步瓦片组装模型（完整定义见第2.2节）。*All* 指模型中所有系统的集合，*dir* 指有向系统的子集。带星号（*）的单元格表示已有结果，带匕首号（†）的单元格表示利用已有结果中的瓦片集得到的显然结论。其余结果均为新的结果。

2 预备定义

在本文中，我们将使用 $\mathbb{Z}$、 $\mathbb{Z}^+$ 和 $\mathbb{N}$ 分别表示整数集、正整数集和非负整数集。我们还假设 $\mathbb{Z}^d$ 具有晶格图的附加结构，使得每个点都是一个顶点，并且当且仅当两个点之间的欧几里得距离为1时，这两个点相邻（即共享一条边）。

2.1 抽象瓦片组装模型的定义

本节定义二维和三维空间中的抽象瓦片组装模型。我们将用缩写 $aTAM$ 指代二维模型，用 $3DaTAM$ 指代三维模型。这些定义取自 [7]，并且我们指出，对于不熟悉该模型的读者，[19] 是很好的入门介绍。

固定 $d \in \{2,3\}$ 为维数，并令 Σ 为包含其有限字符串的某个字母表。一个粘合剂 $g \in \Sigma^* \times \mathbb{N}$ 由一个有限字符串标签 和一个非负整数强度组成。一个瓦片类型 是一个元组 $t \in (\Sigma^* \times \mathbb{N})^{2d}$，可以将其视为每一侧都带有粘合剂的单位正方形或立方体。一个瓦片集 是由有限个瓦片类型构成的集合。我们始终假设瓦片类型的集合是有限的，但允许每种瓦片类型有无限多个副本占据 $\mathbb{Z}^d$格点中的位置，每个副本称为一个瓦片。

给定一个瓦片集 T，构型 是晶格 $\mathbb{Z}^d$ 中瓦片的一种排列（可以为空），即一个偏函数 $\alpha : \mathbb{Z}^d \dashrightarrow T$。构型中的两个相邻瓦片会发生相互作用，

或结合或附着，前提是它们相邻侧面的胶水标签和强度均相等，且强度为正。每个构型 α 都会导出一个结合图 B_α，其顶点是被瓦片占据的点；如果两个顶点对应的瓦片以强度 s相互作用，则这两个顶点之间存在一条权重为 s 的边。一个组装是指其定义域（作为图）连通且非空的构型。组装 α 的形状 $S_\alpha \subseteq \mathbb{Z}^d$ 是指 α的定义域。对于某个 $\tau \in \mathbb{Z}^+$，如果组装 α 的每个割的权重都至少为 τ，则称其为 τ-稳定的，即 τ-稳定的组装无法在不分离相互结合且共享胶水的累积强度为 τ的瓦片的情况下被拆分为两个部分。给定两个组装 α，β，如果满足 $S_\alpha \subseteq S_\beta$，且对于所有 $p \in S_\alpha$，$\alpha(p) = \beta(p)$，则称 α 是 β 的一个子组装（记作 $\alpha \sqsubseteq \beta$）。

瓦片组装系统（TAS）是一个三元组 $\mathrm{T} = (T, \sigma, \tau)$，其中 T是一个瓦片集，σ 是一个有限的τ-稳定组装体，称为种子组装，$\tau \in \mathbb{Z}^+$ 称为结合阈值。给定一个瓦片组装系统 $\mathrm{T} = (T, \sigma, \tau)$ 和两个 τ-稳定组装体 α和 β，如果 αT -在一步内生成 β（记作 $\alpha \to_1^{\mathcal{T}} \beta$），则称 α v β 且 $|S_\beta \setminus S_\alpha| = 1$。也就是说，$\alpha \to_1^{\mathcal{T}} \beta$ 当且仅当 β 与 α的区别在于增加了一个瓦片时成立。T -前沿是集合 $\partial^{\mathcal{T}}\alpha = \bigcup_{\alpha \to_1^{\mathcal{T}} \beta} S_\beta \setminus S_\alpha$，其中包含瓦片可以稳定附着到 α上的位置。

我们使用 A^T 表示瓦片集 T 中所有瓦片组装体的集合。给定一个瓦片组装系统 $\mathrm{T} = (T, \sigma, \tau)$，由 A^T 中的一系列 $k \in \mathbb{Z}^+ \cup \{\infty\}$ 组装体 $\alpha_0, \alpha_1, \ldots$ 构成的序列称为 T-组装序列，若对于所有 $1 \le i < k$, $\alpha_{i-1} \to_1^{\mathcal{T}} \alpha_i$ 均成立。组装序列的结果是该序列唯一的极限组装。对于有限组装序列，该结果就是最终组装；而对于无限组装序列，该结果则是由序列中任意组装体的所有瓦片构成的组装体。若存在一个以 α 开始且结果为 β 的 T-组装序列，我们称 α 可由 T 生成 β（记作 $\alpha \to^{\mathcal{T}} \beta$）。若 α 可由 T 生成，则称其为 T-可生成组装体，并记作 A[T]，表示 T-可生成组装体的集合。若 α 是 T-终端组装体，则 α 是 τ-稳定的，且不存在任何可由 α 生成的组装体。我们用 $\mathrm{A}_\square$[T] 表示 T-可生成且 T-终端组装体的集合。

根据上下文可以明确时，我们可以省略上述记号中的$\mathcal{T}$。

协作附着

给定一个瓦片组装系统$\mathcal{T} = (T, \sigma, \tau)$，瓦片要附着到组装体上，必须匹配粘合剂，使其累积强度至少达到 τ，从而形成一个 τ-稳定的组装体。例如，如果匹配的某个粘合剂强度至少为 τ，就可能发生这种情况；此时，其他任何匹配的粘合剂都是多余的。或者，即使没有任何强度为 τ的粘合剂，瓦片仍然可以附着，但这需要匹配多个粘合剂，且它们的强度之和至少为 τ。我们将此类附着称为协作附着。

2.2 模型变体

本文考虑 aTAM 的 3 种变体。除 3D aTAM 外，还包括模型的有向版本和扩散受限版本。若瓦片组装系统$\mathcal{T}$满足$|\mathcal{A}_\square[\mathcal{T}]| = 1$，即$\mathcal{T}$只允许产生唯一的终端组装体，则称其为有向系统。当我们提到有向模型时，指的就是某个模型中的所有有向系统的集合。有向系统对于自组装十分理想，因为我们通常希望瓦片生长成单一的目标形状。

对于扩散受限模型，我们注意到，在 aTAM 中，瓦片可以附着在一个已被其他瓦片完全包围的空间区域内。在二维空间中，我们可以设想瓦片能够通过组装体周围的 3rd 维度进行移动，但在三维空间中，这种附着方式则难以得到合理解释。因此，我们还考虑了禁止此类附着的模型。在二维空间中，这种限制可以模拟水滴表面的自组装过程，其中表面张力会阻止各个组成部分.....

无法利用 3rd 维度的优势。我们将二维扩散受限 aTAM 称为平面异步瓦片组装模型 或 PaTAM，将三维扩散受限 aTAM 称为空间异步瓦片组装模型或 SaTAM。在这些模型及其有向子类中，我们将被完全包围的区域（不允许发生瓦片附着）称为受限区域。为了对这一限制进行形式化建模，我们首先注意到，给定一个有限的 d 维组装 α，图 $\mathbb{Z}^d \setminus S_\alpha$ 由有限个连通分支组成，其中恰有一个分支的大小为无限。我们称该分支图为 α 的外部区域，而有限大小的分支则为受限区域。在扩散受限系统中，我们只允许瓦片在组装的外部区域发生附着。

2.3 内在模拟

首先，我们给出内在模拟这一概念的高层定义，这应足以帮助理解我们的结果。随后将给出完整的技术定义。为简洁起见，除非另有明确说明，本文中的“模拟”均指内在模拟。

模拟的高级描述

系统 $\mathcal{T}$由系统 $\mathcal{S}$以缩放因子 m进行模拟，因此，$\mathcal{S}$中的 $m \times m$（或在 3D 中为 $m \times m \times m$）个瓦片块（我们称之为宏瓦片）对应于$\mathcal{T}$中的单个瓦片。对于给定的模拟，我们定义一个宏瓦片表示函数 R，用于描述宏瓦片到瓦片的映射。此外，为方便起见，我们使用 R 定义一个组装表示函数 R^*，将$\mathcal{S}$ 中的整个组装映射到$\mathcal{T}$中的组装；本质上，它会针对$\mathcal{S}$中的给定组装，在每个宏瓦片位置上计算 R。请注意，我们不要求宏瓦片内的所有位置都包含瓦片；包含瓦片的宏瓦片块仍可在 R下映射为空空间。当瓦片附着首次导致某个宏瓦片位置的表示映射到一个瓦片时，我们称此次附着使该宏瓦片得到确定；宏瓦片一旦得到确定，其内部任何额外的瓦片附着都不能改变它在 R 下的表示。虽然我们允许宏瓦片位置映射到空空间，但要使模拟有效，就必须限制$\mathcal{S}$中允许瓦片附着的位置。为了使我们的模拟概念能够有效衡量不同模型的相对能力，我们要求$\mathcal{S}$ 只能在紧邻（不包括对角方向）已得到确定的宏瓦片区域内放置瓦片，并将此类位置称为模糊区。这样一来，$\mathcal{S}$中的瓦片只会附着在可能在有效模拟过程中得到确定的宏瓦片中，因为只有模糊区位置映射到$\mathcal{T}$中的位置，才可能在$\mathcal{T}$中接收瓦片。如果系统类 C 中的所有系统都能由共享同一个瓦片集的另一系统类 C' 模拟（尽管每个系统可以有不同的种子组装），我们就称类 C' 以内在方式模拟 C，并具有一个普适瓦片集。我们也可以说，C' 对于 C是内在通用 (IU)。

模拟的形式化定义

现在，我们为内在模拟给出形式化定义。此处的定义取自 [7]，具体针对三维系统。 [8]中给出了二维内在模拟的类似定义。对于三维系统对二维系统的模拟，我们采用三维定义，并假设二维系统中的所有系统都定义在三维空间中，因此组装体仅占据 $z = 0$ 平面。

从此处起，令 T 为一个瓦片集，缩放因子为 $m \in \mathbb{Z}^+$。定义在 T上的 m-块宏瓦片是一个偏函数 $\alpha: \mathbb{Z}^3_m \dashrightarrow T$，其中 $\mathbb{Z}_m = \{0, 1, \ldots\ldots, m-1\}$。令

B_m^T 为定义在 T上的所有 m-块宏瓦片的集合。定义域为空的 m-块称为空。对于一般组装 $\alpha : \mathbb{Z}^3 \dashrightarrow T$ 以及 $(x', y', z') \in \mathbb{Z}^3$，定义 $\alpha^m_{(x',y',z')}$ 为由 $\alpha^m_{(x',y',z')}(i_x, i_y, i_z) = \alpha(mx' + i_x, my' + i_y, mz' + i_z)$ 针对$0 \leq i_x, i_y, i_z < m$所定义的 m-块宏瓦片。对于某个瓦片集 S，若偏函数 $R : B_m^S \dashrightarrow T$ 满足：对于任意 $\alpha, \beta \in B_m^S$，只要 α v β 且$\alpha \in \text{dom } R$，就有 $R(\alpha) = R(\beta)$，则称其为从 S 到 T 的有效 m- 块宏瓦片表示。

对于给定的从瓦片集 S 到瓦片集T的有效 m块宏瓦片表示函数 R，定义组装表示函数[2] $R^* : \mathrm{A}^S \to \mathrm{A}^T$，使得 $R^*(\alpha') = \alpha$ 当且仅当 $\alpha(x, y, z) = R\left(\alpha'^m_{(x,y,z)}\right)$ 对所有$(x, y, z) \in \mathbb{Z}^3$ 均成立。对于满足$R^*(\alpha') = \alpha$的组装 $\alpha' \in \mathrm{A}^S$，若对所有非空块 $\alpha'^m_{(x,y,z)}$，$(x, y, z) + (u_x, u_y, u_z) \in \text{dom } (\alpha)$，且存在某个$(u_x, u_y, u_z) \in U_3$使得 $u_x^2 + u_y^2 + u_z^2 \leq 1$；或者若$\alpha'$ 至多有一个非空的 m块α_0^m，0，则称其在 R^* 下干净地映射到 $\alpha \in \mathrm{A}^T$。换句话说，α' 可以在表示 α中空空间的宏瓦片块上放置瓦片，但前提是该位置与 α中的某块瓦片相邻。我们将这种生长称为模糊区“边缘周围”的生长，因此将其限制为只能与有效宏瓦片相邻，而不能对角相邻（即不允许出现对角模糊区）。

在以下定义中，设 $\mathcal{T} = (T, \sigma_T, \tau_T)$ 为一个瓦片组装系统，设 $\mathcal{S} = (S, \sigma_S, \tau_S)$ 为一个瓦片组装系统，并设 R 为一个 m-块表示函数 $R : B_m^S \to T$。

▶ **定义 1.** 我们称 S 和 T 具有等价生成 （在 R 下），并记作 $S \Leftrightarrow T$，若满足以下条件：

1. $\{R^*(\alpha') | \alpha' \in A[S]\} = A[T]$. *2.* $\{R^*(\alpha') | \alpha' \in A_\square[S]\} = A_\square[T]$. *3.* 对所有 $\alpha' \in A[S]$，α' 均可干净地映射到 $R^*(\alpha')$。

▶ **定义 2.** 我们称 T 遵循 S（在 R 条件下），并记作 $T \, a_R \, S$，如果对于某些 $\alpha', \beta' \in A[S]$，意味着 $R^*(\alpha') \to^{\mathcal{T}} R^*(\beta')$。

下一个定义实质上规定：每当$\mathcal{S}$ 模拟组装 $\alpha \in \mathcal{A}[\mathcal{T}]$,时，对于$\mathcal{T}$从 α 出发可能采取的每一个下一步，都必须在$\mathcal{S}$ 中至少存在一条有效的生长路径，使其最终得到一个映射到该下一步的$\mathcal{S}$ 组装。遗憾的是，这个定义虽然相当复杂，却涵盖了一些微妙的情况，例如$\mathcal{S}$必须先“承诺”采用$\mathcal{T}$中一部分可能的表示形式，然后才能依据 R将其明确映射到其中某一种。

▶ 定义 *3.* 我们称 S 模拟 T（在 R 下），并记作 $S \models_R T$，当且仅当对于每个$\alpha \in A[T]$,，都存在 $\Pi \subset A[S]$，其中 $\Pi \neq \varnothing$ 且 $R^*(\alpha') = \alpha$ 对所有 $\alpha' \in \Pi$均成立；并且对于每个满足 $\alpha \to^{\mathcal{T}} \beta$的 $\beta \in A[T]$，*(1)* 对于每个 $\alpha' \in \Pi$，都存在 $\beta' \in A[S]$，其中 $R^*(\beta') = \beta$且 $\alpha' \to^{\mathcal{S}} \beta'$；以及 *(2)* 对于每个满足 $\alpha'' \to^{\mathcal{S}} \beta'$的 $\alpha'' \in A[S]$，$\beta' \in A[S]$，$R^*(\alpha'') = \alpha$且$R^*(\beta') = \beta$，都存在 $\alpha' \in \Pi$，使得 $\alpha' \to^{\mathcal{S}} \alpha''$。

▶ **定义 4.** 我们称 S内在模拟T（在 R 下），当且仅当 $S \Leftrightarrow_R T$（等价生成），$T \, a_R S$，且 $S \models_R T$（等价动力学）。

2.4 窗口电影引理

在 [15], 中，作者证明了窗口电影引理。这是一种适用于 aTAM（及其变体）的抽引引理，此后已被广泛用作有力工具，用以证明

[2] 注意，R^* 是一个全函数，因为 S 的每个组装都表示 T的某个组装；函数 R 和 α 是偏函数，以允许未定义点表示空空间。

XX:8 基于瓦片的自组装中的内在跨模型模拟

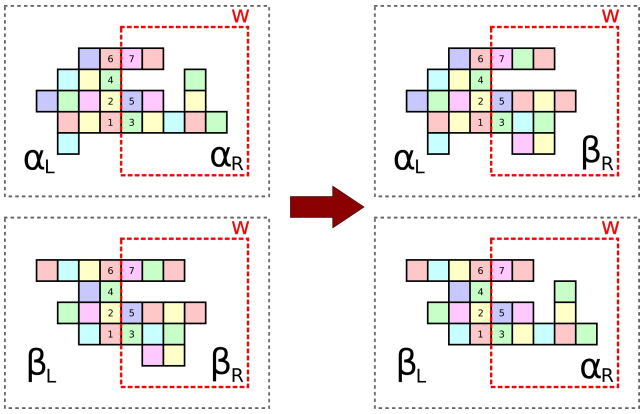

图2 窗口电影引理示意图。左侧是由同一瓦片集生成的两个可生成组装体$\alpha = \alpha_L \cup \alpha_R$和 $\beta = \beta_L \cup \beta_R$，窗口 w将它们分别划分为两个子组装体。对于这两个组装体，窗口 w 具有相同的窗口电影，即瓦片沿窗口呈现粘合剂的顺序；瓦片上的数字表示它们附着的相对顺序。由于窗口区域内的所有生长都只取决于沿窗口呈现的粘合剂，我们可以将这两个组装体拼接起来，得到 $\alpha_L \cup \beta_R$ 或 $\beta_L \cup \alpha_R$ （如右侧所示）。窗口电影引理由此保证这两个组装体都可以生成。

某些瓦片组装模拟是不可能实现的。由于该引理出现在我们的若干证明中，我们先对其作非正式描述，然后再明确陈述。**窗口** 是一个边割，它将晶格图（$\mathbb{Z}^2$ 在二维或 $\mathbb{Z}^3$ 在三维）划分为两个区域。给定某个窗口 w 以及 TAS $\mathcal{T}$中的某个组装序列 $\vec{\alpha}$，**窗口电影** M 定义为组装序列 $\vec{\alpha}$期间，$\mathcal{T}$中的瓦片沿着 w 呈现的胶水所构成的有序序列。非正式地说，如果我们将窗口 w 视为分隔两个瓦片位置区域的一片薄板，并设想沿着组装序列 $\vec{\alpha}$ 逐次进行瓦片附着，那么 M 就是通过记录薄板表面上出现的胶水及其相对顺序构造而成的。更正式地说，**窗口电影** 是序列 $M_w^{\vec{\alpha}} = \{(v_i, g_i)\}$，由网格图顶点 v_i 和胶水 g_i组成的有序对构成，其顺序由窗口 w 上的胶水在 $\vec{\alpha}$期间出现的先后决定。此外，如果胶水 k 在 $\vec{\alpha}$的同一组装步骤中沿着 w 出现，那么这些胶水会连续列出，并按照描述其在 $M_w^{\vec{\alpha}}$中朝向的单位向量的字典序排列。

通俗地说，窗口电影引理指出，发生在窗口所界定区域内的任何瓦片附着，都可以在由相同窗口（经过平移）界定且具有相同窗口电影的区域内发生。这使我们能够将组装序列拼接起来，从而在能够确保存在相同窗口电影的前提下，重复一段瓦片附着序列。图3展示了如何利用窗口电影引理来重复生长。

窗口电影引理。

令 $\vec{\alpha} = \{\alpha_i\}$ 和 $\beta = \{\beta_i\}$ 为瓦片组装系统 $\mathcal{T}$ 中的组装序列，并令 α, β 分别为它们的结果组装体。令 w 为一个窗口，将 α 划分为两个构型α_L 和 α_R；令 $w' = w + \vec{c}$为 w 的平移，将 β划分为两个构型β_L 和 β_R （其中 α_L 和 β_L 分别为包含其种子瓦片的构型）。此外，定义 $M_w^{\vec{\alpha}}$和 $M_w^{\vec{\beta}}$分别为 $\vec{\alpha}, w$和 $\vec{\beta}, w'$的窗口电影。那么，如果 $M_w^{\vec{\alpha}} = M_w^{\beta}$，组装体 $\alpha_L \cup \beta'_R$和 $\beta'_L \cup \alpha_R$（其中 $\beta'_L = \beta_L - \vec{c}$和 $\beta'_R = \beta_R - \vec{c}$）也可以被生成。

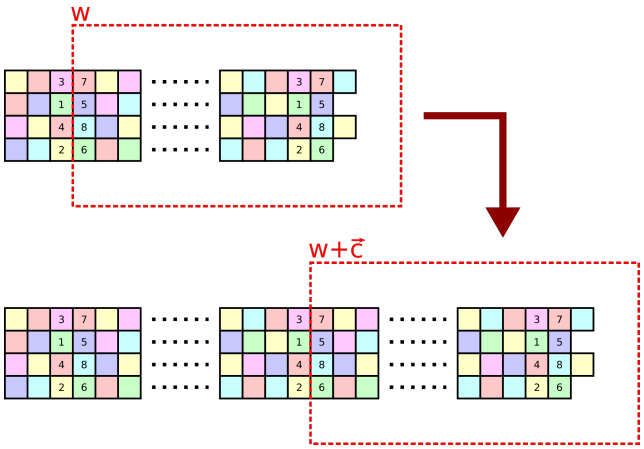

图 3 使用窗口电影引理“泵送”组装序列。顶部的组装图展示了一条水平向右生长的瓦片带，瓦片上的数字表示附着的相对顺序。如果这条瓦片带生长得足够长，那么根据鸽巢原理，最终必然会在其长度方向上存在两个相同的垂直切片。由于窗口 w 内的每次瓦片附着只取决于窗口中的瓦片及其附着的相对顺序，因此我们可以找到一个组装序列，使得生长在第二个相同的垂直切片之后重复。这一过程可以无限进行，从而“泵送”这条瓦片带。

3 结果

本节概述我们的结果。完整证明可从第 4.1 节开始查阅。我们先介绍一些简单的观察，由此可以填补表1中的几个箱体。

▶**注 5**。 如果存在一个瓦片组装模型 M 中的有向系统 T，无法由瓦片组装模型 M'中的任何系统模拟，那么（*1*）存在一个 M中的系统，无法由 M'中的任何系统模拟；（*2*）存在一个 M 中的系统，无法由 M'中的任何有向系统模拟；以及（*3*）存在一个 M 中的有向系统，无法由 M'中的任何有向系统模拟。

▶**观察 6**。 在三维模型（*3DaTAM* 和 *SaTAM*）中，存在一些有向和无向系统，无法由二维模型（*aTAM* 和 *PaTAM*，包括有向和无向模型）中的任何系统进行模拟。

注5成立，因为模型中有向系统的集合是该模型所有系统的子集。因此，$\mathcal{T}$既是 M 中的一个系统，也是 M中有向子集里的一个系统。根据假设，$\mathcal{T}$无法被 M'中的任何系统模拟，因此也无法被 M'的任何系统子集模拟，尤其无法被有向系统子集模拟。关于注6，虽然我们将模拟的概念限制为使用正方形宏瓦片，但已有研究使用由正方形瓦片构成的大致呈六边形的宏瓦片，实现了对三角晶格上系统的模拟 [1], 。因此，人们可能会设想，若放宽模拟的定义，允许使用更复杂的宏瓦片，二维瓦片或许能够呈现三维正方形瓦片的几何结构。然而，就我们的情形而言，根据库拉托夫斯基定理，$\mathbb{Z}^3$ 的晶格图不存在平面嵌入。因此，不可能将 $\mathbb{Z}^2$ 划分为由宏瓦片位置构成的连通区域，同时保留 $\mathbb{Z}^3$ 中各点的邻接关系；即使我们推广宏瓦片的概念，也无法实现模拟。对于任何三维系统，只要其可生成组装体的定义域作为图是非平面的，情况皆是如此；而在所考虑的所有三维模型中，这种情况显然都可能出现。

3.1 使用现有瓦片集进行模拟

在 [7], 中，研究证明存在适用于 3DaTAM、SaTAM 以及这两种模型中有向系统子集的内在普适瓦片集。该研究的重点虽是模型内部的内在模拟，但这些内在普适瓦片集也可直接用于补全表1中的几个空格。首先，我们注意到，任何 aTAM 系统也可以视为 3DaTAM 系统（甚至可以视为 SaTAM 系统，因为只占据三维空间单个平面的瓦片无法约束三维区域），其胶水仅出现在每个瓦片六个面中的四个面上。其次，我们注意到，3DaTAM 和 SaTAM 的内在普适瓦片集仅在少数瓦片类型上有所不同；这些瓦片类型负责在解析之前沿每个宏瓦片的各个面生长一堵墙。在 SaTAM 中实现内在普适性必须如此，因为如果没有这些瓦片，构成宏瓦片的瓦片会稀疏到必然允许瓦片沿扩散路径穿过已解析的宏瓦片。因此，如果不包含这些瓦片类型，那么即使在 SaTAM 中，该内在普适瓦片集也能模拟 3DaTAM 系统，因为没有包围各个宏瓦片的墙，扩散限制不会妨碍任何瓦片的附着。最后，该瓦片集经过专门设计，在模拟有向系统时能够保留其有向性。因此，利用内在普适瓦片集和 [7],中的证明，可得出以下观察结论。

▶**观察7.** 在 *3DaTAM* 和 *SaTAM* 中都存在一个普适瓦片集，可以在保留有向性的前提下，对 *aTAM* 中的所有系统进行内在模拟。

▶**观察8.** *SaTAM* 中存在一个普适瓦片集，可以在保留有向性的前提下，对 *3DaTAM* 中的所有系统进行内在模拟。

3.2 有向系统无法模拟无向系统

▶**定理9.** 在 *aTAM*、*3DaTAM*、*PaTAM* 和 *SaTAM* 中，都存在一些系统，无法由这些模型中的任何有向系统进行模拟。

有向系统只有一个终端组装体，而无向系统可以有多个终端组装体。图4展示了一个简单无向系统的瓦片集和终端组装体$\mathcal{T}$，由于该系统不使用任何这些模型所特有的动力学，因此无需修改即可作为 aTAM、3DaTAM、PaTAM 或 SaTAM 中的系统。由于有向系统只能有一个终端组装体，任何试图模拟$\mathcal{T}$的有向系统都必然会失败，因为任何组装表示函数 R^* 都无法映射

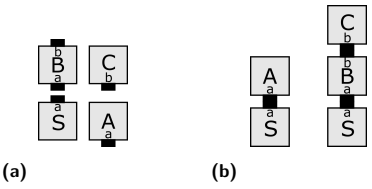

图4 (a) 用于证明定理9的无向系统的瓦片集，以及 (b) 其两个终端组装体。

将一个终端组装体映射到$\mathcal{T}$的两个终端组装体。该证明的形式化处理见第 4.1 节，但其基本思路是相同的。

3.3 PaTAM 无法模拟 aTAM

这里我们证明，存在一些 aTAM 系统，任何 PaTAM 系统都无法对其进行正确模拟。为此，我们利用这样一个事实：aTAM 系统能够在受限区域内生长，而 PaTAM 系统则不能。具体而言，我们证明 PaTAM 无法模拟有向 aTAM；根据注5，这也意味着 PaTAM 无法模拟 aTAM。证明的完整技术细节见第 4.2 节。

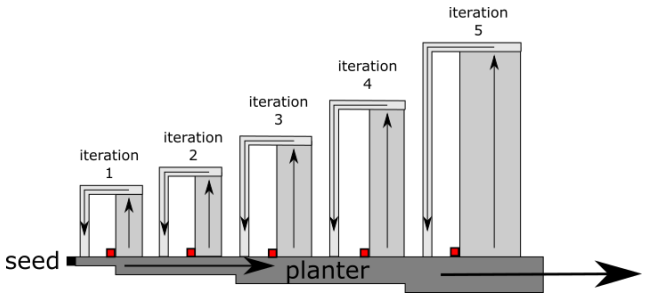

图5 定理10证明中的系统$\mathcal{T}$。一个无限播种器从种子开始向东生长，并启动一系列无限计数器向上的生长过程，每个计数器都比前一个更高。这些计数器会启动单瓦片宽路径，路径先向左生长，然后向下撞入播种器。在每个计数器左侧的底部位置，都可以附着一块红色瓦片。

▶**定理10.** *存在一个系统 T，它是有向 aTAM 系统，因此也是 aTAM 系统，但任何 PaTAM 系统都无法对其进行模拟。*

图5 是$\mathcal{T}$的终端组装体的示意图。$\mathcal{T}$是一个有向 aTAM 系统，我们声称 PaTAM 无法对其进行模拟。请注意，$\mathcal{T}$比这样一种系统更复杂：瓦片附着以受限区域，而该区域内还可以附着另一块瓦片。这是因为内在模拟的定义允许宏瓦片在尚未被瓦片完全填满时就完成解析。因此，虽然宏瓦片可以映射到受限区域的瓦片，但构成宏瓦片的瓦片未必会受限区域。我们的构造旨在确保在某个时刻，任何假定的模拟系统都必须先受限区域，然后其中的瓦片才能附着。在我们的有向 aTAM 系统 $\mathcal{T}$中，这是通过首先启动一个播种器的生长来实现的。该构件向东生长时以二进制递增计数，并在预定间隔处启动高度不断增加的臂的生长。这些臂本质上是二进制计数器构件，每条臂都向上生长至一定距离，该距离由播种器提供的瓦片上的胶水编码；到达指定高度后，它们便启动细臂的生长。细臂只有一个瓦片宽，先向西生长固定距离，再向南生长，直至撞上下面的播种器。通过这一过程，播种器启动的每条臂都会受限越来越大的空间区域；每个区域都包含播种器与臂之间的一个位置，单块瓦片可以在此协作附着（图5 中以红色方块表示）。构成细臂向南生长部分的瓦片都属于同一种瓦片类型，其北面和南面的胶水完全相同。虽然不同的宏瓦片可能映射到 $\mathcal{T}$ 中的同一块瓦片，但构成一个宏瓦片的瓦片组合数量有限。因此，无论缩放因子是多少，只要沿着播种器向下看得足够远，就一定会遇到一条生长得足够高的臂，使得模拟集合必须在同一条细臂上的两个位置重复使用同一种宏瓦片表示。随后，我们可以用窗口电影引理证明，在撞上播种器之前，这条臂会在假定的模拟系统中“泵送”生长。因此，任何模拟 PaTAM 系统都不可能阻止某个区域在其中的宏瓦片完成解析之前变为受限状态，从而产生无法正确映射到 $\mathcal{T}$中终端组装体的终端组装体。

3.4 aTAM 无法模拟 PaTAM

鉴于 PaTAM 只是对瓦片附着增加了限制的 aTAM，PaTAM 无法模拟 aTAM 的完整动力学并不十分令人意外；然而，较不明显的是，平面性限制也 赋予了 PaTAM 一些

aTAM 不具备的能力，即限制某个区域并阻止其中的生长。我们在定理 11 的证明中利用了这一能力，证明概要见此处，详细内容见第 4.3 节。此外，根据注 5，这对有向 aTAM 也同样成立。

▶**定理 11**。 存在一个 $PaTAM$ 系统 P，无法由任何 $aTAM$ 系统模拟。

与定理10的证明类似，在内在模拟的定义中，我们考虑所有可能的表示函数和缩放因子，以证明其不可能性。图 6 给出了 PaTAM 系统 $\mathcal{P}$ 的示意图，该系统不可能被 aTAM 正确模拟。

$\mathcal{P}$ 的生长始于瓦片沿着一行向东附着并延伸。该行的长度具有非确定性，因为沿着该行的任意位置都可能有一个角瓦片附着，从而启动向北的生长。因此，$\mathcal{P}$ 是一个无向系统，所以任何潜在的模拟系统都必须能够模拟$\mathcal{P}$的所有可能组装体。类似地，向北和向东生长的瓦片行也会附着，其长度取决于每个角瓦片之前附着的瓦片数量。最后，一列瓦片开始向南生长，并在此过程中启动多条向东延伸的臂的生长，每条臂之间相隔 4 个瓦片。向南生长的瓦片列和这些臂都会持续生长，直到受到限制区域的约束或与组装体的其他部分发生碰撞。为了证明$\mathcal{P}$ 无法在 aTAM 中被模拟，我们假设存在一个模拟 aTAM 系统$\mathcal{T}$，并证明它必然允许某些与$\mathcal{P}$中的组装序列不对应的组装序列。为此，我们考虑$\mathcal{P}$ 中的一个组装序列，其中瓦片矩形不断生长，直到达到一个尺寸，该尺寸根据模拟的缩放因子确定，从而使向南生长的瓦片列能够生成足够多且足够长的臂。我们还选择一个组装序列，使得向南生长的瓦片列最终会与种子瓦片发生碰撞，从而限制包含这些臂的区域。由于我们选择的组装体足够大，因此根据窗口电影引理，每条臂都能够被“抽取”。随后，我们让最底部的臂继续生长，直到它刚刚与东墙发生碰撞之后，并注意到，尽管$\mathcal{T}$是一个 aTAM 系统，仍然可以在受限区域内部继续生长瓦片，但是瓦片

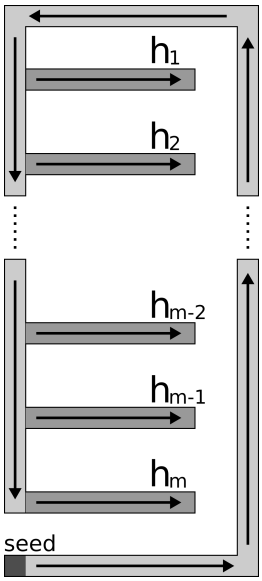

图 6 定理 11 证明中系统 $\mathcal{P}$ 的示意图。瓦片以矩形形状生长，并周期性地生成臂，这些臂可能撞上墙壁并限制一个区域。该系统是无向的，其大小取决于每个角之间附着的瓦片数量，且具有非确定性。

内部和外部区域将不再能够相互影响生长。根据表示函数是否已解析底部臂的最后一块瓦片，需要考虑几种情况，但基本上，我们随后会证明，可以继续生长西墙，直到其宏瓦片在 $\mathcal{P}$ 中解析为约束矩形内部的瓦片。通过计数论证以及对臂数目的选择，我们接着可以证明，其他臂中必有一条能够在受限区域内继续生长，并且 $\mathcal{T}$ 中的组装序列会映射到 $\mathcal{P}$ 中一个无效的组装序列。

3.5 3DaTAM 无法模拟 SaTAM

定理 12 的证明在原理上与定理 11 的证明相似，不过所用系统略有不同，并利用了 2D 与 3D 之间的差异。我们在此概述其思路，并将在第 4.4 节给出形式化证明。

▶**定理 12**。 存在一个 *SaTAM* 系统 S，无法由任何 *3DaTAM* 系统模拟。

该结果所用的系统 $\mathcal{S}$ 如图 7 所示，起初会生长出两个几乎密封的腔室，两者由一条狭窄隧道相连，从而允许它们之间存在一条扩散路径。这两个腔室的底部尺寸均固定为 9×9，但它们可以按照与定理 11 证明中所用系统的框架类似的方式，生长到任意高度。完全生长后，其中一个腔室的天花板上有一个仅宽一块瓦片的开口，这是瓦片从外部区域扩散进入腔室的唯一通道；我们将有此孔的腔室称为外室，另一个则称为内室。此外，两腔室的底部都可以通过附着相同瓦片类型的瓦片，使柱子向上生长至任意高度。内室中的柱体最终会撞上天花板或，直到外室中的柱体长得足够高，堵住其天花板上的开口并限制内部空间。

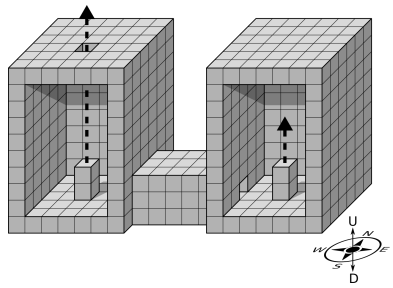

图 7 定理 12 证明中系统 $\mathcal{S}$ 的剖视图。两个腔室由一条狭窄隧道相连。在外侧西腔室内生长的柱体最终会限制腔室内的区域；此时，在内侧东腔室生长的柱体将无法继续生长。

我们通过证明以下事实，说明 $\mathcal{S}$ 无法由任何 3DaTAM 系统模拟：在任何可能的模拟系统中，在适当条件下，即使不希望如此，外室柱体封闭腔室后，内腔室柱体仍有可能继续生长。为此，我们注意到，在假设的模拟过程中，内室中的柱体要“知道”腔室已被封闭，唯一的途径就是让瓦片在隧道内附着。因此，由于隧道很窄，且其横截面由一个中空的 3×3正方形构成，腔室之间在模拟过程中只能进行有限次通信。具体而言，如果模拟的缩放因子为 c，那么在隧道对应的任意x-坐标处能够放置的瓦片数量都有上限由 $5c \times 5c$ 给出，其中包括隧道宏瓦片旁模糊区内可能生长的任何瓦片。因此，通过简单的计数论证，如果我们一开始将腔室生长到足够大的高度，那么必定存在某个组装序列，使两个柱体都能生长任意数量的宏瓦片（我们选择足够长的长度以允许可泵送生长），且在此过程中，隧道中心不会放置任何瓦片。接着，利用窗口电影引理，我们构造一个组装序列，使外室通过泵送来约束腔室。由于在此组装序列中，隧道中心没有放置任何瓦片，因此没有任何东西能阻止内腔室柱也被泵送。任何据称模拟我们系统 $\mathcal{S}$ 的 3DaTAM 系统中，都必须存在这样的组装序列；而由于这个组装序列对应于 SaTAM 中无效的组装序列，因此这种模拟是不可能的。

3.6 PaTAM 可以模拟有向平面异步瓦片组装模型

▶**定理 13.** 存在一个通用的平面异步瓦片组装模型瓦片集 S，能够模拟任何有向 *PaTAM* 系统。

尽管 PaTAM 和有向 PaTAM 本身都不是内在通用的，[7], 但借助 [7] 和 [2] 中的工具，我们能够构造出一个能够模拟任意有向 PaTAM 系统的 PaTAM 瓦片集。下面我们概述这一过程，

通过该过程，PaTAM 瓦片集 S 可以模拟任意给定的有向 PaTAM 系统 $\mathcal{T}$。该瓦片集 S具有通用性，这意味着无论有向 PaTAM 系统 $\mathcal{T}$为何，同一个瓦片集都将在固定的结合阈值下使用，只有模拟系统的种子会发生变化，以适应 $\mathcal{T}$。技术细节请参见第 4.5 节。

给定一个有向 PaTAM 系统 $\mathcal{T}$，我们定义一个模拟系统 $\mathcal{S}$，它使用一个固定的瓦片集，结合阈值为 2。$\mathcal{S}$ 的种子由已解析的宏瓦片组成，其构型与$\mathcal{T}$的种子相同。$\mathcal{S}$中的每个宏瓦片由一个 9×9 网格构成，网格中包含我们称为组件块（CB）的结构；每个组件块均由许多更小的基于瓦片的构造组成，并各自存储系统$\mathcal{T}$的编码，以及以某些瓦片上的特定粘合剂形式表示的一些额外数据。一个宏瓦片中的各个 CB 都会使用模拟图灵机的瓦片执行计算，以确定它们应如何生长，以及根据周围宏瓦片的当前信息，该宏瓦片是否能够解析。

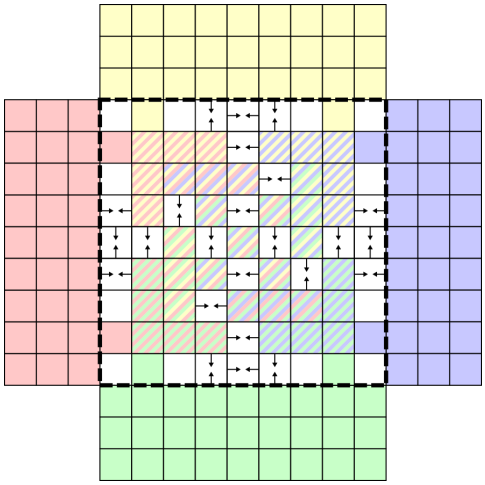

图 8 示意图展示了宏瓦片位置中可能出现的 9×9 网格组件块布局。包含两个箭头的正方形表示可能包含探测区域的网格位置。周围的宏瓦片使用不同颜色的瓦片表示其相对于当前宏瓦片的方向。组件块位置的颜色表示该组件块可能获取哪个相邻宏瓦片的信息。

每个 CB 本质上都表现得像 9×9 网格上的一个独立瓦片，我们可以认为 CB 有两种生长方式。第一种是 CB 通过来自另一个相邻 CB 的瓦片附着进行生长，其方式类似于强度为 τ 的瓦片附着；第二种是 CB 可以在网格中某些指定为探针区域的位置，沿着两个相邻 CB 之间的间隙生长。这是类似于通过两个相对瓦片之间的协同结合而发生的瓦片附着（我们将其称为 跨间隙协作）。组件块之间的这些“协作附着”用于整合组件块之间的信息。例如，一个组件块可能包含关于北侧相邻宏瓦片的编码信息，另一个可能包含关于西侧的信息；在它们之间的探测区域中，可以生长出一个新的组件块，其中包含关于两者的信息，随后它可以利用这些信息来确定在与该宏瓦片对应的瓦片位置处，$\mathcal{T}$中的瓦片附着是否可能。图 8 展示了将宏瓦片布局为组件块位置的方式，其中这些探测区域用带有两个相对箭头的方框表示。

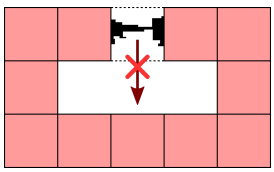

图 9 在模拟过程中检查跨间隙协作时，瓦片不能简单地横跨整个间隙，否则会将两个空间区域分隔开来。

探测区域是组件块（CB）中的位置，在这些位置上，位于相对两侧的两个相邻组件块可以伸出称为探针的结构。探针是从周围组件块向组件块位置中心生长的细长结构。在探测区域中生长的每个探针都表示来自周围宏瓦片的某种可能的信息组合，并根据该信息生长在一个独特的位置。探针的长度经过精心设定，恰好略短于组件块位置的中心距离，这样，当探测区域相对两侧的两个探针对齐时，它们之间恰好留有一个瓦片宽的间隙。这个间隙允许一个瓦片协作附着，并沿着

探针的侧面生长，从而获取两者的信息。否则，如果探测区域内没有探针对齐，那么组件块的组成部分便有足够的空间从探测区域的一侧挤入探针之间，并到达另一侧。图 10 展示了涉及探测区域的两种情形。

探针区域在 [2] 中被引入，用以解决图 9 所示的问题。在模拟瓦片系统时，若要检查哪些宏瓦片可能进行跨间隙协作，朴素的做法是让瓦片生长，以探查两个相邻宏瓦片并判断是否可能附着。然而，这必然会将空间区域分隔开；对于平面系统而言，在确定附着是否可能发生之前，还会对其中一个区域加以限制。如果附着无法发生，那么瓦片将无法再附着到受限区域中，模拟很可能因此失效。探针通过在跨间隙协作可能发生时恰好对齐来避免这一问题，同时仍允许瓦片结构在它们未对齐时继续生长穿过。

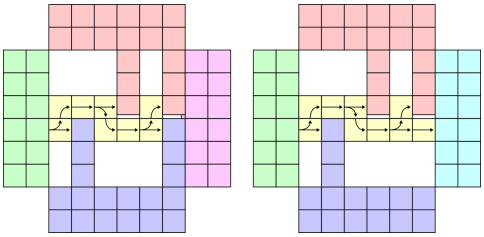

图 10 组件块之间的探测区域。红色和蓝色组件块向中间位置的组件块中心生长探针，而绿色组件块则试图穿过探测区域生长。在左侧，两个探针恰好对齐，此时，包含绿色组件块信息的瓦片路径无法通过，东侧的组件块则由两个探针之间的协作瓦片附着形成。在右侧，两个探针没有对齐，这意味着来自绿色组件块的瓦片路径可以从探针之间的狭窄空隙穿过，从而影响东侧组件块的生长。

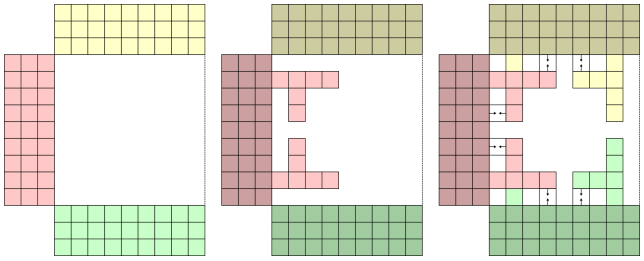

图 11 由周围宏瓦片生长而成的组件块构成的手。

现在我们已经了解了组件块和探针区域的行为方式，接下来将通过重点介绍几个重要情况，来描述解析宏瓦片的协议。宏瓦片内部的生长始于一个或多个周围宏瓦片完成解析，并且瓦片开始在该宏瓦片内部附着。从周围的宏瓦片出发，该协议始终首先通过生长两个由 CB 构成的“T”形结构来启动，这些结构称为手，如图 11 所示。请注意，两个相邻的周围宏瓦片可能会尝试在同一位置生长手。这种情况通过单点竞争机制处理：首先在共享手的位置中距离最近的角落放置瓦片的周围宏瓦片，将获准放置其手。在手与周围宏瓦片之间，会在图 11 右侧所示的区域内生长探针，使一个 CB 能够以协作方式“附着”，从而整合来自手和附近宏瓦片的信息。在某些情况下，这些信息可能存在冗余，但只要存在两个或更多周围宏瓦片，就始终至少有一个位置能够整合来自两个宏瓦片的信息。

手与周围宏瓦片协作形成的组件块随后再次协作，组件块沿着手生长，形成顺时针肘部，并在肘部之间形成额外的探针区域。随后，组件块在这些肘部之间协作附着，并

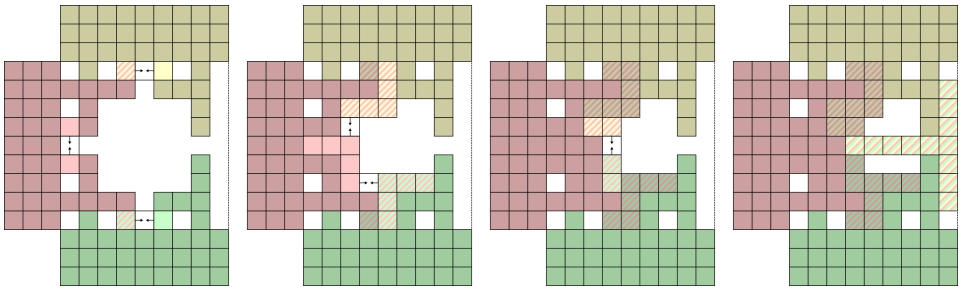

图 12 手生长完成后，CB 会协作，直到来自所有方向的信息汇总到一个 CB 中。随后，宏瓦片即可完成解析。

再次在瓦片中心附近协同工作，最终将周围宏瓦片中的所有信息整合起来。一旦这一过程完成，在瓦片中心“附着”的组件块便包含来自所有方向的信息。如果周围的宏瓦片代表 $\mathcal{T}$ 中能够放置瓦片的瓦片，则可以向其余各侧生长出额外的组件块，将这些信息传递给其余各侧，并在相邻的宏瓦片位置重复这一过程。

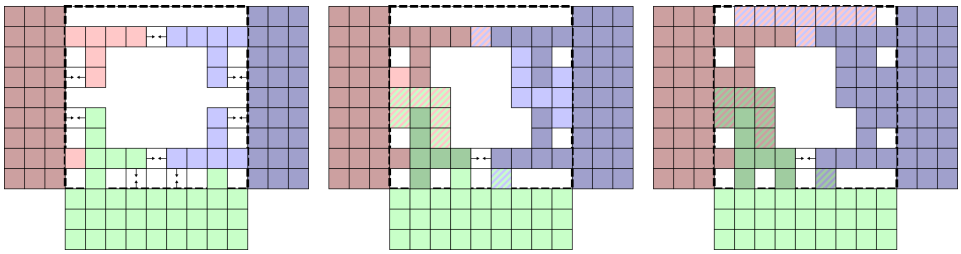

图 13 相对宏瓦片之间的探针区域可以检测是否存在跨间隙协作。

如果 $\mathcal{T}$ 中可能发生跨间隙协作，协议就会略有不同。如图 13 所示，如果东西两侧的宏瓦片之间可能发生跨间隙协作，它们的手将共享一个探针区域，且探针彼此对齐。因此，CB 可以在该位置生长并完成宏瓦片的解析。这种生长可能会限制南侧区域，阻止宏瓦片南侧的瓦片附着和 CB 生长；但这并不重要，因为宏瓦片只需在尚未完成解析的相邻宏瓦片中启动该过程。所述协议能够适应手以不同顺序生长以及周围宏瓦片数量不同的情况，包括那些最终不会参与宏瓦片解析的宏瓦片。只要 CB 在任何时候获得足够的信息，能够确定宏瓦片应如何解析，它就会开始向宏瓦片中心生长，然后延伸至周围的边。由于我们模拟的是有向系统，每个位置至多只能附着一个唯一的瓦片，因此其他 CB 不会中断这一过程。

4 技术附录：省略的细节与证明

4.1 有向系统无法模拟无向系统

▶**定理9**。 在 *aTAM*、*3DaTAM*、*PaTAM* 和 *SaTAM* 中，存在一些系统，无法由这些模型中任何一种模型的有向系统模拟。

证明。 设 T为图4a所示的瓦片集。定义一个瓦片组装系统 $\mathcal{T} = (T, \sigma, 1)$，其中 σ 由单个瓦片组成：一个位于原点、与标记为 S 的瓦片相同的瓦片。注意，如果 $\mathcal{T}$是 aTAM、3DaTAM、PaTAM 或 SaTAM 中的系统，其行为完全相同：它是一个无向系统，且恰有两个终端组装体，如图4b所示。

我们通过反证法证明定理9。因此，假设$\mathcal{S} = (S, \sigma', \tau)$是一个有向系统，它模拟$\mathcal{T}$（使用表示函数 R，缩放因子为 c）。根据模拟的定义，$R(\sigma') = \sigma$（即种子 σ' 表示 σ），并且$\mathcal{S}$中至少存在一个组装序列，使得在由此产生的终端组装体中，位于 σ' 北侧的 $c \times c$ 宏瓦片区域在 R下表示 T 中标记为 A的瓦片；此外，$\mathcal{S}$ 中还至少存在一个组装序列，使得在由此产生的终端组装体中，位于 σ' 北侧的 $c \times c$ 宏瓦片区域在 R下表示 T 中标记为 B的瓦片。然而，由于$\mathcal{S}$ 是有向的，因此只能有一个终端组装体，所以这两个组装序列在该 $c \times c$ 宏瓦片区域中放置的瓦片完全相同。但是，由于 R 是一个函数，它不可能将同一个输入宏瓦片区域映射到两个不同的瓦片。这就产生了矛盾，因此$\mathcal{S}$ 不能模拟$\mathcal{T}$。而且，由于对$\mathcal{S}$ 唯一的假设是它为有向系统，因此任何有向系统都无法模拟$\mathcal{T}$（无论它属于aTAM、3DaTAM、PaTAM还是SaTAM），定理9得证。

◀

4.2 PaTAM不能模拟aTAM

▶**定理10。** *存在一个系统 $\mathcal{T}$，它是一个有向 aTAM 系统，因此也是一个 aTAM 系统，但任何 PaTAM 系统都无法模拟它。*

证明。 令 $\mathcal{T}$ 为图5中示意描绘的系统。$\mathcal{T}$ 的种子由一个放置在 $(0,0)$ 处的单个瓦片组成，其结合阈值为 2（即 $\tau = 2$）。从种子瓦片开始，$\mathcal{T}$会生长出一个“播种器”，它本质上是一个经过改造的对数宽度二进制计数器，从 8 计数到 ∞。它经过改造，使得每当计数到一个数 $8 \leq n < \infty$时，该数 n 的各位都会向上旋转，从而启动一个向上生长 n 行的计数器。此外，每个计数器的各位之间还留有 8 个额外的空位。播种器无限向右生长，不受它启动的各个向上生长计数器的影响。每个由某个唯一值 n的各位播种的向上生长计数器，都会向上生长 n 行。此时，它会沿顶部额外生长一行，然后向左生长出一条宽度为一个瓦片、长度为4 个瓦片的臂；随后，一个瓦片会附着在它的南侧，该瓦片带有 τ强度的粘合剂，使其自身的副本能够附着在它的北侧和南侧。这样便形成了一列由该瓦片副本组成的单瓦片宽列，并向下生长，直到最终与播种器“相撞”（即该列中的一个瓦片放置在播种器旁边，导致无法再放置其他瓦片）。请注意，播种器的生长经过了专门设计：向下生长的臂撞上播种器的位置，必须在最终启动该臂生长的计数器开始生长之前完成。最后，在向上生长的计数器生长出第一行后的任何时刻，一个红色瓦片都可以与该行最左侧的瓦片结合。

通过对$\mathcal{T}$ 的模块进行精心设计（这些模块是许多 aTAM 构造中常见的标准模块，见 [11, 8], 例如），显然$\mathcal{T}$不仅是一个有效的 aTAM 系统，而且还是定向的。我们通过矛盾证明定理10，因此假设$\mathcal{P}$ 是一个瓦片集为 P、能够模拟$\mathcal{T}$的 PaTAM 系统。令 c 为$\mathcal{P}$模拟$\mathcal{T}$时所用的缩放因子，令 R 为表示函数。

对于每个 $8 \leq n < \infty$，我们使用术语“第 n 次迭代”来指代向上计数器增长到 n、向左再向下生长的臂，以及与该 $8 \leq n < \infty$ 相关的红色瓦片

。请注意，向下生长的臂可以变得任意高，但宽度始终不变。根据模拟的定义并检查$\mathcal{T}$，我们可以看到，横跨臂中任意一行的瓦片数不能超过 $3c$，即 3 个宏瓦片的宽度。这个数量包括代表臂上瓦片的宏瓦片，以及两侧各一个模糊区宏瓦片。任何超出该宽度的部分都会违反模拟中对模糊区的限制，使模拟无效。因此，令 $p = (3c)!(|P|+1)^{3c}$，并注意，这是 $|P|$（包括不放置瓦片的情况）中的瓦片按不同顺序放置在一行 $3c$ 个瓦片位置上的数量上界。

现在，考虑一个组装序列 $\vec{\alpha}$，它使组装体不断生长，直至第 $2p$ 次迭代，此时计数器增长到高度 $2p$，但第 $2p$ 个红色瓦片尚未附着。由于根据假设，$\mathcal{P}$ 模拟 $\mathcal{T}$，因此在 $\mathcal{T}$ 中必然存在一个对应的组装序列 $\vec{\alpha}'$。注意，根据我们对 p 的定义以及迭代的大小，在对应于向下生长的臂的至少两个不同宏瓦片（及其周围的模糊区）的顶部行中，瓦片必须以相同的方式和顺序附着。随后，我们可以定义两个窗口 w_1 和 w_2，它们均为一个 $3c \times p + 1$ 矩形的边界，其顶部中心分别位于这些宏瓦片的顶部行上，并注意到在 $\vec{\alpha}'$ 期间，这两个窗口将具有相同的窗口电影。因此，我们可以在 $\mathcal{T}$ 中构造一个新的组装序列 $\vec{\beta}'$，其与 $\vec{\alpha}'$ 类似，不同之处在于两个窗口所围区域内的瓦片以完全相同的方式附着。随后，这些瓦片附着过程可以重复进行，直至被种植器宏瓦片或其周围模糊区中的某个瓦片阻挡。此时，由于 $\mathcal{P}$ 是一个平面异步瓦片组装模型系统，因此不可能有瓦片附着在表示该次迭代中红色瓦片的宏瓦片区域内。无论此后瓦片如何附着，对应于该红色瓦片的宏瓦片都将永远无法完成解析，因此模拟将是不正确的。由于 $\mathcal{P}$ 无法模拟 $\mathcal{T}$，并且除了 $\mathcal{P}$ 是一个能够模拟 $\mathcal{T}$ 的 PaTAM 系统这一事实之外，我们没有对其作出任何其他假设，因此这样的模拟器不可能存在。◀

4.3 aTAM 无法模拟 PaTAM

▶**定理 11**。 *存在一个 PaTAM 系统 P，它无法被任何 aTAM 系统模拟。*

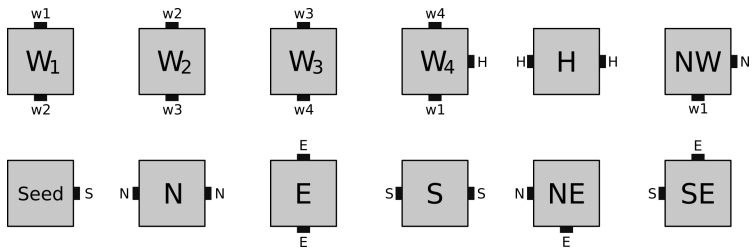

图 14 无法被任何 aTAM 系统正确模拟的 PaTAM 系统的瓦片集。

证明。 为证明定理 11，令 $\mathcal{P}$ 为图 15 所示的 PaTAM 系统。该系统从一个种子瓦片开始，并由此生长出一个矩形框架。框架的南、东、北三面墙分别由多个相同瓦片类型的副本构成，每一面使用的瓦片类型各不相同；西墙则由 4 种不同的瓦片类型构成，并按周期序列生长。由于框架的前三面墙都由同一种瓦片类型的副本构成，每面墙的长度是不确定的，取决于角瓦片附着前各类型的副本附着了多少个。此外，西墙瓦片之后没有角瓦片附着，因此西墙会无限生长，或者直到与另一块瓦片发生碰撞。随着

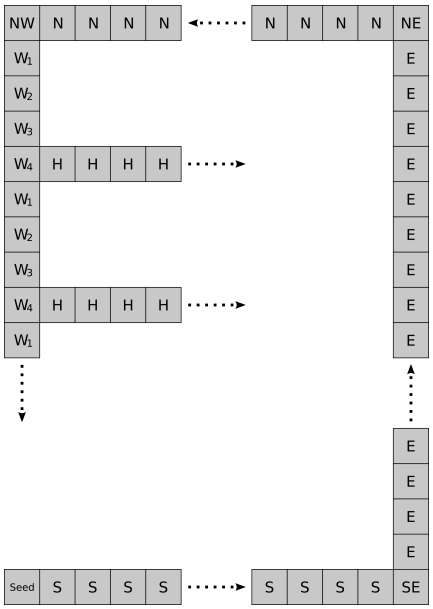

图 15 这个 PaTAM 系统无法由任何 aTAM 系统正确模拟。

西墙生长时，每第 4 块瓦片都会启动一条向东生长的臂；这条臂通过相同瓦片的附着而无限生长，或者直到该区域受到限制，或发生碰撞。该系统中的所有胶水强度均为 1，结合阈值也为 1。

我们通过反证法证明，aTAM 中不存在能够模拟$\mathcal{P}$的所有组装序列的系统。因此，假设$\mathcal{T} = (T, \sigma, \tau)$是一个模拟$\mathcal{P}$的 aTAM 系统，令 c 为缩放因子，R 为该模拟的表示函数。现在，令 $p = (3c)! \cdot (2(g+1))^{3c}$。这是一个上界，表示沿着两行 $3c$ 瓦片位置之间的边界放置来自 T 的瓦片（包括不放置瓦片）可能的顺序数。因此，p 限定了缩放因子为 c 的宏瓦片可能具有的一维切片数量，其中包括两个相邻的模糊宏瓦片区域，并考虑瓦片附着的相对顺序。由于泵引理长度的概念与此类似，因此可以将其视为一种泵引理长度：如果$\mathcal{P}$中的一行至少有 p 个相同的瓦片，且它们生长的位置与其他瓦片足够远，那么$\mathcal{T}$中至少有两个对应宏瓦片之间必然发生了相同的瓦片附着序列。出现这种情况时，可以考虑这样一种组装序列：第二个相同宏瓦片边界之后的任何瓦片附着，都模仿第一个边界之后的附着。这意味着$\mathcal{T}$中存在具有周期性生长的组装序列，可以无限持续下去，或持续到被组装体的其他部分阻挡为止。

现在考虑组装 α_0 in$\mathcal{P}$，其中反向的 C 形框架不断生长，使其北侧和南侧的长度为 p $(6c+2)$，东侧的长度为 $4 \cdot (6c+2) + 2$，不包括角瓦片。这些特定数值的原因稍后会解释。此外，在 α_0 中，西侧已经生长到距离与种子瓦片碰撞仅差两块瓦片的位置，但尚未开始生长任何水平臂。令 $\vec{\alpha}_0$ 为 $\mathcal{P}$ 中的组装序列，它从种子瓦片开始，以 α_0结束。到目前为止，应该不难看出系统 $\mathcal{T}$ 如何模拟该组装序列。令 $\vec{\alpha}'_0$ 为$\mathcal{T}$中的某个组装序列，它模拟 $\vec{\alpha}_0$。

接下来，我们将考虑，一系列组装序列 $\vec{\alpha}_1 \vec{\alpha}_2, \ldots, \vec{\alpha}_n$，它们都属于$\mathcal{P}$，且每个序列都是由前一个序列按特定方式推导而来，其中水平臂从西侧生长

。我们选择 $n = 6c + 1$ 这个值，原因很快就会明了。根据我们对东侧长度的选择，西侧能够生成 $m = 6c + 2$ 条水平臂（每条臂之间相隔 4 个瓦片），同时仍与种子瓦片保持 2 个瓦片的距离，避免发生碰撞。为方便起见，我们从北到南将这些臂称为 h_1，h_2，h_3，...，h_m。此外，令 $\tilde{y}$ 为恰好位于$\mathcal{P}$中臂 h_{m-1} 和 h_m的 y 坐标之间的 y 坐标。据此，固定 $\tilde{y}'$ 为$\mathcal{T}$中宏瓦片位置所在行内的任意 y 坐标，该行对应于$\mathcal{P}$ 中 y 坐标为 $\tilde{y}$的瓦片位置。

我们定义紧接组装序列 $\vec{\alpha}_{i-1}$ 生长之后的组装序列 $\vec{\alpha}_i (i = 1、2、.....、 n)$，使其满足：(1) 瓦片附着以生长臂 h_i，直到其与东侧相撞；(2) p 瓦片附着在臂 h_m 的末端。注意，在每个组装序列中，臂 h_m 仅通过 p 个瓦片部分生长。我们选择了组装的宽度，因此即使每个臂北侧都有对应的组装序列，也不会与东侧相撞。现在，对于 $\mathcal{P}$ 中的每个组装序列 $\vec{\alpha}_i$，令 $\vec{\alpha}'_i$ 为 $\mathcal{T}$中对应的组装序列。对于 $\vec{\alpha}_i$ 中的每次瓦片附着，$\vec{\alpha}'_i$ 中可能有多次对应的瓦片附着。在 $\mathcal{T}$的宏瓦片位置发生这些附着期间，我们将跟踪一个特定条件，即瓦片被放置在 y 坐标 $\tilde{y}'$ 处。计入东臂和西臂周围的模糊区域后，$\mathcal{T}$ 中 y 坐标为 $\tilde{y}'$ 的瓦片位置只有 $6c$ 个；在这些位置放置瓦片不会因距离过远而导致模拟失效。由于我们对 $n = 6c + 1$ 的选择，至少有一个组装序列（设为 $\vec{\alpha}'_j$）必定会在 y 坐标 $\tilde{y}'$ 处没有放置瓦片的情况下发生。

现在，我们如下定义 $\mathcal{P}$ 中的组装序列 β。首先依次遵循组装序列 $\vec{\alpha}_0, \vec{\alpha}_1, \ldots, \vec{\alpha}_{j-1}$。然后，遵循组装序列 $\vec{\alpha}_j$，直到臂 h_j上倒数第二块瓦片附着为止。接着，我们偏离原有的组装序列，跳过臂 h_j上最后一块瓦片的附着。我们转而生长臂 h_m，在其与组装体东侧相撞前停下一块瓦片。最后，附着西侧剩余的 2 块瓦片，使其与种子瓦片相撞。不难看出，β 是 $\mathcal{P}$中的一个有效组装序列。此外，注意到 β 是 $\mathcal{P}$中的一个终端组装体，因为根据平面性约束，组装体内的任何臂现在都不可能继续生长。因此，如果我们将 $\vec{\gamma}$ 定义为组装序列 β 后接臂 h_j上剩余瓦片的附着，$\vec{\gamma}$ 就不是 $\mathcal{P}$中的有效组装序列。尽管如此，我们仍可在 $\mathcal{T}$中构造组装序列 $\vec{\gamma}'$ 来模拟 $\vec{\gamma}$，从而证明 $\mathcal{T}$不能正确模拟 $\mathcal{P}$。

为此，我们按如下方式构造 $\mathcal{T}$ 中的组装序列 $\vec{\gamma}'$。首先，依次跟随组装序列 $\vec{\alpha}'_0, \ldots, \vec{\alpha}'_{j-1}$。然后，跟随组装序列 $\vec{\alpha}'_j$，直到但不包括会使与 h_j 最后一个瓦片对应的宏瓦片完成解析的瓦片附着。接下来继续跟随 $\vec{\alpha}'_j$，但跳过所有位于 y 坐标 $\tilde{y}'$以北的瓦片附着。由于在 $\vec{\alpha}'_j$ 期间，没有瓦片在此 y 坐标处附着，因此这不会妨碍与臂 h_m 中接下来的 p 个瓦片对应的宏瓦片生长。在这些位于 $\tilde{y}'$以南的附着过程中，我们考虑一个尺寸为$p + 1 \times 3c$ 的矩形窗口 w，并注意到，根据我们对 p的选择，必须能够沿着臂以两种方式平移 w 的位置，且两者的窗口电影相同。根据窗口电影引理，第一个平移窗口中所有可能的瓦片附着，在第二个窗口中也都必须可能发生。随后可以重复（或“泵送”）这些瓦片附着，直到被东侧的一块瓦片阻挡。请注意，由于第一段泵送的瓦片附着序列没有向 $\tilde{y}'$以北生长，其余附着也不会向北生长。如果与东侧碰撞时，与 h_m 最后一个瓦片对应的宏瓦片完成解析，那么就会产生矛盾：因为此时，在臂 h_m 据称封闭包含 h_j的区域之后，只需一次瓦片附着，就能使与 h_j 最后一个瓦片对应的宏瓦片完成解析。否则，我们可以继续

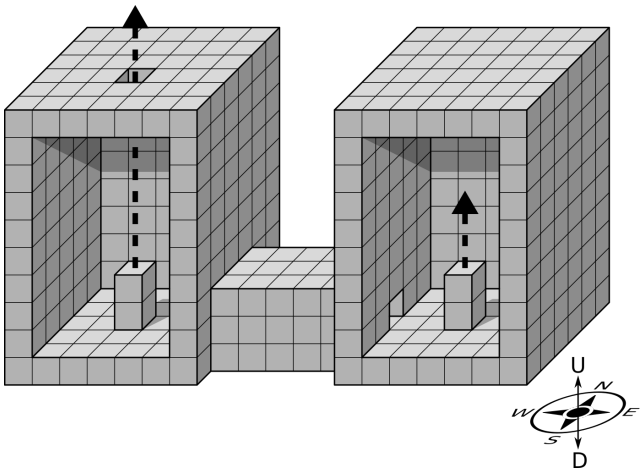

图16 定理 12 证明中所用系统 $\mathcal{S}$ 的剖视图。两个腔室由一条狭窄隧道连接。

在 $\mathcal{T}$ 中任意进行瓦片附着序列，使其对应于 $\mathcal{P}$ 西侧剩余的两个瓦片。这些瓦片附着不会影响由与 h_m 对应的宏瓦片和东墙之间的碰撞所封闭的区域，因此，只需在与 h_j 最后一个瓦片对应的宏瓦片中附着一块瓦片，仍会使该宏瓦片完成解析，从而产生矛盾。◀

4.4 3DaTAM 无法模拟 SpatialaTAM

这里我们约定，方位方向北、南、东、西、上和下分别对应 $+y$、$-y$、$+x$、$-x$、$+z$ 和 $-z$。在指代瓦片构造的尺寸时，我们使用宽度、长度和高度分别表示 x、y 和 z 轴上的尺寸。

▶**定理 12.** 存在一个 *SaTAM* 系统 S，它无法由任何 *3DaTAM* 系统模拟。

证明。 设 $\mathcal{S}$ 是图16所示的 SaTAM 系统，描述如下。从种子开始，瓦片附着并形成两个箱体：东侧的箱体称为内室，西侧的箱体称为外室，二者由一条狭窄隧道连接，该隧道使两个腔室相距 5。每个腔室的底部都是一个 9×9 瓦片正方形，每个腔室都可以生长到任意高度，之后会有一个特殊瓦片附着，以启动其天花板的生长。内室的天花板是实心的，而外室的天花板中心有一个瓦片开口。在每个腔室内，一根由瓦片构成的柱子可以从底部中央向上生长。这些柱子均由同一种瓦片类型的副本构成，这些瓦片可以彼此叠加附着，使柱子能够无限增高。隧道的横截面是一个中空的 3×3 正方形，允许瓦片扩散进入内室，直到外室中的柱子长得足够高，堵住天花板上的开口并限制内部区域。

现在反设存在一个 3DaTAM 系统 $\mathcal{T}$，它使用瓦片集 T、缩放因子 c 和宏瓦片表示函数 R 来模拟 $\mathcal{S}$。首先，我们定义几个在证明过程中很重要的常数。令 $p = (9c^2)!(|T|+1)^{9c^2}$。这是瓦片来自 T（包括不放置任何瓦片）时，在一个

XX:22 基于瓦片的自组装中的内在跨模型模拟

$3c \times 3c$ 方格中可以放置的顺序数量的上界。我们还定义 $b = 25c^2$，并令 $h = (p+1)(b+2) + 2$，它将作为我们腔室的高度，其值很快就会明确。现在，我们考虑 $\mathcal{S}$ 中的几个组装序列；根据我们的假设，$\mathcal{T}$ 必须能够模拟这些序列。首先，令 $\vec{\alpha}_0^{\mathcal{S}}$ 为 $\mathcal{S}$ 中的组装序列，在此过程中，瓦片附着到种子上，使两个腔室都完成生长，从而二者的内部高度均为 h（即不包括底部和天花板），且两个柱体都生长到高度 2。我们将 $\vec{\alpha}_0^{\mathcal{S}}$ 中的最后一个组装称为 $\alpha_0^{\mathcal{S}}$。此外，我们考虑该组装序列的一系列延续，并以归纳方式定义它们；因此，对于 $k = 0, \ldots, b$，令 $\vec{\alpha}_{k+1}^{\mathcal{S}}$ 为这样一个组装序列：它从组装 $\alpha_k^{\mathcal{S}}$ 开始，在此过程中，外室柱先由 $p+1$ 个瓦片生长，随后内室柱由 $p+1$ 个瓦片生长。为完成归纳定义，令 $\alpha_{k+1}^{\mathcal{S}}$ 为组装序列$\vec{\alpha}_{k+1}^{\mathcal{S}}$中的最终组装。注意，在组装序列 $\alpha_k^{\mathcal{S}}$（其中 $k = 1, \ldots, b+1$）期间，每个柱子都会生长 $p+1$ 个瓦片的高度；根据我们将 h 定义为 $(p+1)(b+2)+2$，这意味着两个柱子都尚未到达天花板。然后，我们将 $\vec{\alpha}^{\mathcal{S}}$ 定义为按顺序连接这些组装序列所得的序列。

由于我们假设 T 模拟 S，因此 T 中必定存在一个组装序列，模拟组装序列 $\vec{\alpha}^{\mathcal{S}}$ 的生长。令 $\vec{\alpha}^{\mathcal{T}}$ 为这样一个组装序列，并且对于 $k = 0, \ldots, b+1$，令 $\alpha_k^{\mathcal{T}}$ 为 $\vec{\alpha}^{\mathcal{T}}$ 中第一个在 R^* 映射下对应于 $\alpha_k^{\mathcal{S}}$ 的组装。为方便起见，我们将组装序列 $\vec{\alpha}^{\mathcal{T}}$ 划分为子序列 $\vec{\alpha}_k^{\mathcal{T}}$（$k = 0, \ldots, 5c+1$），使得 $\vec{\alpha}_k^{\mathcal{T}}$ 模拟组装序列 $\vec{\alpha}_k^{\mathcal{S}}$，并以组装 $\alpha_k^{\mathcal{T}}$ 结束。现在，我们将利用 T 中的这些组装序列，在 T 中构造一个新的组装序列，它不可能对应于 S 中的有效组装序列。首先，令 x_t 为 $calT$ 中隧道中心的 x 坐标。若内室中的宏瓦片要“了解”外室中的宏瓦片，瓦片就必须附着在 x 坐标为 x_t 的位置。在 T 中，隧道在 x 坐标 x_t 处的横截面是一个 3×3 宏瓦片正方形；若将模糊区也计算在内，这意味着 T 中没有瓦片能够附着在隧道周围、位于 x 坐标 x_t 处的 $5c \times 5c$ 正方形之外。因此，在组装序列 $\vec{\alpha}^{\mathcal{T}}$ 期间，最多只有 $25c^2$ 个瓦片（我们为 b 选取的值）能够附着在 x 坐标为 x_t 的位置。由此，必定存在某个索引 j（$1 \le j \le b+1$），使得在组装序列 $\vec{\alpha}_j^{\mathcal{T}}$ 期间，始终没有瓦片放置在 x 坐标为 x_t 的位置。

现在请注意，在组装序列 $\vec{\alpha}_j^{\mathcal{T}}$期间，瓦片附着并使两根柱子都长高了 $p+1$。我们对 p 的定义将使我们能够如下使用窗口电影引理。首先，令 w 为一个盒子的边界所定义的窗口，该盒子的 x 和 y 维尺寸分别为 $3c$，且 z 维尺寸为 $p+2$。接着注意，由于在任何组装序列 $\vec{\alpha}_1^{\mathcal{T}}$、.....、$\vec{\alpha}_{b+1}^{\mathcal{T}}$开始之前，每根柱子的高度都为 2 个宏瓦片，因此，与 $\vec{\alpha}_j^{\mathcal{T}}$中的任何宏瓦片相邻的模糊区，都不会与任何宏瓦片相邻，除非这些宏瓦片在 $\vec{\alpha}_j^{\mathcal{T}}$中得到解析。由于 p 被定义为一个上界，表示在 $3c \times 3c$ 正方形内，来自 T的瓦片附着顺序有多少种；并且，由于我们在 $\vec{\alpha}_j^{\mathcal{T}}$期间在每根柱子上都生长 $p+1$ 个宏瓦片，因此必定存在两种对窗口 w的平移方式，记作 w_1^{out}和 w_2^{out}，使其以外腔室柱为中心，并且 w_1^{out}和 w_2^{out}在组装序列 $\vec{\alpha}_j^{\mathcal{T}}$ 期间具有相同的窗口电影。因此，根据窗口电影引理，我们可以构造一个新的组装序列 $\vec{\beta}^{\text{out}}$，其开头与 $\vec{\alpha}_j^{\mathcal{T}}$相同，但在该序列中，边界由 w_1^{out}围定区域内的所有瓦片放置也会发生在边界由 w_2^{out}围定的区域内。我们可以对内室中的柱子也做同样的操作，从而类似地定义组装序列 $\vec{\beta}^{\text{in}}$。随后，我们可以重复这一过程，通过重复相应窗口区域内发生的瓦片附着，使两根柱子都向上“泵升”；还要再次注意，绝不会有瓦片被放置在 x-坐标 x_t 处，因此任一柱子的生长都不会影响另一根。

因此，我们可以按以下方式构造一个组装序列 $\vec{\gamma}$。首先，我们继续

推动外腔室柱生长，直到最后一个宏瓦片完成解析，使柱体的高度达到 h。不过，我们确实需要稍加注意，因为在最后一次泵送迭代期间，窗口电影引理的假设将不再成立。这是因为，当我们足够接近天花板上的开口时，天花板的宏瓦片及周围的模糊区会改变窗口电影。然而，如果仔细考察泵送过程中发生的生长，这并不会造成问题。要理解原因，请回想一下：不允许在任何不属于已解析宏瓦片相邻模糊区的位置发生生长。因此，在先前的泵送迭代中，当瓦片附着在柱体上方的某个宏瓦片位置（例如 m）时，在该位置解析之前，没有瓦片能够附着在与 m 相邻的那些宏瓦片位置。因此，即使窗口电影引理不再成立，我们仍然可以重复相同的瓦片附着序列，直到宏瓦片解析并形成高度为 h 的柱体，因为天花板模糊区中的瓦片都无法阻止所需的附着。将外室柱生长到高度为 h 个宏瓦片后，我们继续组装序列 $\vec{\gamma}$，执行在 $\vec{\beta}^{\text{in}}$ 中发生的相同瓦片附着，这些附着对应于瓦片附着到内室柱上。然后，我们令组装序列 δ 为由组装序列 $\vec{\alpha}_0^{\mathcal{T}}$、.....、$\vec{\alpha}_{j-1}$ 和组装序列 $\vec{\gamma}$ 连接而成的组装序列。该组装序列在 $\mathcal{T}$ 中有效，但在 R 下，它映射为 $\mathcal{S}$ 中的一个组装序列，其中内室柱在外室柱长到足以限制该区域之后仍继续生长。这与前提矛盾；由于我们此前并未对 $\mathcal{T}$ 作出任何假设，因此 $\mathcal{T}$ 不可能正确模拟 $\mathcal{S}$。◀

4.5 PaTAM 可以模拟有向 PaTAM

▶**定理 13**。 存在一个通用的平面异步瓦片组装模型瓦片集 S，能够模拟任意有向 *PaTAM* 系统。

4.5.1 瓦片组件

该构造使用了几个瓦片构件，这些构件能够执行某些特定任务或按照特定模式生长，且均改编自现有的瓦片组装文献。正如算法通常使用现有的数据结构以伪代码形式进行描述一样，我们将使用这些构件来描述我们的构造。

图灵机模块

用于 [21] 以渐近最优的瓦片复杂度组装有限形状，图灵机块是一种瓦片构件，可在一个正方形空间区域内模拟空间和时间受限的图灵机。TM块的每一侧都被指定为输入端或输出端。TM块的输入和输出均由沿一行瓦片呈现的胶水编码。如果指定特殊胶水分别表示 0 和 1，这些胶水便可用于以位的形式编码数据；此外，输出侧呈现的胶水还可用于与其他瓦片构件连接，或启动相邻 TM块的生长。因此，TM块可以生长形成任意可计算图案。

探针与探针区域

最初在 [2]，中定义的探针，只是放置在宏瓦片特定位置上的高列瓦片。探针解决了图17所示的跨间隙（AtG）协作模拟问题。直观来看，似乎有必要封锁一片空间，以确定两个相对的宏瓦片是否能够协作，在指定位置放置一个瓦片

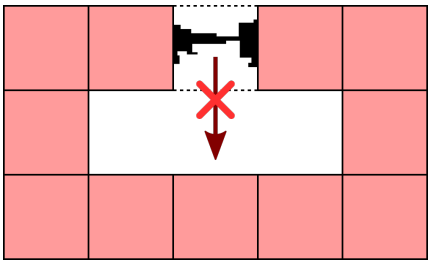

图17 在模拟过程中检查跨间隙协作时，瓦片不能简单地跨越整个间隙，否则会使两个空间区域彼此断开。

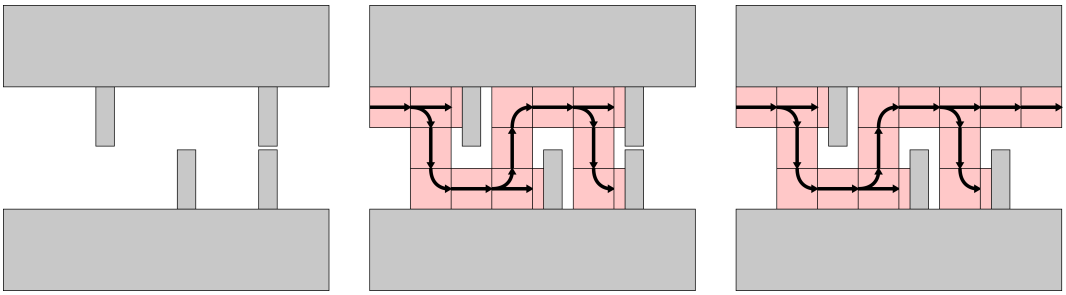

图18 探针区域示意图。如果探针未相遇，TM块将能够围绕探针生长。否则，探针会阻止TM块的生长，而探针之间的跨间隙协作则可以启动不同TM块的生长，使其执行不同的任务。

。我们可以通过指定一些区域来避免这一点：探针序列会在这些区域中生长到与可能进行跨间隙协作的瓦片对相对应的位置。如果相关宏瓦片之间无法进行跨间隙协作，那么探针之间会保持足够大的间距，使数据路径能够穿过探测区域；否则，两个探针将会相遇，而它们之间仅有一个瓦片的间隙，无法容纳数据路径。此时，一个瓦片可以在探针之间协作附着，并启动一条新的数据路径生长，以表明当前宏瓦片可以解析为由跨间隙协作放置的瓦片。

4.5.2 宏瓦片协议

给定一个DPaTAM系统$\mathcal{T}$，我们通过描述瓦片如何在$\mathcal{S}$ 的宏瓦片内附着并解析为$\mathcal{T}$中的一个瓦片，来说明某个PaTAM系统$\mathcal{S}$ 对$\mathcal{T}$的模拟过程。宏瓦片位置中的生长会在至少一个相邻宏瓦片完成解析后开始，而我们的宏瓦片必须能够适应相邻宏瓦片可能以任意顺序完成解析的情况。通过这种方式，宏瓦片内的瓦片附着表现得类似于并发算法，但在可能出现不良结果时，需要特别注意处理竞态条件并避免死锁。

宏瓦片与组件块

我们所用协议的基本组件是瓦片构件，我们称之为组件块 （CB），它们由若干图灵机块构成，并且可能会启动探针区域的生长。$\mathcal{S}$ 中的每个宏瓦片都由一个 9x9 的组件块网格构成，而每个组件块又由一个 $2k \times 2k$ 网格中的图灵机块构成，其中 k 是选择 4

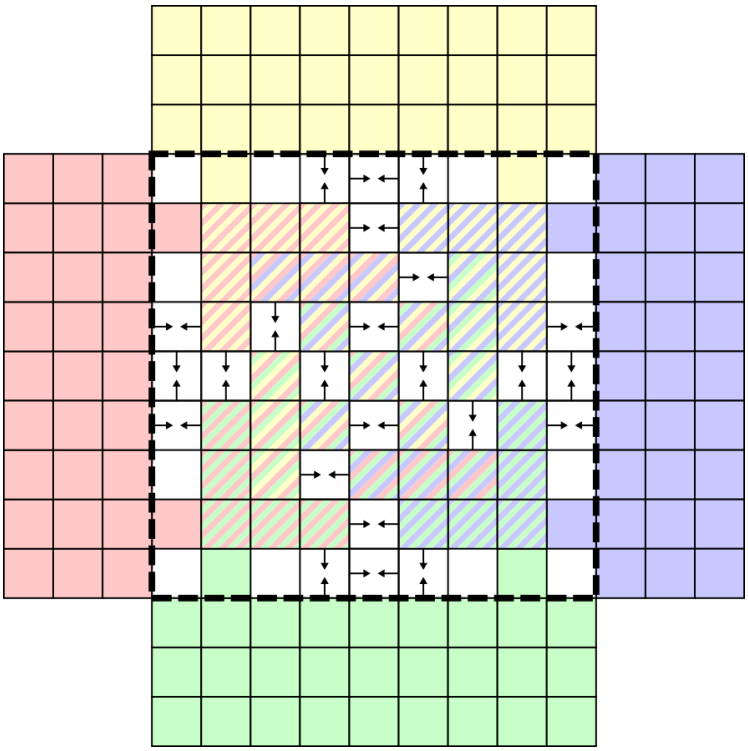

图19 描述可能出现在宏瓦片位置的潜在组件块 9×9 网格的示意图。包含两个箭头的方块表示可能包含探测区域的网格位置。宏瓦片周围的彩色方块表示相邻宏瓦片的部分区域。宏瓦片内网格位置的颜色表示每个组件块可能从哪些相邻宏瓦片获取信息。

个来自$\mathcal{T}$的瓦片胶水的方法数。也就是说 $k = g^4$，其中 g 是$\mathcal{T}$中瓦片类型上出现的胶水数量。组件块中的每个图灵机块都足够大，可以存储以下信息：

- 被模拟系统 $\mathcal{T}$的描述、从 $\mathcal{T}$中选取的最多 4 个胶水组成的序列、其在 CB 内的位置、
- CB 在宏瓦片内的位置，以及作为待执行算法的宏瓦片算法协议的描述。
-
-
-

我们将在后文中回顾此列表，以便在描述完协议后确定模拟的缩放因子。

图19展示了包含可能含有探测区域的 9×9组件块网格。每个探测区域都可能包含探针，这些探针从相邻的CB中生长，其生长方向由箭头指示。探测区域中的探针由TM块的行构成，其跨度为一个CB宽度的一半。不过，其中一个生成探针的CB会预先选定，使其生长距离略短于探测区域的一半。这会在两个对齐的探针之间形成一个单瓦片宽的间隙，瓦片可以在此协作附着，从而启动其他依赖探针对齐情况的TM块的生长。图20展示了两种情形：一种是两个探针在探测区域内对齐，此时没有TM块路径能够穿过该区域，探针之间的协作决定下一个CB；另一种是两个探针未对齐，此时TM块路径可以穿过该区域，以确定下一个CB。

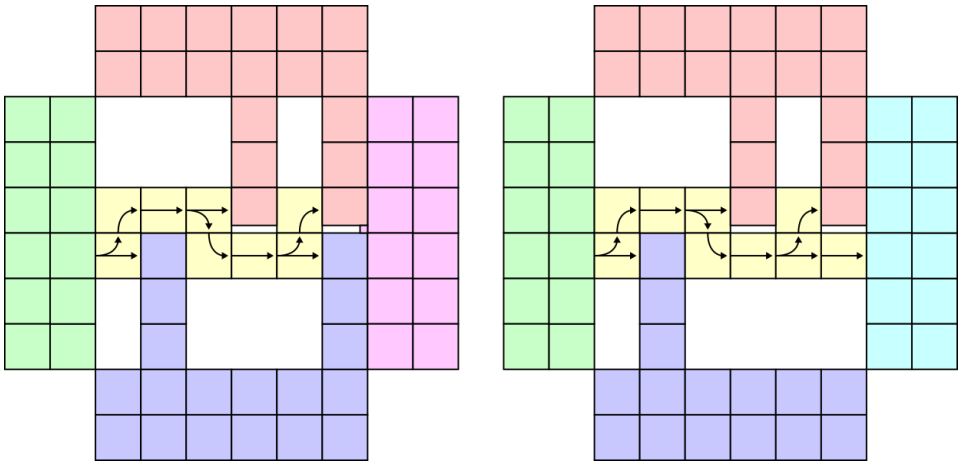

图20 组件块之间的探测区域。红色和蓝色的组件块将由图灵机块构成的探针伸入它们之间的网格位置。黄色图灵机块由绿色组件块中的图灵机块生成，只有在探针未对齐时才能通过探测区域。如果探针对齐（左图），黄色图灵机块将无法通过，而右侧的组件块则由探针之间的协同生长启动。如果探针未对齐（右图），黄色图灵机块便可通过并启动右侧组件块的生长。因此，根据探针的对齐情况，探测区域右侧的组件块由探针所生长自的组件块或探测区域左侧的组件块决定。

我们可以认为，这些组件块的行为类似于独立的瓦片，探针区域则促进跨间隙协作，而这些组件块共同构成一个宏瓦片，用于执行在 9×9 网格中模拟$\mathcal{T}$的算法。这些“瓦片”沿着一条路径生长，在此过程中不断积累有关周围宏瓦片的信息，直到抵达宏瓦片的中心。一旦到达中心，根据我们协议的设计，构成 CB 的图灵机块将拥有足够的信息，从而确定宏瓦片应解析为$\mathcal{T}$中的哪块瓦片。指定的探针区域标示了两个 CB 可以“整合”有关相邻宏瓦片信息的潜在位置，同时也允许图灵机块在探针未对齐时穿过。因此，CB 的大小（即 $2k \times 2k$ 个图灵机块）经过专门选择，以确保对于相邻宏瓦片所呈现的每种胶水组合，始终都有足够的探针位置。额外的系数 2 意味着每个探针都有足够的空间，使图灵机块即使在相邻探针之间也能挤身通过。

单个周围宏瓦片的协议

我们将描述发生在 9×9 组件块网格中的协议，并将每个组件块视作一块瓦片。这些“瓦片”的协同结合始终发生在指定的探测区域中，并由探针促成；而强度为 τ 的连接则由构成每个组件块“瓦片”的图灵机块促成。换言之，组件块之间强度为 τ 的连接，只不过是图灵机块生长的一种固定模式，它使组件块沿着某条预定路径生长，而该路径可能取决于存储在图灵机块中的信息。

如图21所示，来自相邻宏瓦片的 CB 首先生长为两个镜像对称的“T”形结构，称为手。随后，CB 在这些手与相邻宏瓦片之间的探针区域内协同生长。由于目前我们只处理一个相邻宏瓦片，这些协同“附着”只会使 CB 生长到宏瓦片第一行的中心。接下来可能发生两种情况。如果相邻宏瓦片对应于$\mathcal{T}$中的一个瓦片，且其粘合剂允许发生强度为 τ 的附着，

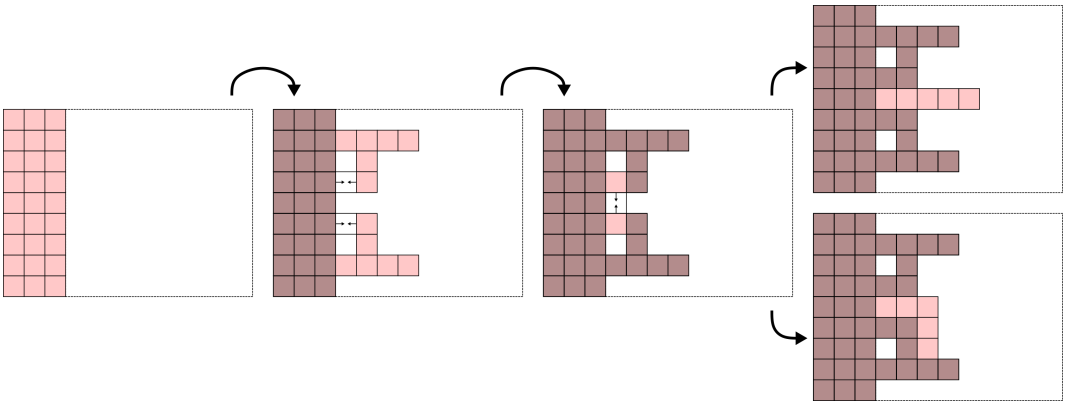

图21 来自相邻宏瓦片的 CB 生长模式。从相邻宏瓦片开始，CB 将生长成镜像的手，这些手协同作用，使 CB 能够在宏瓦片第一行的中央附着。如果此宏瓦片对应于 $\mathcal{T}$ 中强度为 τ 的附着，那么一行 CB 将附着在中央（顶部），最终完成该宏瓦片；否则，它们会沿顺时针方向生长（底部），等待来自相邻宏瓦片的生长。

那么构成 CB 的图灵机块就拥有足够的信息来解析当前宏瓦片。在这种情况下，强度为 τ 的附着会使 CB 生长到宏瓦片中心，并最终使宏瓦片得到解析，具体情况将在后文描述。否则，CB 路径只会沿着宏瓦片顺时针一侧的手生长；在另一个相邻宏瓦片得到解析之前，不会发生进一步生长。

两个相邻周围宏瓦片的协议

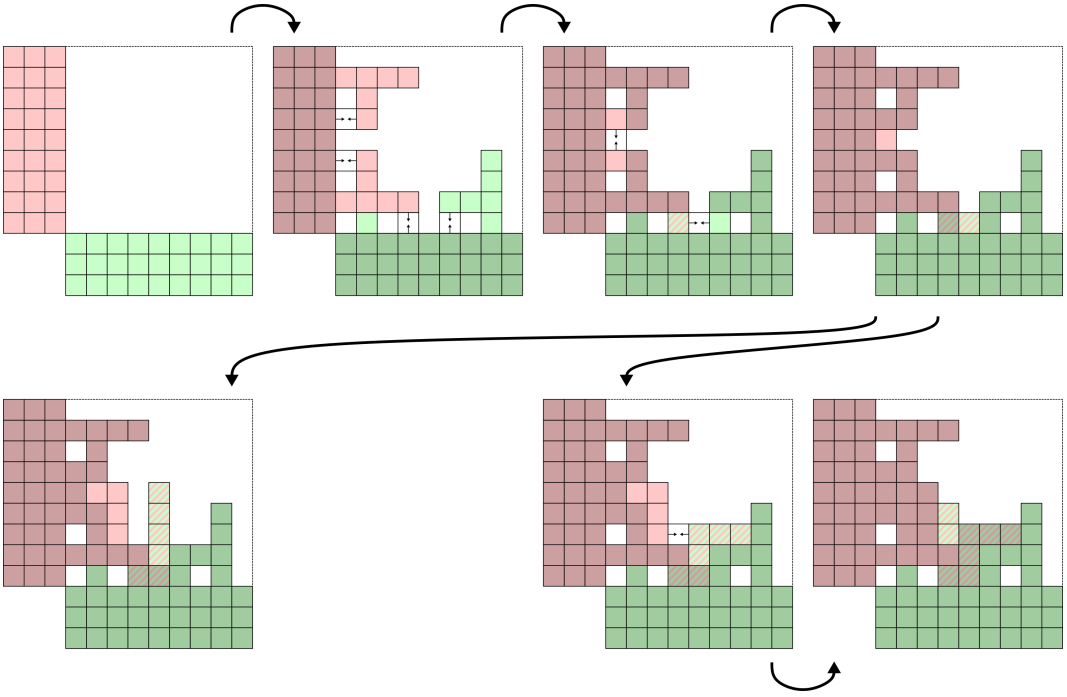

图22 有两个相邻的周围宏瓦片时，该协议与之前类似，但这两个周围宏瓦片会争相放置各自的一个手。

图22展示了两个出现在当前宏瓦片相邻两侧的周围宏瓦片所使用的协议。需要注意的是，周围宏瓦片可能在不同时间完成解析，因此我们的协议设计为能够处理不同顺序的CB附着。生长的开始方式与上述情况非常相似：两个周围宏瓦片都会尝试先生长自己的手。不过请注意，它们都会尝试在同一位置生长其中一只手。为处理这种情况，我们只需要求在手生长期间，组成两只手共享的CB区块的图灵机块先在共享角放置一个瓦片。哪只手先成功放置该瓦片，哪只手就生长。在图22中，先放置瓦片的是西侧宏瓦片的手，但南侧宏瓦片的手也完全可能先放置。

手部生长完成后，组件块（CB）之间的协作式“附着”会像之前一样发生在手部与周围宏瓦片之间，但在这种情况下，其中一次协作附着将发生在一个宏瓦片与一个源自另一个宏瓦片的手部之间。因此，这种协作式CB附着能够整合两个相邻宏瓦片的信息，并将两种粘合剂存储在构成该CB的图灵机块中。如果这些信息足以使该宏瓦片完成解析，也就是说，如果周围宏瓦片代表的 $\mathcal{T}$ 中的瓦片能够协作，从而允许一个瓦片在此位置附着，那么CB将以 τ 强度“附着”到宏瓦片的中心，最终促使其完成解析。否则，它们都会像只有一个周围宏瓦片时的情况一样，生长形成顺时针肘部。不过，这一次，两个相邻肘部之间存在一个探测区域，允许进一步附着少量CB。在另一个周围宏瓦片完成解析之前，这些附着不会产生任何作用，因为此时 $\mathcal{T}$ 中尚无任何瓦片能够在与该宏瓦片对应的位置附着。

请注意，此过程不受周围宏瓦片解析顺序的影响。即使西侧宏瓦片远早于南侧宏瓦片完成解析，并按照单个周围宏瓦片的协议生长，此协议仍然能够执行，且由南侧宏瓦片输掉放置其手部结构的竞争。情况是对称的，因此即使南侧宏瓦片赢得竞争，也会以类似方式发生。此外，即使最先到达的周围宏瓦片对应于$\mathcal{T}$中的一个瓦片，且该瓦片能够在当前宏瓦片中形成强度为 τ 的附着，另一个宏瓦片形成的附着也不会造成干扰。

两个相对周围宏瓦片的协议

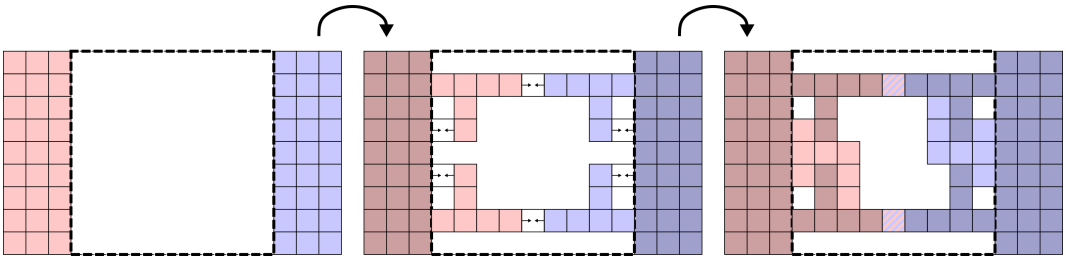

图23

当两个相邻的宏瓦片彼此相对时，如图23所示，双方生长出的手之间的探测区域将有助于确定该宏瓦片的解析结果。手生长完成后，如果这两个相对的宏瓦片对应于$\mathcal{T}$中能够进行跨间隙协作的瓦片，那么相对的手之间的探测区域

将会有对齐的探针。利用这些探针，构成 CB 的图灵机块能够整合来自两个相邻宏瓦片的信息，从而确定当前宏瓦片将解析为哪种瓦片。请注意，这种情况与前几种情况略有不同，因为 CB 不会生长到宏瓦片的中心。事实上，双方都生长完成后，宏瓦片内部将成为一个受限区域，不会再有其他瓦片扩散进入其中。不过这并无影响，因为手之间的两个 CB 都拥有足够的信息来确定该宏瓦片应如何解析；所需做的只是将这些信息传播到瓦片的空侧。

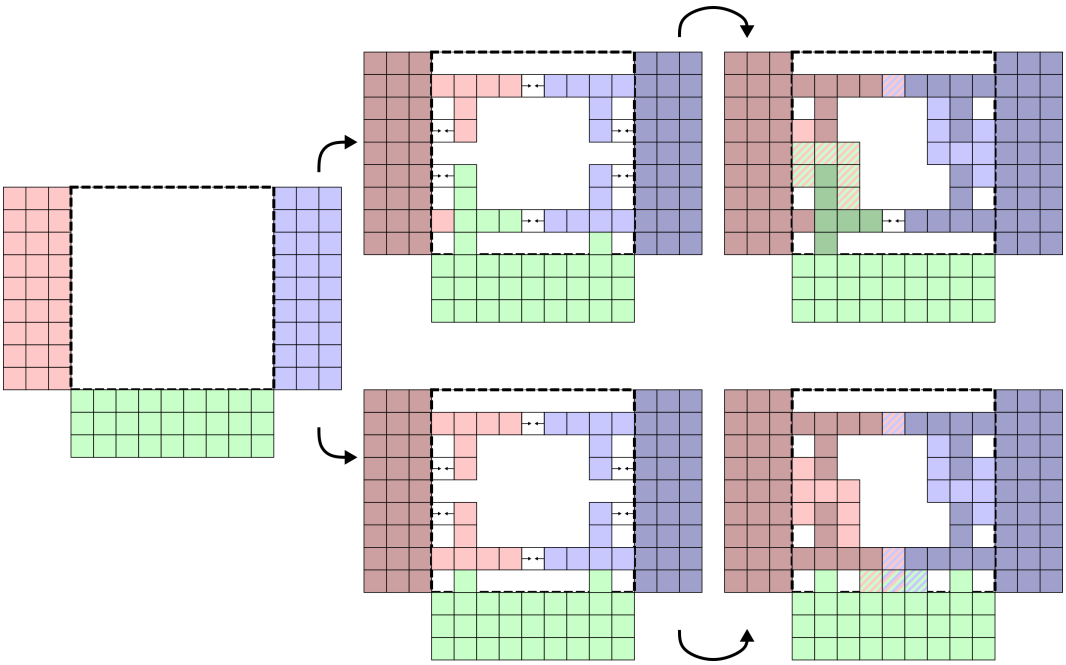

图24

即使相对的宏瓦片之间还有另一个环绕宏瓦片，该协议也能成功确定宏瓦片，如图24所示。关于哪些宏瓦片能在放置其手的竞争中胜出，存在几种可能，但这些可能性不会影响不含环绕宏瓦片一侧的探测区域。因此，无论图24南侧发生何种瓦片附着，CB 仍然可以附着在宏瓦片的北侧，表明该宏瓦片已确定为与跨间隙协作附着相对应的瓦片。相对的手之间、北侧探测区域下方的任何生长都无法影响这一确定过程，因为探针会将其阻挡；而沿南侧的生长无关紧要，因为宏瓦片无需在该方向表明其确定结果，南侧的环绕宏瓦片已经完成确定。此外，由于我们模拟的是有向系统，当前宏瓦片无论如何都不可能确定为其他瓦片。

另一方面，如果这两个相对的宏瓦片并不代表$\mathcal{T}$中能够进行跨间隙协作的瓦片，那么相对的手之间共享区域内的探针就不会对齐，图灵机块便能在它们之间生长，从而使协议继续处理其他情况。换言之，不具备跨间隙协作能力的相对宏瓦片不会妨碍协议继续进行。如果另一个宏瓦片

最终指向北或南，并代表T中能够与周围的东侧、西侧或两侧宏瓦片协作的瓦片，那么它仍然能够做到这一点。

三块周围宏瓦片的协议

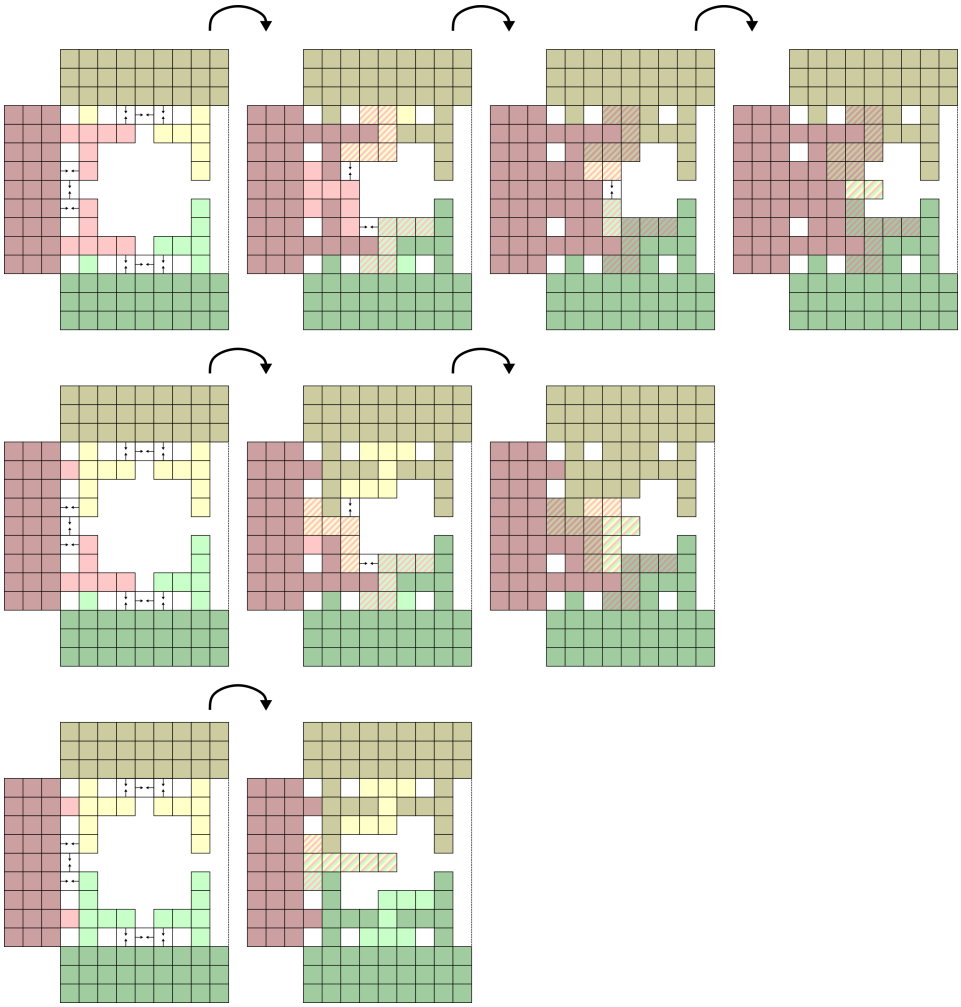

图25

对于三个周围宏瓦片协作以完成该宏瓦片解析的情况，需要考虑若干种情形，具体取决于哪个周围宏瓦片先放置其手。这些情形如图25所示。最复杂的情形是中央的周围宏瓦片同时赢得两场竞赛并放置了它的两只手，不过所有情形本质上都相同。在这种情形下，与之前一样，三侧都会生长出自己的手和相应的顺时针肘部。随后，这些肘部通过探针协作，将各自的信息与相邻肘部的 CB 合并。接下来，剩下的 CB 可以再次协作，汇总来自三侧的信息，并向宏瓦片中心生长，最终完成解析。其他情形较为简单，因为 CB 会更早汇总来自三个周围宏瓦片的信息。在这些情形中，CB 掌握的信息足以“知道”该宏瓦片应如何解析，因此能够更早地向中心生长。

四个周围的宏瓦片

在我们的有向 PaTAM 系统 $\mathcal{T}$中，不可能有瓦片放置在四周都被瓦片包围的位置。四面都被包围的任何瓦片位置都是受限区域；如果放置该瓦片必须依赖全部四块瓦片，那么由于扩散限制，这种情况就不可能发生。另一方面，如果所需瓦片少于四块，但在瓦片附着之前仍可能有四块瓦片包围该位置，那么该系统就不是有向的；瓦片可能会在该区域受限之前放置，也可能不会。在我们的模拟系统 $\mathcal{S}$ 中，这种情况绝不会发生，因为它违反了 $\mathcal{T}$ 是 DPaTAM 系统这一假设。

解析宏瓦片

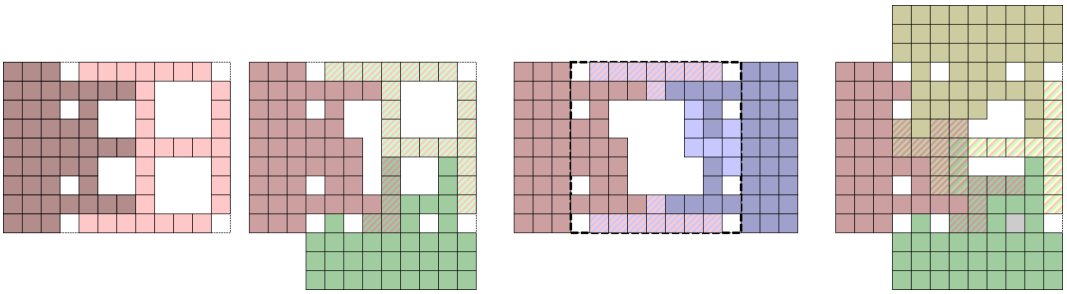

图2 6

当一个组件块到达宏瓦片的中心（或者当相对的宏瓦片的手之间在探测区域发生跨间隙协作时），该宏瓦片就准备好进行解析。在这个中心组件块位置放置第一个瓦片后，宏瓦片表示函数 R 不再将该宏瓦片映射为空空间，而是映射到$\mathcal{T}$中的正确瓦片；该瓦片已由组件块根据必要周围宏瓦片所提供的信息确定。此时，其他组件块开始“附着”并向四个方位方向生长，以便如图2 6所示，向宏瓦片的每个必要侧面生长一行瓦片。随后，这些瓦片行会在相邻的宏瓦片位置重复整个过程，生长出手并遵循所述协议。

请注意，CB 可能无法沿某个方向完全生长。例如，如果某个周围的宏瓦片在当前宏瓦片中的大部分过程完成后才解析出来，或者某个方向要求在受限区域内进行瓦片放置，就可能发生这种情况。不过这并不是问题，因为只有那些可能对应于$\mathcal{T}$中可发生有效瓦片附着的位置的周围宏瓦片，才需要“了解”当前宏瓦片的解析状态。

4.5.3 模拟的缩放因子

回顾一下，组成组件块的每个图灵机块都包含以下信息：

- 对被模拟系统 $\mathcal{T}$的描述、从 $\mathcal{T}$中选出的
- 至多 4 个胶水组成的序列、其在组件块
- 中的位置、组件块在宏瓦片中的位置，
- 以及

XX:32 基于瓦片的自组装中的内在跨模型模拟

- 对宏瓦片算法协议的描述，该协议充当要执行的算法。

对于给定的系统 $\mathcal{T} = (T, \sigma, \tau)$，我们注意到，图灵机块和组件块只需要瓦片集 T和结合阈值 τ，即可确定宏瓦片应如何解析。$\mathcal{T}$的种子 σ 由$\mathcal{S}$ 的种子处理，因为我们的模拟可以从一个种子组装开始，其中预先解析的宏瓦片已按正确构型放置，以表示 σ。

为了描述瓦片集 T，我们注意到， T 中出现的胶水数量至多为$4|T|$。因此，每种胶水都可以用 $O(\log(|T|))$ 位高效编码，整个瓦片集也就可以用 $O(|T|\log(|T|))$ 位编码。结合阈值只是一个正整数，因此可以用 $O(\log(\tau))$ 位编码。对于我们的图灵机块，可以将描述瓦片集 T 及结合阈值 τ 的表编码为 $O(|T|\log(|T|) + \log(\tau))$ 位。此外，对 4 种胶水组成的序列进行编码只需 $O(\log(|T|))$ 位。

图灵机块在组件块内的位置坐标介于 0 和 $2k$ 之间，其中 k 同样是 4 个胶水的所有可能序列的数量。 $k = g^4$ ，其中 g 是胶水的数量，因此 $\log(2k) = \log(2g^4) = O(\log(g)) = O(\log(|T|))$，由此图灵机块的位置可用 $O(\log(|T|))$ 位编码。由于组件块在宏瓦片内的位置始终是 $\{0, 1, \ldots, 8\}^2$ 中的一个点，因此只需用常数数量的位来存储。类似地，图灵机块执行的算法是固定的，因此也只需用常数数量的位来存储。因此，在我们的构造中，图灵机块存储的信息仅需 $O(|T|\log(|T|))$ 位即可编码。

宏瓦片中的每个 TM 块都会执行一个固定算法，上文已对其进行隐式描述。大部分情况下，该算法只要求 TM 块按照固定模式启动其他 TM 块的生长，以构建当前组件块；但有时也需要查询瓦片集 T，以确定已知胶水是否足以在$\mathcal{T}$中诱发瓦片附着。按照固定模式生长，需要的空间和时间与组件块的大小同阶，即 $O(|T|^4)$。为了确定已知胶水是否足以在$\mathcal{T}$中发生附着，我们可以修改对瓦片集 T 和结合阈值$\mathcal{T}$的朴素编码，采用稍复杂的编码方式：建立一张表，为每种 4 种胶水的组合设置一个条目。这些条目只需存储一个引用，指向在周围胶水条件下可能附着的瓦片类型。由于我们模拟的是有向系统，我们知道在同一位置不可能有多个瓦片附着，因此每个条目最多只需存储一种可能的瓦片。这样的编码需要 g^4个条目，每个条目大小为 $O(\log(|T|))$，因为每个条目只包含一种瓦片类型的描述。因此，该表需要 $O(|T|^4\log(|T|))$的空间，查询所需时间也相同。

因此，总体而言，每个TM块需要达到 $O(|T|^4\log(|T|))$个瓦片的大小；由于每个组件块在每个维度上包含 $2k = 2g^4$ 个TM块，因此在最坏情况下，组件块的宽度必须达到 $O(|T|^8\log(|T|))$个瓦片。由于每个宏瓦片中组件块的数量固定，这也就是该模拟的缩放因子。虽然缩放因子随规模呈多项式增长，但我们注意到，若将瓦片集查找表与TM块分开存储（其中大多数不需要查询该表），便能显著改善这一结果。在我们之前的构造版本中，我们采用了这种做法，但这需要复杂得多的协议，也更难以解释和理解。无论如何，该构造的目的是证明通用瓦片集的存在，并表明PaTAM能够实现其有向子集所具有的全部动力学。

参考文献

1 John Calvin Alumbaugh、Joshua J Daymude、Erik D Demaine、Matthew J Patitz 和 Andréa W Richa。使用主动瓦片式自组装模拟可编程物质系统。载于《DNA计算与分子编程国际会议》，第140–158页。Springer，2019年。URL: http://dx.doi.org/10.1038/nature08016。2 David Doty、Jack H. Lutz、Matthew J. Patitz、Robert T. Schweller、Scott M. Summers 和 Damien Woods。瓦片组装模型具有内在普适性。载于《第53届IEEE计算机科学基础年会论文集》，FOCS 2012，第302–310页，2012年。3 Shawn M. Douglas、Hendrik Dietz、Tim Liedl、Björn Högberg、Franziska Graf 和 William M. Shih。DNA自组装成纳米尺度三维形状。《自然》，459：414 EP –，2009年5月。URL:http://dx.doi.org/10.1038/nature09026。4 Constantine Glen Evans。会计数的晶体！DNA瓦片自组装的物理原理与实验研究。博士论文，加州理工学院，2014年。5 Bin Fu、Matthew J. Patitz、Robert T. Schweller 和 Robert Sheline。使用几何瓦片进行自组装。载于 Artur Czumaj、Kurt Mehlhorn、Andrew M. Pitts 和 Roger Wattenhofer 编，《自动机、语言与编程——第39届国际研讨会，ICALP 2012，英国华威，2012年7月9日至13日，论文集（第一部分）》，《计算机科学讲义》第7391卷，第714–725页。Springer，2012年。6 Hongzhou Gu、Jie Chao、Shou-Jun Xiao 和 Nadrian C. Seeman。基于邻近性的可编程DNA纳米组装线。《自然》，465(7295)：202–205，2010年5月。URL: doi:10.1038/nature09026。7 Daniel Hader、Aaron Koch、Matthew J. Patitz 和 Michael Sharp。维度、扩散和有向性对抽象瓦片组装模型中内在普适性的影响。载于 Shuchi Chawla 编，《2020年ACM-SIAM离散算法研讨会论文集》，SODA 2020，美国犹他州盐湖城，2020年1月5日至8日，第2607–2624页。美国工业与应用数学学会，2020年。8 Jacob Hendricks、Matthew J. Patitz 和 Trent A. Rogers。在抽象瓦片组装模型中，对有向系统进行普适模拟需要无向性。载于《第57届IEEE计算机科学基础年会论文集》（FOCS 2016），美国新泽西州新不伦瑞克，2016年10月9日至11日，第800–809页，2016年。9 Ming-Yang Kao 和 Robert T. Schweller。用于近似形状的随机化自组装。载于 Luca Aceto、Ivan Damgård、Leslie Ann Goldberg、Magnús M. Halldórsson、Anna Ingólfsdóttir 和 Igor Walukiewicz 编，ICALP (1)，《计算机科学讲义》第5125卷，第370–384页。Springer，2008年。10 Yonggang Ke、Luvena L Ong、William M Shih 和 Peng Yin。由DNA砖块自组装而成的三维结构。《科学》，338(6111)：1177–1183，2012年。11 James I. Lathrop、Jack H. Lutz、Matthew J. Patitz 和 Scott M. Summers。自组装中的可计算性与复杂性。《理论计算机系统》，48(3)：617–647，2011年。12 Wenyan Liu、Hong Zhong、Risheng Wang 和 Nadrian C. Seeman。晶体状二维DNA折纸阵列。《应用化学国际版》，50(1)：264–267，2011年。URL: http://dx.doi.org/10.1002/anie.201005911。13 Kyle Lund、Anthony J. Manzo、Nadine Dabby、Nicole Michelotti、Alexander Johnson-Buck、Jeanette Nangreave、Steven Taylor、Renjun Pei、Milan N. Stojanovic、Nils G. Walter、Erik Winfree 和 Hao Yan。由指令性景观引导的分子机器人。《自然》，465(7295)：206–210，2010年5月。URL: doi:10.1002/anie.201005911。14 Kyle Lund、Anthony T. Manzo、Nadine Dabby、Nicole Micholotti、Alexander Johnson-Buck、Jeanetter Nangreave、Steven Taylor、Renjun Pei、Milan N. Stojanovic、Nils G. Walter、Erik Winfree 和 Hao Yan。由指令性景观引导的分子机器人。《自然》，465：206–210，2010年。

XX:34 基于瓦片的自组装中的内在跨模型模拟

15 Pierre-Étienne Meunier、Matthew J. Patitz、Scott M. Summers、Guillaume Theyssier、Andrew Winslow 和 Damien Woods。瓦片自组装中的内在普适性需要协作。载于《ACM-SIAM离散算法研讨会》（SODA 2014）论文集（美国俄勒冈州波特兰，2014年1月5日至7日），第752–771页，2014年。16 Jennifer E. Padilla、Matthew J. Patitz、Raul Pena、Robert T. Schweller、Nadrian C. Seeman、Robert Sheline、Scott M. Summers 和 Xingsi Zhong。瓦片自组装的异步信号传递：燃料高效计算与高效形状组装。载于 UCNC，《计算机科学讲义》第7956卷，第174–185页。Springer，2013年。17 Jennifer E. Padilla、Ruojie Sha、Martin Kristiansen、Junghuei Chen、Natasha Jonoska 和 Nadrian C. Seeman。用于DNA纳米结构主动自组装的信号传递DNA链交换机制。《应用化学国际版》，54(20):5939–5942，2015年3月。18 Paul W. K. Rothemund。折叠DNA以构造纳米尺度形状和图案。《自然》，440(7082):297–302，2006年3月。URL：http://dx.doi.org/10.1038/nature04586, doi:10.1038/nature04586。19 Paul W. K. Rothemund 和 Erik Winfree。自组装正方形的程序规模复杂度（扩展摘要）。载于 STOC ’00：第三十二届 ACM计算理论研讨会论文集，第459–468页，美国俄勒冈州波特兰，2000年。ACM。20 Paul WK Rothemund、Nick Papadakis 和 Erik Winfree。DNA谢尔宾斯基三角形的算法自组装。《公共科学图书馆·生物学》，2(12):e424，2004年。21 David Soloveichik 和 Erik Winfree。自组装形状的复杂度。《SIAM计算杂志》，36(6):1544–1569，2007年。22 Erik Winfree。DNA的算法自组装。博士论文，加州理工学院，1998年6月。23 Damien Woods。内在普适性与自组装的计算能力。《伦敦皇家学会哲学汇刊A辑：数学、物理与工程科学》，373(2046)，2015年。URL: http://rsta.royalsocietypublishing.org/content/373/2046/20140214, arXiv:http://rsta.royalsocietypublishing.org/content/373/2046/20140214.full.pdf, doi:10.1098/rsta.2014.0214。24 Damien Woods、David Doty、Cameron Myhrvold、Joy Hui、Felix Zhou、Peng Yin 和 Erik Winfree。利用可重编程DNA自组装实现多样而稳健的分子算法。《自然》，567(7748):366–372，2019年。25 Yin Zhang、Angus McMullen、Lea-Laetitia Pontani、Xiaojin He、Ruojie Sha、Nadrian C. Seeman、Jasna Brujic 和 Paul M. Chaikin。DNA功能化液滴的序列自组装。《自然通讯》，8(1):21，2017年。URL: https://doi.org/10.1038/s41467-017-00070-0,doi:10.1038/s41467-017-00070-0。