



Tietokonemallinnus fysiikan työvälineenä

Juha Samela

Luonnonfilosofian seura

13.10.2015

Aiheita

- Mistä on kysymys?
- Lyhyt historiikki
- Molekyylidynamiikka ja nanokappaleet
 - Mallinnus vs. kokeet
 - Näkyvän maailman emergenssi
 - Onko kosmos mallinnettavissa?
- Soluautomaatit
 - Onko kosmos digitaalinen?
- Voiko elämää mallintaa/simuloida?





**MISTÄ
TIETOKONE-
MALLINNUKSESSA
ON KYSYMYKS?**

Analyyttinen ratkaisu

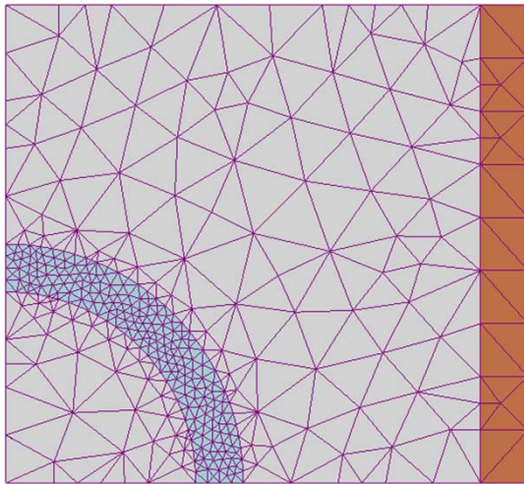
$$ax^2 + bx + c = 0$$

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

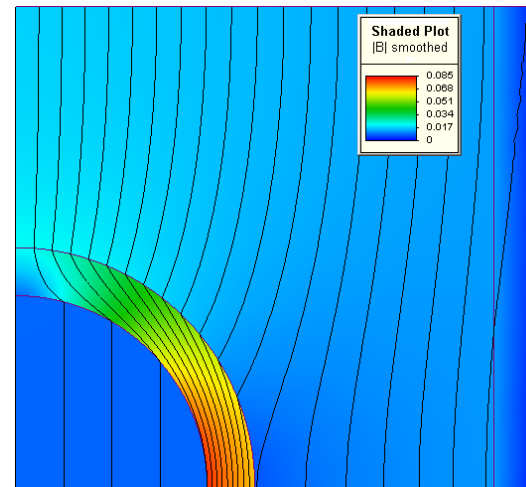
Numeerinen ratkaisu

Jos analyyttistä ratkaisua ei ole johdettavissa, on yhtälö ratkaistava numeerisesti. Saadaan likimääräisratkaisu.

Esimerkkinä elementtimenetelmä:



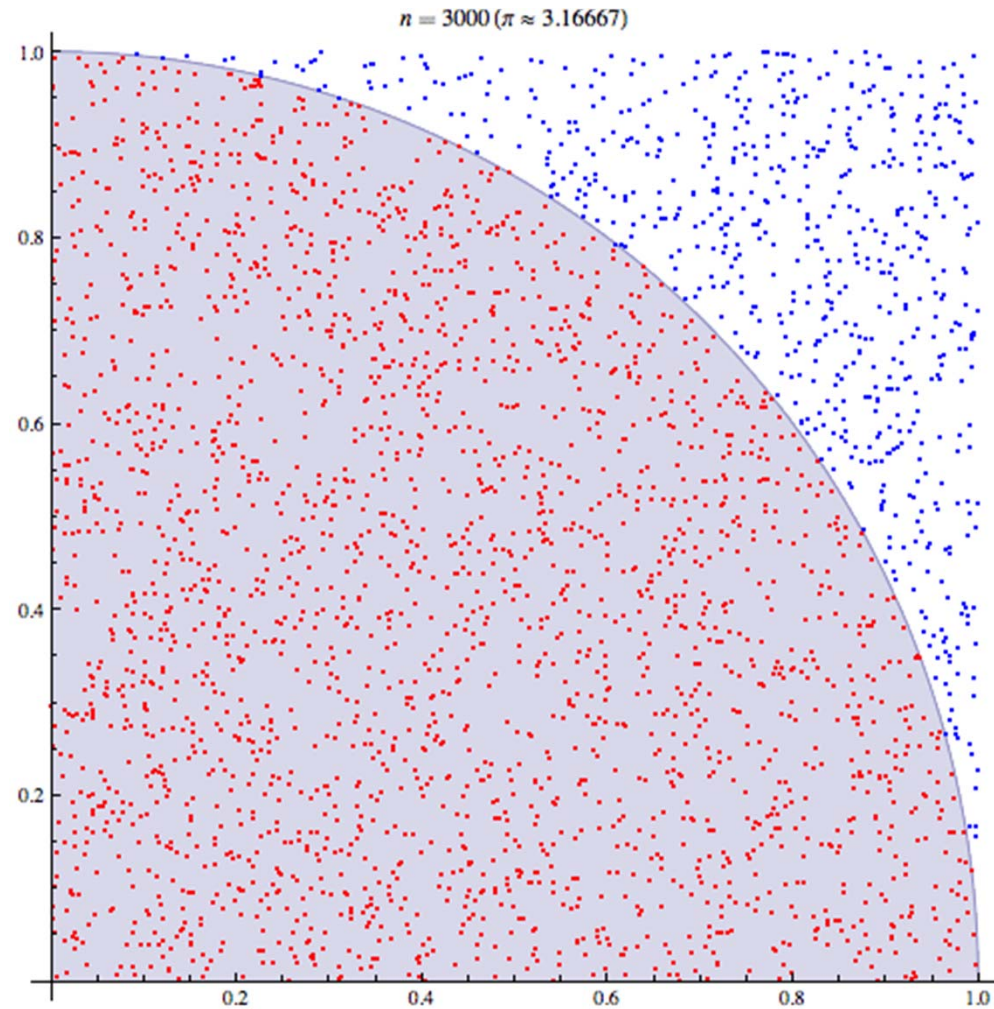
Poikkileikkaus rautasyylinteristä.
Punainen viivoitus kuvaa
laskentahilaa.



Menetelmällä laskettu
magneettivuon tiheys

Monte Carlo -menetelmä

Ympyrän sisään
osuneiden pisteiden
määrä suhteessa
pisteiden
kokonaismäärään on
liikiarvo luvulle $\pi/4$.





Simulointimalli

- Simuloidaan fysikaalisen systeemin aikakehitystä
- Lähtökohtana simuloinnin kohteita koskevat ”säännöt” tai ”kaavat”
- Ei ohjaavaa ”makroskooppista teoriaa”

Satunnaisluvut

- Oikea satunnaisuus
 - Esimerkiksi radioaktiivinen kappale
- Keinotekoinen satunnaisuus
 - Tietokonealgoritmi, joka tuottaa riittävän pitkä sarjan ei-periodisia ja tasaisesti jollekin arvoalueelle jakautuneita satunnaislukuja



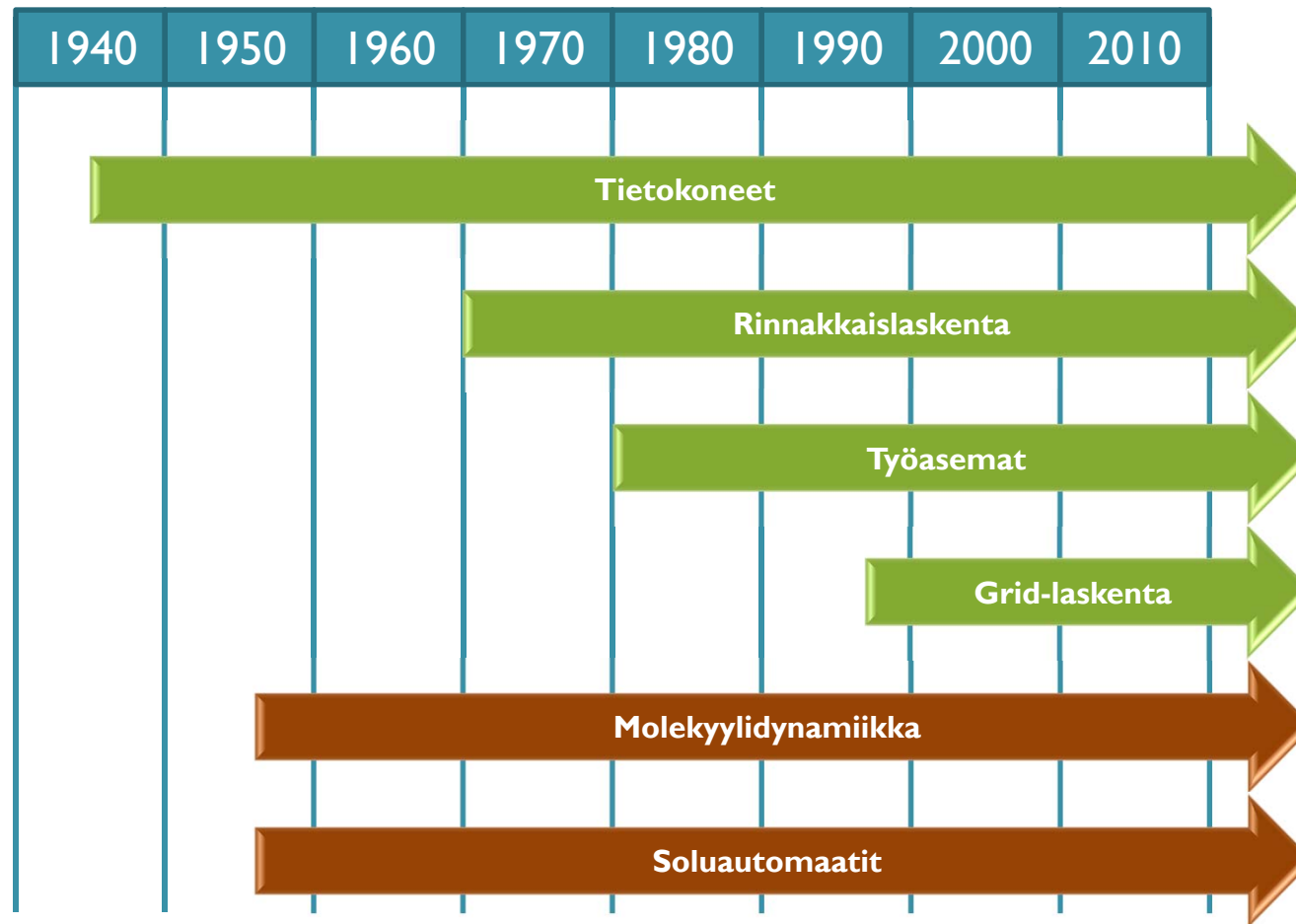
On tietokonemallinnus
kokeellista tutkimusta?

Ei ole!



LYHYT HISTORIA JA NYKYPÄIVÄÄ

Lyhyt historia



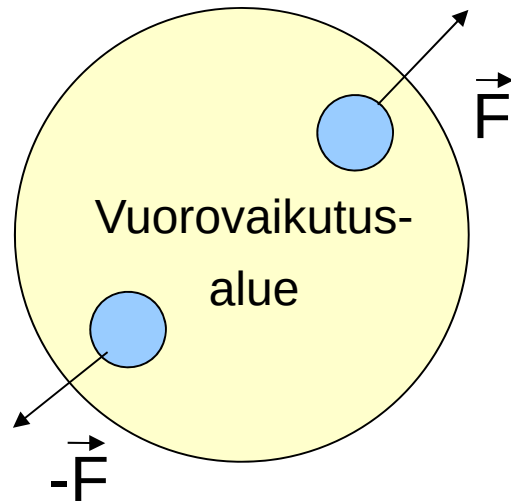
Lisätietoja

- CSC – Tieteen tietotekniikan keskus
 - www.csc.fi
- Helsingin yliopiston tutkimusryhmä
 - <http://www.acclab.helsinki.fi/sim/>
- Akatemian huippututkimusyksikkö: Computational Nanoscience
 - <http://physics.aalto.fi/groups/comp/>



ESIMERKKINÄ MOLEKYYLIDYNAMIIKKA

Molekyylidynamiikka

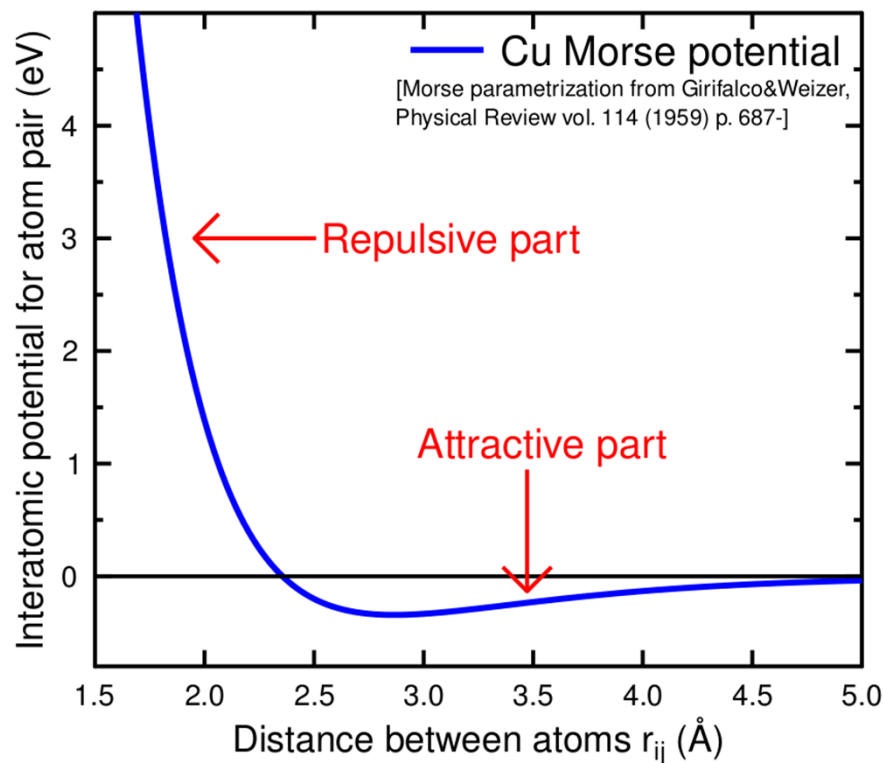
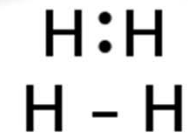
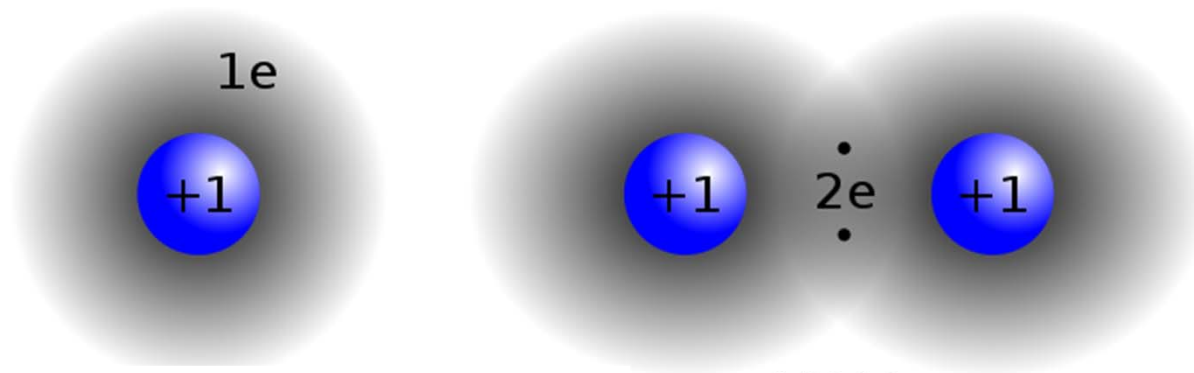


$$\vec{F} = -\nabla V$$

$$\vec{a} = \vec{F}/m$$

- Muutaman atomin vuorovaikutus mallinnetaan kvanttimekanisten laskujen avulla etukäteen.
- Simuloinnin aikana tätä tulosta käytetään laskettaessa atomien väliset voimat.
- Jokaisella simuloinnin aika-askeleella atomeja siirretään niihin vaikuttavan voiman perusteella.
- Simuloinnissa atomit ovat klassista mekaniikkaa noudattavia massapisteitä.

Atomien väliset vuorovaikutukset



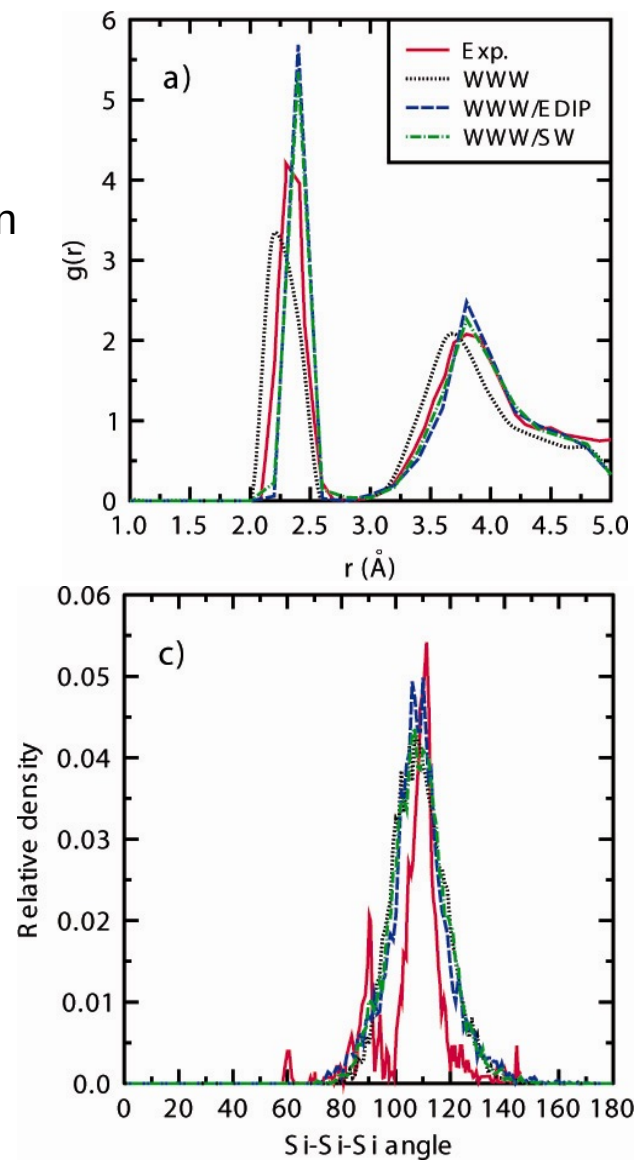
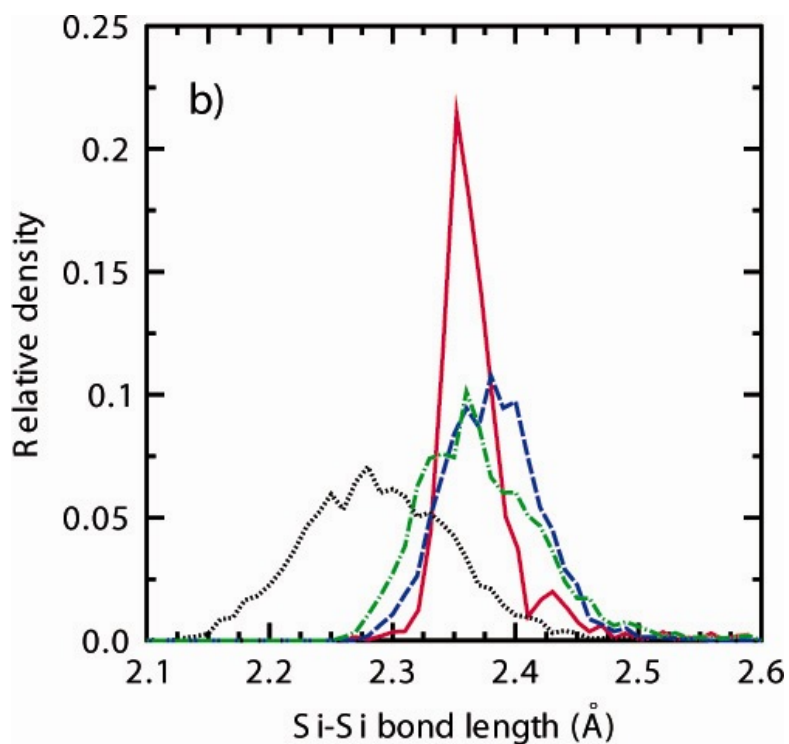
Atomien väliset voimat
lasketaan vuorovaikutuksia
kuvaavista potentiaalfunktioista.

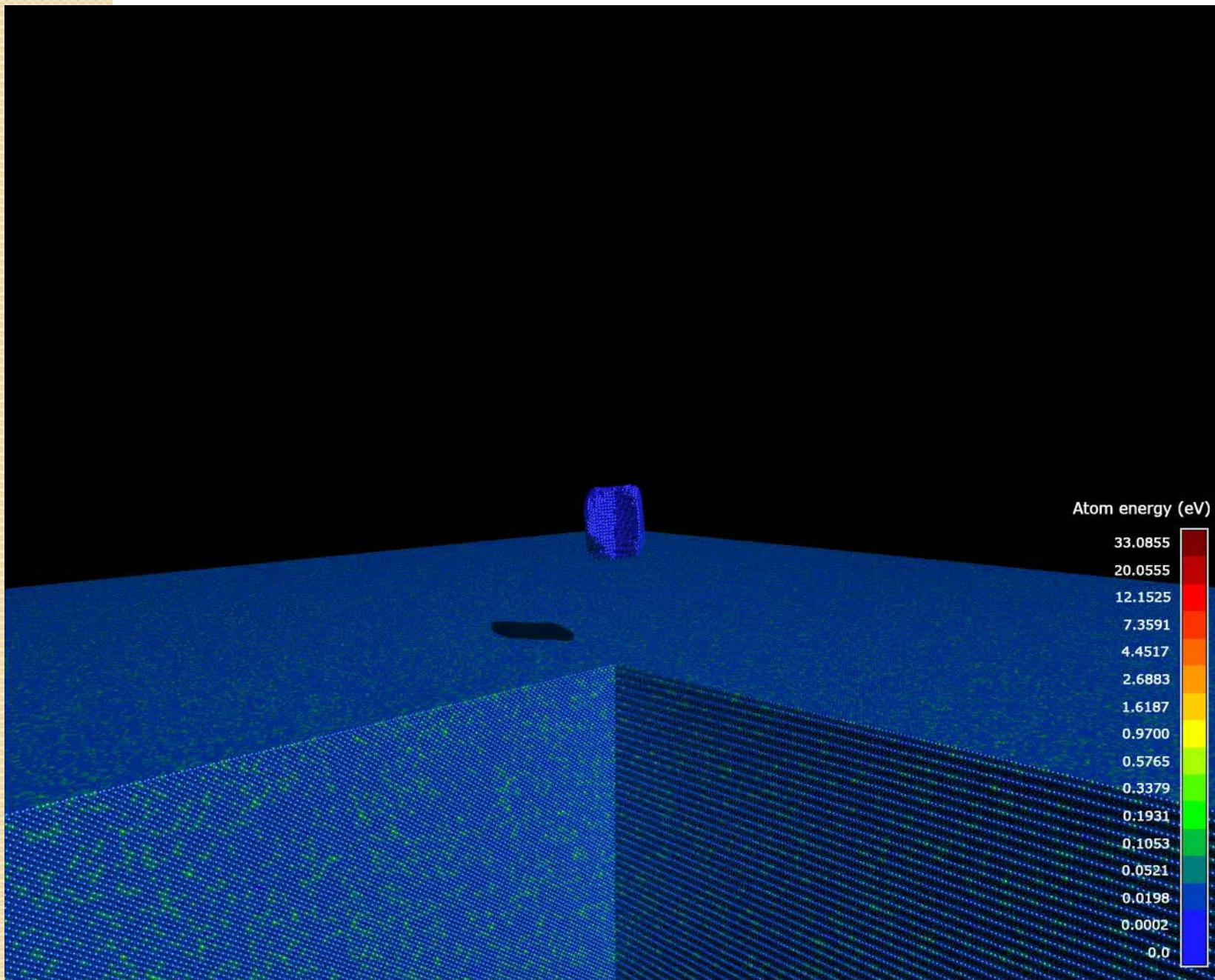
Potentiaali on aina simuloitavalle
Aineelle tyypillinen.

Wikimedia commons: covalent bonding

Digitaalisen aineen laadunvarmistus

Simuloinnissa käytettävän kappaleen ominaisuuksia on verrattava kokeellisiin tosiasioihin.



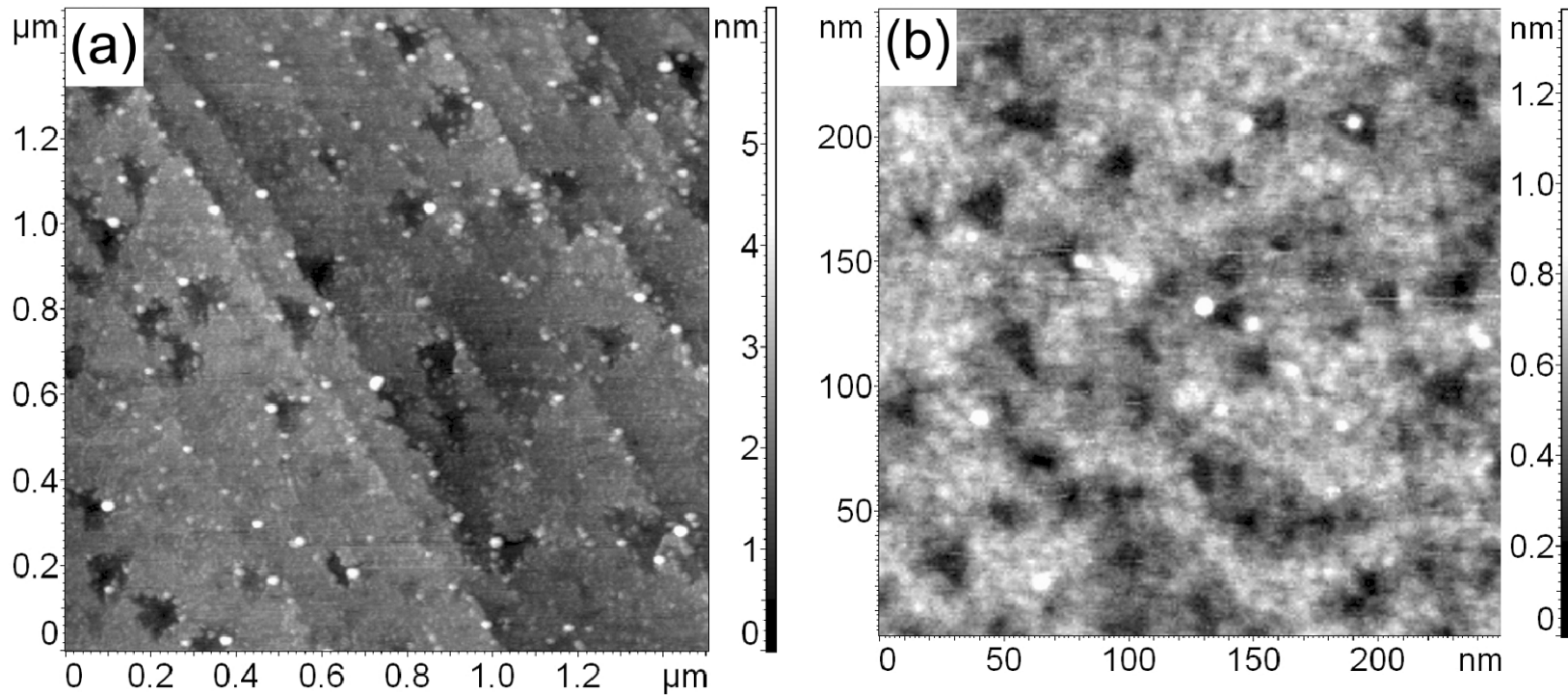


Au_{6300} 500 eV/atom



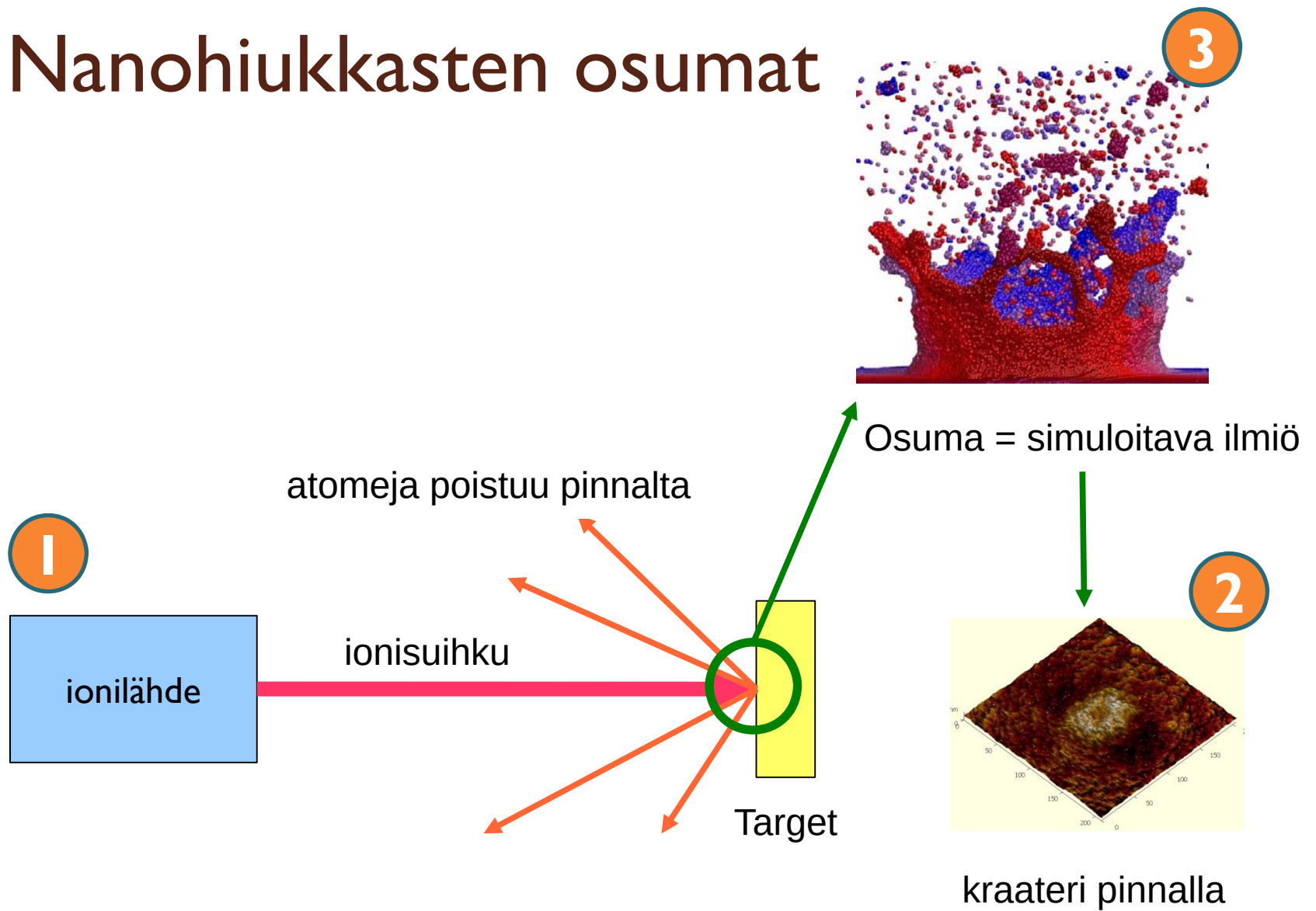
TUTKIMUSESIMERKKI GRAAFEENI

Argon-nanohiukkasten osumajäljet



Atomivoimamikroskoopin kuvia,
4 keV Ar_{27} (Popok et al. PRB 2011).

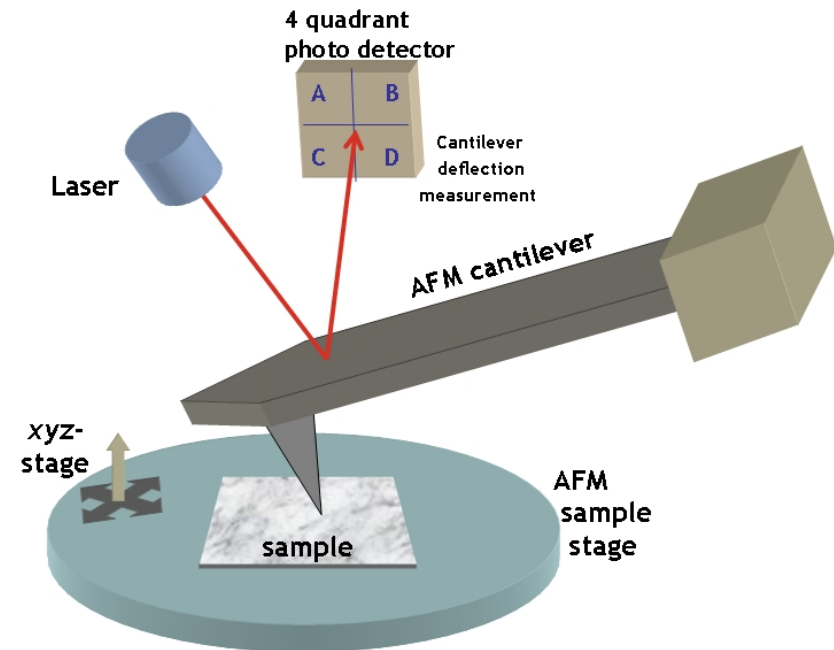
Nanohiukkasten osumat



ioni = sähköisesti varautunut yksittäinen atomi tai atomiryväs (nanohiukkanen)

Koejärjestely

- Kohteena synteettinen hiilikalvo
- Säteilytys Ar_n^+ -ionisuihkun avulla
- Pinnan etsaus 600 °C
- Pinnan tutkiminen atomivoimamikroskoopilla



Wikimedia commons, <http://kristian.molhave.dk>

Tutkimuksen kulku

1 Kokeellinen tai teollinen prosessi

2 Pinnan rakenteen mittaus

3 Simulointi
- vuorovaikutusmalli

4 Teoreettinen tarkastelu



Tulosten
vertailu

Molekyylidynaaminen simulointi

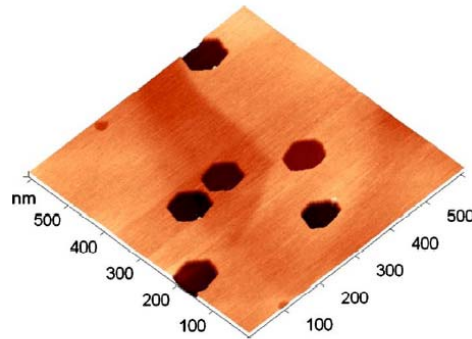
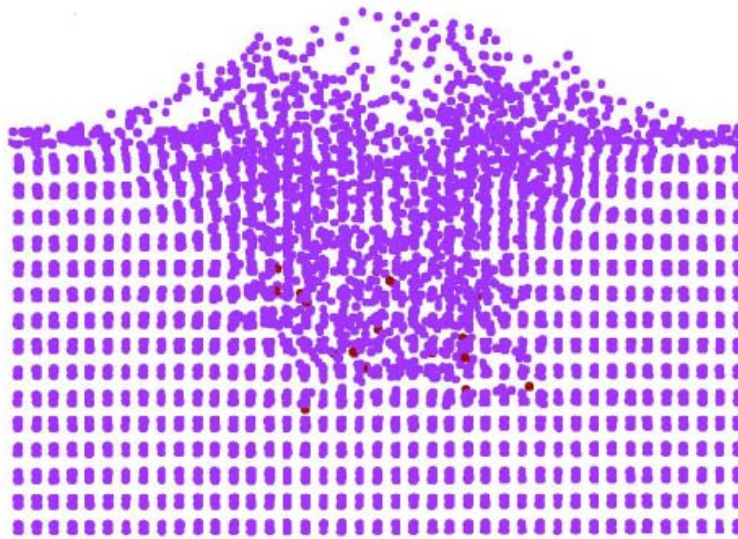


FIG. 1. (Color online) AFM image of HOPG surface after implantation of Ar_{16}^+ cluster ions with an energy of 200 eV/atom (3.2 keV/cluster) followed by etching.

- Tersoffin vuorovaikutusmalli hiiliatomien kesken
- Lennard-Jones –vuorovaikutusmalli Ar-atomien välillä
- Pelkkä repulsiivinen vuorovaikutus argonin ja hiilen välillä
- Kohteen koko 20x20x10 nm
- Simuloitu aikakehitys 25ps

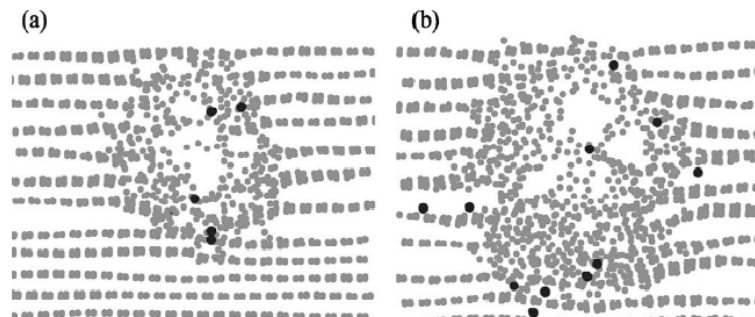
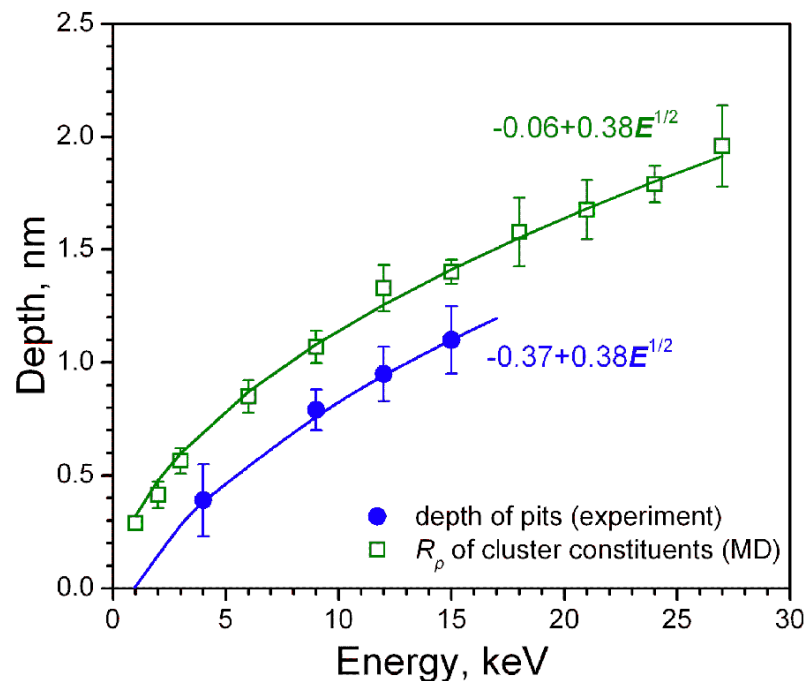


FIG. 2. Snapshots of typical simulation results: (a) 500 eV/atom Ar_{16} and (b) 500 eV/atom Ar_{41} . Ar atoms are shown in black. Width of the frames is 5 nm and they show 1-nm-thick slices, thus, most of the Ar atoms are located outside the slices and not visible.

Argonin syvyyden skaalautuminen



Skaalautumislaki

- Kertoo mitattujen suureiden käyttäytymisen kokeen parametrien funktiona
 - Ensimmäinen askel kohti matemaattista teoriaa
 - Ilmiön ymmärtäminen on yleensä pitkällä, jos simulointi tuottaa kokeellisesti todetun skaalautumislain
-
- Vaurioituneen alueen syvyys on verrannollinen nanohiukkasen liike-energiaan
 - Eri tutkimuksia yhdistelemällä nähdään, että samankaltainen riippuvuus toteutuu monissa materiaaleissa



TUTKIMUSESIMERKKI AALLOT PIIN PINNALLA

ARTICLE

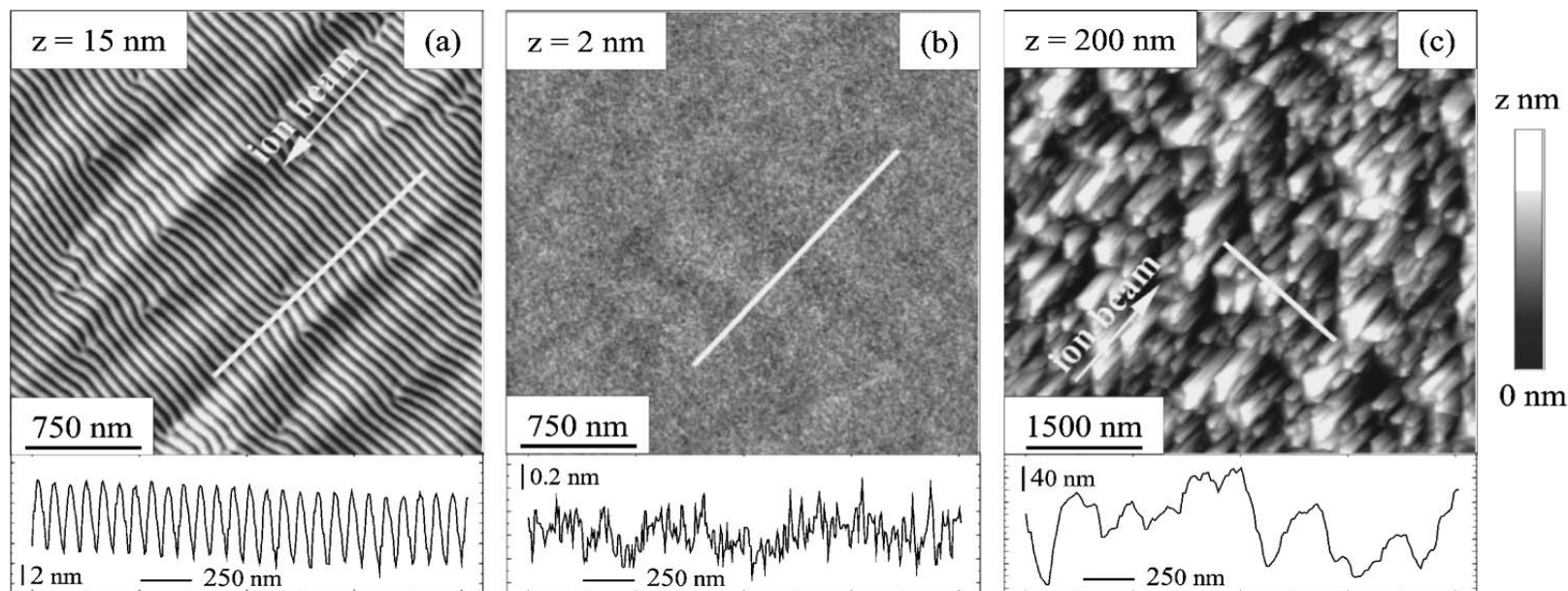
Received 10 Jun 2010 | Accepted 17 Mar 2011 | Published 12 Apr 2011

DOI: 10.1038/ncomms1280

Molecular dynamics of single-particle impacts predicts phase diagrams for large scale pattern formation

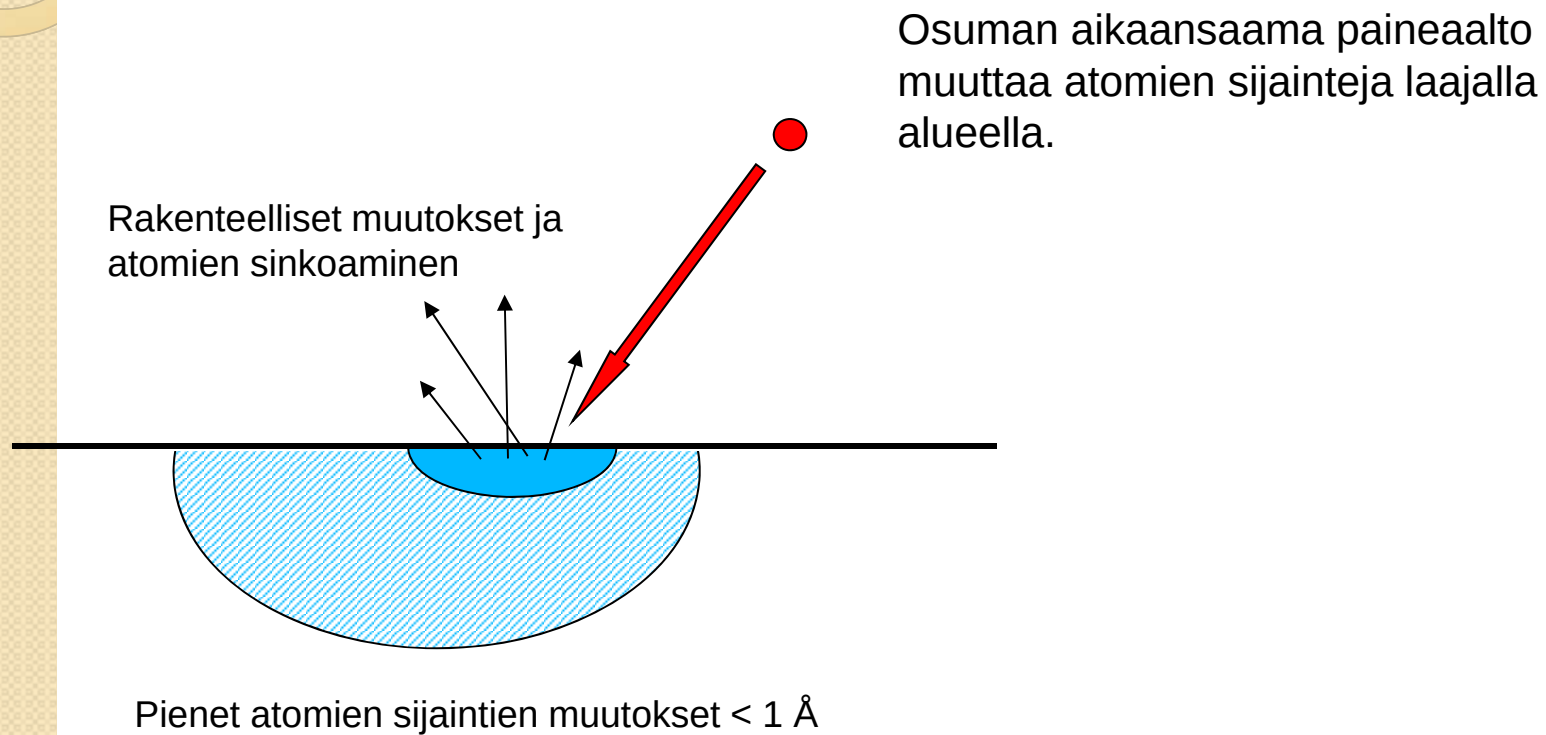
Scott A. Norris^{1,3}, Juha Samela², Laura Bukonte², Marie Backman², Flyura Djurabekova², Kai Nordlund², Charbel S. Madi³, Michael P. Brenner³ & Michael J. Aziz³

Aaltoja piikiekon pinnalla

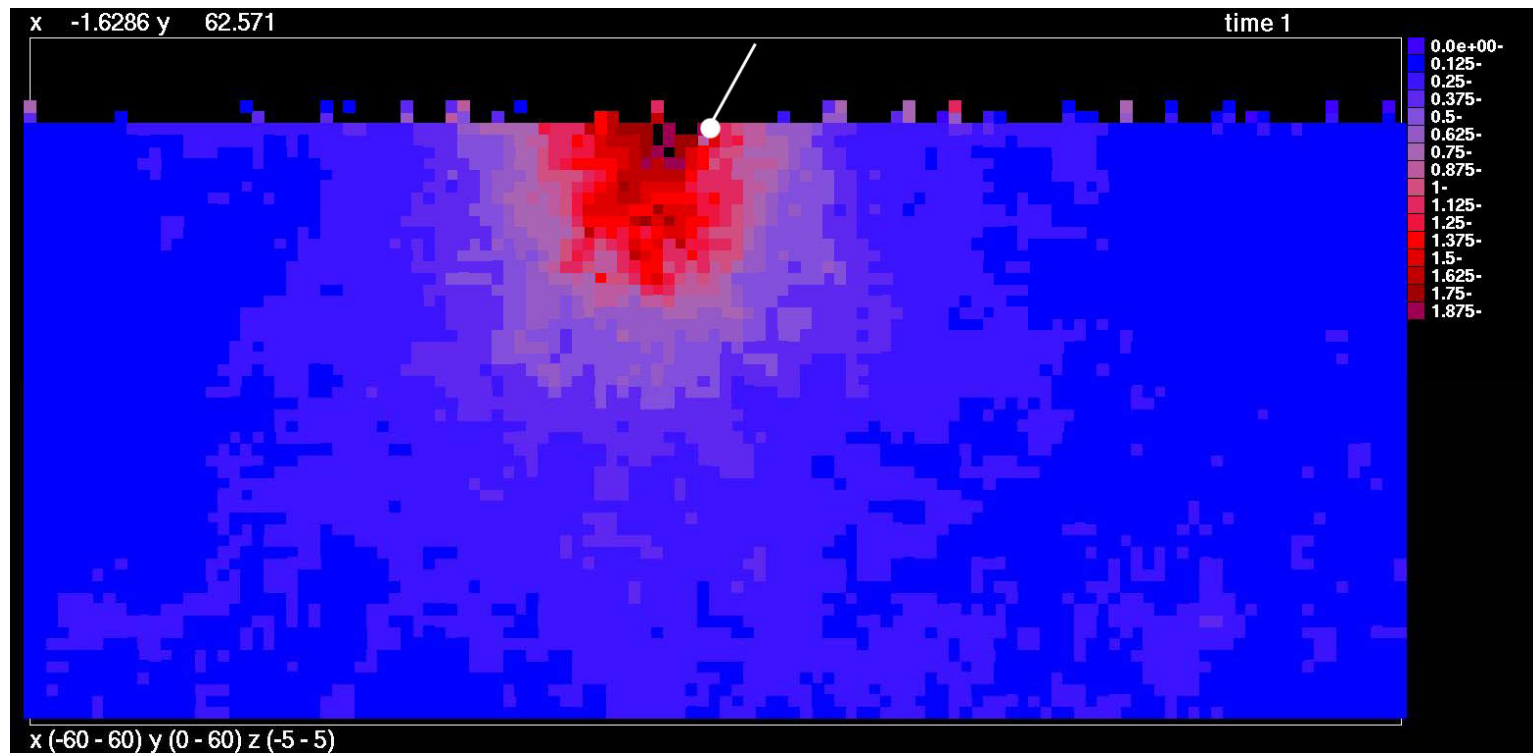


Xe ionisuihkutuksen seuraus: Suihkun kulma 5, 45 ja 75 astetta pintaan nähden.
Ziberi et al. PRB 72 (2005) 235310.

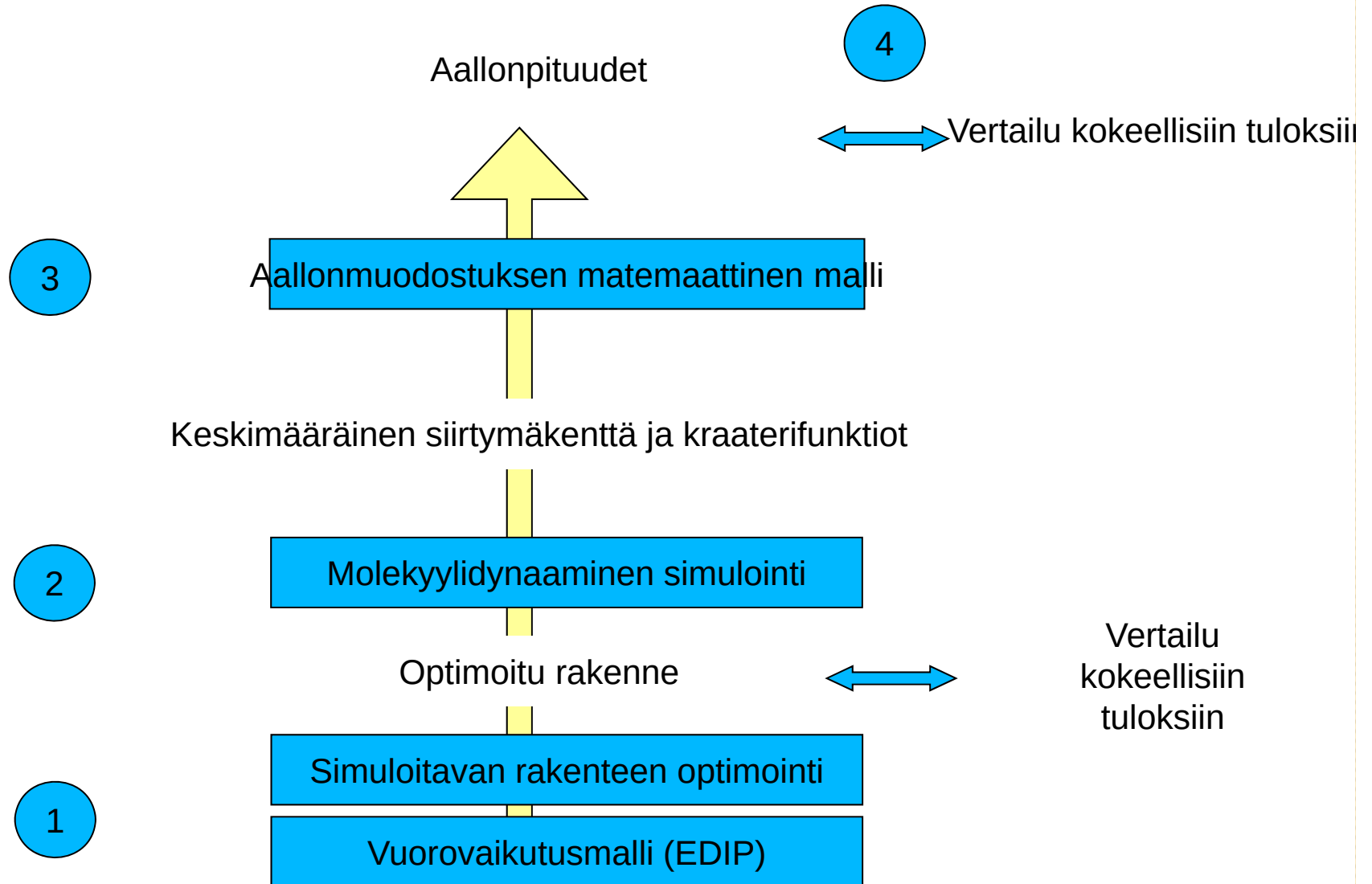
Yksittäisen ionin osuma



Atomien sijaintien muutos 500 simulaation keskiarvona



“Multiscale modelling”



Kontinuumimalli

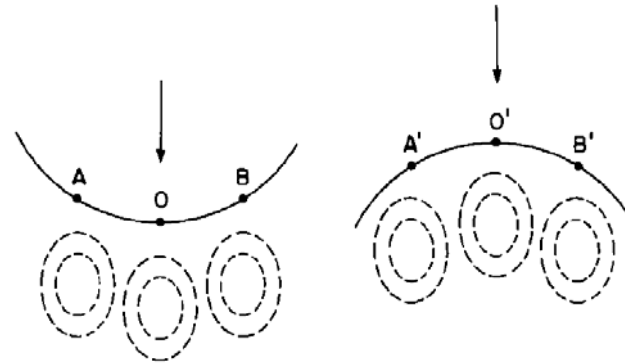
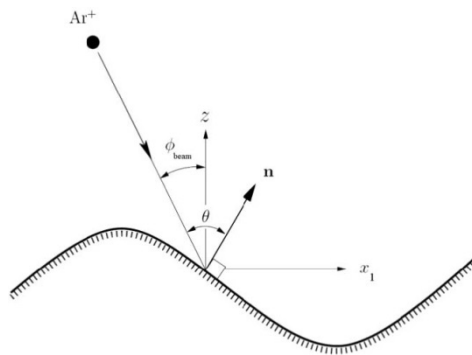
Pinnan korkeuden h muutos:

$$\frac{\partial h(x, y, t)}{\partial t} = \left(S_X(\theta) \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + S_Y(\theta) \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) - B \nabla^4 h,$$

Kertoimet M saadaan simuloinneista:

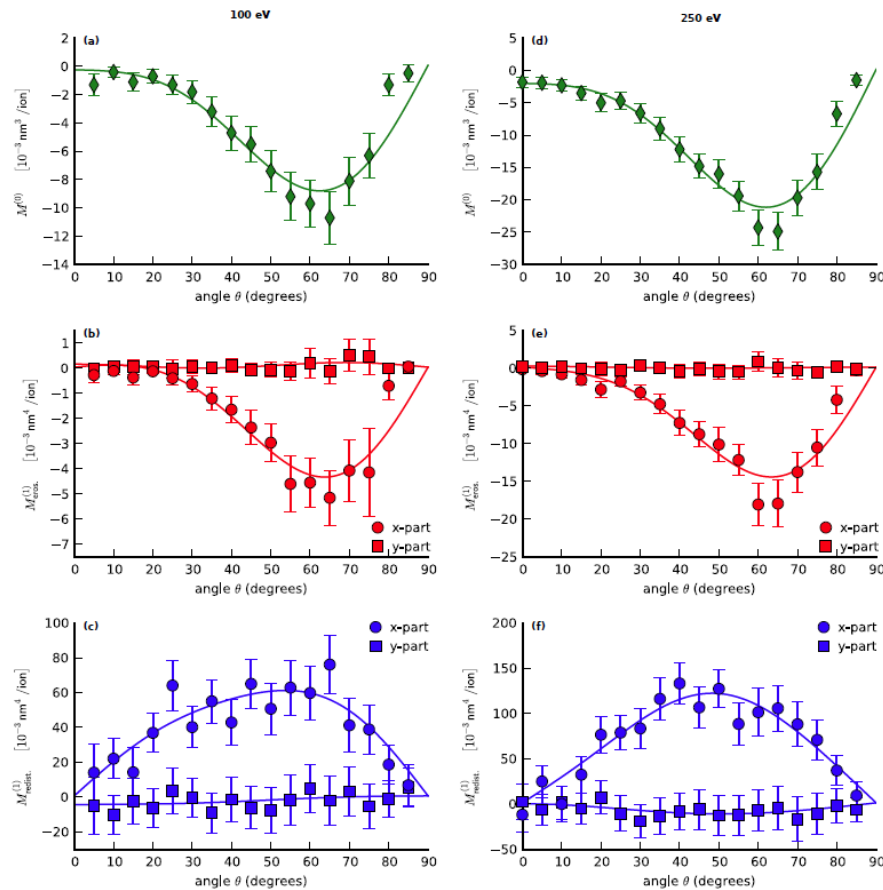
$$S_X(\phi) = I_0 \frac{d}{d\phi} [M^{(1)}(\phi) \cos(\phi)]$$

$$S_Y(\phi) = I_0 M^{(1)}(\phi) \cos(\phi) \cot(\phi)$$



J. Phys.: Condens. Matter **21** (2009) 224017, J. Phys.: Condens. Matter **21** (2009) 22418, J. Vac. Sci. Technol. A **6** (1988) 2390

Moments obtained from MD (Si)

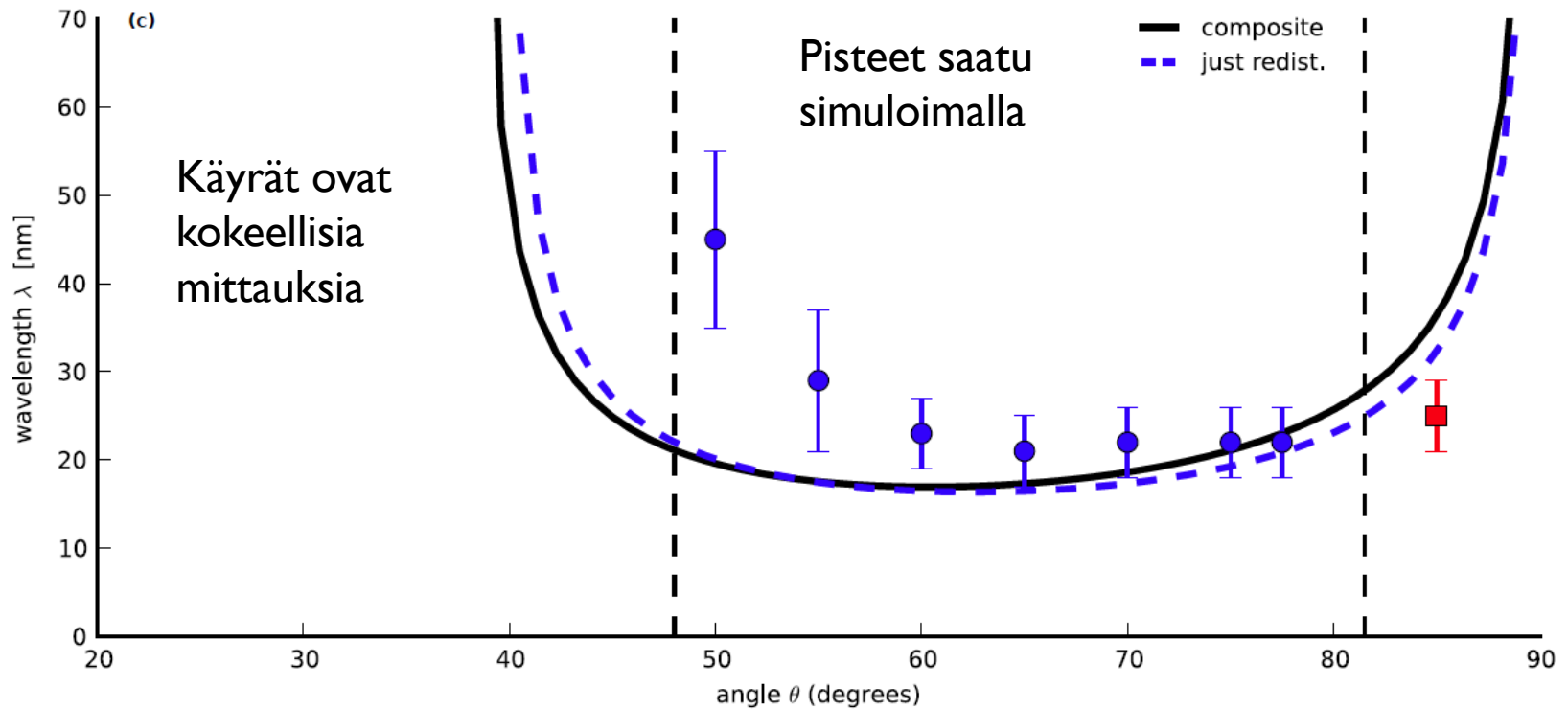


Ovatko tulokset luotettavia?

Ehkä, sillä ...

- Materiaali on hyvin optimoitu.
- Simuloinnissa on vältetty keinotekoisien efektien muodostumista
- 200-500 satunnaisten simuloinnin sarja

Ja vihdoinkin tulos: Pinta-aaltojen aallonpituus ionisuihkun kulman funktiona





EMERGENSSI

Emergenssi

- **Emergenssi** tarkoittaa tietyistä kokonaisuudesta nousevaa ja syntyvää uutta ilmiötä, ominaisuutta tai toiminnan tasoa.
- **Emergentismillä** tarkoitetaan filosofiassa ontologista kantaa, jossa johonkin fysikaaliseen systeemiin ilmestyy uusia ominaisuuksia (Wikipedia).
- **Vahva ja heikko emergenssi** (David J. Chalmers):
 - **Vahva:** Ylemmän tason ilmiö ei ole johdettavissa alemman tason ilmiöistä, vaikka ne ovat välttämättömiä ylemmän tason ilmiön esiintymiselle.
 - **Heikko:** Ylemmän tason ilmiö on johdettavissa alemman tason ilmiöistä, mutta se on ”odottamaton”, toisin sanoen alemman tason kuvaus ei sisällä mitään ylemmän tason ilmiön kuvausta.



Molekyylidynamiikka havainnollistaa sen, että ...

- Näkyvän fyysisen maailman ilmiöt muodostuvat heikon emergenssin kautta atomien vuorovaikutuksista.
- Esimerkiksi kraatterit ja säännölliset pintarakenteet muodostuvat yksittäisten atomien välisten vuorovaikutuksen seurauksena tarvitsematta olettaa muuta.
- Väitettä voi epäillä, mutta epäilyn perusteleminen ei ole helppoa!



Lämmön siirtyminen – esimerkki emergenssistä

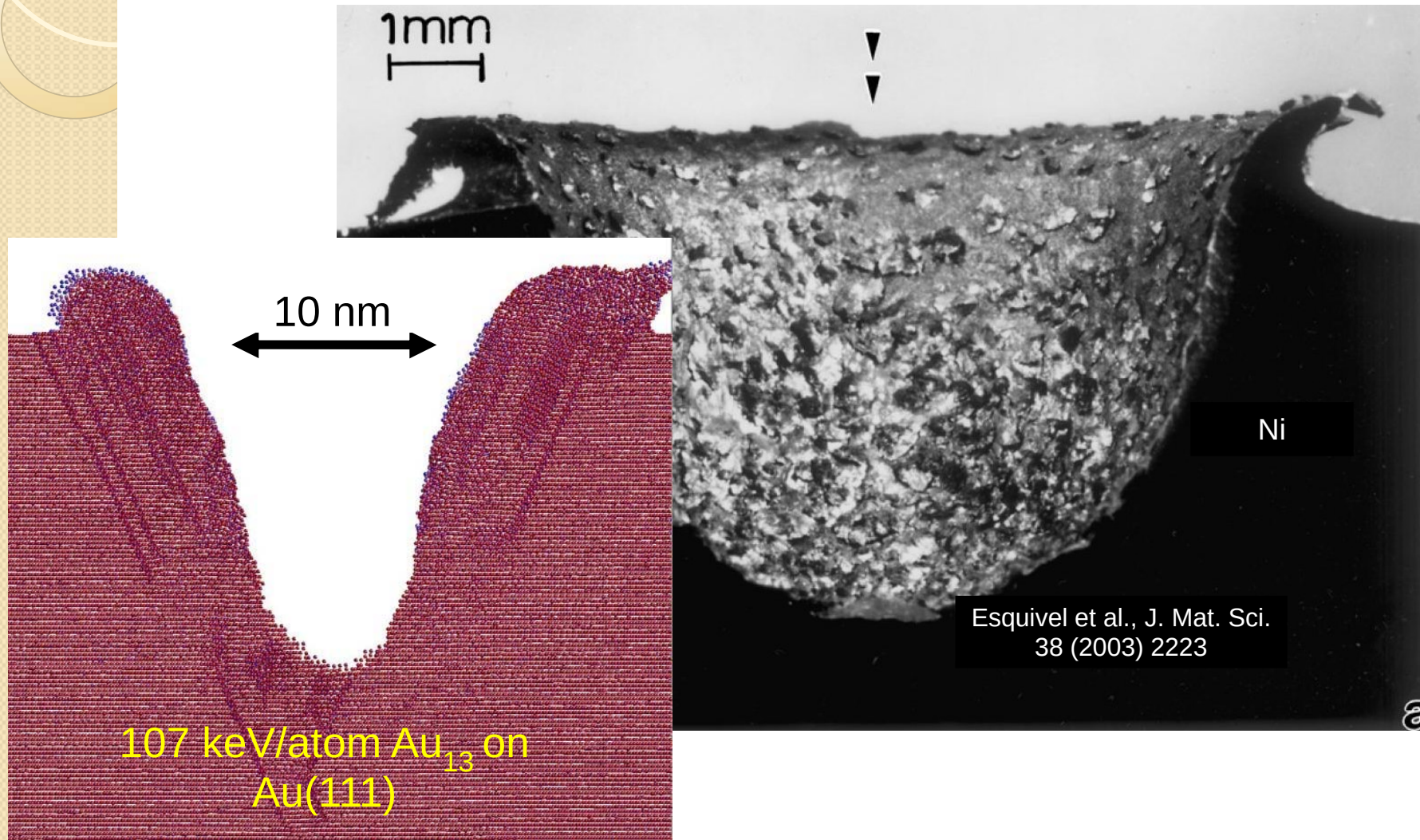
- Termodynamiikka on fysiikan teoria, joka kuvaa lämpöilmiöitä, esimerkiksi lämpöenergian siirtymistä kuumemmalta alueelta kylmemmälle alueelle.
- Simuloinnissa ei sovelleta termodynamiikkaa. Lämpöenergia on simuloinnissa pelkästään atomien värähtelyä tasapainoasemansa ympärillä.
- Lämmön siirtyminen syntyy atomien keskinäisistä vuorovaikutuksista. Lopputulos on sama kuin termodynaamisista yhtälöistä laskemalla saatu tulos.
- Huom! Molekyylidynamiikka ei sellaisenaan sovellu lämpösäteilyn simulointiin. Säteilyn kautta poistuva energia voidaan ottaa pois systeemistä keinotekoisesti.



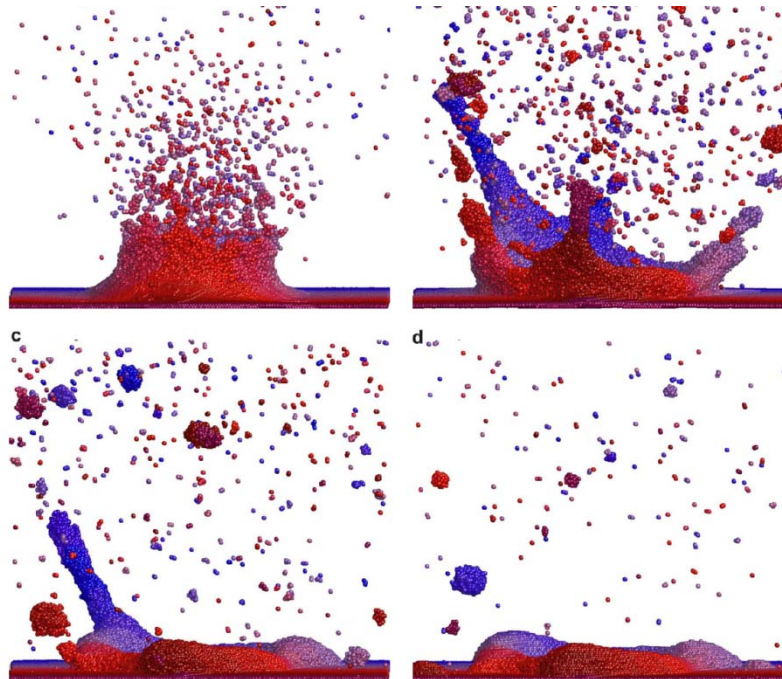
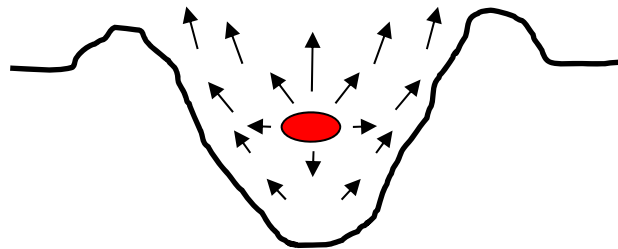
Simuloinneissa havaitaan sama nanomaailman erilaisuus kuin kokeellisesti

- Nanometriluokan systeemit käyttäytyvät usein varsin eri tavalla verrattuna makroskooppisiin systeemeihin.
- Siirryttäessä tuhansien atomien järjestelmistä miljardien atomien järjestelmiin, ilmiöt alkavat vähitellen noudattaa makroskooppisten ilmiöiden lainalaisuuksia. Jyrkkää rajaa nanomaailman ja ”metrimaailman” välillä ei ole.

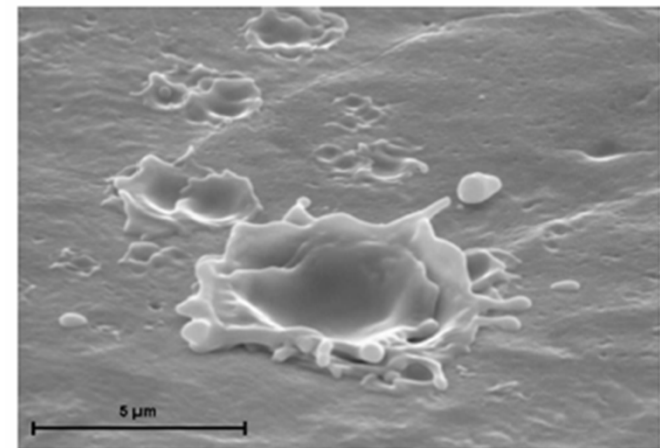
Nanokraateri ja makroskooppinen kraateri



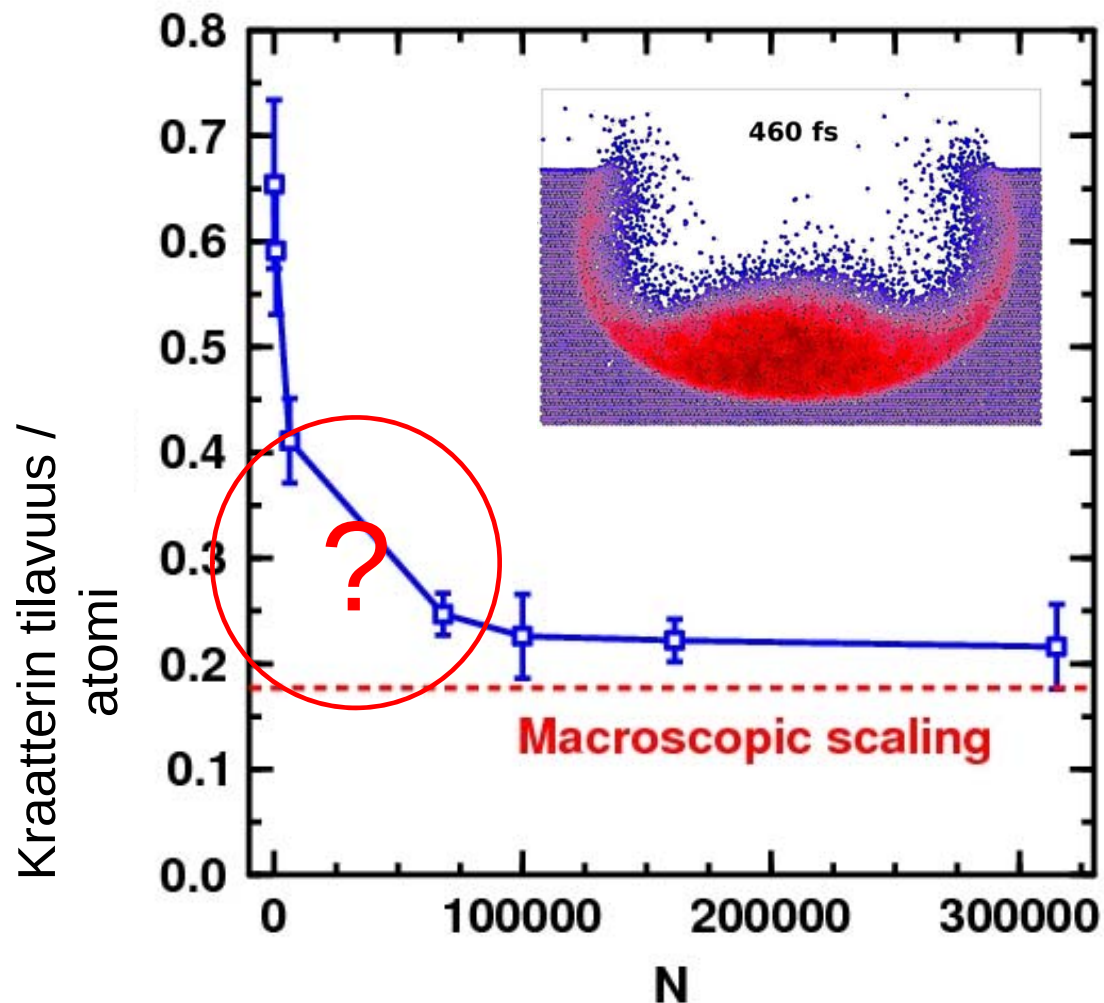
Kraaterin muodostuminen



- Nanohiukkanen törmää suurella nopeudella metallin pintaan.
- Energia pakkautuu “pistemäiseksi”
- Kokeellisesti nähdään vain lopputuloksena syntynyt

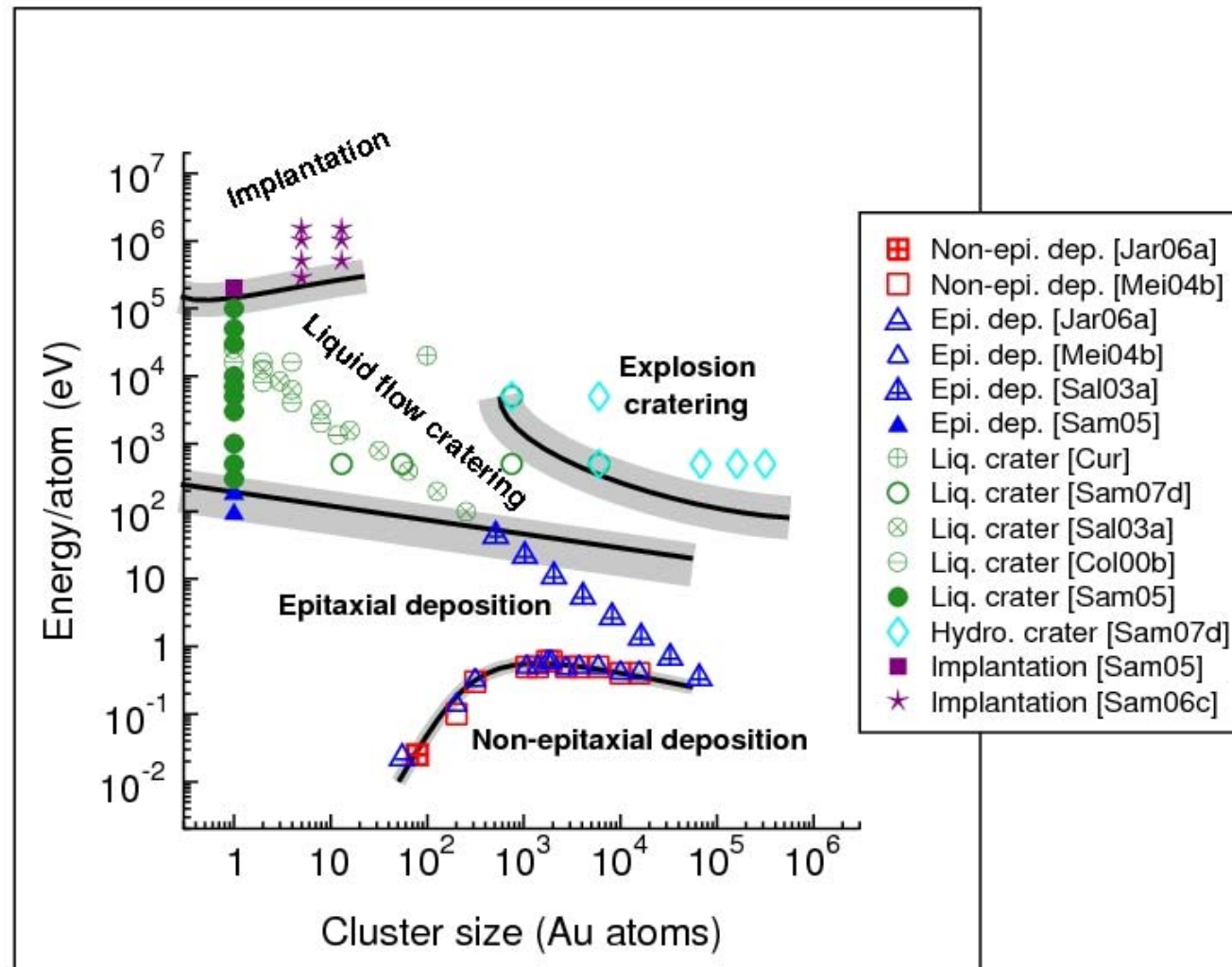


Makroskooppinen skaalautuminen saavutettu simuloinneissa



PRL 101 (2008) 027601

Ilmiön ymmärtäminen syntyy usean tutkimuksen kautta





**ONKO KOSMOS
MALLINNETTAVISSA?**

Determinismi

- Determinismi filosofisena kantana tarkoittaa, että kaikella on syynsä ja kaikki tapahtuu välttämättömyydestä (Laplacen demoni 1814)
- Simulointiprosessi tietokoneella on deterministinen
 - Näin siitä huolimatta, että käytetään satunnaislukuja
- Riittävän suorituskykyisellä tietokoneella voi mallintaa minkä tahansa deterministisen systeemin
- Ei-deterministisen systeemin mallintaminen edellyttäisi äärettömän suorituskykyistä tietokonetta

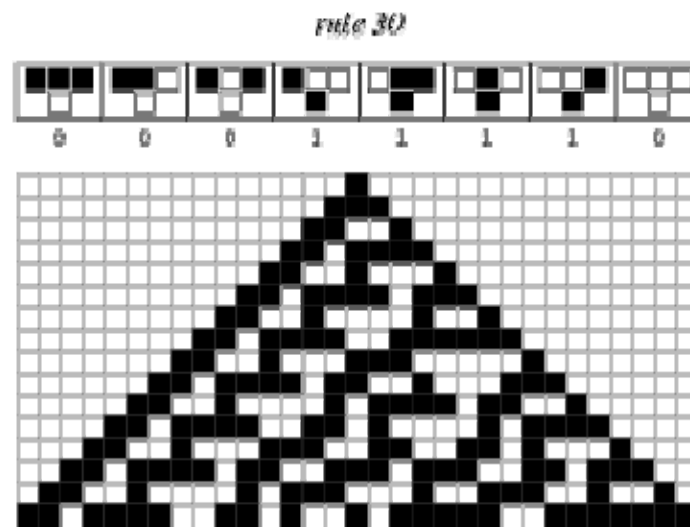
Ei tukea determinismille

- Käytännön syitä
 - Laskentatarkkuus on aina äärellinen, ajan mittaan simuloitussa systeemissä syntyy energiaa tai energiaa katoaa
 - Pienikin muutos alkuehdoissa johtaa ajan mittaan suureen muutokseen systeemin käyttäytymisessä
- Kvanttimekaanisia syitä
 - Aito satunnaisuus: esimerkiksi ytimen hajoaminen – kvanttimekaanisen tilan todennäköisyysluonne
 - Kvanttimekaniikan epätarkkuusperiaate

... mutta jos Kosmos onkin diskreetti?

- Digitaalinen fysiikka
 - Kosmos muodostuu informaatiosta ja on jollain tavalla mallinnettavissa tietokoneelle
 - Periaatteessa on olemassa deterministinen tai todennäköisyyksiin perustuva tietokonemalli, joka tuottaa Kosmoksen
 - https://en.wikipedia.org/wiki/Digital_physics
- Yksi perustelu on, että monet kvanttimekaaniset ilmiöt ovat diskreettejä, esimerkiksi atomin energiatasot

Soluautomaatti



<http://mathworld.wolfram.com/CellularAutomation.html>



Simulaatiohypoteesi

- Hypoteesi: Kosmos on simulointimalli, jonka osia olemme.
 - Tietojenkäsittelykapasiteetin kasvu
 - Kvanttifysikaalisen todellisuuden osittain diskreetti luonne
- ”Jos emme nyt ole osa simulointimallia, jälkeläisemme eivät syystä tai toisesta simuloi menneisyyttä.”
- https://en.wikipedia.org/wiki/Simulation_hypothesis

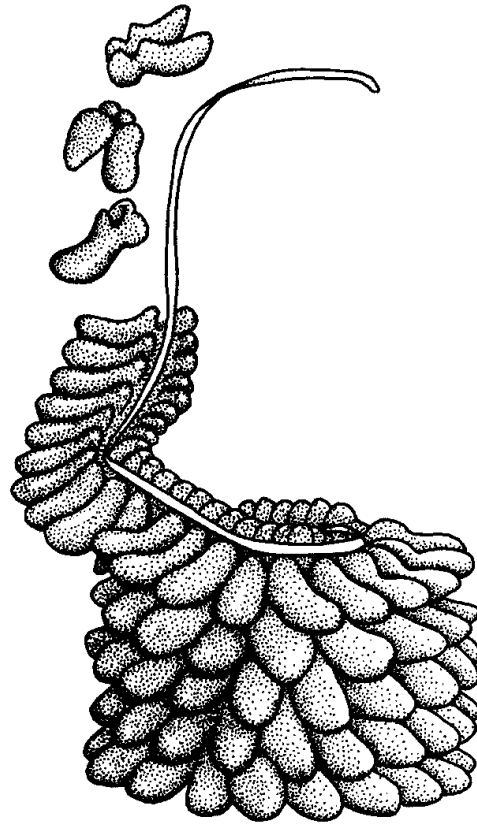


**VOIKO ELOLLISIA
OLIOITA MALLINTAA?**



Itse muodostuvat järjestelmät

- Suuri orgaaninen molekyyli tai jopa virus muodostuu itsestään, kun sen osaset tuodaan samaan tilaan (self-assembly).
- Esimerkiksi tupakkavirus (Tobacco Mosaic Virus)
- Voidaanko näin simuloida ”elollisen olion” muodostuminen?



Bec/02

© BIODIDAC, Stritch

© BIODIDAC

Lasin särkyminen osoitettu tieteellisesti!

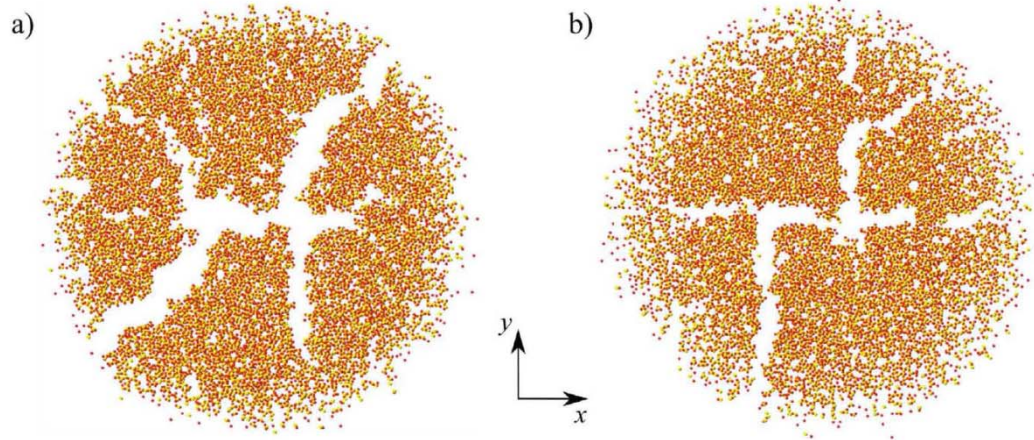


Fig. 3: (Color online) (a) Cross-section of the fracture at the bottom of the 24 nm sheet after bombardment at 22 km/s. (b) Cross-section of the fracture at the bottom of the 30 nm sheet after bombardment at 31 km/s. The coloring is as follows: yellow for Si, red for O.

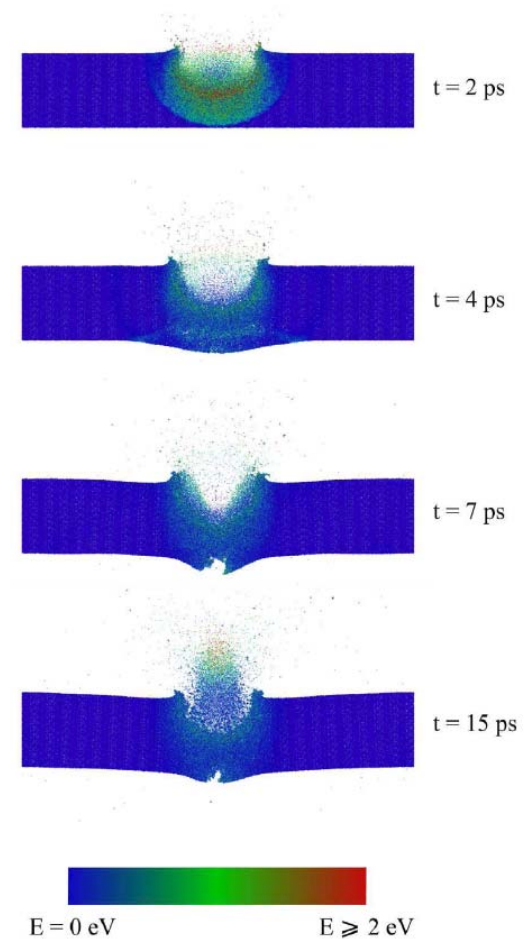


Fig. 1: (Color online) From top to bottom: slideshow of a 22 km/s impact on the 24 nm sheet. The coloring is by kinetic energy as shown at the bottom of the figure.



KIITOS!