Mikä rooli on laskennallisella fysiikalla luonnontieteellisessä selittämisessä?

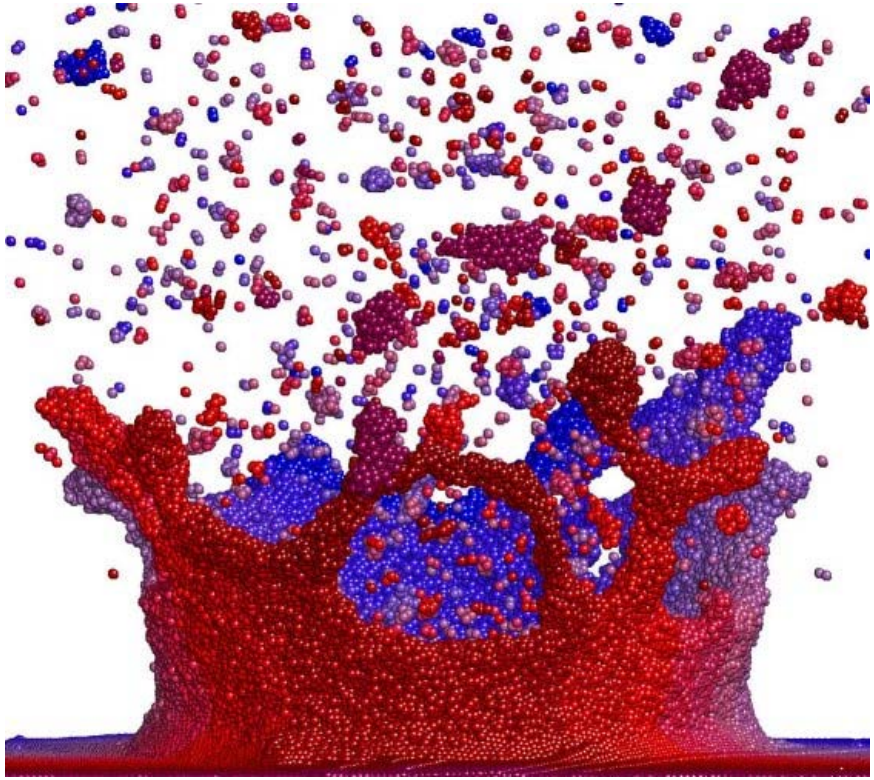
Luonnonfilosofian seura 19.10.2021

Juha Samela

Miksi tämä aihe?

Tietokoneilla tehtävä simulointi on …

- **Merkittävä tutkimuskeino**
- **Yhteiskunnallisesti vaikuttavaa**
- **Tieteenfilosofisesti uusi ja mielenkiintoinen**
- **Kehittymässä tekoälyn suuntaan**



Aiheita

Käytännön tutkimuksesta tieteenfilosofisiin kysymyksiin:

1. **Luonnontieteellinen selittäminen?**
2. **Simulointi?**
3. **Esimerkkejä tutkimuksista**
4. **Haasteita, mahdollisuuksia ja myyttejä**
5. **Yhteenvetoa**

Miksi ja miten?

Miksi? – erinomainen kysymys

Luonnonilmiön ymmärtäminen tarkoittaa perinteisesti metodologista ja kognitiivista prosessia, joka on yhteisöllinen:

- **Tutkimustulokset on saatu yleisesti luotettavaksi tunnustettuja menetelmiä käyttäen**
- **Uudet selitykset on perustellaan havainnoilla sekä aikaisemmin luotettavaksi todetuilla selityksillä ja teorioilla**
- **Kuka tahansa asiaan riittävästi perehtyvä tulee vakuuttuneeksi selityksestä, looginen ristiriidattomuus.**
- **Tutkimusyhteisön pitää tulla vakuuttuneeksi selityksestä**

Richard Feynman: Why? – ”It’s an excellent question!”
https://www.youtube.com/watch?v=36GT2zI8lVA

Flogiston-teoria

Puu palaa, mitä itse asiassa tapahtuu?

- **Flogiston on hienojakoinen aine, joka tekee kappaleista kiinteitä**
- **Palaminen on flogistonin vapautumista kappaleesta**
- **Flogiston näkyy liekkeinä ja valona**
- **Kappaleen ja tuhkan painojen erotus on vapautuneen flogistonin paino**
- **Vapautunut flogiston sitoutui ympäröivään ilmaan**
- **Metallien massa kuitenkin kasvoi niiden palaessa, joten niiden osalta piti olettaa, että flogistonilla oli negatiivinen massa.**

Tarkemmin: https://fi.wikipedia.org/wiki/Flogiston-teoria

Simulointi

Todellisuuden jäljittelyä

Laskennallinen tiede

Perinteisesti luonnontiede jaetaan kokeelliseen ja teoreettiseen

Laskennallinen tiede tullut kolmanneksi:

- **Mittaustulosten käsittely ja analyysi – empiirisiä malleja**
- **Numeerinen ratkaiseminen – ratkaisuja teoriasta**
- **Suurten tietomassojen analyysi – löytöjä**
- **Tietokonesimulointi – monimutkaisuuden hahmottamista**

Tietotekniikan kehitys on tehnyt tämän mahdolliseksi – tieteen digitaalinen ”vallankumous”

Simulointi – askellusta ajassa

Tässä esityksessä simulointi tarkoittaa tietokoneella tehtävää tapahtumaketjun simulointia. Luodaan tietokoneohjelma, jossa mallinnetaan jonkin ilmiön ajallista kehittymistä ainakin sen oleellisilta osin.

Aika kuluu yleensä askeleittain. Askeleen pituus voi vaihdella.

Simuloinnissa käytettävä malli perustuu matemaattisesti muotoiltuun teoriaan joko kokonaan, osittain tai ei ollenkaan!

Tietokonesimuloinnit ovat hyvin käytännöllinen työväline, simulaatiohypoteesi on filosofista spekulaatiota.

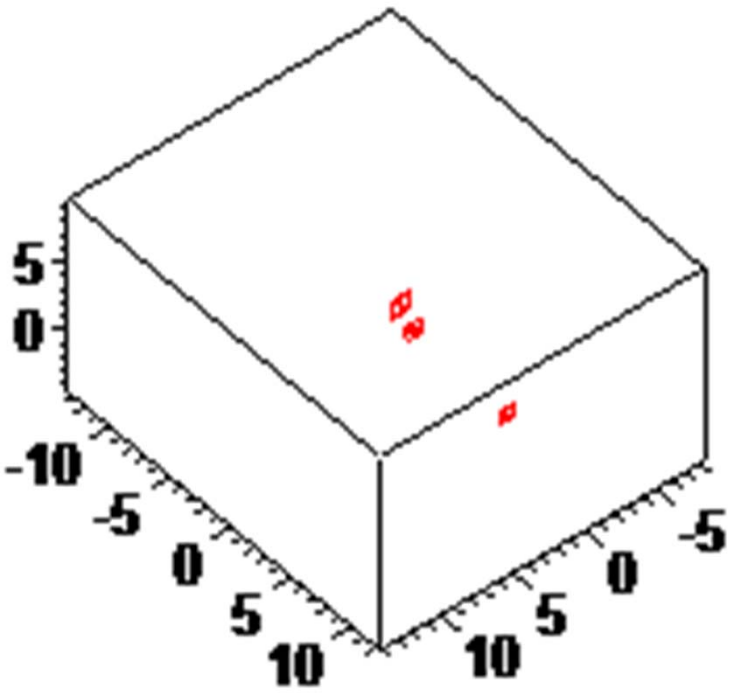
Monen kappaleen ilmiöitä

Jos kappaleeseen ei vaikuta mitään ulkoista voimaa, kappale jatkaa tasaista, suoraviivaista liikettä tai pysyy levossa.

Etäisyys lähtöpisteestä = vakionopeus kertaa kulunut aika

Mutta jos …

- **Kappaleeseen vaikuttaa voimia, jotka aiheuttavat kiihtyvyyksiä ja mutkia**
- **Kappale pysähtyy välillä**
- **Kappale jakautuu kahtia**
- **Kappaleet törmäilevät epäelastisesti**
- **Kappaleiden välillä vuorovaikutuksia**
- **Kappaleita on miljoona**



By User:Joris_Gillis~commonswiki - Oma teos, Public Domain, https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=521539

Kolmen kappaleen probleema!

Mitä hyötyä on tietokonesimuloinneista?

Simuloimalla voidaan tarkastella monimutkaisia fysikaalisia systeemejä havainnollisemmin kuin matemaattisen analyysin avulla.

- **Meillä on rajallinen kyky hallita yhtä aikaa monia muuttujia ja yksityiskohtia.**

Joissakin tapauksissa simuloinnissa saadaan viitteitä ilmiöistä, joiden esiintyminen voidaan kokeellisesti varmentaa.

Ilmiön kokeellinen tutkiminen voi olla käytännön syistä erittäin vaikeaa, joten simulointi antaa mahdollisuuden selvittää ilmiön sisäistä dynamiikkaa.

Yhteiskunnallinen merkitys

Ilmastomallit (”climate simulation”)

Kosmologiset mallit (”cosmolocical simulation”)

Virusten leviäminen väestössä (”epidemic simulation”)

Lääkkeiden kehittäminen (”drug development simulation”)

Nanorakenteiden ja materiaalien perustutkimus (esim. ” nanotube simulation”)

ym. ym. ym. …

CSC - www.csc.fi/fi
Tee se itse - https://www.lammps.org/

Voiko simulointi tuottaa tietoa?

Yleinen näkemys on, että simulointi on päättelyä eli filosofian kielellä argumentointia. Se ei tuota uutta havaintotietoa.

Havainnot ja niitä tuottavat kokeet ovat luonnontieteen ensisijainen tiedon lähde.

Väite, että tietokonesimulointi korvaa kokeen, sisältää oletuksen uuden tiedon tuottamisesta.

Simuloinnin vahvuuksia:
- Johdattaa päättelyihin, joita ei pelkällä ajatustyö ei hoksaisi.
- Varmistaa monimutkaisten järjestelmin käyttäytymisestä tehtyjä intuitiivisia päättelyjä.

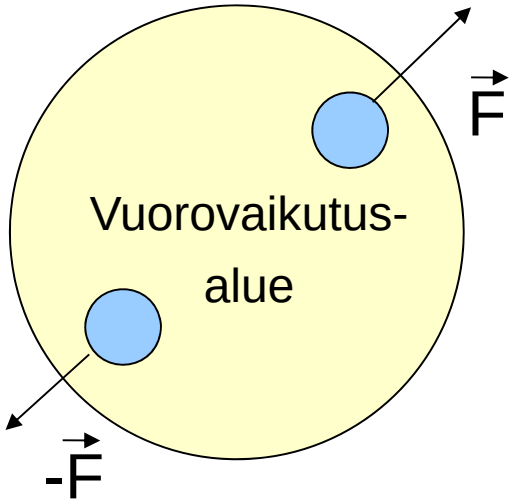
Päättelyä aineen rakenteen eri tasoilla

Luonnon prosessit	Agentit
Kappaleet, nesteiden ja kaasujen virtaukset	Elementit
Atomit, molekyylit, nanoryppäät (atomistinen simulointi)	Atomit
Hiukkasten vuorovaikutukset	Kentät

Mallissa on kaksi tasoa = multi-scale modelling

Esimerkkejä

Molekyylidynamiikka – pelaamista pistemäisillä atomeilla



$$F = -\nabla V$$

$$a = F/m$$

Atomit kuvataan **massapisteiksi**, jotka noudattavat klassista mekaniikkaa.

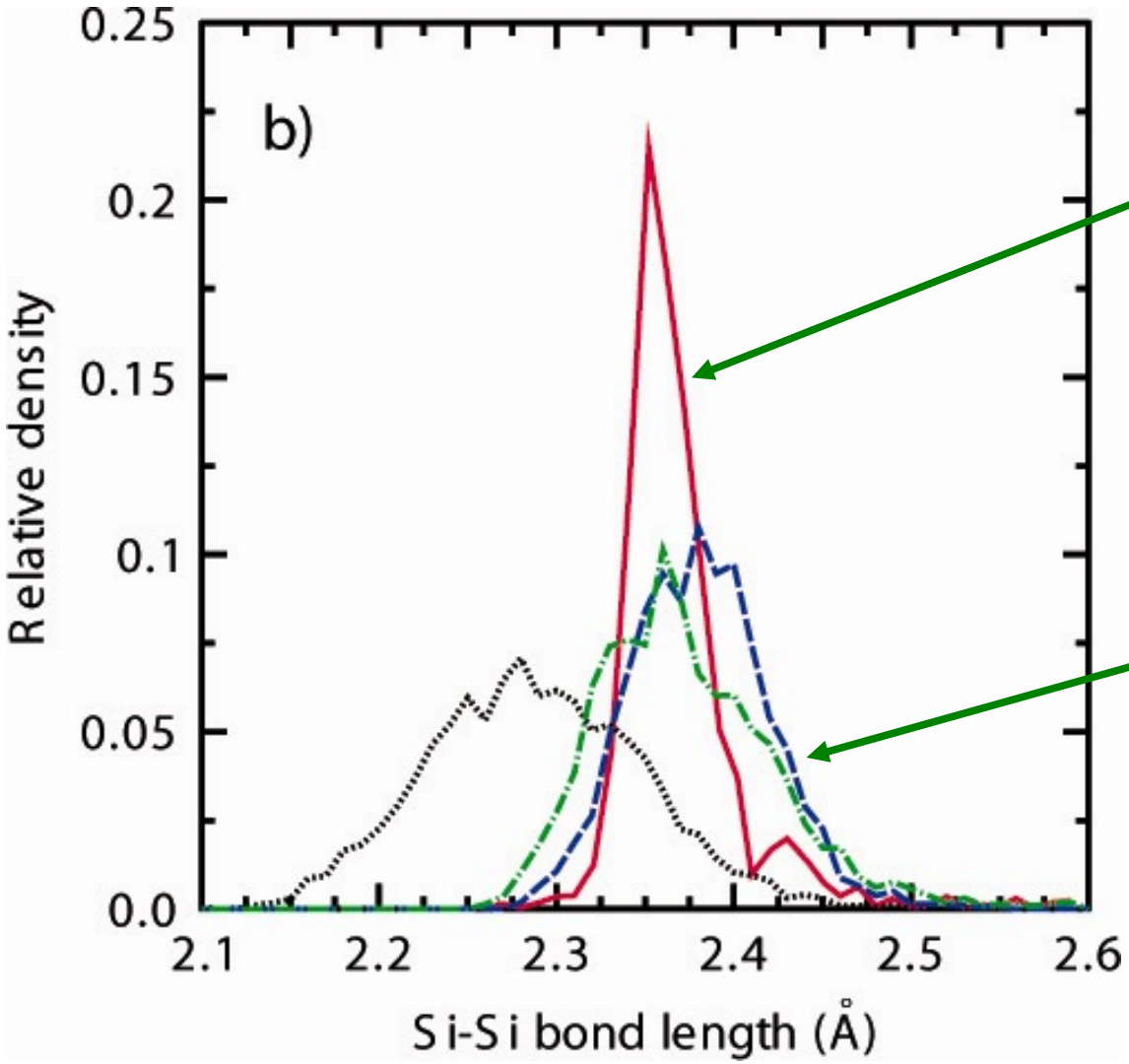
Muutaman atomin vuorovaikutukset mallinnetaan kvanttimekaanisten laskujen avulla etukäteen ns. **potentiaaliksi** (V).

Simuloinnin aikana potentiaalia käytetään atomien välisten voimien (F) laskemiseen. **Voima aiheuttaa kiihtyvyyden** (a).

Jokaisella simuloinnin aika-askeleella atomeja siirretään niihin vaikuttavan voiman perusteella.

Lisätietoja: An Introduction to Molecular Dynamics (science4all):
https://www.youtube.com/watch?v=lLFEqKl3sm4

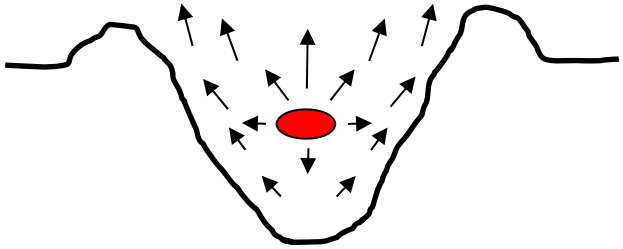
Aineen tietokonemalli pitää todeta riittävän realistiseksi

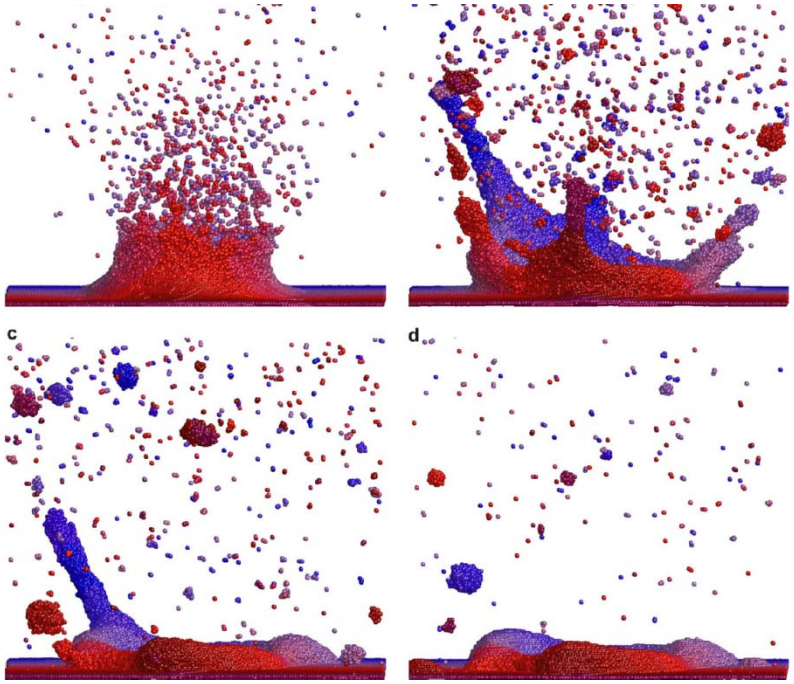


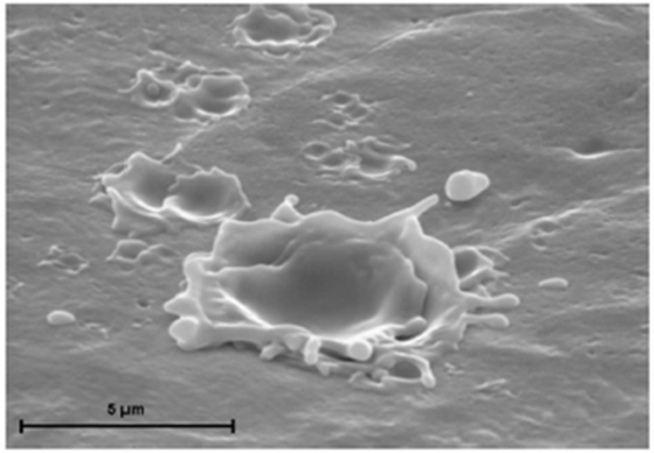
Mitattu

Erilaisia malleja atomien välisille vuorovaikutuksille

Kraatterin muodostumisen simulointi





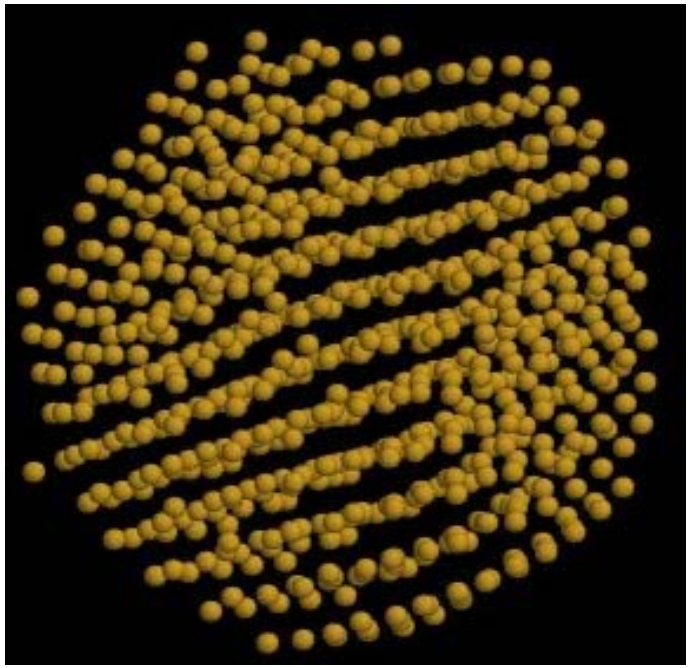


NIMB 263 (2007) 375–388

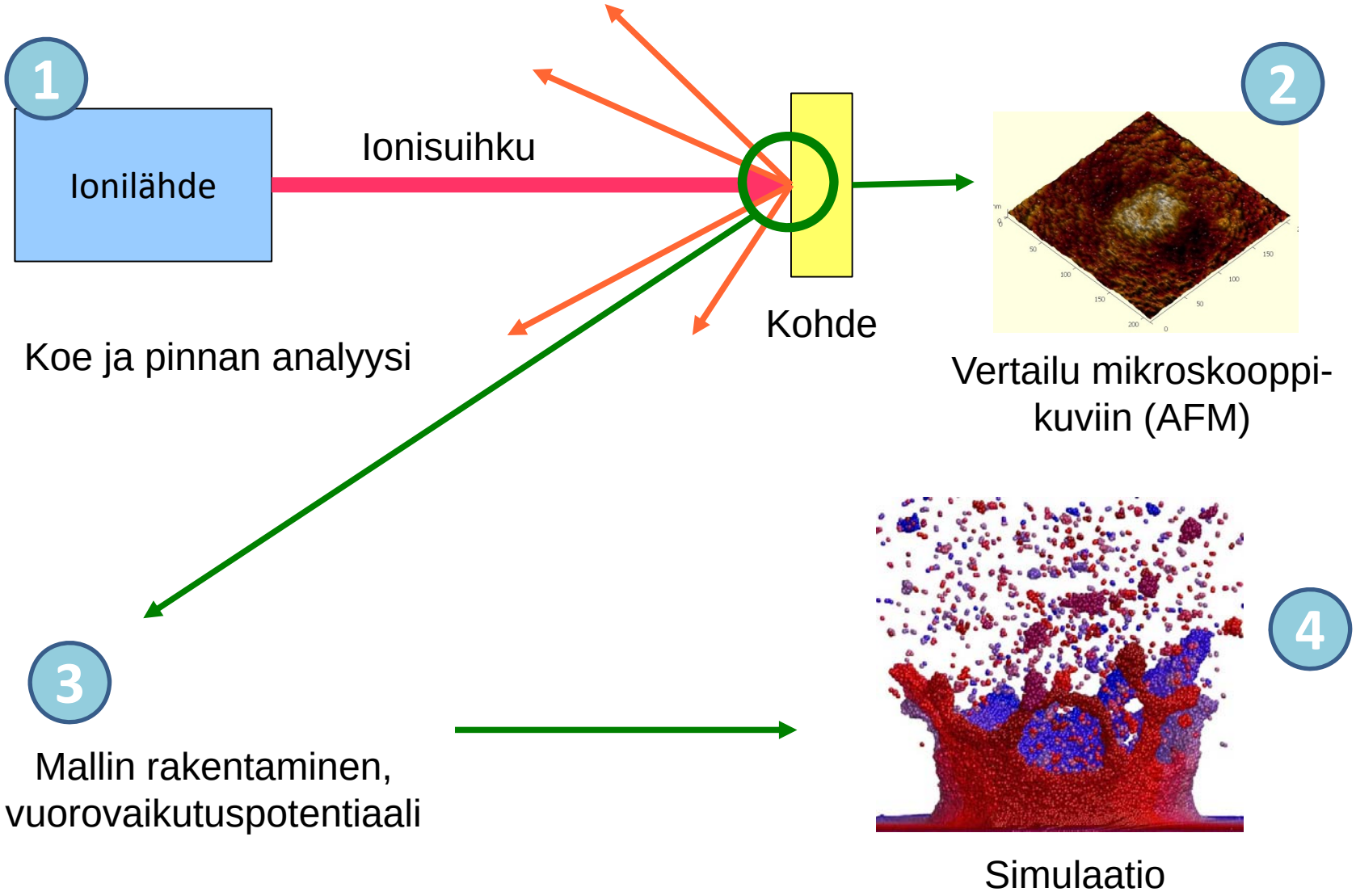
Mittakaava

- **Nanopartikkeli 2 - 315000 atomia**
  - **halkaisija < 20 nm**
- **Vauhti 10 – 1000 km/s (0.01 – 1 nm/fs)**
  - **avaruuden hiukkaset 10 – 70 km/s (hypervelocity)**
- **Tapahtuman kesto 1 – 300 ps**
  - **Pysähtymisaika < 500 fs**
- **Kratterin halkaisija < 100 nm**

Au_{750}



Kokeen ja simuloinnin yhdistelmä



Kappaleen murtuminen

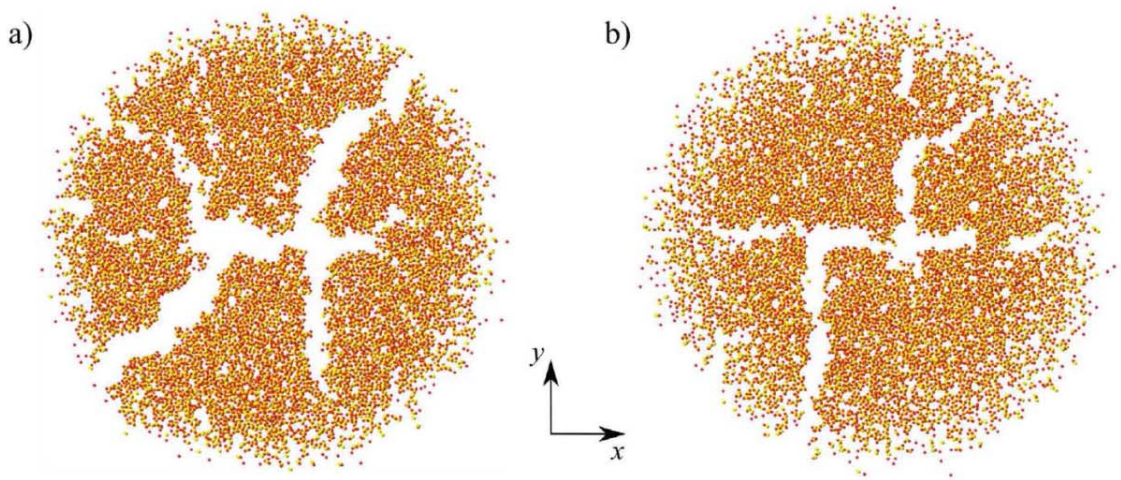


Fig. 3: (Color online) (a) Cross-section of the fracture at the bottom of the 24 nm sheet after bombarding at 2
(b) Cross-section of the fracture at the bottom of the 30 nm sheet after bombarding at 31 km/s. The coloring is as
yellow for Si, red for O.

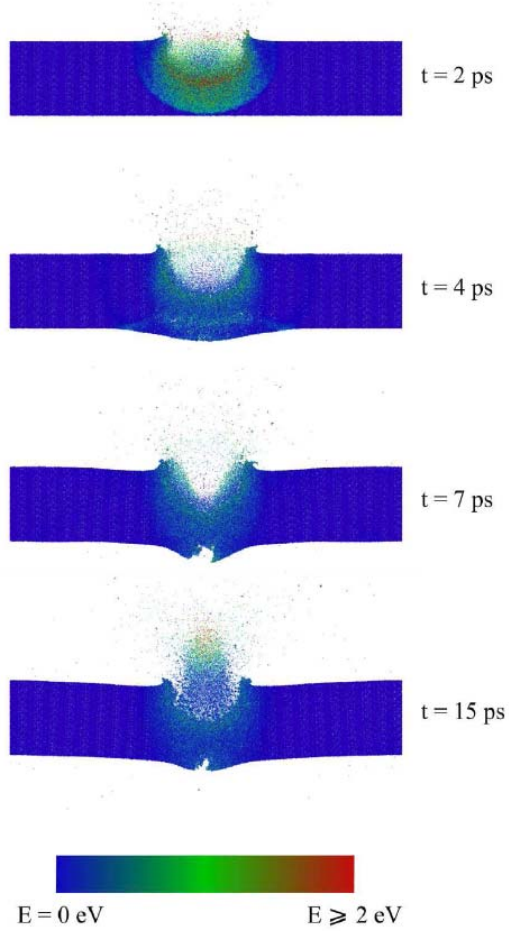


Fig. 1: (Color online) From top to bottom: slideshow of a 22 km/s impact on the 24 nm sheet. The coloring is by kinetic energy as shown at the bottom of the figure.

EPL 96 (2011) 16005

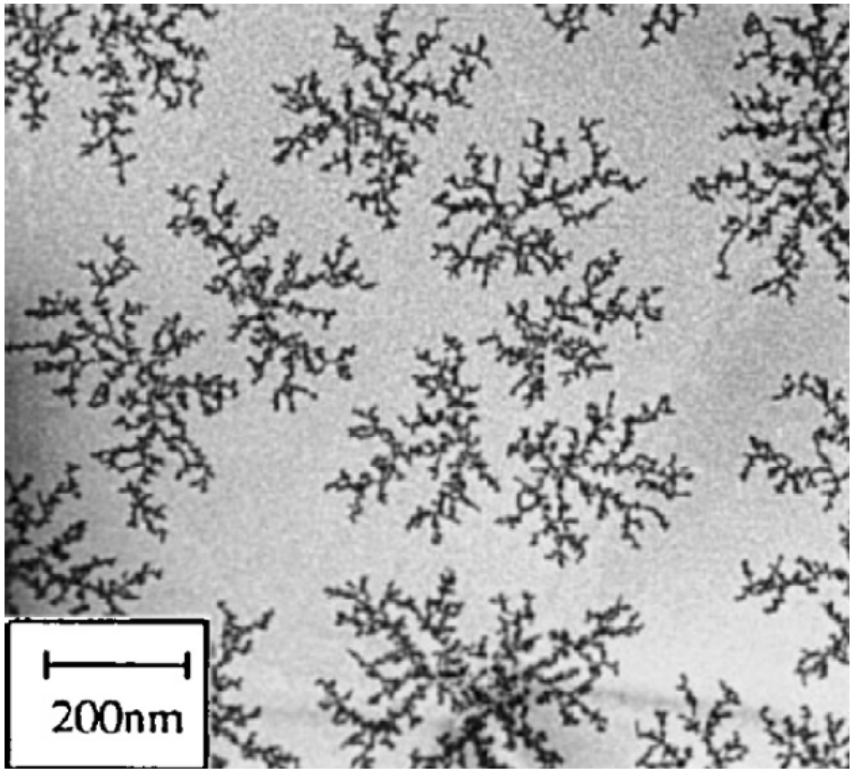
Emergentit ilmiöt

Yksi simuloinnin käyttötarkoituksista on emergenssin ja itseorganisoitumisen tutkiminen.

Emergenssi: Monimutkaisen systeemin osaset käyttäytyvät niille luonteenomaisella tavalla, jolloin systeemiiin ”ilmestyy” uusia ominaisuuksia. Ulkopuolista ohjausta ei tarvita, emergentit ilmiöt ovat seurausta osasten vuorovaikutuksesta.

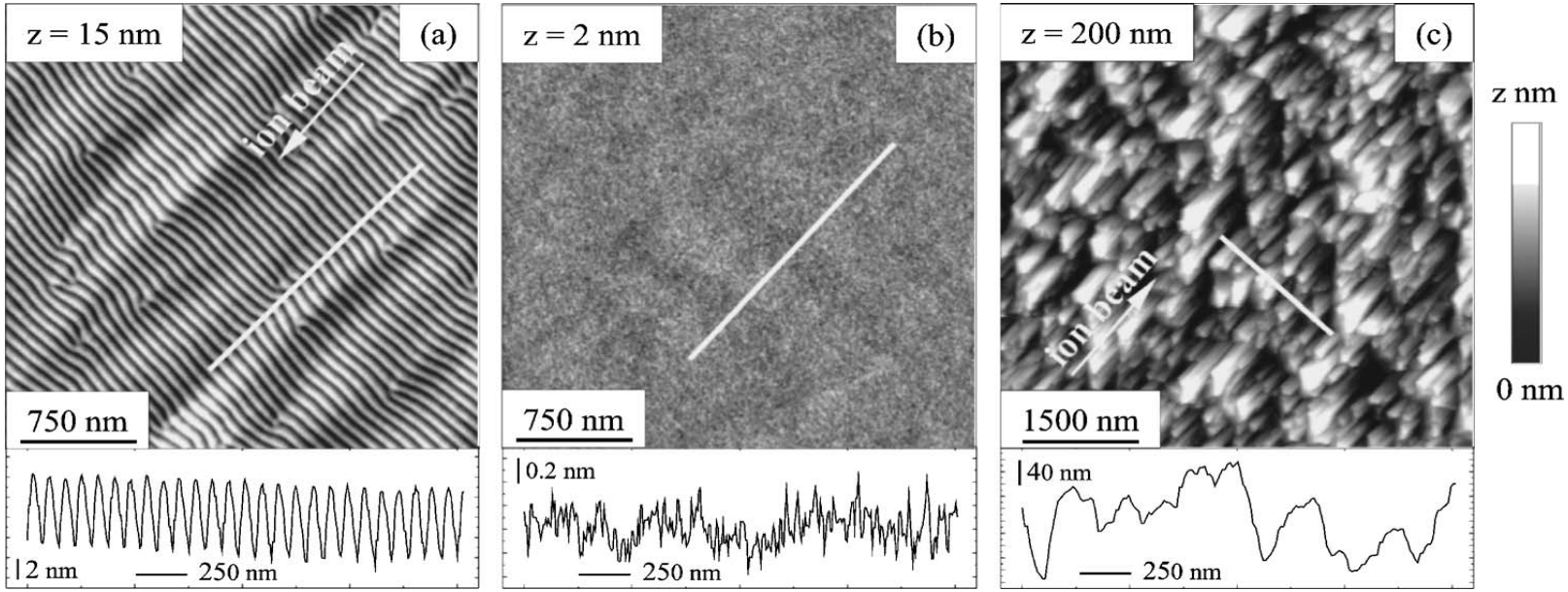
Simuloinnin avulla voidaan ainakin joissakin tapauksissa ymmärtää, miten tämä ”ilmestyminen” tapahtuu.

Antimoniatomeja hiilikalvon pinnalla



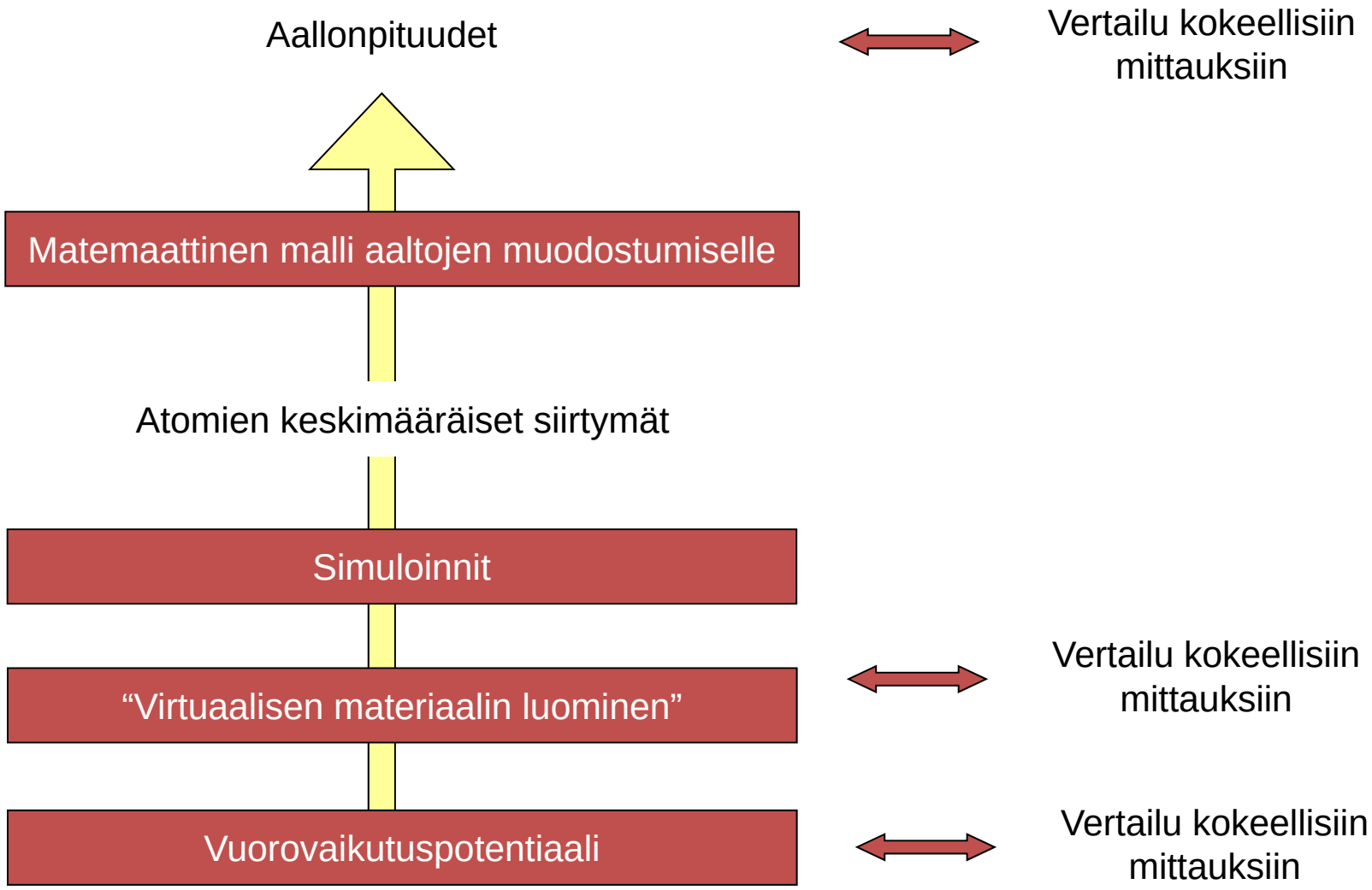
Transmission electron microscopy image of typical island morphologies after deposition of Sb_{2300} clusters on graphite. (P. Jensen, Rev. Mod. Phys. 71 (1999) 1695.)

Aaltoja piin pinnalla



Xe bombardent of silicon: Patterns induced by 5, 45, and 75 degree ion beams.
Ziberi et al. PRB 72 (2005) 235310.

Monitasoinen mallinnus

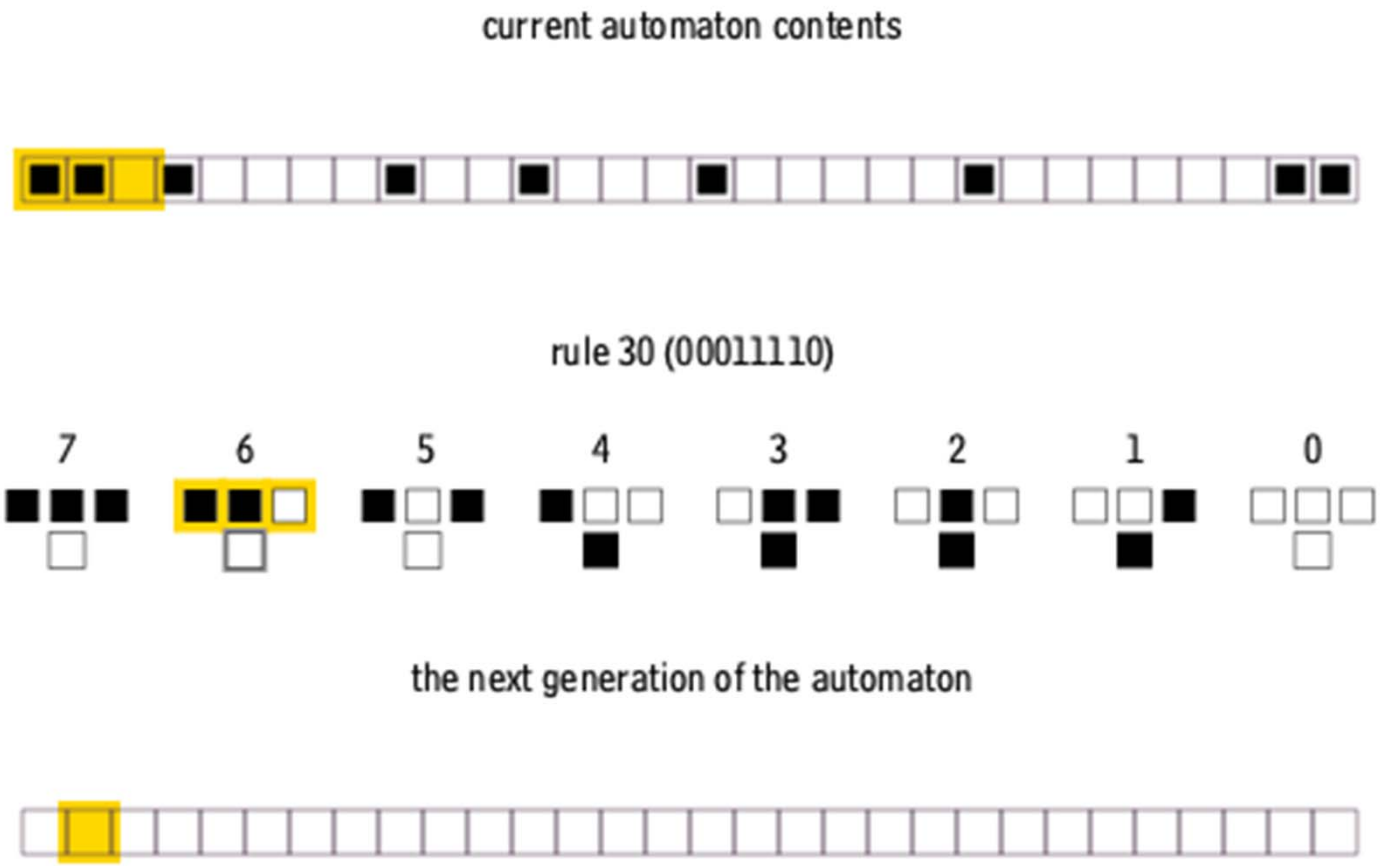


Soluautomaatit maailman selittäjinä

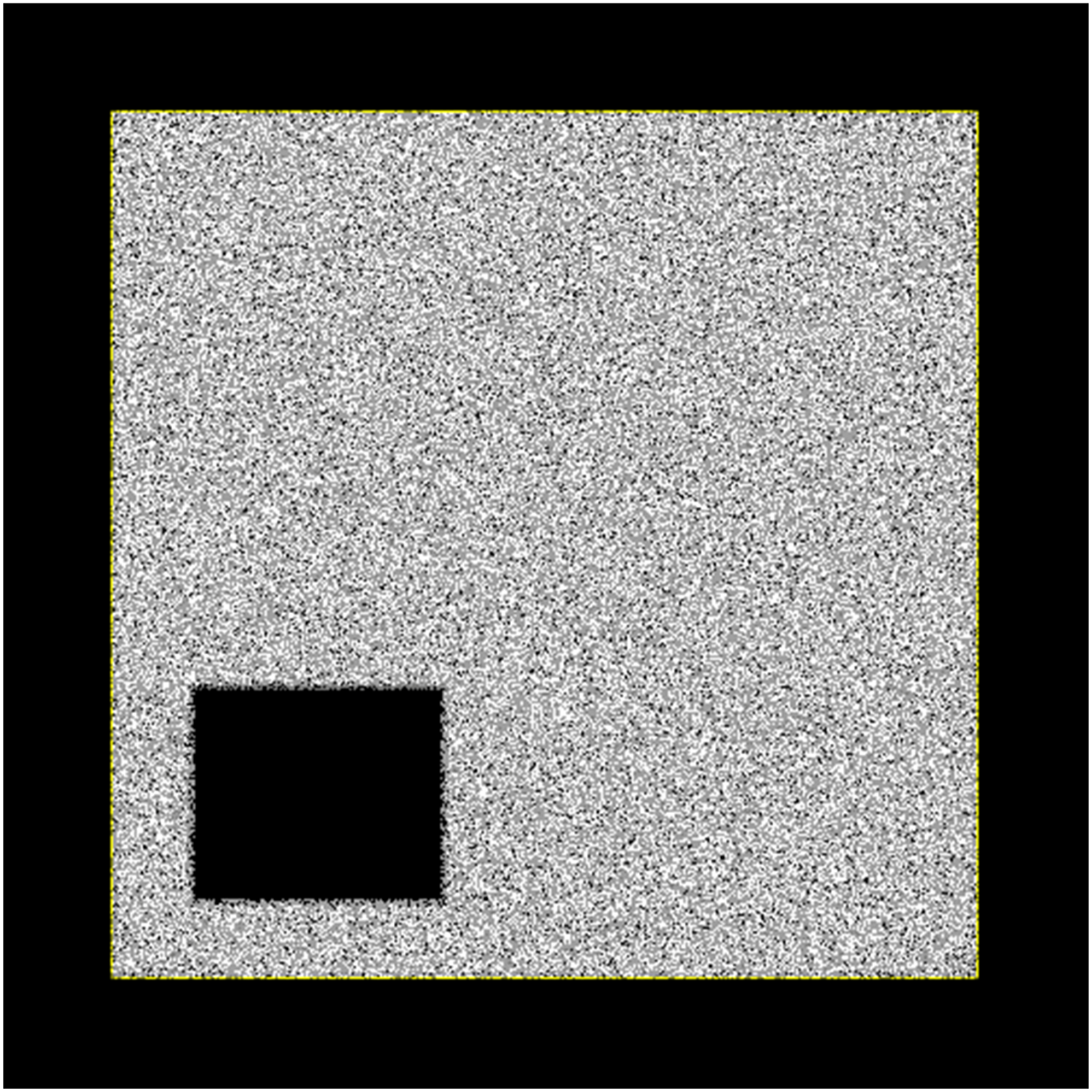
Soluautomaatti on ”soluista” muodostuva verkko, jossa solut voivat olla tietyissä tiloissa. Jokaisella aika-askeleella tilat voivat muuttua säännöstön mukaisesti. Solun tila voidaan päätellä esimerkiksi edellisellä aika-askeleella vallinneista naapurisolujen tiloista.

Voidaan toteuttaa simulointeja, joissa tiloista muodostuneet visuaaliset hahmot muistuttavat luonnollisia olioita ja niiden kehitystä.

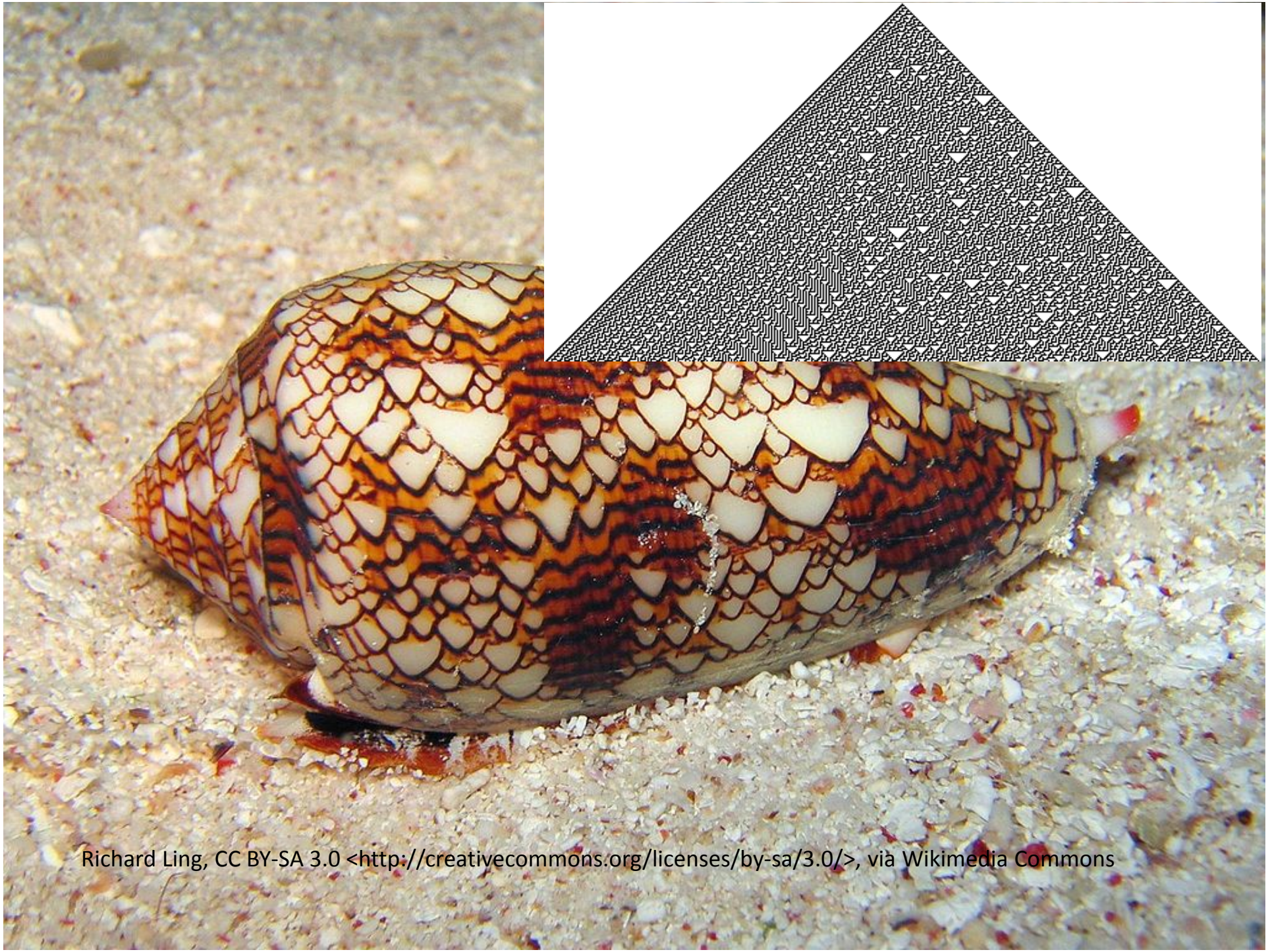
Lisätietoja: https://fi.wikipedia.org/wiki/Soluautomaatti
Stephen Wolfram: A New Kind of Science (2002)



By Cormullion - Own work, CC BY-SA 4.0,
https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=74536115



Simpsons contributor, Public domain, via Wikimedia Commons



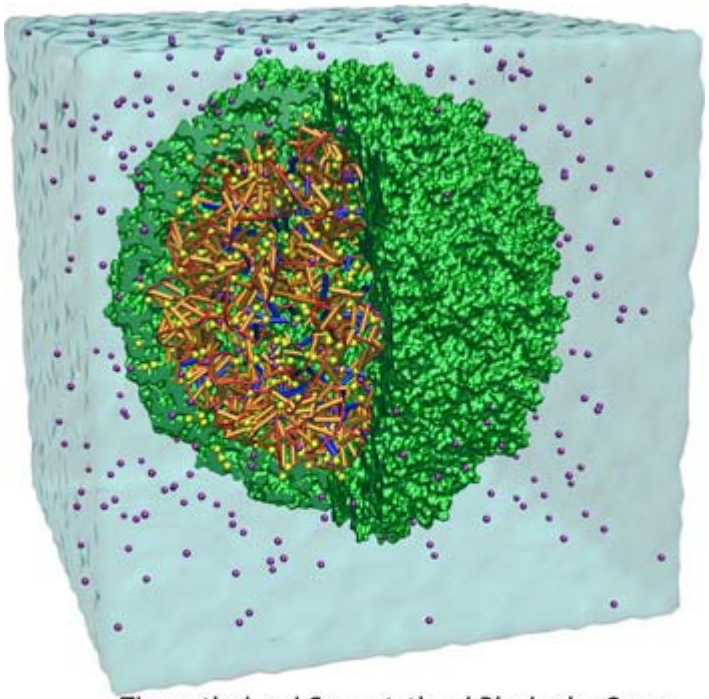
Richard Ling, CC BY-SA 3.0 <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/>, via Wikimedia Commons

Molekyylien itsekokoonpano ja itsejärjestäytyminen

Molekyylit ovat ikään kuin palapelin paloja, jotka sopivat tai eivät sovi toisiinsa.

Osuessaan toisiinsa voivat liittyä yhteen.

Yhteenliittymällä voi olla uusia ominaisuuksia, jotka edelleen vaikuttavat kokoonpanon tai järjestyksen syntymiseen seuraavassa vaiheessa.



Theoretical and Computational Biophysics Group
Beckman Institute
University of Illinois at Urbana-Champaign

Viruksen osittainen simulointi: http://www.ks.uiuc.edu/Research/STMV/

Haasteita, mahdollisuuksia ja myyttejä

Mallinnuksen käytännön haasteita

- **Miten realistinen mallista voidaan tehdä?**
- **Vuorovaikutusten kuvaaminen tarkasti ja samalla laskentanopeuden kannalta tehokkaasti**
- **Onko mallin validointiin käytettävissä tutkimusdataa?**
- **Mallin monimutkaisuus: Onko yhteys mallin lähtökohdista tuloksiin hahmotettavissa myös ihmisjärjellä?**
- **Käytettävissä oleva laskenta-aika on aina rajoite**
  - **Algoritmien valinta ja säätäminen**
  - **Simulaatioiden koko ja määrä**
- **Laskentatarkkuuden hallinta**

Satunnaisuus

Luonteeltaan satunnaiset tapahtumat, kuten ytimien hajoaminen tai viritystilojen purkautuminen:

- **Käytetään satunnaislukuja tapahtumien ajoittamiseen, liikkeen suuntaukseen ja muihin tekijöihin**

Kompleksisen järjestelmän aikakehityksessä esiintyvä vaihtelu:

- **Ajetaan lukuisia simulaatioita eri alkuarvoilla, saadaan tilastollinen tulos**

Satunnaislukuja muodostavan algoritmin tulee olla hyvä.

Determinismi

Kvanttimekaniikan tulkinta on, että todellisuus on perimmältään indeterministinen.

Tietokoneohjelma on deterministinen: sama ohjelmisto, samat alkuarvot, sama kone -> sama lopputulos

Satunnaisuutta voidaan simuloida simulaatiossa – deterministisesti!

Jos kuitenkin oletetaan todellisuuden olevan paikoittain ja ajoittain likimain deterministinen, kuinka tarkasti se voidaan siltä osin simuloida?

Mielivaltaisen tarkka simulaatio

Jos kuitenkin oletetaan todellisuuden olevan paikoittain ja ajoittain likimain deterministinen, kuinka tarkasti se voidaan siltä osin simuloida?

Kompleksisessa järjestelmä pienikin alkuarvojen muutos voi muuttaa järjestelmän käyttäytymistä merkittävästi.

Tietokoneella on aina äärellinen laskentatarkkuus. Pienikin epätarkkuuden kasautuminen vaikuttaa pitemmän päälle simuloinnin tulokseen.

Johtopäätös: Mielivaltaisen tarkka simulaatio ei ole mahdollinen käytännössä.

Elollisen simulointi?

Vaikka kokonaisia olioita ei voida molekyylitasolla simuloida, vievät niiden osien ja prosessien simuloinnit elollisen luonnon tutkimusta eteenpäin.

Hermoverkkoja mallinnetaan, ala kehittyy nopeasti.

Populaatioiden käyttäytymisen simulointi mahdollistaa emergenttien ilmiöiden tutkimisen

Oma näkemys: Ei ole mitään viitteitä siitä, että nämä mallit ja simuloinnit toisivat lähiaikoina selvyyttä psykofyysiseen ongelmaan.

Oppivat järjestelmät

Tuleeko tietokoneesta tieteellinen auktoriteetti?

”Perinteinen” simulointi perustuu algoritmeihin, säännöt ja kaavat luettavissa ohjelmakoodista

Oppiva järjestelmä perustuu neuroverkkoon, josta ei ole luettavissa säännöstöä – ainakaan suoraan!

?

Voiko simulointiin perustuva tutkimus epäonnistua?

Riski: Ohjelmoidaan simulointimalli, joka osoittaa tietyn ennakkokäsityksen oikeaksi – poliittisesti korrekti simulaatio!

Riskin torjunta:

1. **Malli perustuu tunnettuun fysiikkaan tai teoriaan, jota halutaan testata**
2. **Lähtökohdat, välitulokset ja lopputulokset ankkuroidaan kokeellisiin havaintoihin**
3. **Tunnistetaan mallin piirteet, jotka ovat edellytyksiä tietyn lopputuloksen saamiselle**
4. **Noudatetaan vakiintuneita hyviä käytäntöjä, esimerkiksi riittävä statistiikka, laskennallisen virheen hallinta, laadukkaat satunnaisluvut jne.**
5. **Malli julkaistaan koodeineen ja alistetaan julkiselle kritiikille**

IPCC - Evaluation of Climate Models

Ilmastomallien laaja arviointi. Tiettävästi laajin laatuaan. Esimerkin vuoksi muutamia johtopäätöksiä vapaasti käännettyinä:

1. Pintalämpötilojen simulointi on parantunut, haasteita riittää.
2. Mallit pystyvät tuottamaan pintalämpötilojen historialliset muutosten yleiset piirteet, eivät kuitenkaan tarkasti.
3. Pilvisyyden vaikutusten simulointi on edelleen haasteellista.
4. Myrskyjen kulku pystytään simuloimaan karkeasti.
5. Osa malleista pystyy tuottamaan havaitun merten pintavesien lämpötilanousun.
6. Aerosolit on otettu mukaan useaan malliin.

Terveiset aika-seminaariin – kvantittunut aika

1. **Suuressa osassa fysiikka aika kuvataan yhteen suuntaan eteneväksi jatkumoksi. Sellaisena koemme myös psykologisen ajan.**

2. **Teoreettisissa malleissa on tarjottu ratkaisuksi myös kvantittunutta aikaa eli jonkinlaista aika-askellusta (esimerkiksi ”chronon” jo 1927).**

3. **Kvantittunut aika ei tietenkään ole sama käsite kuin tietokonesimulaatioiden aika-askellus. Aikakvantit ovat jotain arkihavaintojemme näkökulmasta poikkeavaa, kuten kvanttimekaniikassa on totuttu.**

4. **Jos aika osoittautuu kvantittuneeksi, ei siitä voi suoraan päätellä, että elämme jonkinlaisessa simulaatiossa.**

Yhteenveto

1. **Tietokonesimulointi on modernin luonnontieteen keskeinen työväline**

2. **Simulointien tuloksilla on merkittävä yhteiskunnallinen vaikutus**

3. **Simulointi on päättelyä, ei kokeellista tiedettä**

4. **Simulointi ei tee matemaattisten teorioiden rakentelua tarpeettomaksi**

5. **Simulointi on vaativat tehtävä, jossa on riskinsä**

6. **Täydellistä simulointimallia ei ole eikä käytännössä tarvita**

7. **Simulointi on antaa näkökulmia luonnonfilosofiseen pohdiskeluun, esimerkiksi monimutkaisen systeemien ja emergenssin tarkasteluun**