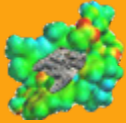
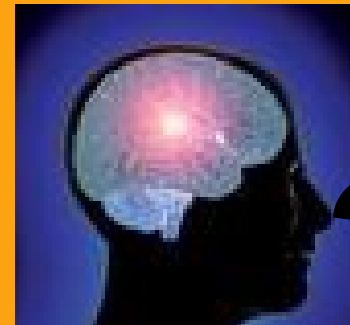


HELSINGIN YLIOPISTO  
HELSINGFORS UNIVERSITET  
UNIVERSITY OF HELSINKI



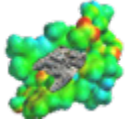
# Kommer rå datorkapacitet att klå människohjärnan i att beskriva naturen?

Kai Nordlund  
Professor i  
beräkningsmaterialfysik  
17.11.2009



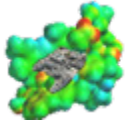
**Matematisk-naturvetenskapliga fakulteten**  
**Institutionen för fysik**  
**Avdelning för materialfysik**





## Vad skall jag tala om?

- Analytisk beräkning vs. datorberäkning
  - När fungerar analytisk matematik i att behandla naturen?
- Termodynamik, komplexitet och emergens
- Emergens i jonbombardemang av material
- Cirkeln sluts: den klassiska fysikens hämnd
- Framtid: förståelse av biologisk emergens?

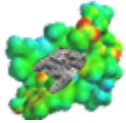


# Analytisk beräkning versus datorer

## ■ Exempel: jorden och månen

- Vi ställer oss en vetenskaplig fråga:  
Vi vet var jorden och månen befinner sig nu. Var befinner de sig om en miljon år?



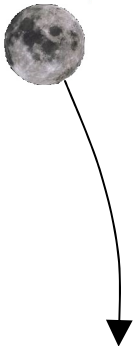


# Analytisk beräkning versus datorer

## ■ Analytisk beräkning:

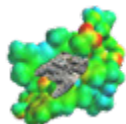
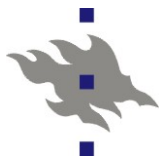
Om vi tänker oss att resten av solsystemet inte påverkar systemet, kan vi lätt räkna svaret på systemet:

- Månens bana är en cirkel, platsen bestäms av rotationstiden  
=> lösningen är i princip:



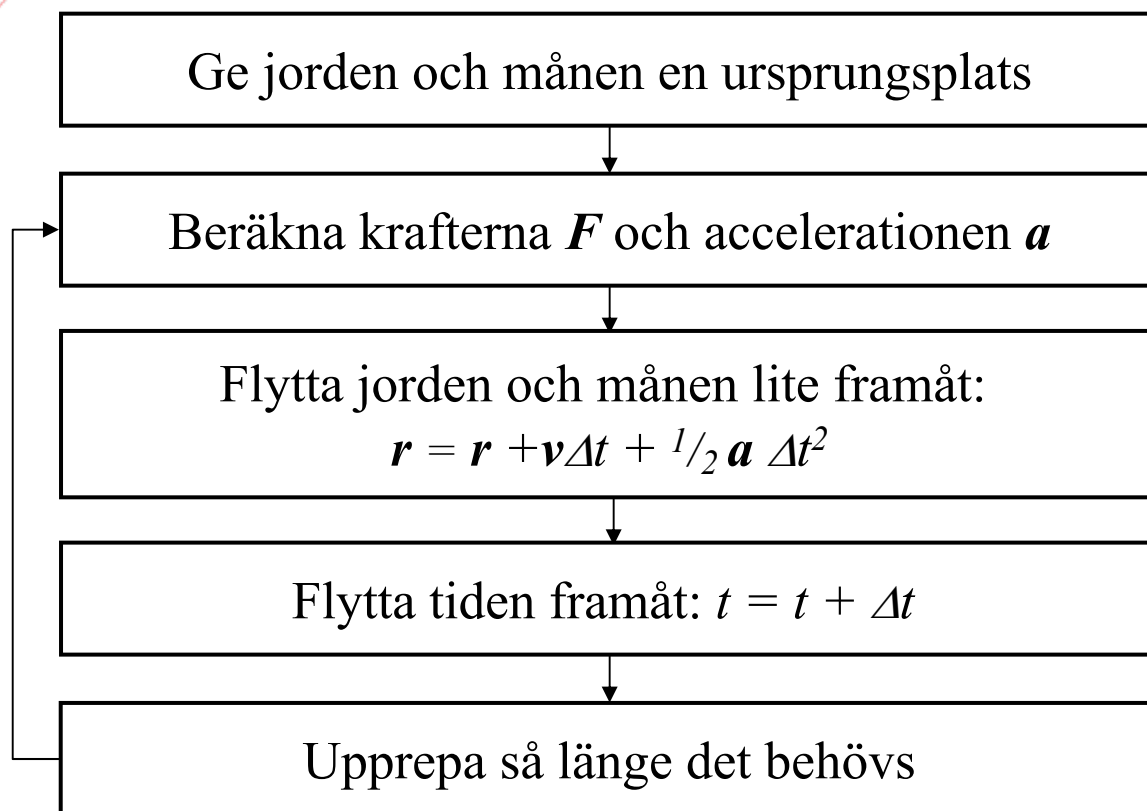
$$\text{PLATS} = \text{TID} / 29.53 \text{ dagar} * 360 \text{ grader}$$

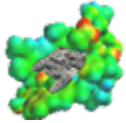
som ger platsen vilken tidpunkt som helst



# Analytisk beräkning versus datorer

- Om nu en analytisk lösning dock inte skulle existera, kunde en dator ändå få fram svaret med att **iterera**:





## Analytisk beräkning versus datorer

- Genom att iterera får man också fram svaret på var månen är om en miljon år



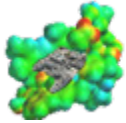
- ***Men hur många gånger skall man iterera??***

- Om  $\Delta t = 1$  timme, borde man iterera  
 $24 \times 365 \times 1\,000\,000$   
 $= 8\,760\,000\,000$  gånger

- En analytisk beräkning ger svaret på en gång



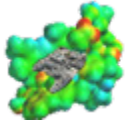
**=> Människan vinner datorn!**



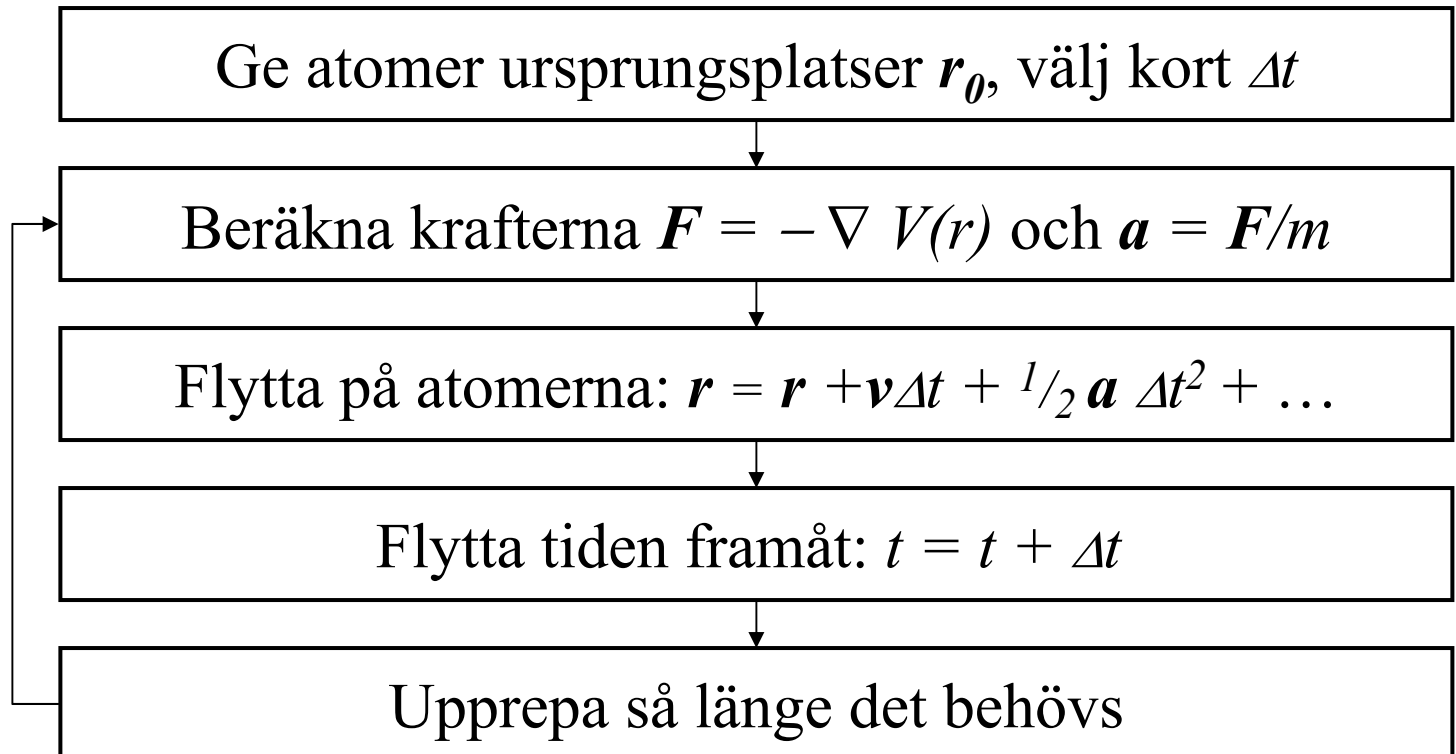
## 2 vs. 3 vs. $N$ partiklar

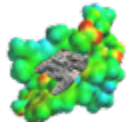
- Jorden+månen är ett 2-partikelsystem
  - Rörelseekvationerna går att lösa analytiskt (Newton)
- Men vad händer om det finns 3 partiklar?
  - Fast jorden-månen-solen
  - Inte mera möjligt att lösa exakt analytiskt!
- Och vad händer om det finns ett stort antal partiklar,  $N$ ?
  - En människa kan omöjligen lösa det med penna och papper
- Varför är detta viktigt?
  - Världen består av atomer
  - För att förstå atomers rörelse vill vi lösa rörelseekvationerna för ett stort antal atomer  $N$
- En dator kan göra det!



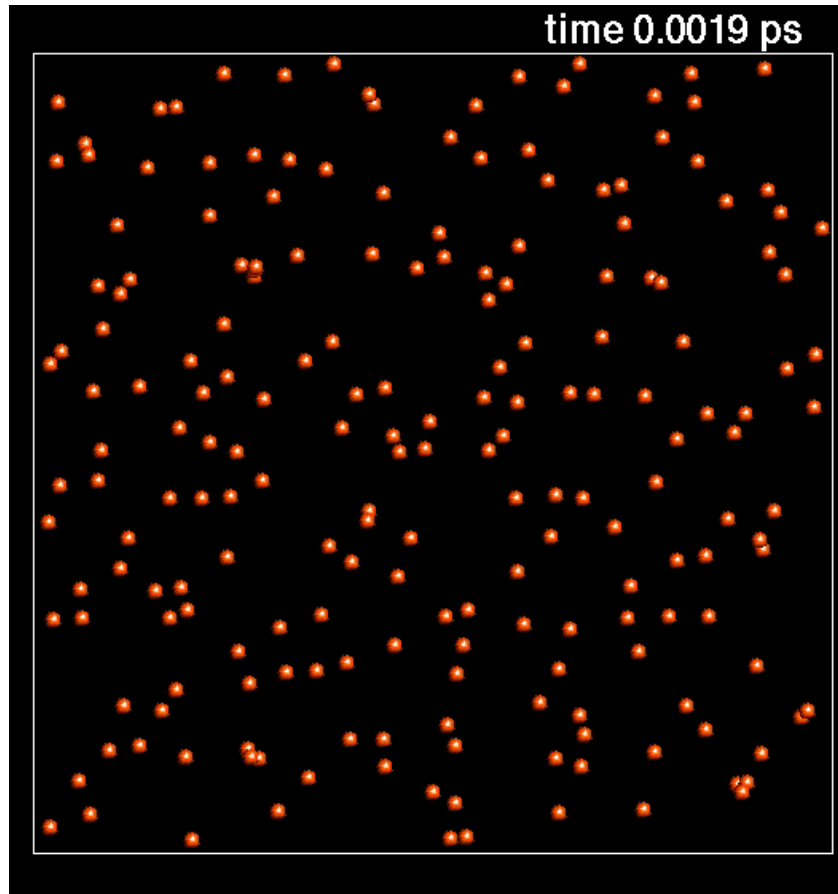


# Simulering av atomrörelse = molekyldynamik

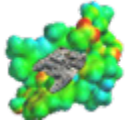




## Exempel: 200 neonatomer



- Temperatur  $T = 300$  K, Volym  $V = (5 \text{ nm})^3$ , Antal atomer  $N = 200 \Rightarrow$  simuleringen gav trycket  $P = 69$  bar

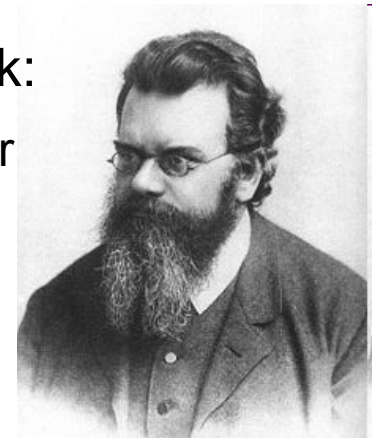


## Herr Boltzmanns hämnd

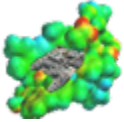
- Simuleringen på atomnivå gav 69 bar
- Att få svaret krävde 5300 itereringar och ungefär 1.2 miljoner växelverkningsberäkningar
- Men klassisk termodynamik kan samma sak:
  - Redan på 1800-talet visste man att ädelgaser följer ganska väl tillståndsekvationen

$$PV = Nk_B T \Rightarrow P = \frac{Nk_B T}{V}$$

- Insättning ger 66 bar (jfr. simulering 69 bar)
  - En enda beräkning gav nästan rätt svar – varför slösa en miljon beräkningar på en dator?



=> Människan vinner datorn!

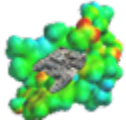


# Var går gränserna för analytisk beräkning?

- Analytisk klassisk termodynamik beskriver mycket bra termisk jämvikt
  - T.ex. luft i ett rum med konstant temperatur
- Också vissa ojämviktsprocesser kan beskrivas bra analytiskt
  - Exempel: luft i ett rum en kall vinterdag:  $+20\text{ C}$  inne,  $-20\text{ C}$  ute
    - Värmekonduktivitets-ekvationen



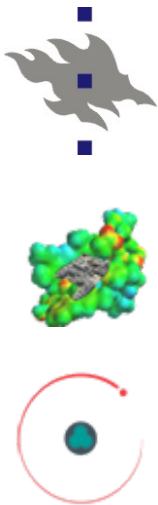
[Werner Åström, Talvi-ikkuna, 1920, museot.fi]



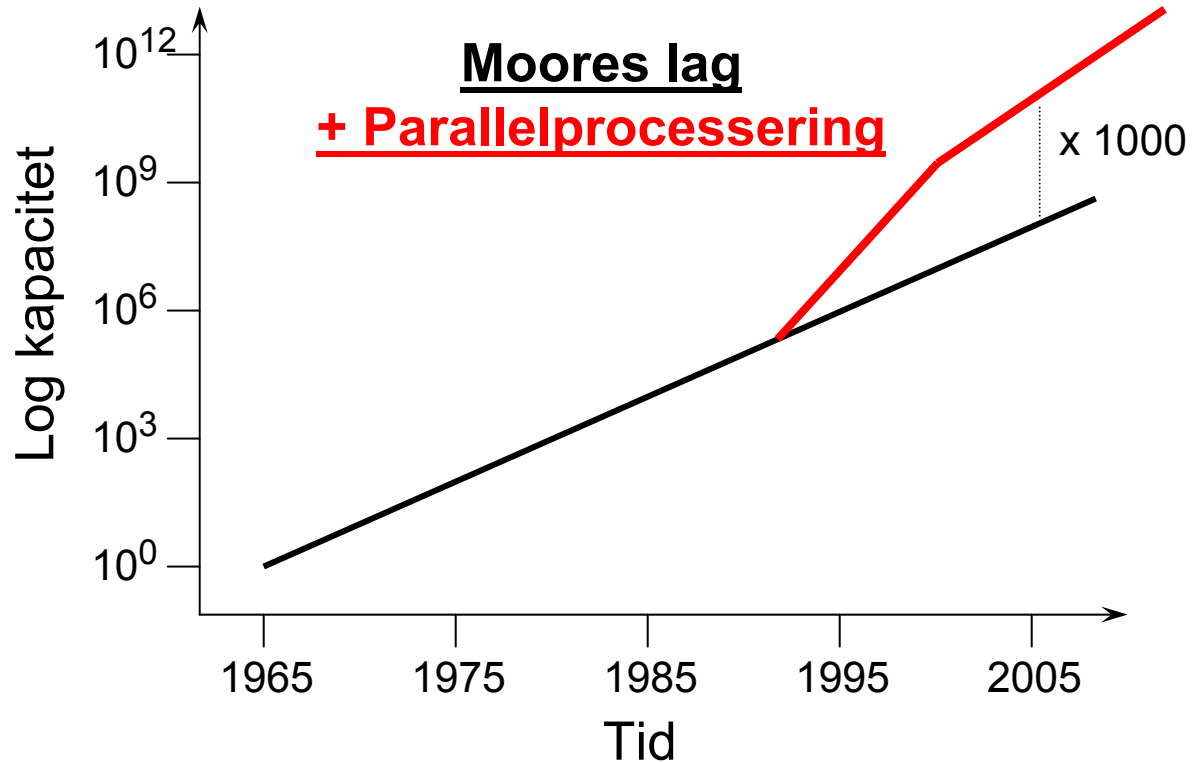
# Vad är gränserna för analytisk beräkning?

- Men många ojämviktsprocesser kan aldrig beskrivas analytiskt
- Speciellt intressanta är processer där komplicerat beteende "stiger fram" utan styrning, spontant
- "Emergens", "more is different"
  - Från enkla grundväxelverknningar stiger det fram komplicerat beteende då det finns tillräckligt av dem
- Emergens är mycket svårt att spå analytiskt
- Men emellanåt kan man se det direkt i datorsimuleringar!
  - Och naturen

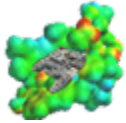




# Explosionen i datorkapacitet!

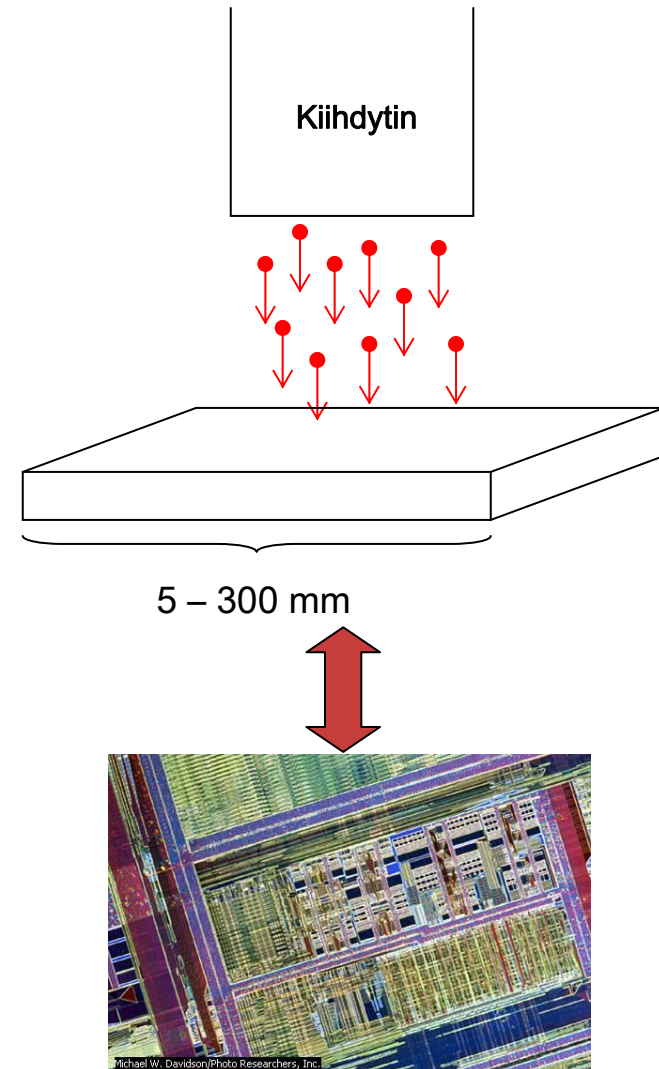


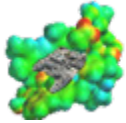
- Hur många datoroperationer kan man göra idag?
- Finlands Cray: 2000 prosessorer, 36 timmar:
  - En enda körning kan vara  $2000 \times 36 \times 3600 \times 10^9$   
operationer = **259 200 000 000 000 000 stycken !!!**



# Exempel av emergens i atomnivås bombardemangsprocesser

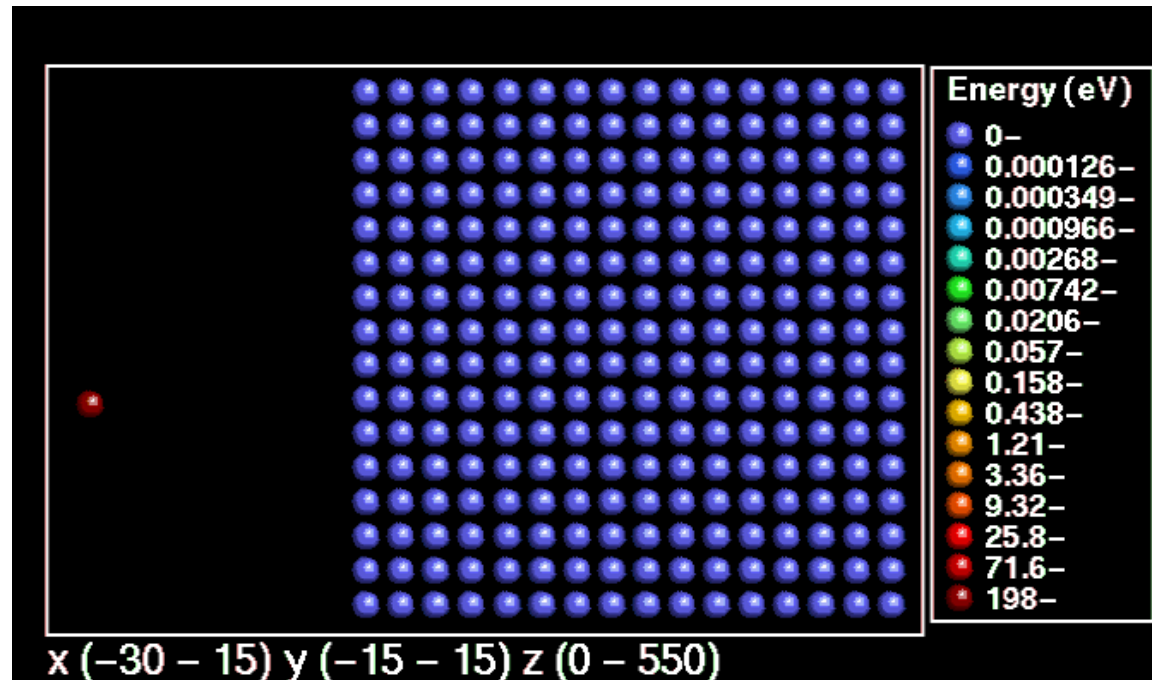
- I vår grupp forskar vi i vad som händer när man beskjuoter ytor med joner
  - De accelereras till mycket stor energier
  - En atom eller atomkluster i taget bombarderar ytor
  - Yt- och nanovetenskap
- Liknande bombardemang används i bl.a. tillverkning av datorchips



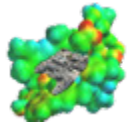


## Liten bombardemangsenergi: 500 eV

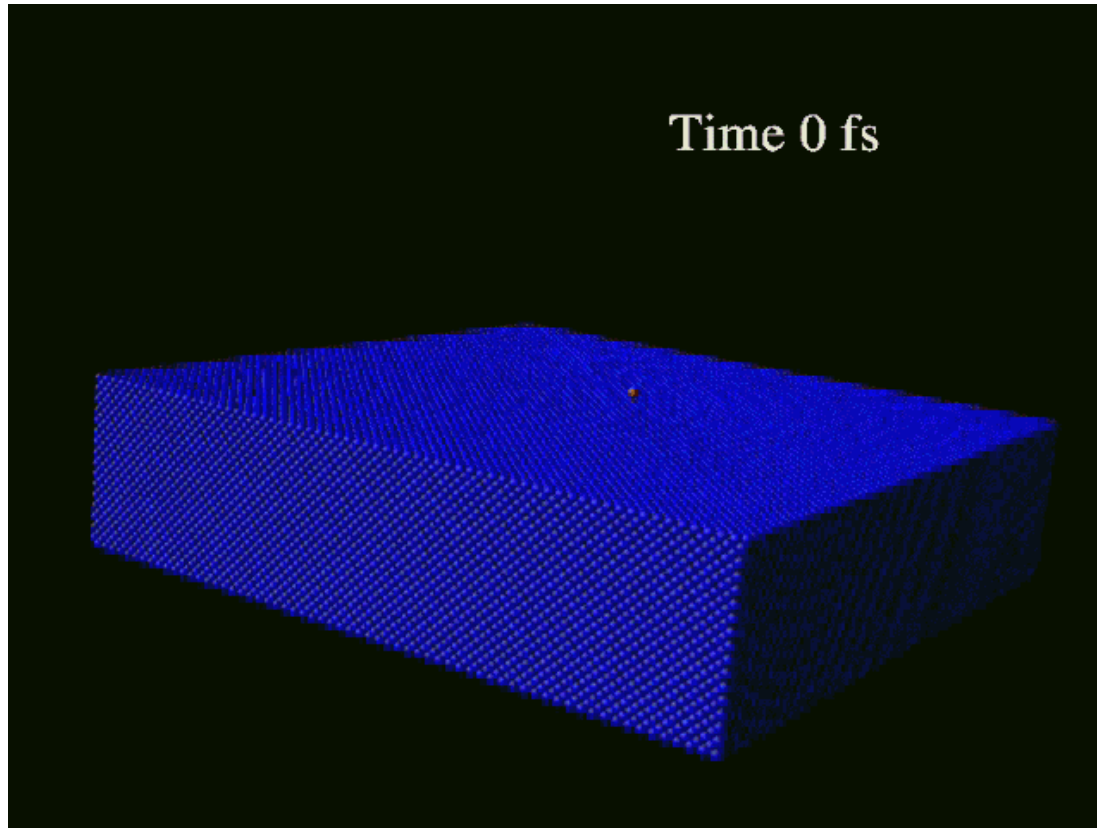
- Den teoretiska forskningen i området har redan länge gjorts med datorsimuleringar



- Detta är “biljardbollsphysik”, och kan förstås kvalitativt med klassisk fysik



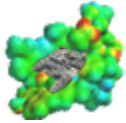
100x större bombardemangsenergi: 50 000 eV



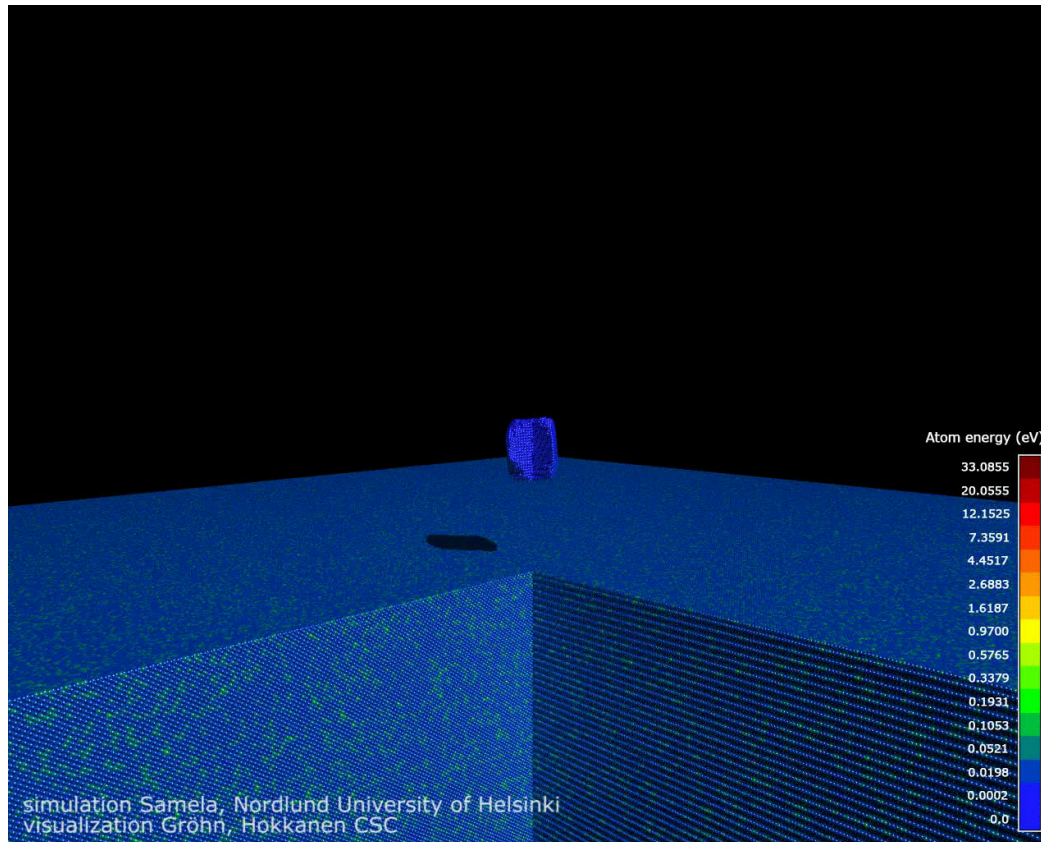
- Nu är beteendet mycket komplicerat
- Detta kan inte på något sätt förutspås analytiskt!
  - Ett komplicerat beteende steg fram => *Emergents!!*



**1000x större bombardemangsenergi: 50 000 000 eV**

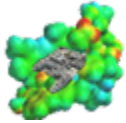


■ Ett guldkluster (100 000 atomer) slår till mot guld



**Denna simulering  
tar ungefär  
200 000 CPU-  
timmar då man  
kör den på  
Finlands Cray:  
~ en triljon ( $10^{18}$ )  
operationer**

*Emergents!!*

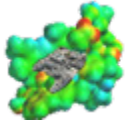


## Emergens

- Atomers grundväxelveckningar var i alla fall de samma, och relativt enkla:  
3 analytiska ekvationer
- Men när antalet atomer steg till ungefär en miljon, steg det komplicerade beteendet fram: upprepandet av ett (löst) stort antal växelveckningar => emergens
- Fenomenet åstadkoms bara tack vare ett otroligt stort antal upprepade växelveckningar !

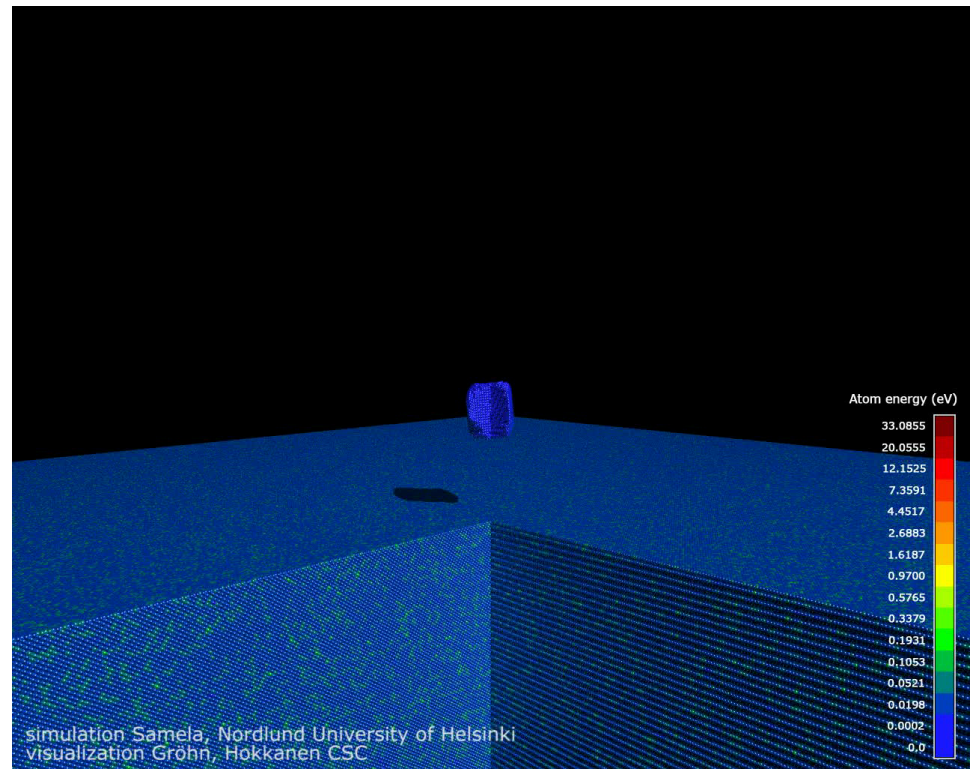


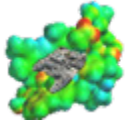
=> Datorn vinner människan!



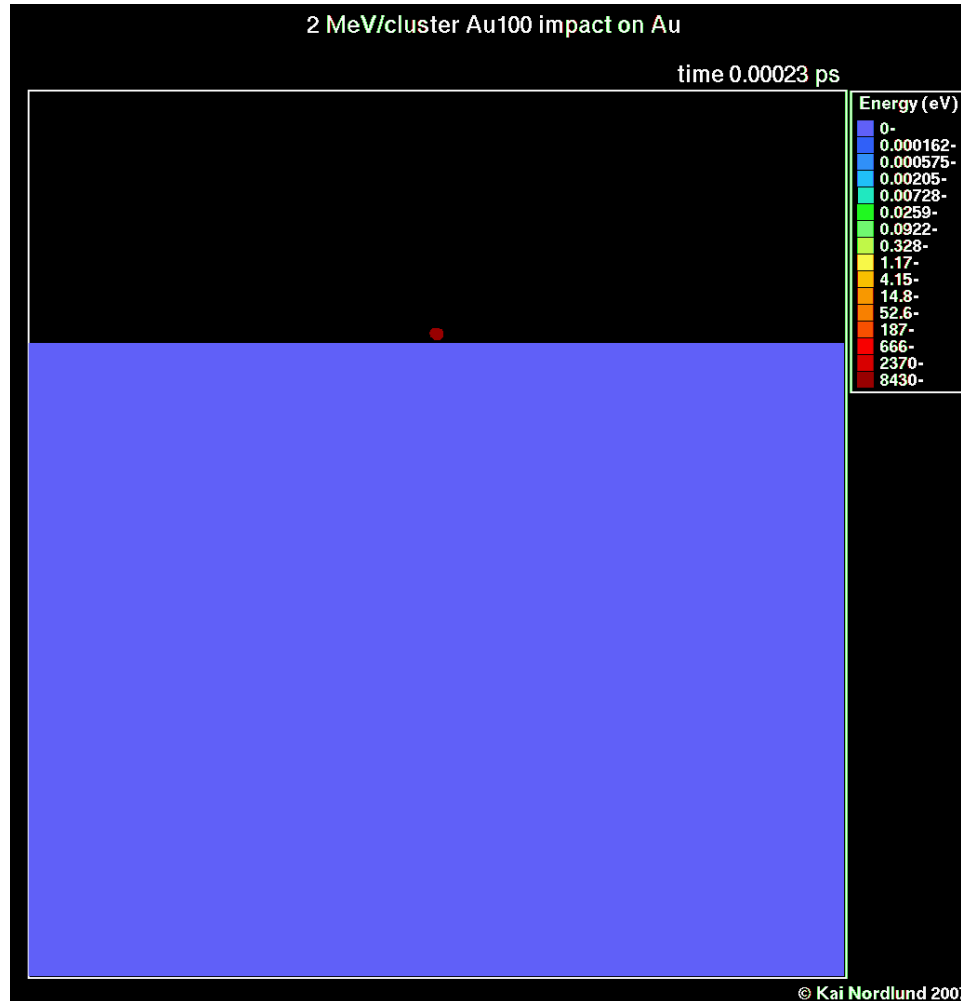
# Lordi Rayleighs hämnd

- Men låt oss se på det sista fallet pånytt:
- "Fingrarna" bryts upp spontant
- Detta beteende förutspådde Lord Rayleigh på 1800-talet!

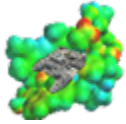




## Tvärsnitt: Au<sub>100</sub>, 2 000 000 eV

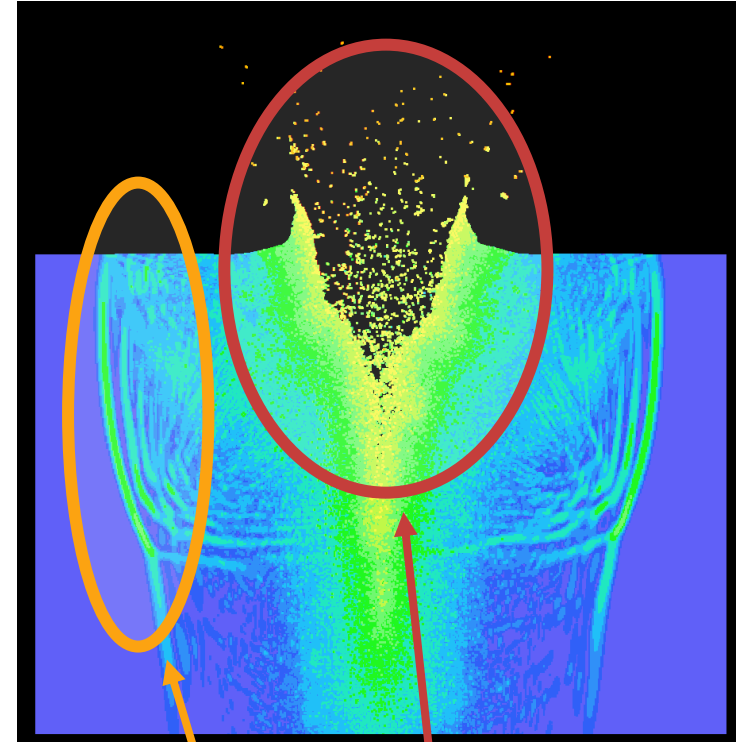


■ Klassiska vågor (ljud, jfr. Mats Braskén idag)!



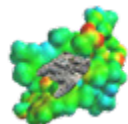
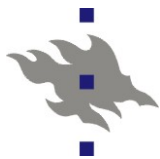
## Cirkeln sluts

- Vågorna stiger fram ur atomnivås simulering
- Men denna våg kan beskrivas med den *klassiska vågekvationen*!
- Alltså en del av beteendet har återvänt till den klassiska kontinuitetsvärlden!
  - Att komma fram till det krävde en miljard räkneoperationer



**Emergens!!**

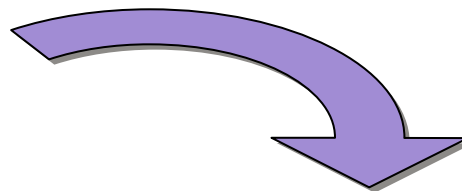
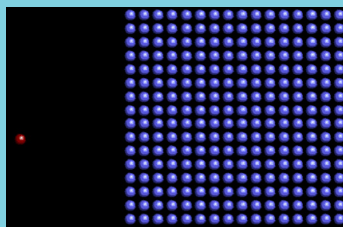
**Klassisk termodynamik**



## Sammandrag om exemplet - hur slöts cirkeln?

10 000 atomer

- klassisk  
biljardbolls-  
fysik

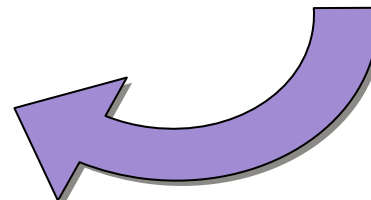
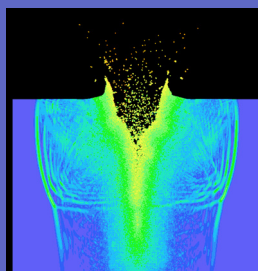


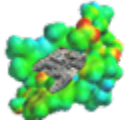
1 000 000 atomer

- *Emergens*

100 000 000 atomer

- Klassiska  
fysikens  
återkomst  
- Men andra  
lagar





## Svaret

### ■ Nej!

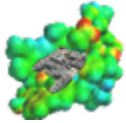
- Då när analytiska ekvationerna fungerar, klår människohjärnan fortfarande datorer



### ■ Jo!

- Men det finns fenomen, som emergens och andra komplexa fenomen, som människan inte kan beskriva utan datorns hjälp!

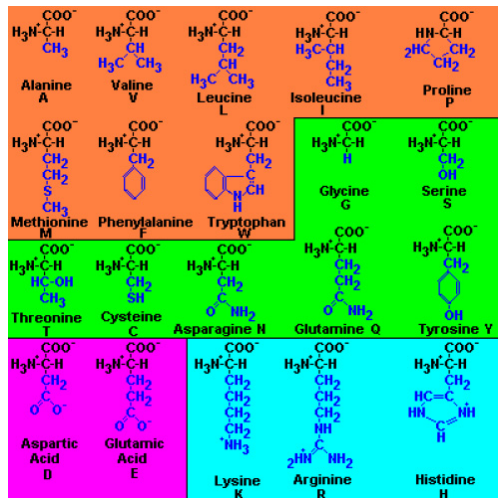




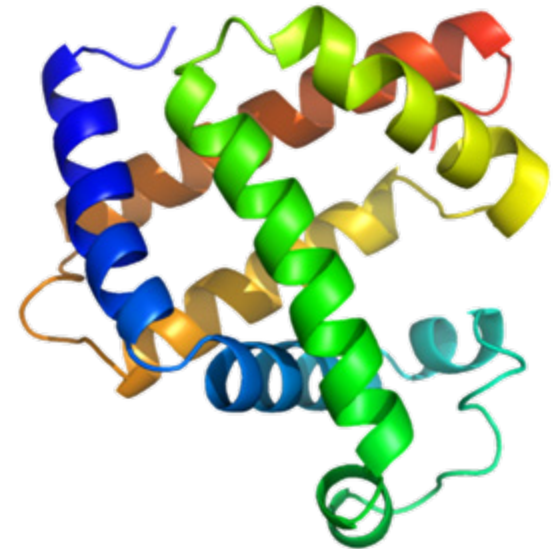
## Biologisk emergens?

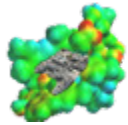
- Växelverkningarna mellan atomer är relativt enkla och ganska välförstådda
  - Bindningslängder, vinklar, mm.
- Men hur stiger den extremt komplicerade biologin, livet, fram ur detta?

### 20 enkla aminosyror



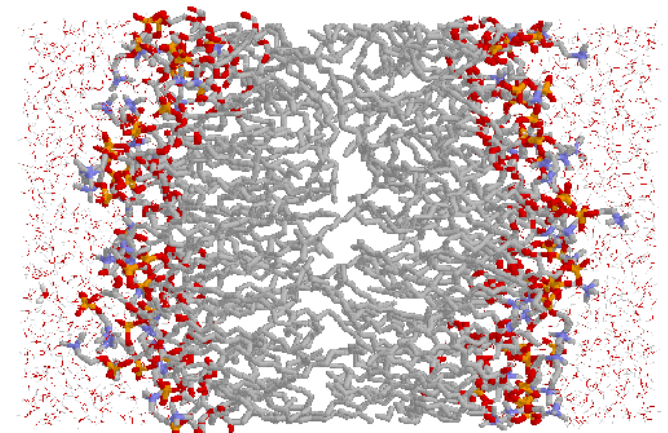
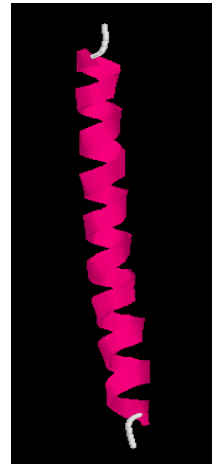
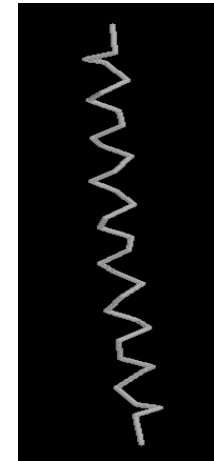
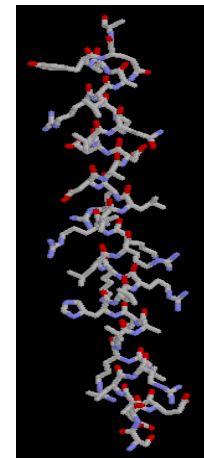
### Komplicerat protein

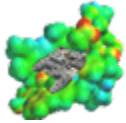




# Hur långt kan man modellera biologi?

- Man kan i biofysiken redan nu simulera impressivt komplicerade biologiska strukturer
  - Atom eller atombaserade grovkornsmodeller
- Man kan redan nu modellera t.ex. en hel cellvägg dynamiskt
  - Också ett helt virus har modellerats
  - Nån dag kanske en hel cell
  - Exempel på dynamisk process: t.ex. alkoholens inverkan på en cellvägg [Emppu Salonen]
- Biologisk emergens kan modelleras





## Framtiden: emergens av medvetande??

- En av de största kvarvarande problemen i naturvetenskap är hur medvetande stiger fram
- På något sätt får biljoner och triljoner neuronväxelsverknningar till stånd medvetande och intelligens
  - "Emergens av intelligens"
- Vad förklarar detta, och kan man få fram det i datorer??
- Om man kan, blir datorerna medvetande!?!

