

## UUSIA TIETEEN HUIPPUYKSIKÖITÄ

**S**uomen Akatemia valitsi vuosille 2022-2029 yksitoista uutta tutkimuksen huippuyksikköä. Seuraavassa esitellään lyhyesti näistä neljä: Professori Eero Saksmanin (HY) johtama Satunnaisuuden ja rakenteiden huippuyksikkö, Professori Hanna Vehkamäen (HY) johtama VILMA (Virtuaalinen laboratorio ilmakehän molekyyli-tason reaktioille ja faasimuutoksille), Professori Johanna Ivaskan (UTU) johtama Solumekaniikka biologisten esteiden toiminnassa -huippuyksikkö sekä Kvarkkiaineen tutkimuksen huippuyksikkö, jota johtaa professori Tuomas Lappi (JY). Arkhimedeksen tulevissa numeroissa näiden yksiköiden tieteellisiä tavoitteita ja tuloksia esitellään pidemmin ja yksityiskohtaisemmin. Myös muut kuin tässä esitellyt yksiköt ovat tervetulleita esittäytymään Arkhimedeksen lukijoille niin halutessaan.

### SATUNNAISUUS JA RAKENTEET

Monet ajankohtaiset, keskenään hyvinkin erilaiset matematiikan ja sen sovellusten ongelmat sisältävät olennaisena osana satunnaisuutta ja johtavat yllättävän samankaltaisiin satunnaisia rakenteita koskeviin kysymyksiin. Satunnaisten rakenteiden geometria on usein fraktaalinen eli toistuva. Tällaisia rakenteita esiintyy erityisesti tilastollisessa fysiikassa ja kvanttikenttäteoriassa, esimerkkeinä magnetisaatio ja kvantti-gravitaatio.

Satunnaisuuden ja rakenteiden huippuyksikkö tutkii tällaisia ilmiöitä. Yksikön tavoitteena on erityisesti ymmärtää satunnaisten rakenteiden analyttisiä ja geometrisia

ominaisuuksia. Tutkimus vaatii useamman matematiikan alan asiantuntemusta, joten huippuyksikkö kokoaa yhteen joukon uuden sukupolven johtavia matemaatikkoja näiden ongelmien selvittämiseksi.

Satunnaiset rakenteet esiintyvät yllättävällä tavalla myös lukuteoriassa, kuten alkulukujen jonon rakenteessa. Kuuluisa matemaatikko Paul Erdős totesi: "God may not play dice with the universe, but something strange is going on with the prime numbers". Huippuyksikössä tutkitaan esimerkiksi multiplikatiivisten funktioiden ja Riemannin zetafunktion satunnaista luonnetta.

Huippuyksikkö kehittää myös uusia analyttisiä ja geometrisia menetelmiä, joiden

tavoitteena on ymmärtää esimerkiksi miten makroskooppiset luonnonlait seuraavat mikroskooppisista. Huippuyksikkö tekee myös suoraan sovelluksiin tähtäävää tutkimusta kehittämällä korkeaulotteista tilastotiedettä, satunnaisia algoritmeja ja niiden geometrista ymmärtämistä laskennallisia sovelluksia ja koneoppimista varten.

Satunnaisten rakenteiden ymmärrystä käytetään muun muassa mallintamaan veden virtausta kalliossa, jonka sovelluskohteena on geoterminen energiantuotanto. Toinen sovelluskohde on ilmakehän aerosolien kondensaatiomallien ennustettavuus ja sitä kautta ilmastomuutoksen ennakoimisessa käytetyt mallit.

Satunnaisuuden ja rakenteiden huippuyksikköä johtaa professori Eero Saksman. Huippuyksikkö koostuu tutkimusryhmistä Helsingin yliopiston lisäksi Aalto-yliopistossa, Jyväskylän yliopistossa ja Turun yliopistossa.

---

## VILMA - VIRTUAALINEN LABORATORIO ILMAKEHÄN MOLEKYYLITASON REAKTIOILLE JA FAASIMUUTOKSILLE

Ilmastomuutos ja ilman saasteet ovat aikamme suurimmat ympäristöongelmat, ja molemmat ovat seurausta päästöistä, joita ilmakehään päätyy ihmisen toiminnan seurauksena. Näiden ongelmien keskiössä on toistaiseksi huonosti ymmärretty kaasujen muuntuminen nestemäiseksi tai kiinteäksi aineeksi radikaalireaktioissa ja molekyyliklusterien muodostuksessa. Ilmakehän olosuhteissa näihin aerosolien muodost-

tumisprosesseihin osallistuu valtava määrä pääasiassa orgaanisia yhdisteitä, joista monien mallintaminen ja mittaaminen yksittäinkin on hyvin vaikeaa. Huippuyksikön tutkimuksessa keskeisenä haasteena onkin sekä lyhytikäisten tai epästabiliinien molekyylien ja molekyyliklusterien mittaamisen vaikeus että kaasumaisten prekursorien ja hiukkasia muodostavien molekyylien kemiallinen monimutkaisuus.

VILMAssa yhdistämme ilmakehän- ja tietojenkäsittelytieteen menetelmiä rakentaaksemme virtuaalisen laboratorion ilmakehän aerosolien muodostumiselle. Virtuaalinen laboratorio yhdistää kymmeniä eri mittalaitteita, data-analyysityökaluja ja eri tasoisia skaalojen malleja itseään korjaavaksi ja vuorovaikutteiseksi työkalupakiksi. Tekoälyyn perustuva lähestymistapamme mahdollistaa ilmakehän hapetusreaktioiden ja noen muodostumisen mallintamisen, jolloin voimme ennustaa tiivistymiskykyisimpien yhdisteiden muodostumista erilaisissa ilmakehän olosuhteissa. Kehitämme laskennallisesti kevyitä menetelmiä ilmakehän monikomponenttisten molekyyliklusterien stabiilisuuden mallintamiseksi, sekä massaspektrometriihin perustuvia kokeellisia menetelmiä klusterien havaitsemiseksi ja mittausten epävarmuuksien pienentämiseksi erityisesti halkaisijaltaan 1-50 nm klustereille. Uudet mallimme, joiden ennustuskyky vahvistetaan kehittämällämme koejärjestelyillä, mahdollistavat pääasiassa orgaanisista aineista koostuvien nanometrien kokoluokan klusterien muodostumis- ja kasvunopeuksien ja niiden virherajojen ennustamisen erilaisissa ilmakehän olosuhteissa. Mallien ennustuskyky vahvistetaan kehittämällämme koejärjestelyillä, Tällainen malli on edellytys esteettöisen ajan ilmakehän tarkalle rekonstruktioille, jota puolestaan vaaditaan luotettaviin ilmanlaadun ja ilmaston ennusteisiin. Uusilla data-analyysimenetelmillä saadaan myös aiemmin

tuotetustaasta mittausaineistostadatasta lisää tietoa ilmakehän aerosoleista. Yleisemmällä tasolla kehittämämme menetelmät viitoittavat tietä kombinatoristen ongelmien ratkaisulle muissakin tutkimuskohteissa, joissa kemiallisia komponentteja on valtava määrä, esimerkiksi biologisissa systeemeissä tai energian tuotannossa.

VILMAN 10 partneria erikoisaloineen ovat: Hanna Vehkamäki (johtaja, laskennallinen aerosolifysiikka, Helsingin yliopisto), Theo Kurtén (varajohtaja, laskennallinen ilmakemia, Helsingin yliopisto), Arkke Eskola (kokeellinen reaktiokinetiikka, Helsingin yliopisto), Juha Kangasluoma (kokeellinen ilmakehätiede, Helsingin yliopisto), Kari Lehtinen (aerosolidynamiikka ja käänteismallinnus, Itä-Suomen yliopisto), Kai Puolamäki (tekoäly, Helsingin yliopisto), Patrick Rinke (koneoppiminen materiaalitieteessä, Aalto -yliopisto), Matti Rissanen (vapaiden radikaalinen hapettumiskemia, Tampereen yliopisto & Helsingin yliopisto), Siegfried Schobesberger (kemiallinen ionisaatio-massaspektrometria, Itä-Suomen yliopisto) ja Mikko Sipilä (massaspektrometrian laitekehitys, Helsingin yliopisto).

---

## SOLUMEKANIikka BIOLOGISTEN ESTEIDEN TOIMINNASSA -HUIPPUYKSIKKÖ

Fysiikassa pintojen tärkeys on hyvin tiedossa; mitä pienempiin skaaloihin edetään, sitä enemmän tutkittavasta materiaalista on pelkkää pintaa. Biologiassa pintojen rooli on tätäkin kiehtovampi, koska pinnat ovat läsnä kaikkialla. Elämämme perustuukin pitkälti siihen, että meitä suojelee laaja joukko erikoistuneita biologi-

sia solukerrosten muodostamia biologisia esteitä. Veri-aivoeste säätelee monien aineiden pääsyä verenkierrosta aivoihin. Silmiemme pinnassa oleva molekyyli-pinnoite suojaa silmiämme kuivumiselta. Ihomme suojelee meitä patogeenien ohella auringolta ja kuivumiselta, toisaalta se mahdollistaa paikallisten tulehduslääkkeiden pääsyn kohteeseensa. Veri- ja imusuonten seinämissä erikoistuneet solut muodostavat esteen verenkiertoon kulkeutuneiden syöpäsolujen leviämiseksi muihin kudoksiin, mutta sallivat valkosolujen kulkeutumisen kudoksiin. Keuhkot suojelevat elimistöä ulkoisia uhkia vastaan, mutta sallivat hapen kulkeutumisen verenkiertoon – tosin sitä, kuinka happi pääsee keuhkoista verenkiertoon ei vielä kukaan ymmärrä.

Biologiset esteet ja niiden häiriötön toiminta ylläpitävät terveyttämme. Tämä on ikävällä tavalla tiedostettu myös edellisten kahden vuoden aikana, kun SARS-CoV-2 -virus on hyökännyt erityisesti keuhkojen biologisen esteen kimppeen tavoilla, jotka ovat monelta osin edelleen tuntemattomia. Vastaavasti myös muiden biologisten esteiden toiminnan fysikaaliset periaatteet ja biologia sekä säätelymekanismit tunnetaan äärimmäisen huonosti. Ongelman ydin on näiden monimutkaisten esteiden moniskaalainen rakenne ja toiminnallisuus, jolloin niiden ymmärtämiseen tarvitaan tietoa sekä molekyyli-tason vuorovaikutuksista että eri solutyypin keskinäisistä vuorovaikutuksista, jotka ovat sekä biokemiallisia että fysikaalisia. Harvalla tutkimusryhmällä on riittävää monitieteellistä osaamista tutkia moniskaalaisia biologisia prosesseja yksittäisistä atomeista organismeihin. Tämän haasteen edessä Solumekaniikka biologisten esteiden toiminnassa –huippuyksikön (<https://barrierforce.utu.fi/>) tavoitteena on tutkia sitä, miten biologisten esteiden kudokset ovat rakentuneet, kuinka elimistö ylläpitää niitä, ja erityisesti miten fysikaalisten voimien ja bio-

kemiallisten signaalien integrointi toimii molekyylitasolta kudostasolle. Molekyylitason tieto estekudosten toiminnasta on ensiaskel hoitoihin, jotka kohdentuvat sairauksien syihin eivätkä seurauksiin.

Huippuyksikön toiminnassa ovat mukana Turun yliopistosta Johanna Ivaskan tutkimusryhmä (Cell Adhesion and Cancer) sekä Helsingin yliopistosta Sara Wickströmin (Stem Cells and Tissue Architecture), Pipsa Saharisen (Translational Vascular Biology), Pekka Lappalaisen (Actin-based Molecular Machines) ja Ilpo Vattulaisen (Biological Physics and Soft Matter) tutkimusryhmät. Keskeinen osa huippuyksikön toimintaa on fysiikkaa edustava laskennallisen biofysiikan toiminta, joka kehittää mm. koneoppimiseen perustuvaa data-analytiikkaa ja luo moniskaalaisia simulaatiomalleja biologisten estekudosten toimintaperiaatteiden ymmärtämiseksi. Yksi keskeisimmistä fysiikan vahvuuksista on edistää uusien tutkimusmenetelmien kehitystä, luoden kiehtovia mahdollisuuksia johdattaa tiedettä uusiin suuntiin.

Huippuyksikön tavoitteena on kehittää yleisesti metodologiaa ja teknologioita, ja niitä hyödyntäen selvittää monitieteellisen tutkimuksen kautta, kuinka biologisten esteiden peittämiseen liittyviä sairauksia voidaan hoitaa ja jopa ehkäistä toimintahäiriöitä korjaamalla.

---

## KVARKKIINEEN TUTKIMUKSEN HUIPPUYKSIKKÖ

Jyväskylän yliopiston Kvarkkiaineen tutkimuksen huippuyksikkö on yksi lokakuussa 2021 julkistetuista uusista Suomen Akatemian tutkimuksen huippuyksiköistä. Lukuisten yritysten jälkeen tämä on ensimmäinen kerta, kun hiuk-

kasfysiikan ala on edustettuna huippuyksikköohjelmassa. Akatemian päätös on siten merkittävä tunnustus koko suomalaiselle hiukkasfysiikalle, ja etenkin CERNissä tehtävälle tutkimustyölle.

Huippuyksikön tutkimuskohteena ovat vahvat vuorovaikutukset kvarkkien ja gluonien eli tavallisen aineen pienimpien rakenneosien välillä. Kyseessä on siis yksi luonnon neljästä tunnetusta perusvuorovaikutuksesta, painovoiman, sähkömagnetismin ja heikon vuorovaikutuksen lisäksi. Vahvoja vuorovaikutuksia kuvaava kvanttiväridynamiikan teoria (QCD) on tunnettu ja perustuu pohjimmiltaan yksinkertaiseen symmetriaan. Kokeellisesti havaittavien ilmiöiden ymmärtäminen suoraan teoriasta lähtien on kuitenkin haastavaa. Kvarkkiaineen tutkimuksen huippuyksikön tavoitteena on ymmärtää, kuinka kvarkkien ja gluonien ominaisuudet tulevat havaittaviksi suurienergisissä hiukkastörmäyskokeissa. Huippuyksikkö pyrkii erityisesti ymmärtämään, kuinka ja milloin aine muuttuu kvarkkigluoniplasmaksi kutsuttuun olomuotoon, jossa kvarkit ja gluonit eivät ole sidottuina suuremmiksi hiukkasiksi.

Huippuyksikkö koostuu kolmesta teoreettisesta ja kahdesta kokeellisesta tutkimusryhmästä. Teoriaryhmien tutkimus liikkuu QCD:n teorian ja kokeellisten tulosten välisellä laajalla alueella, liittyen sekä CERNin LHC-kiihdyttimellä että lähivuosina Yhdysvaltoihin rakennettavalla elektroni-ioni-kiihdyttimellä (EIC) tehtävään tutkimukseen. Kokeelliset tutkimusryhmät ovat jäsenenä lähes kahdensadan tutkimuslaitoksen muodostamassa kansainvälisessä ALICE-kollaboraatioissa, joka operoi yhtä LHC:n suurista koeasemista. Eräs huippuyksikön vahvuuksista onkin hiukkasfysiikan alalla poikkeuksellisen läheinen yhteys teoreettisten ja kokeellisten ryhmien välillä.