

Sommersemester 2008

COMPUTER PHYSIK

Ralf Klessen

Rainer Spurzem

Institut für Theoretische Astrophysik
rklessen@ita.uni-heidelberg.de

Astronomisches Rechen-Institut
spurzem@ari.uni-heidelberg.de

Zentrum für Astronomie der Universität Heidelberg

<http://www.ita.uni-heidelberg.de/research/klessen/people/klessen/lectures/2008-A/CompPhys/>

Computerphysik - Vorlesung

Warum Computerphysik notwendig?

- Differentialgleichungen (DGL)–keine analytische Lösung!
Zusammenhang: Nichtlineare Dynamik, Chaostheorie
- Gewöhnliche zeitabh. DGL – Teilchensimulationen
Plasmaphysik, Moleküldynamik, Stelldynamik...
- Partielle zeitabh. DGL – Gittermethoden
Hydrodynamik, Relativitätstheorie, Quantenmechanik
- Zeitunabh. DGL – Mittelwerte, stationäre Zustände
Quantenmechanik, statistische Mechanik, Monte-Carlo Verfahren.
- Spezialfall Computermathematik-komplexe analytische Lösungen, konventionell praktisch unlösbar.
Mathematica, Maple, MatLab, ...

Computerphysik - Vorlesungsplan

Doppelstunde	Einzelstunde	Kapitel-Nummer: Thema
Mi 9.15 – 10.45	Fr 11.15 - 12.00	
9.4.	11.4.	0: Einführung
16.4	18.4.	1-3: Praktische Übungen/Mathematica
23.4.	25.4.	4: Einfache dynamische Systeme 2-Körper-Problem, Populationsdynamik
30.4.	2.5.	5: Lineare Algebra / Matrizen Eigenwerte
7.5.	9.5.	5: gestörter quantenmech. Oszillator Numerov-Algorithmus
14.4.	16.5.	6: Gewöhnliche DGL Methoden
21.5.	23.5.	6: Anwendung: Lorenz-Attraktor
28.5.	30.5.	6: " Henon-Heiles System
4.6.	6.6.	6: " Duffing-Oszill., Numerov-Algorithmus
11.6.	13.6.	6: " 3-Körper-Problem, Hermite-Verfahren
18.6.	20.6.	7: Diskrete Systeme, Logistische Abbildung
25.6	27.6.	7: " , Liapounov-Exp., determ. Chaos
2.7.	4.7.	8: Zufallszahlen
9.7.	11.7.	9: Monte Carlo Methoden
16.7	18.7.	9: Ising-Modell

Geschichte

- Erik Holmberg (1908-2000)

Dissertation Univ. Lund (Schweden) (1937):

``A study of double and multiple galaxies``

Galaxien oft in Gruppen und Paaren

Satellitengalaxien ungleichmäßig verteilt (Holmberg-Effekt)

- **Vater der numerischen Astrophysik....**

- **...mit 200 Glühbirnen**



Geschichte

- The Astrophysical Journal, Nov. 1941

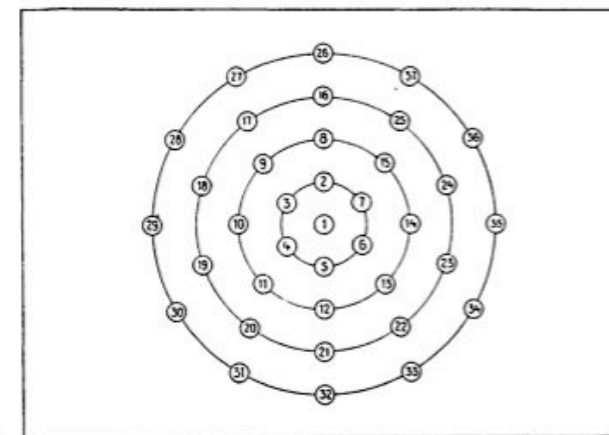
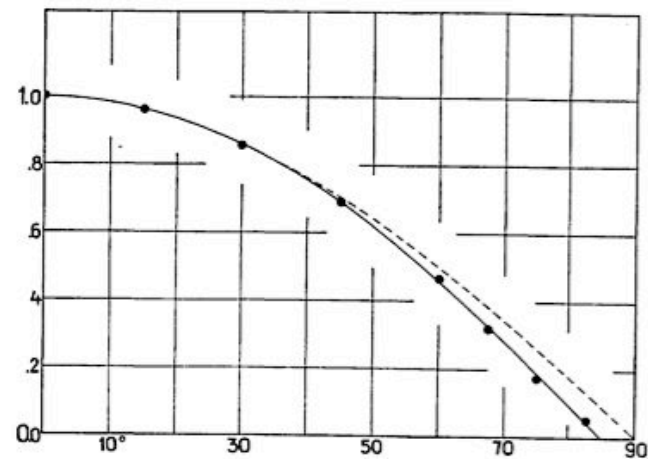
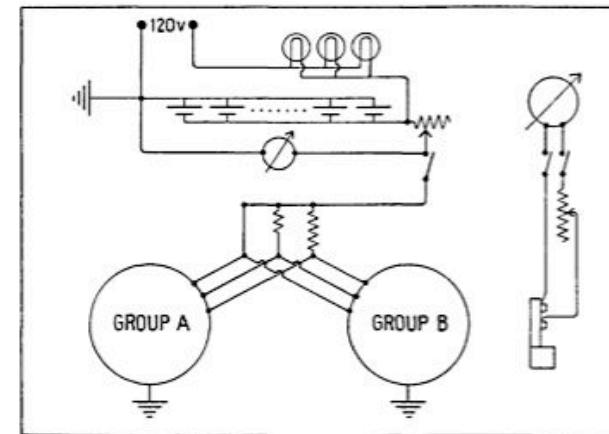
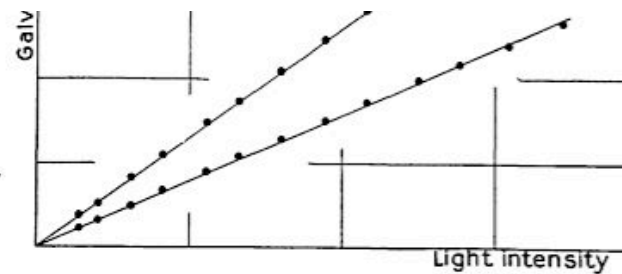


FIG. 2

FIG. 3

FIG. 2.—(a) Relation between galvanometer deflection and light-intensity (resistance of 0 and 10,000 ohms). (b) Relation between galvanometer deflection and angle of incidence of light (dotted line = theoretical cosine law).

FIG. 3.—(a) Coupling scheme. (b) Arrangement of the 37 light-bulbs in groups A and B

Geschichte

- The Astrophysical Journal, Nov. 1941

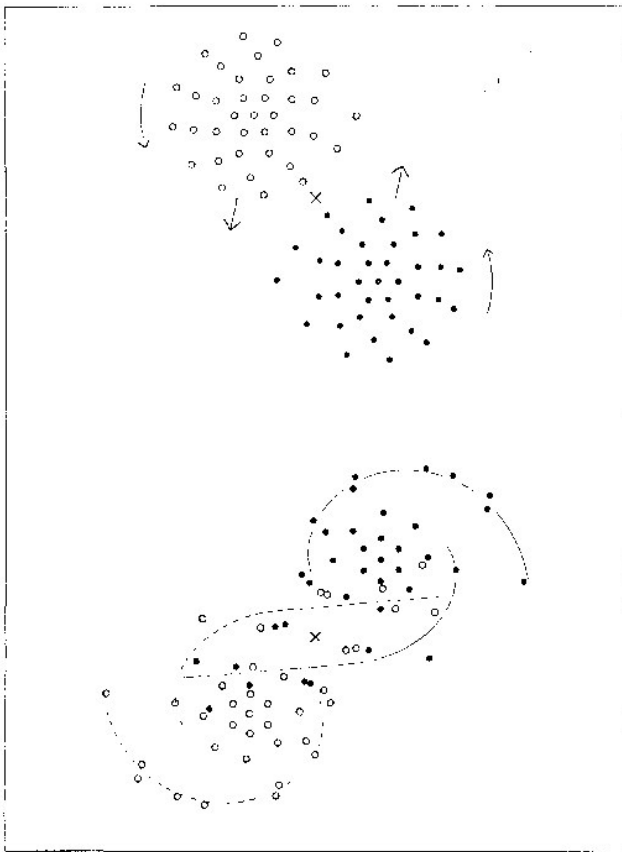


FIG. 4b

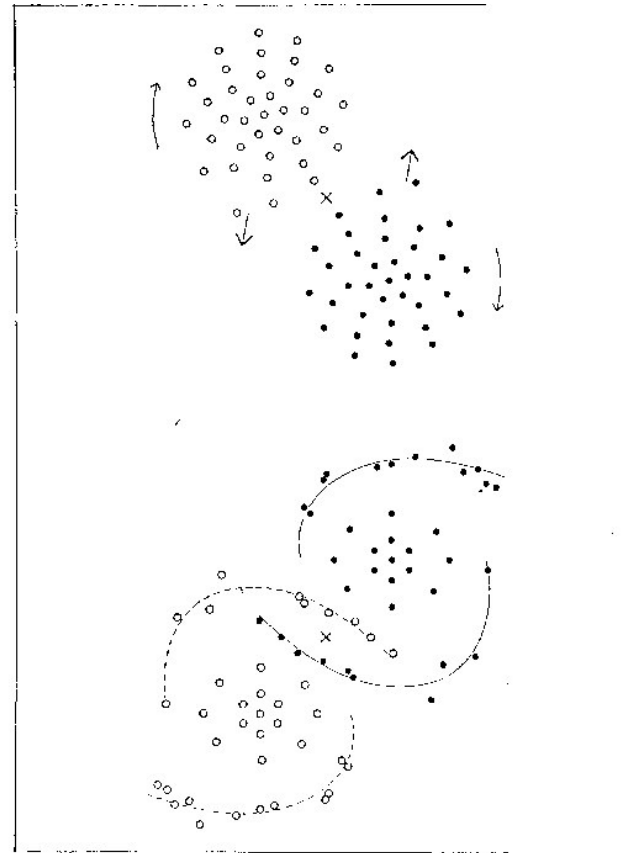


FIG. 4a

Geschichte



- Konrad Zuse (1910-1995) Berlin
Erfinder des frei programmierbaren Rechners



Z1 in der elterlichen Wohnung 1936

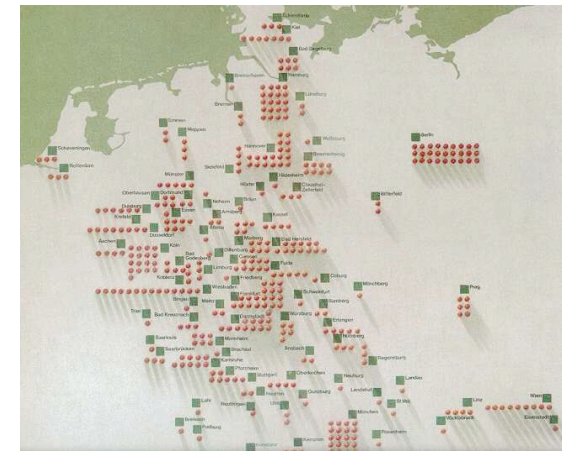


Schwingungen

Geschichte

0.03 Mflops

<http://www.rtd-net.de/Zuse.html>



Zuse Z4: 1944 Berlin, 1950 Zürich

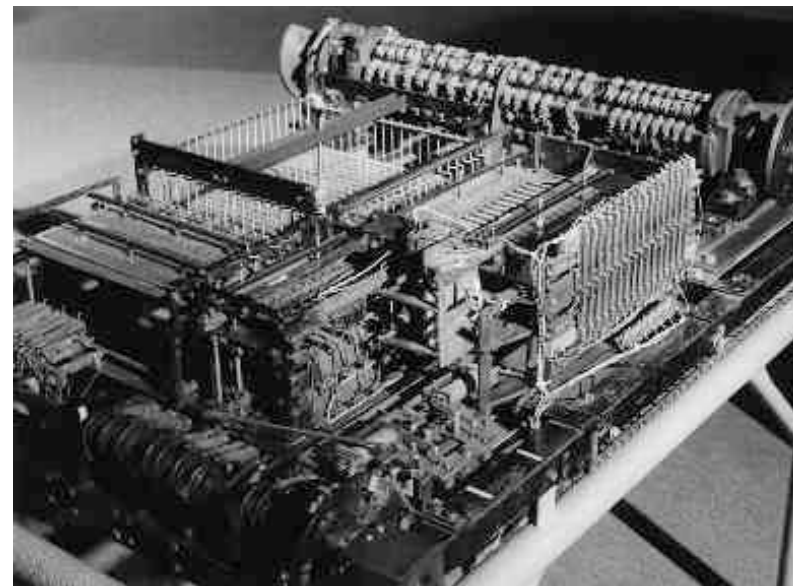
1954 Frankreich

1959 Deutsches Museum München



Rechenanlage 0.03 MHz

Klessen, Spurzem



Speicher 256 byte

Comp. Physik Univ. Heidelberg

Geschichte

- Grundprinzipien des elektronischen Rechners

Verwirklicht bei Zuse, Theorie von Neumann

Freie Programmierbarkeit

Binäres Zahlenformat

Speicher

Gleitkommaarithmetik



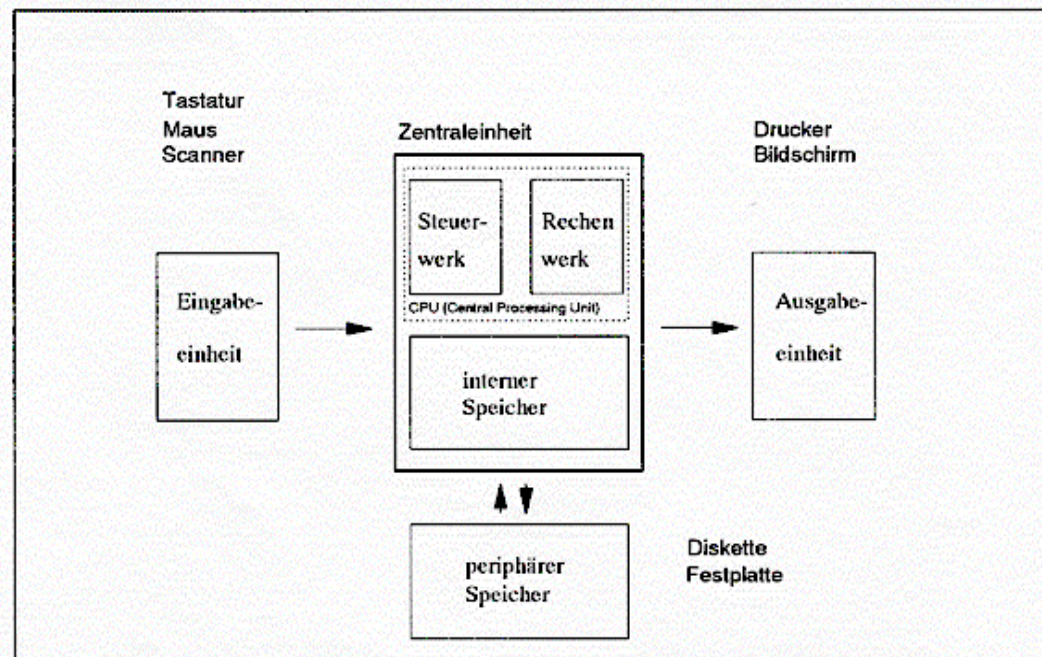
Geschichte

● John von Neumann (1903-1957)

Geb. Budapest, Dozent Berlin,

ab 1930 Princeton Univ. NJ USA Princeton

„Requirements



History

Astronomisches Rechen-Institut in Heidelberg
Mitteilungen Serie A Nr. 14

Die numerische Integration des n -Körper-Problemes für Sternhaufen I

Von

SEBASTIAN VON HOERNER

Mit 3 Textabbildungen

(Eingegangen am 10. Mai 1960)

Astronomisches Rechen-Institut in Heidelberg
Mitteilungen Serie A Nr. 19

Die numerische Integration des n -Körper-Problems für Sternhaufen, II.

Von

SEBASTIAN VON HOERNER

Mit 10 Textabbildungen

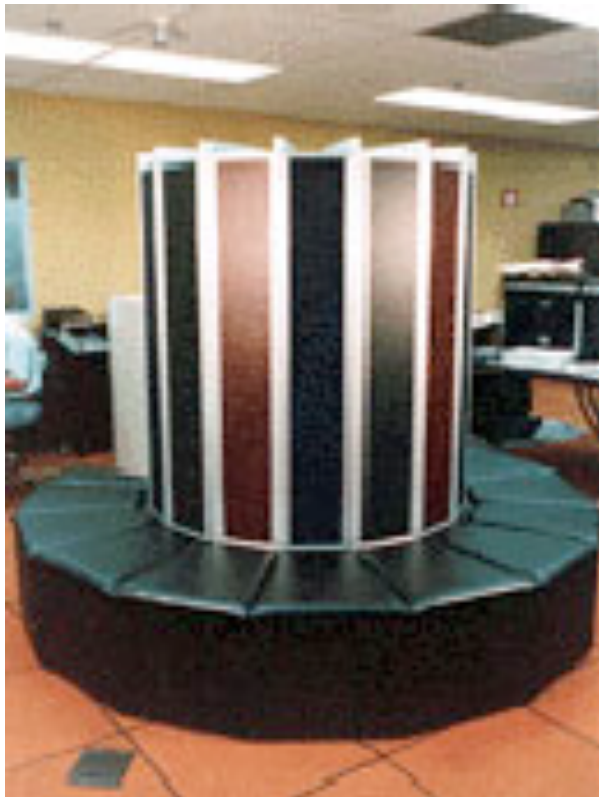
(Eingegangen am 19. November 1962)



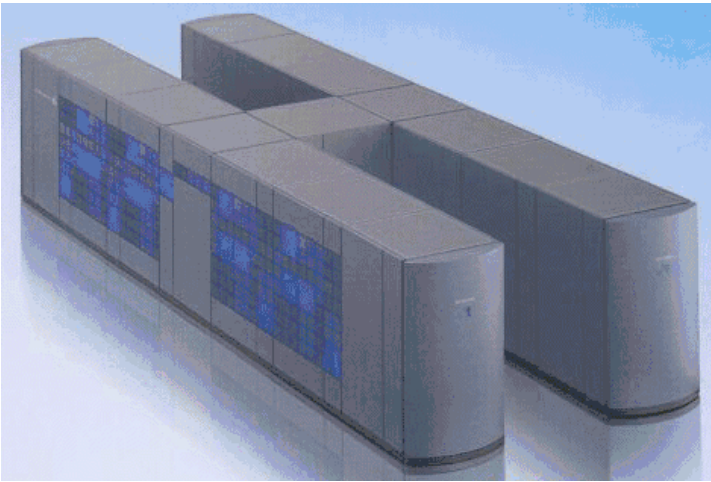
Sebastian von Hoerner
(1919 – 2003)

Geschichte

- Seymour Cray (1925-1996)
 - **“The father of supercomputing”**



CRAY1: Vektorregister (1976)
160 Mflop, 80 MHz, 8 MByte RAM
CRAY2: (1984)
1Gflop, 120MHz, 2GByte RAM



Geschichte

Hitachi SR8000 LRZ München
6 Tflops, TByte Memory

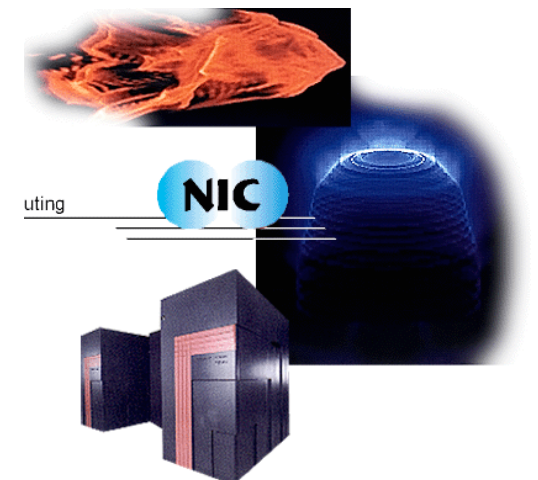
● Für welche Zwecke?

- Autos, Flugzeuge, ..., Weltraumforschung
- Meteorologie, Klimaforschung, Wetter
- Elementar-Teilchen, Astro-Teilchen,
Hochenergiephysik
- Astrophysik
- Geisteswissenschaften, Datenbanken,
Wissensarchivierung
- (Krieg – Militär)



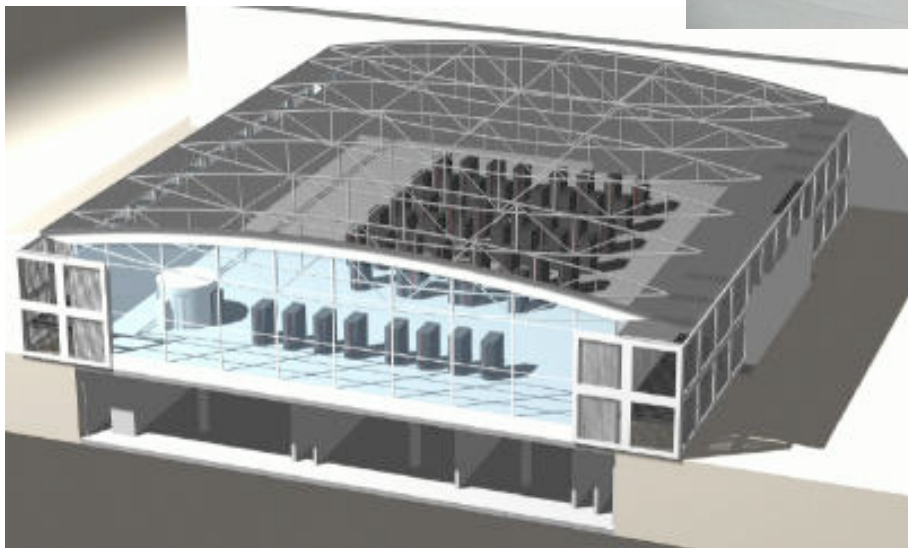
HLRS Stuttgart

NIC Jülich



Geschichte

IBM Supercomputer
FZ Jülich



p690
IBM @server
Cluster 1600

GCS

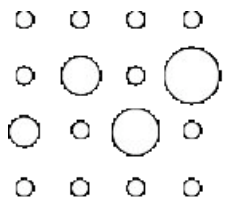
Gauss Centre for Supercomputing



Leibniz-Rechenzentrum München, FZ Jülich, HLRS Stuttgart
Europäisches Netzwerk der Höchstleistungsrechner
<http://www.deisa.org>

SGI Altix 4700
62 Tflop/s





VolkswagenStiftung

Zentrum für Astronomie
Univ. Heidelberg
Astron. Rechen-Inst.



MPRACE Card
Univ. of Mannheim, D

32 Dual Xeon P4
32 micro-GRAPE-6
32 FPGA cards ⇒

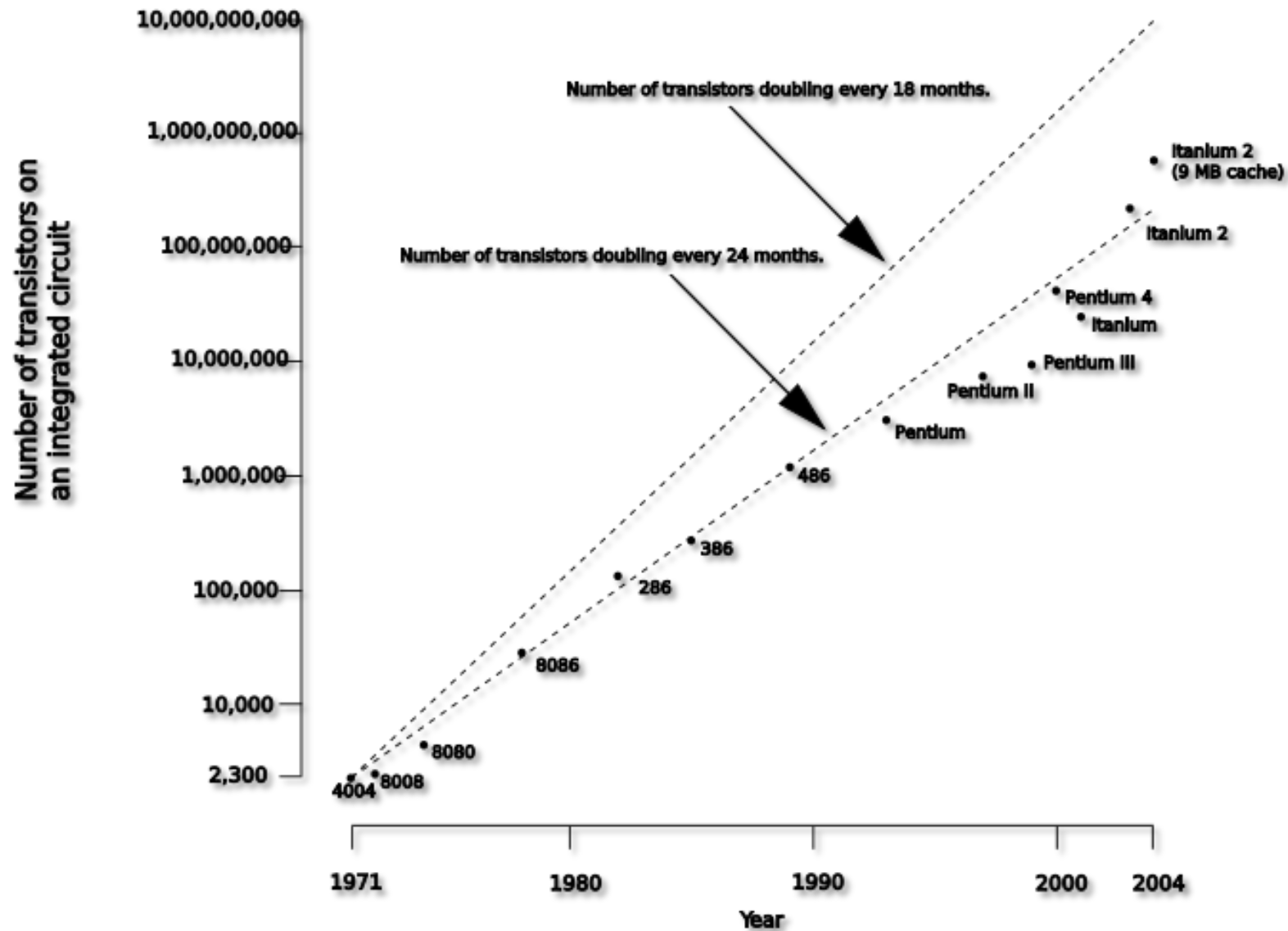
GRAPE
project

*One of premier platforms in the world!
4 Tflops real, 40 Tflops equivalent*

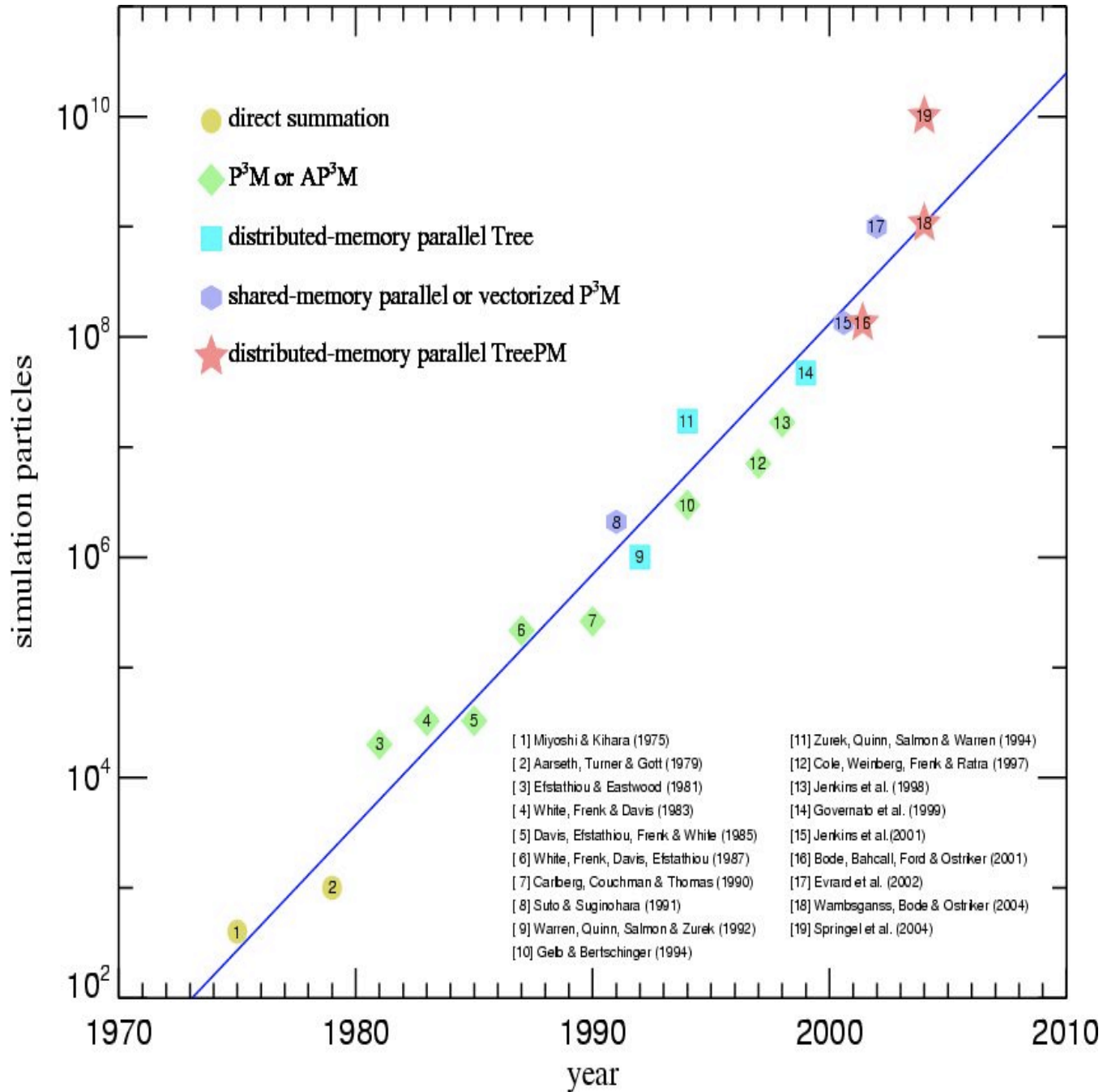
Klessen, Spurzem

Comp. Physik Univ. Heidelberg

Moore's Law



Moore's Law in Cosmology Sim.



The GRID....

- DEISA – Europe www.deisa.org
- Teragrid – USA www.teragrid.org
- NAREGI – Japan www.naregi.org
- D-Grid – Deutschland www.d-grid.de
- Astrogrid-D Deutschland www.astrogrid-d.de

Computerphysik

● Traditionell:

Theorie

Experiment/Beobachtung

● Modern:

Theorie

Beobachtung

Computer-Experiment

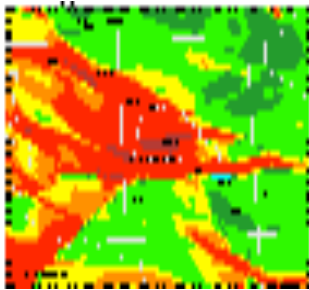
Beobachtungen, die direkt nicht möglich sind!

Beobachtungen nicht existierender Objekte!

Computerphysik

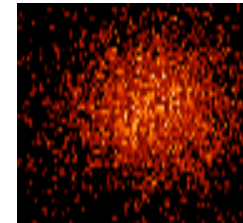
<http://www.fz-juelich.de/nic/Publicationen/Broschuere/Broschuere-d.html>

● Projekte am NIC



Umwelt

Elementar-
Teilchen

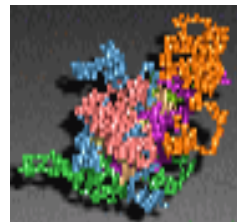


Astrophysik

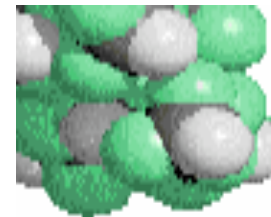


Vielteilchen

Polymere

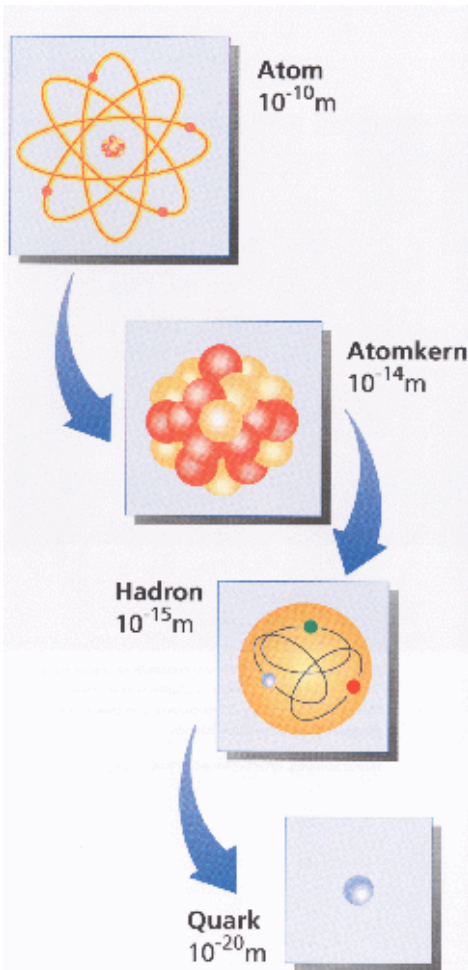


Chemie



Computerphysik - Teilchenphysik

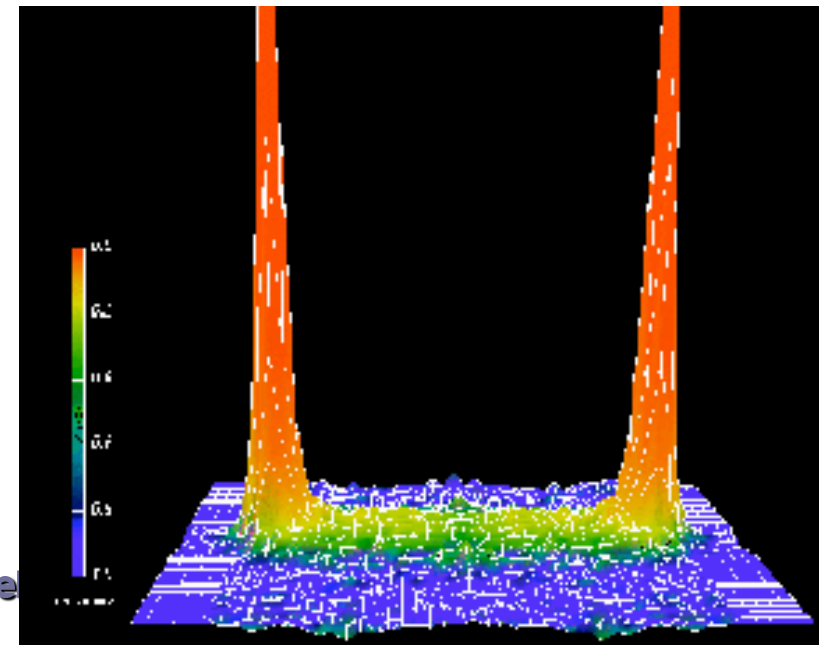
Nahezu die gesamte Masse der Atome ist im Atomkern konzentriert, der aus Protonen und Neutronen besteht und durch die starke Wechselwirkung zusammengehalten wird. Protonen und Neutronen (Hadronen) selbst sind wiederum aus drei Quarks aufgebaut, die durch den Austausch von Gluonen (glue = Klebstoff) zusammengehalten werden. Soweit heute bekannt ist, haben Quarks und Gluonen keine weitere Substruktur. **(Klaus Schilling, NIC-FG Elementarteilchenphysik)**



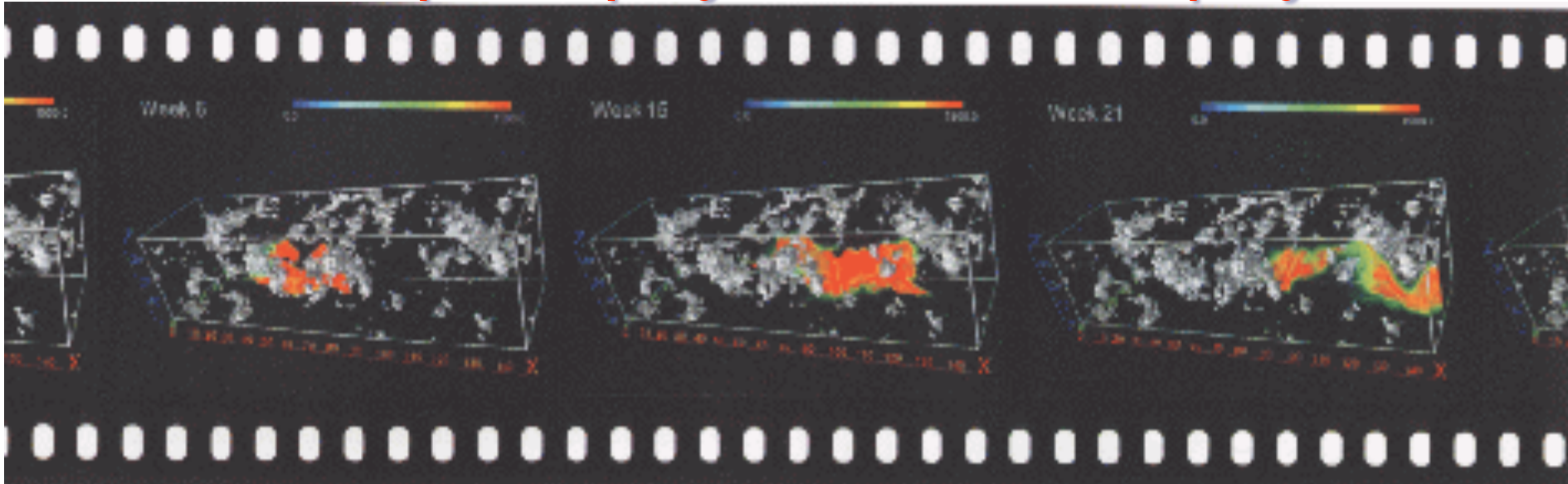
Klessen, Spurzem

Man erkennt, daß die statische Wechselwirkung zwischen Quark und Antiquark durch Ausbildung eines engen Flußschlauches erfolgt. Er verhindert, daß Quarks von Antiquarks isoliert werden können.

Comp. Physik Univ. Heide



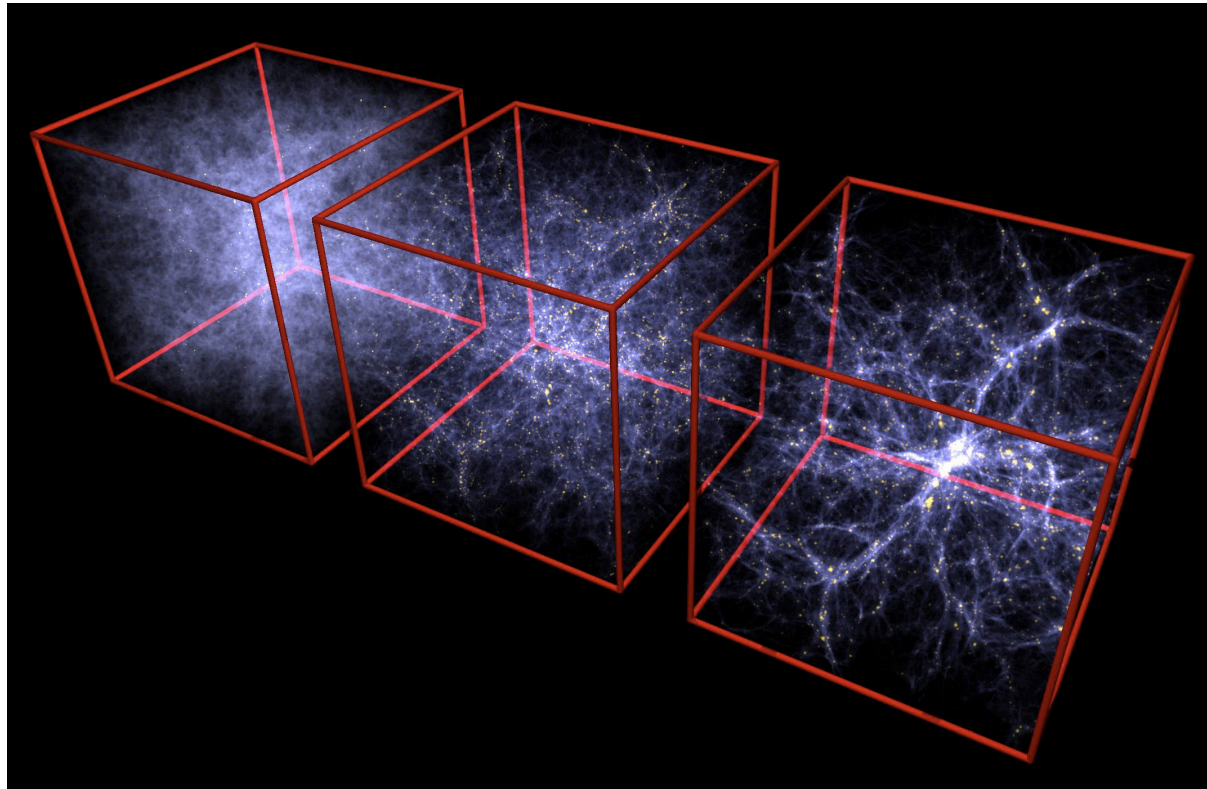
Computerphysik - Umweltphysik



- In Jülich wurde ein Software-Paket entwickelt, mit dem sich die Schadstoffausbreitung im Grundwasser voraussagen läßt. Während mehrjähriger Labor- und Feldarbeit wurden Bodenproben in einem Feld bei Krauthausen nahe Jülich genommen und auf ihre Wasserleitfähigkeit und Speicherkapazität untersucht. Um den Wasserfluß im Böden zu verfolgen, setzten die Forscher ungiftige Fluoreszenz-Farbstoffe ein und analysierten regelmäßig ihren Verbleib. Aus den gewonnenen Daten konnte ein Computer-Modell erarbeitet werden, das die Mobilität von Schadstoffen vorausberechnet. Das Programmpaket besteht aus drei Teilen: "Trace" berechnet den Wasserfluß im Erdboden; das Programm läuft auf einem Parallelrechner. Aufbauend auf den Ergebnissen berechnet "Partrace" die Ausbreitung der Schadstoffpartikel auf dem Vektorrechner CRAY T90. Anschließend werden die Ergebnisse auf einem Graphikrechner visualisiert. Das Bild zeigt die Ausdehnung einer Schadstoffwolke (rot) im Verlauf mehrerer Wochen. Wasserundurchlässige Gesteinsschichten sind grau dargestellt.
- **(Harry Vereecken, Institut für Erdöl und Geochemie, Forschungszentrum Jülich)**

Computerphysik - Astrophysik

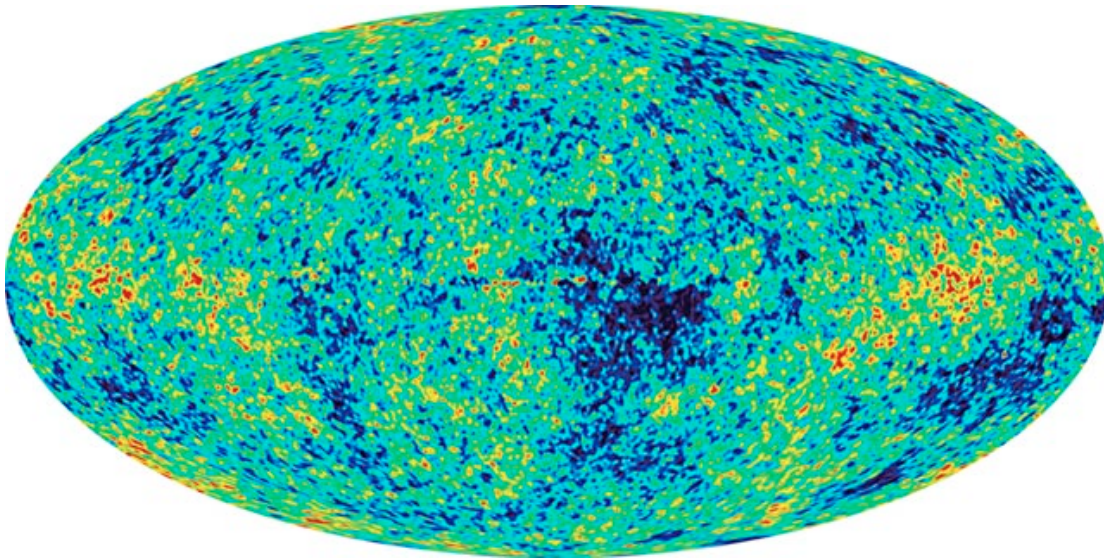
Kosmologie



Computerphysik - Astrophysik

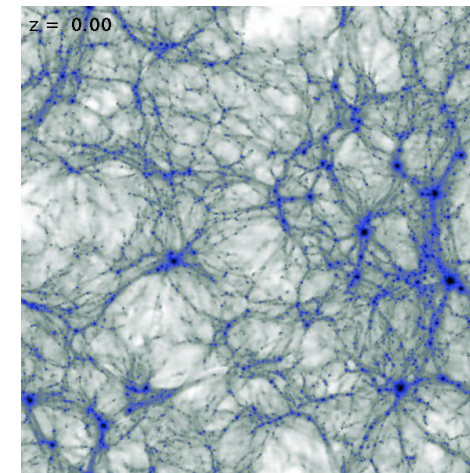
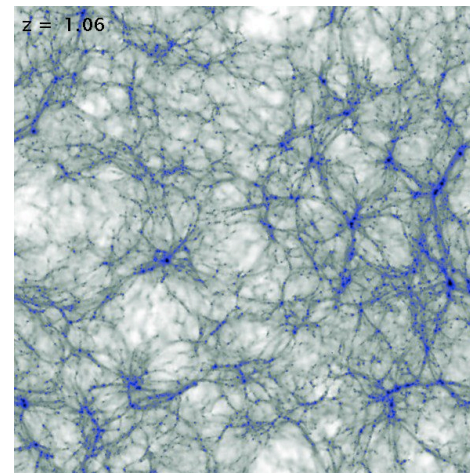
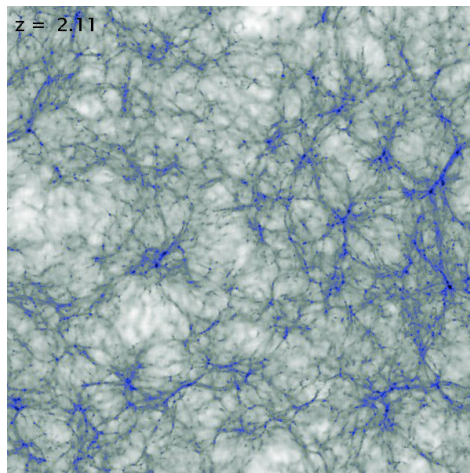
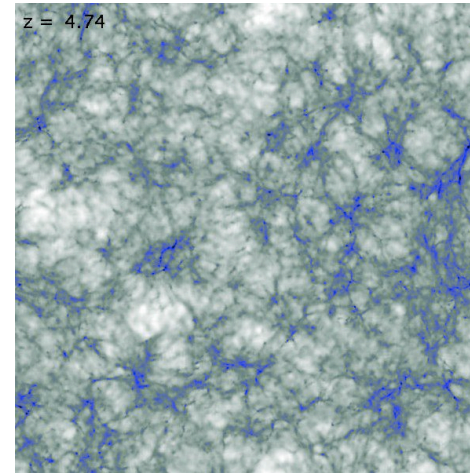
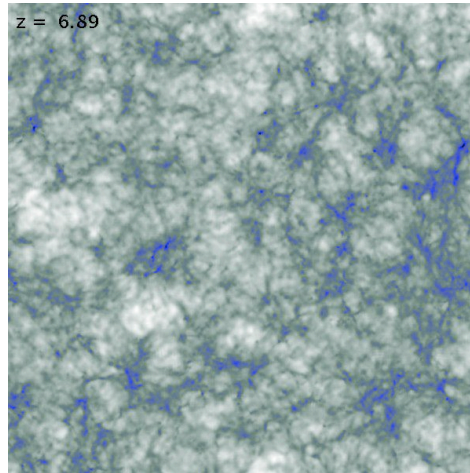
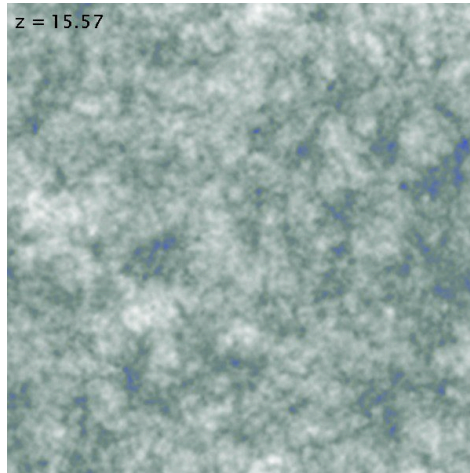
- Strukturbildung im Universum

Im Jahre 100.000....

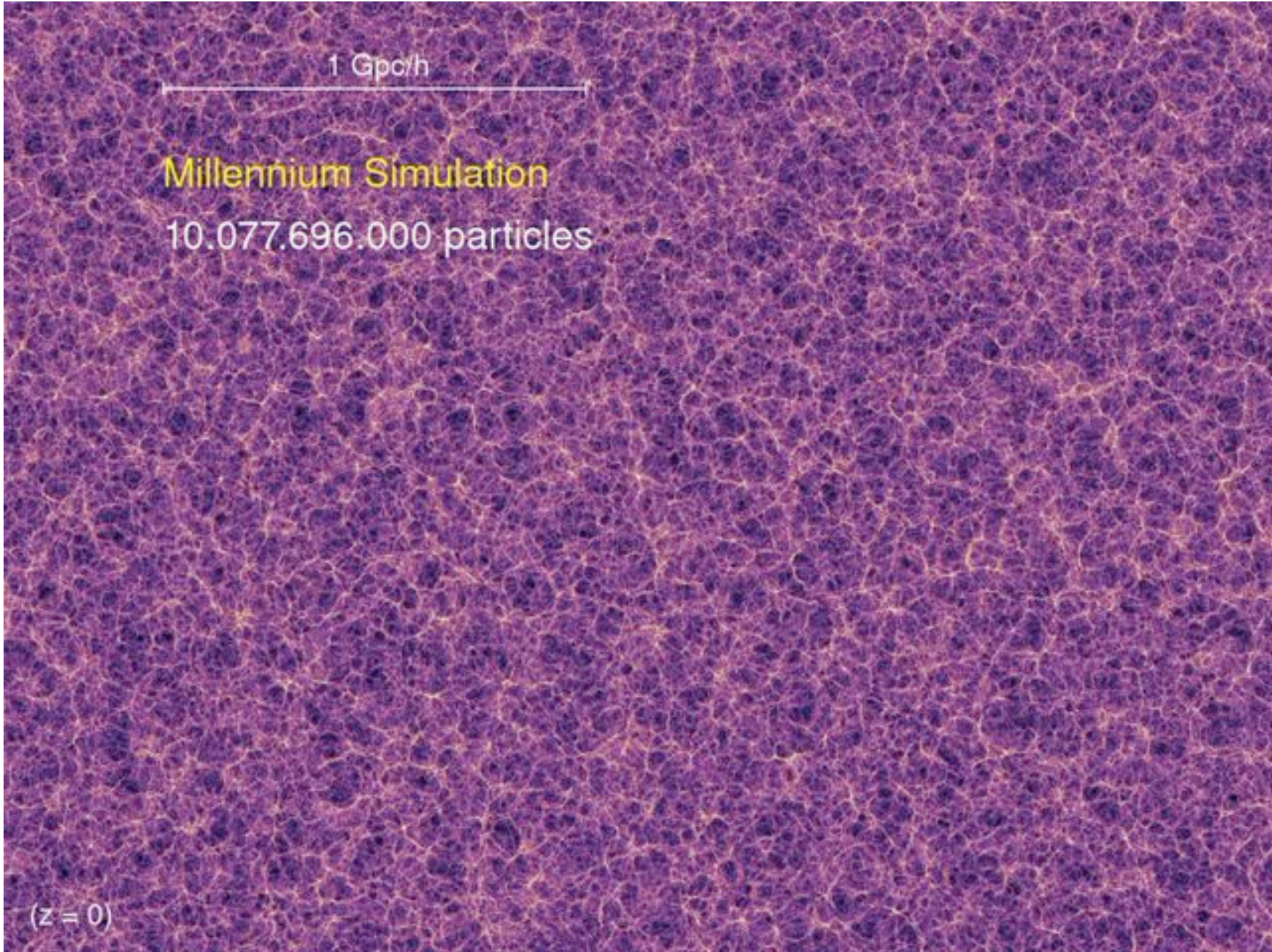


- Wilkinson Microwave Anisotropy Probe (WMAP) ...und ``heute``
(Kosmischer Mikrowellenhintergrund)

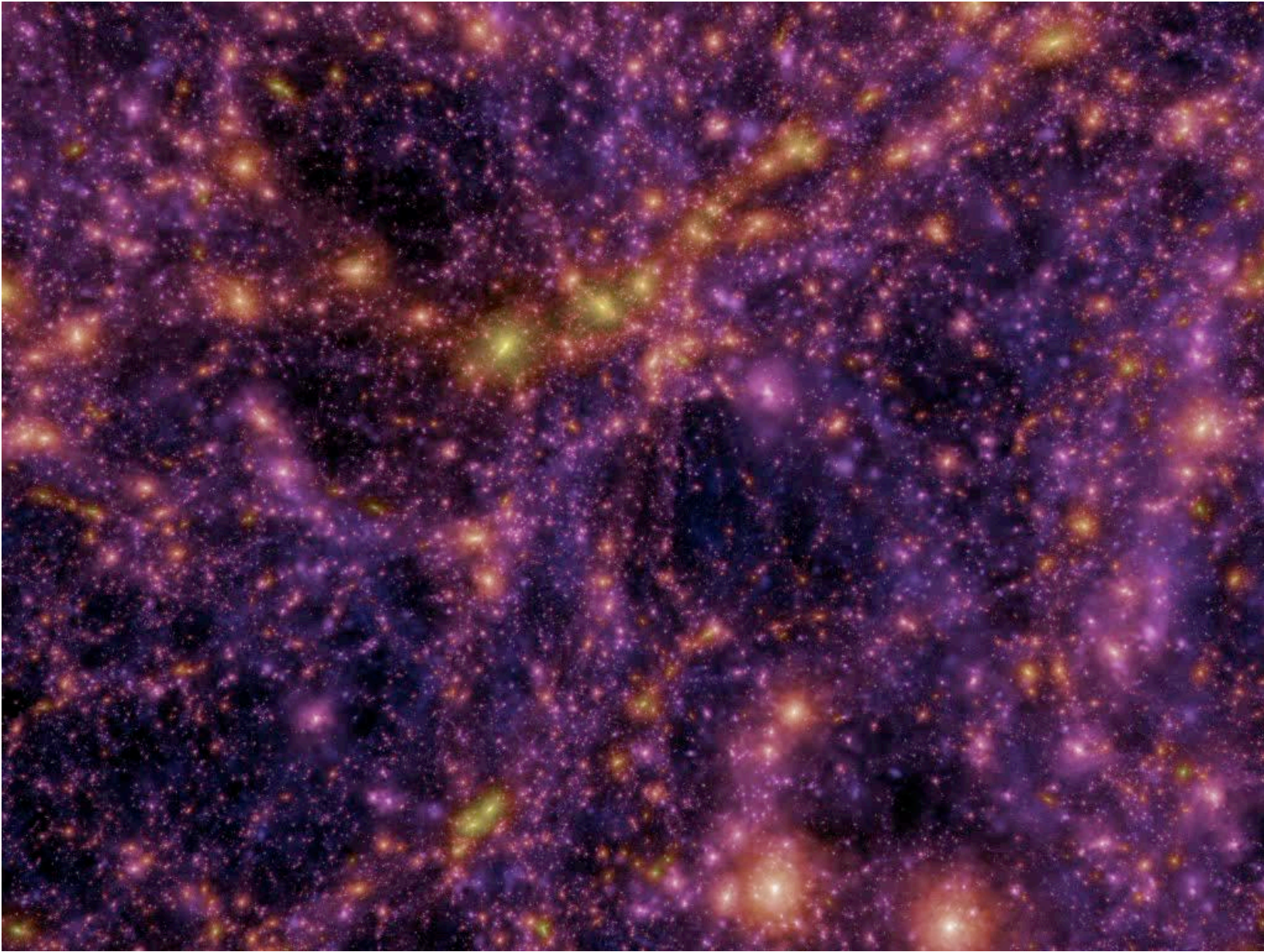
Computerphysik - Astrophysik



Simulation on scales of 100 Mpc are the workhorses of large-scale structure formation (Springel)

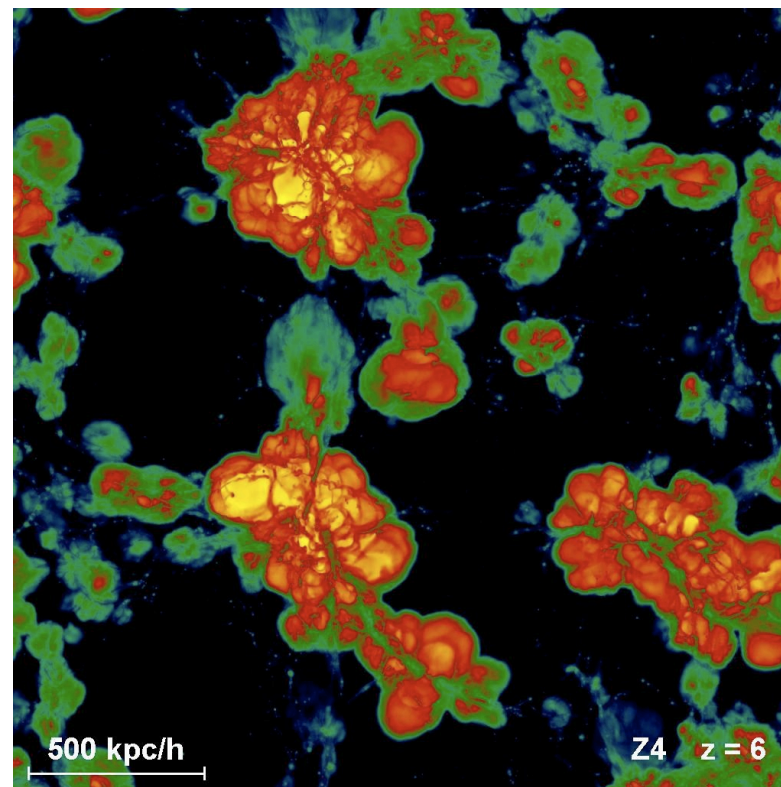
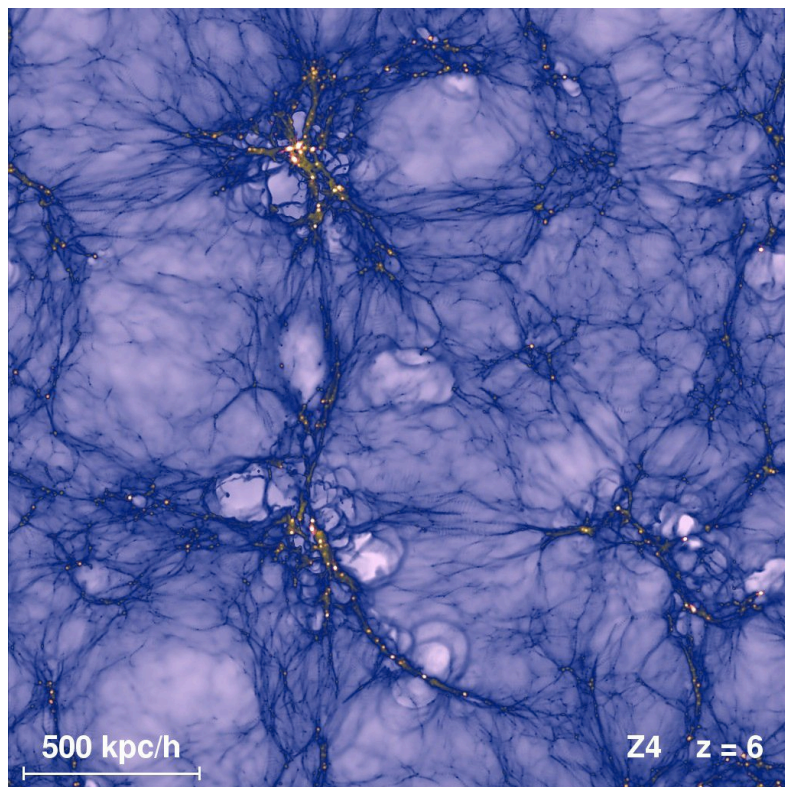


Millennium Simulation (Springel et al.)



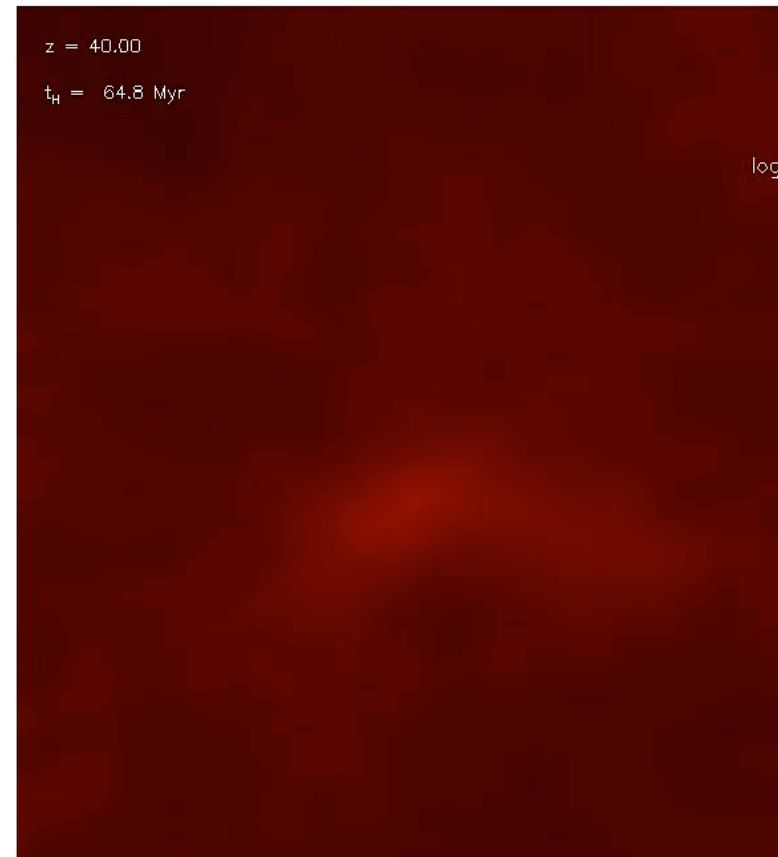
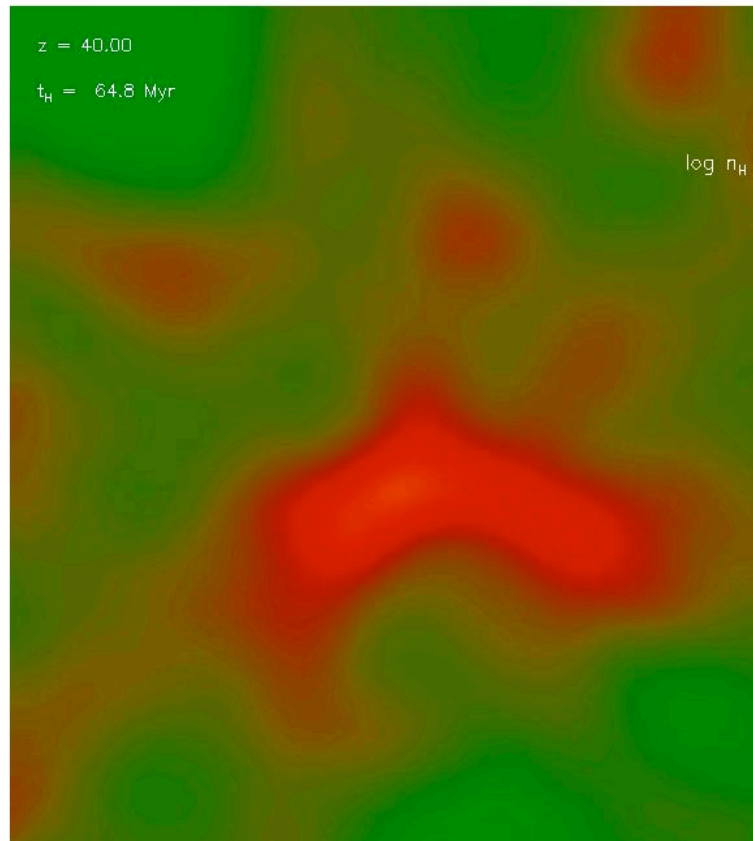
Millennium Simulation (Springel et al.)

Challenges: mehr Physik



Hot bubbles of ionized gas around small primordial galaxies (Springel & Hernquist)

Challenges: mehr Physik



From our own group: Formation of the first galaxy with gas cooling and chemistry (Greif et al. 2008)

Computerphysik - Astrophysik

Galaxies



Galaxien- Entwick- lung

NGC1232:

Nucleus

Bulge

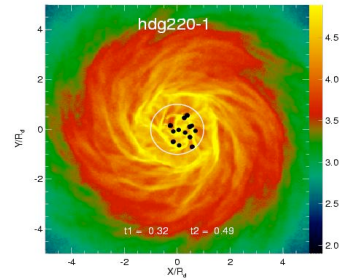
Disk

Wave Pattern

Star Formation

Satellites

Wie modelliert man Galaxien?



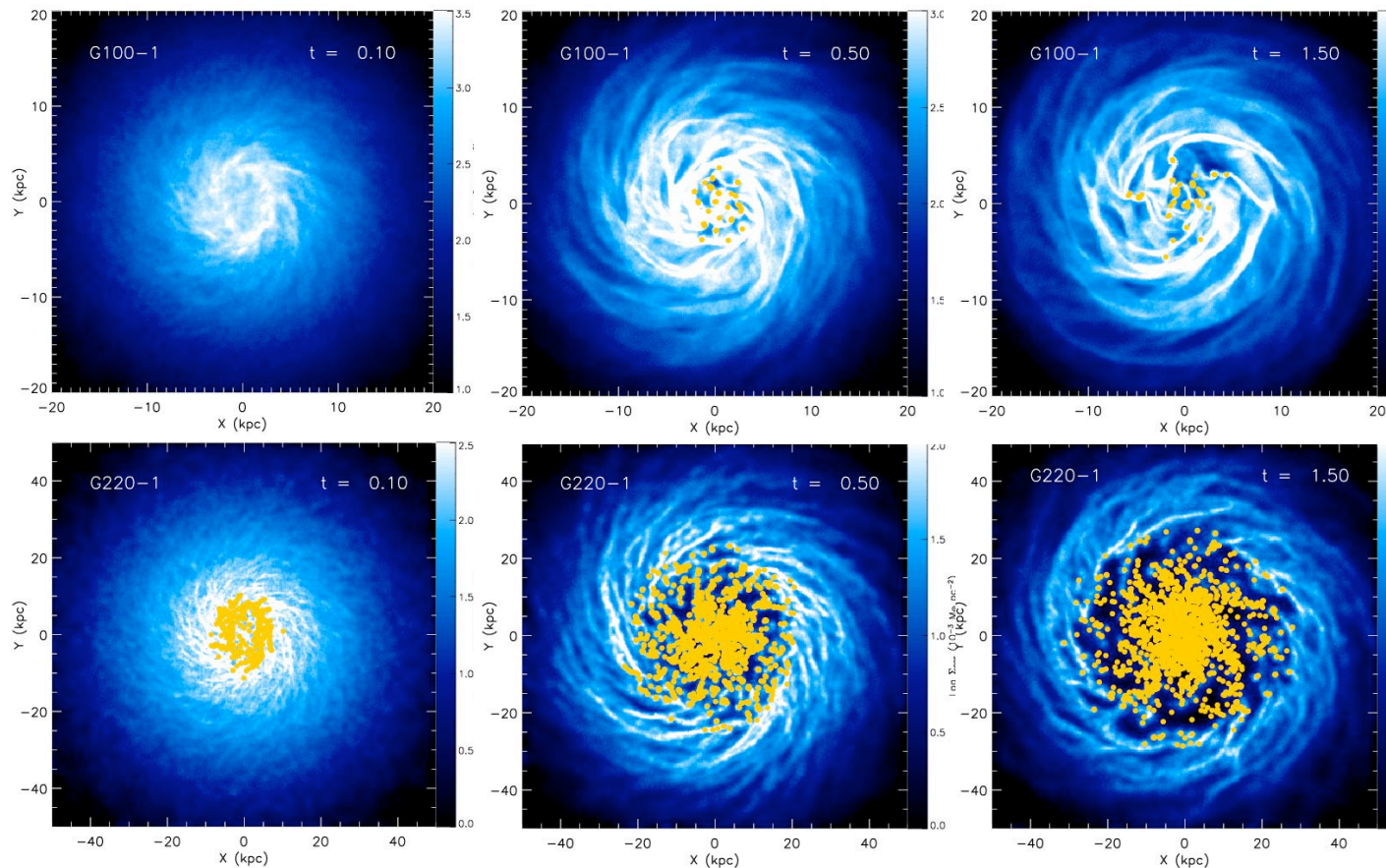
**modeling star formation in galactic disk +
molecular cloud formation**

(hydrodynamics, stellar dynamics,
chemistry, feedback [radiation, outflows])

(Schmidt law, star-formation history,
relation between global dynamics and SF)

Beispiele

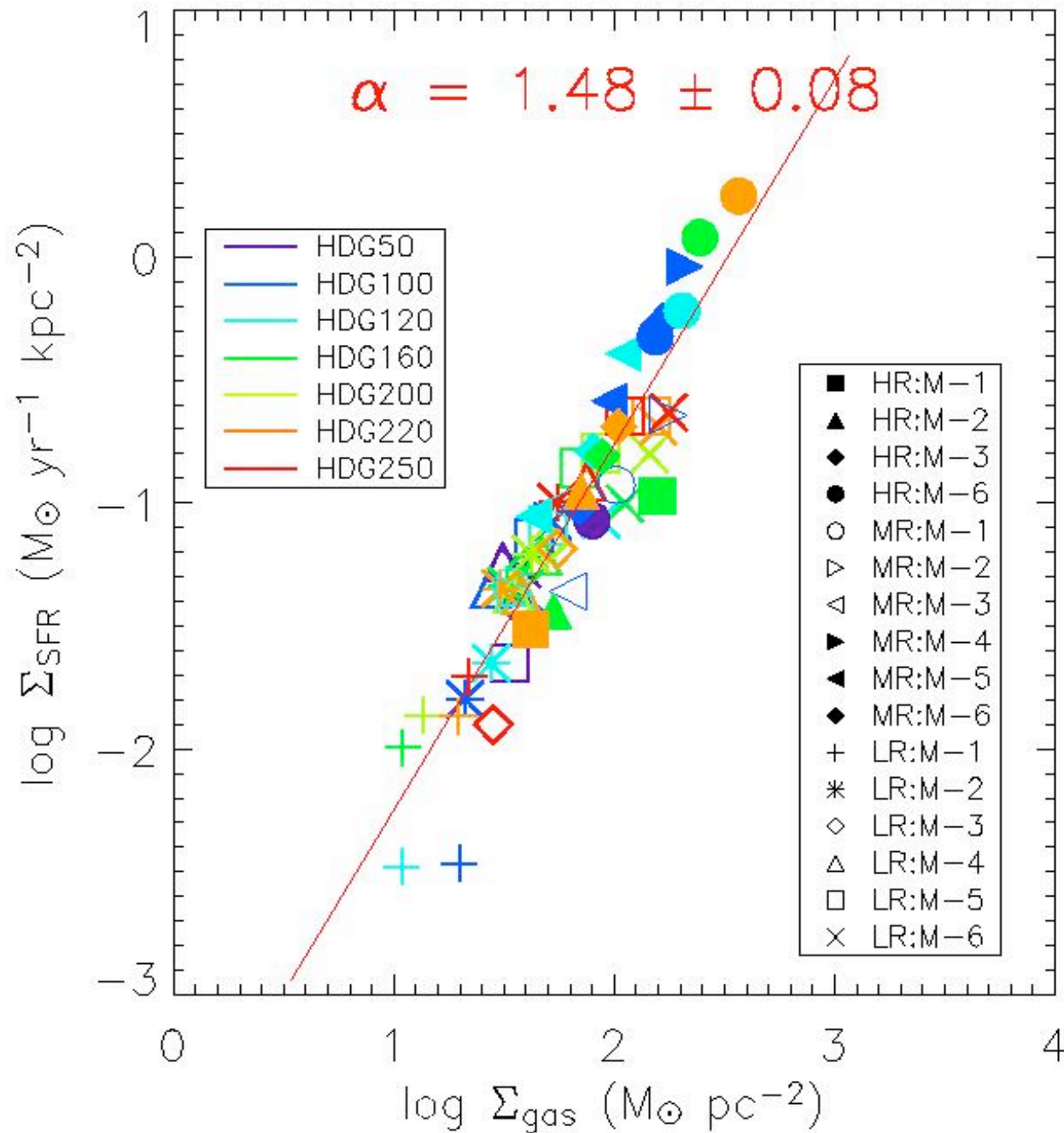
**SPH + stars + DM
models of isolated
disk galaxies with
several million
particles**



→ begin to resolve
individual molecular
clouds

→ we need to care
about „small-scale“
physics (i.e. *transition*
from *atomic gas* to
molecular)

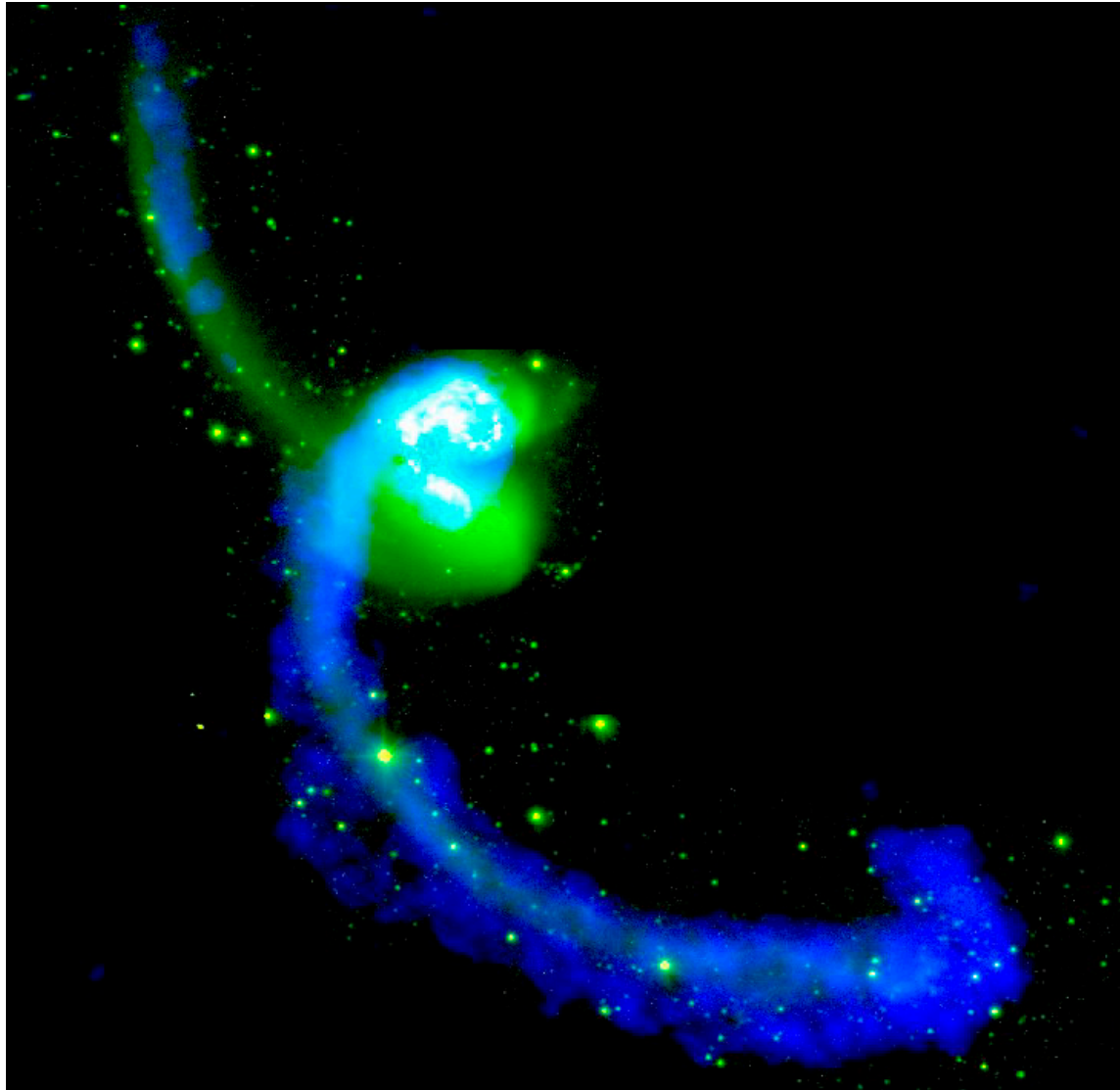
(simple physics: gravity +
hydrodynamics (isothermal
EOS) + stellar dynamics [stars
+ DM])



Result:
 gravitational instability alone leads to the *Schmidt law* (power-law correlation between star formation and surface density)

$$\Sigma_{\text{SFR}} \propto \Sigma_{\text{gas}}^{1.5}$$

Sternentstehung in wechselwirkenden Galaxien



Antennae Galaxie

- *NGC4038/39*
- *Entfernung: 19.2Mpc*
- *vis. Magn: 11.2*
- *optisch: weiß, grün*
- *radio: blau*

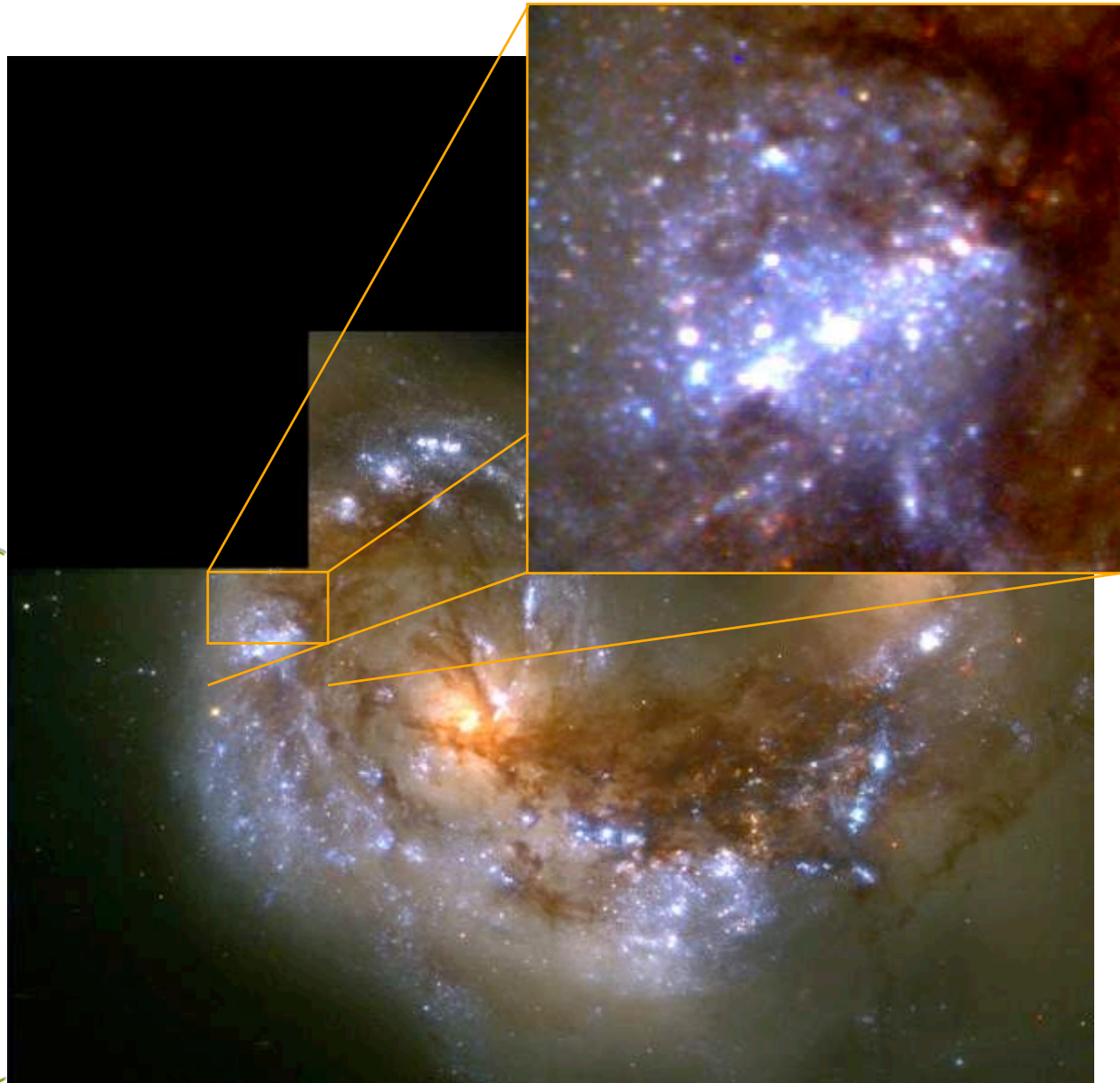
(Antennae Galaxie: Chandra Webpage)

Sternentstehung in wechselwirkenden Galaxien

Antennae Galaxie

- **Burst von Sternentstehung in wechselwirkenden Galaxien (dh. in stark gestörten Systeme)**
- **Sternbildung in Gezeitenarmen**
- **Großskalige, gravitative Bewegungen bestimmen SE**
- **Sterne entstehen in "Knoten" (dh. in Superhaufen)**

(HST: Whitmore & Schweizer 1997)



Galaxienkollision

Erik Wesselak 2004 American Museum Of Natural History Rose Center Production

time: 000.25 : 0.0625

Modell der Kollision der Milchstraße mit Andromeda (Yuexing Li, CfA)

Computerphysik - Astrophysik

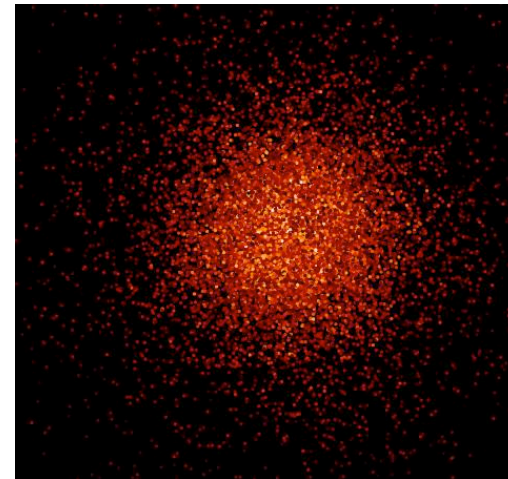
- Theorie:
Differentialgleichung

$$\vec{a}_0 = \sum_j Gm_j \frac{\vec{R}_j}{R_j^3} ; \quad \vec{a}_0 = \sum_j Gm_j \left[\frac{\vec{V}_j}{R_j^3} - \frac{3(\vec{V}_j \cdot \vec{R}_j)\vec{R}_j}{R_j^5} \right]$$

- Modell:
Diskretisierung

- Simulation:
Zeitablauf

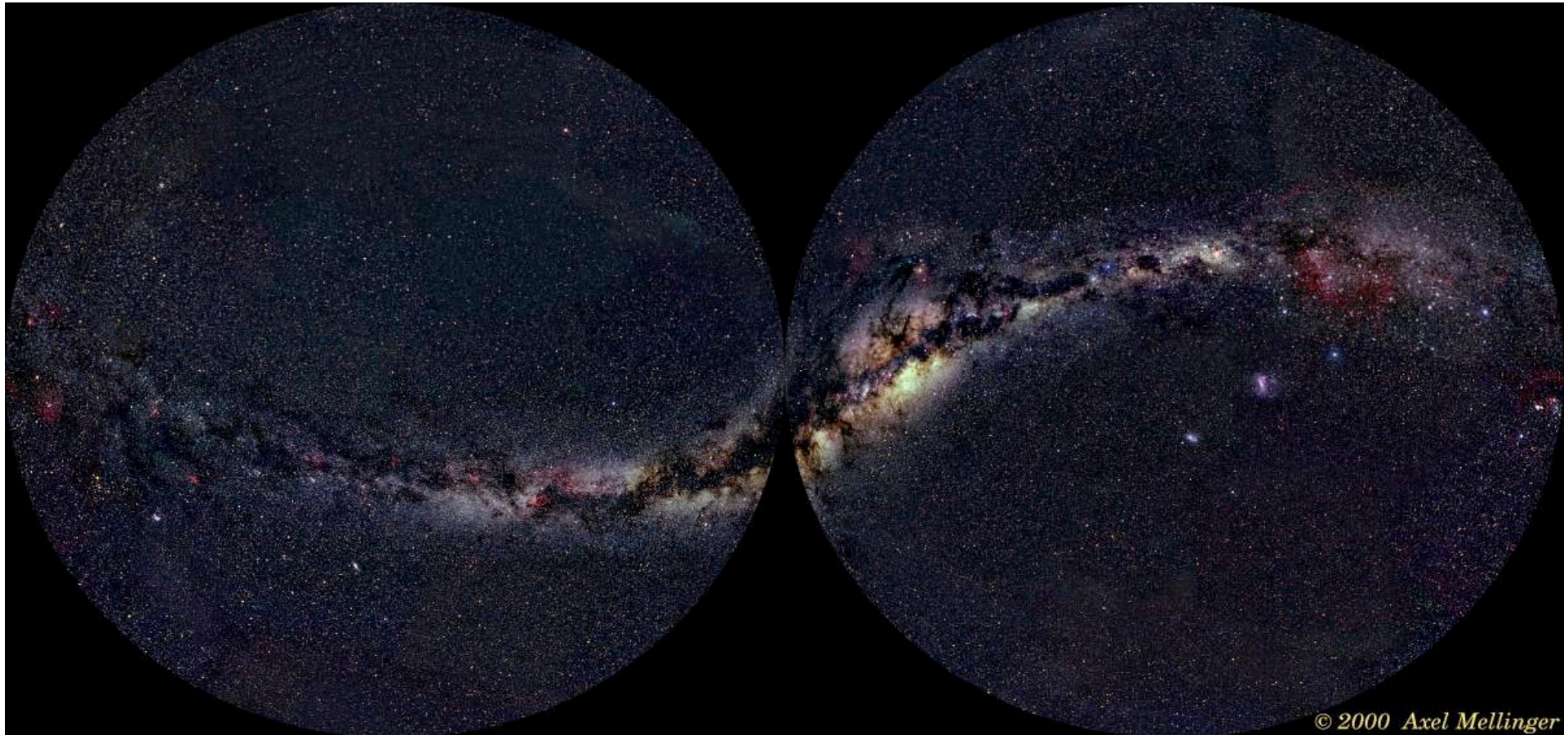
- Ergebnisse:
Vergleich mit Beobachtung oder Theorie



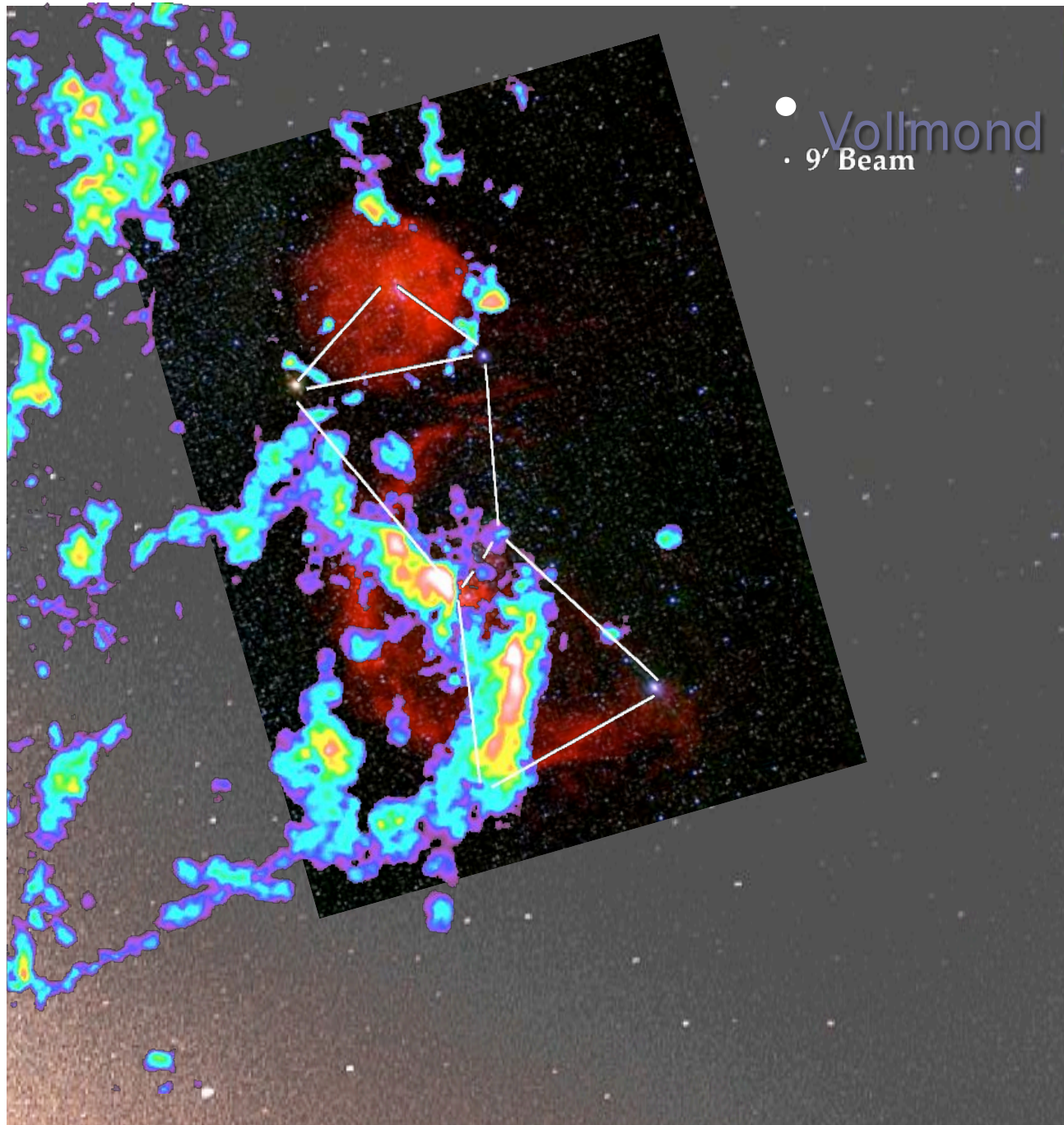
Computerphysik - Astrophysik

Interstellares Medium und Sternentstehung

Sternentstehung in der Milchstraße



Am Nachthimmel sieht man **Dunkelwolken** und **Sterne**:
Die hellsten Sterne sind *massereich* und daher *jung*.
→ Sternentstehung ist wichtig um beobachtete Struktur
der Milchstraße zu verstehen.

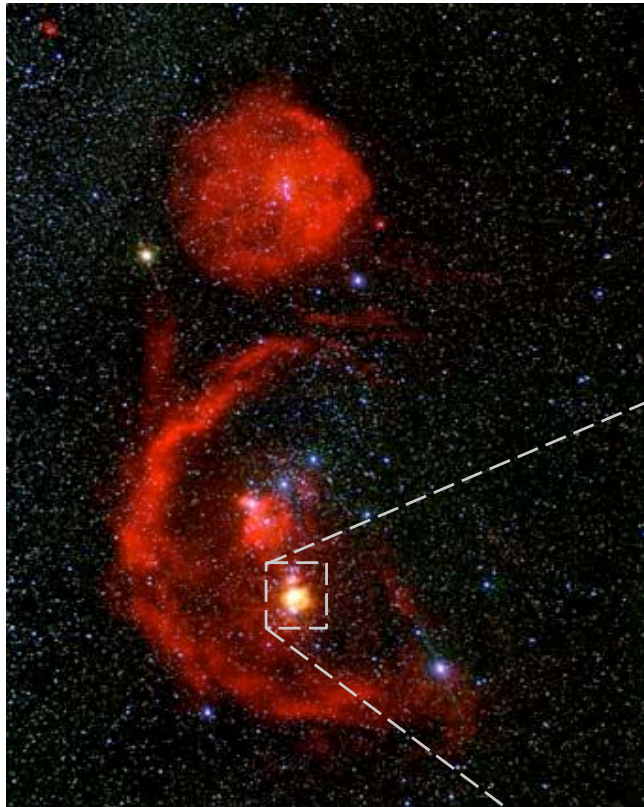


Stern- entstehung in Orion

Wir sehen

- *Sterne* (im sichtbaren Licht)
- **Atomaren Wasserstoff** (in $H\alpha$ -- *rot*)
- **Molekularen Wasserstoff H_2** (Radiostrahlung von Tracermolekül CO *farbcodiert*)

Lokales SE Gebiet: Trapezhaufen in Orion



Sternbild Orion

Die Orionmolekülwolke ist die Geburtsstätte mehrerer junger Sternhaufen.

Der Trapezhaufen ist noch ``eingebettet`` und nur im IR Wellenbereich sichtbar. Der Haufen besteht aus ~2000 jungen Sternen.



Trapezhaufen



Trapezhaufen (Detail)

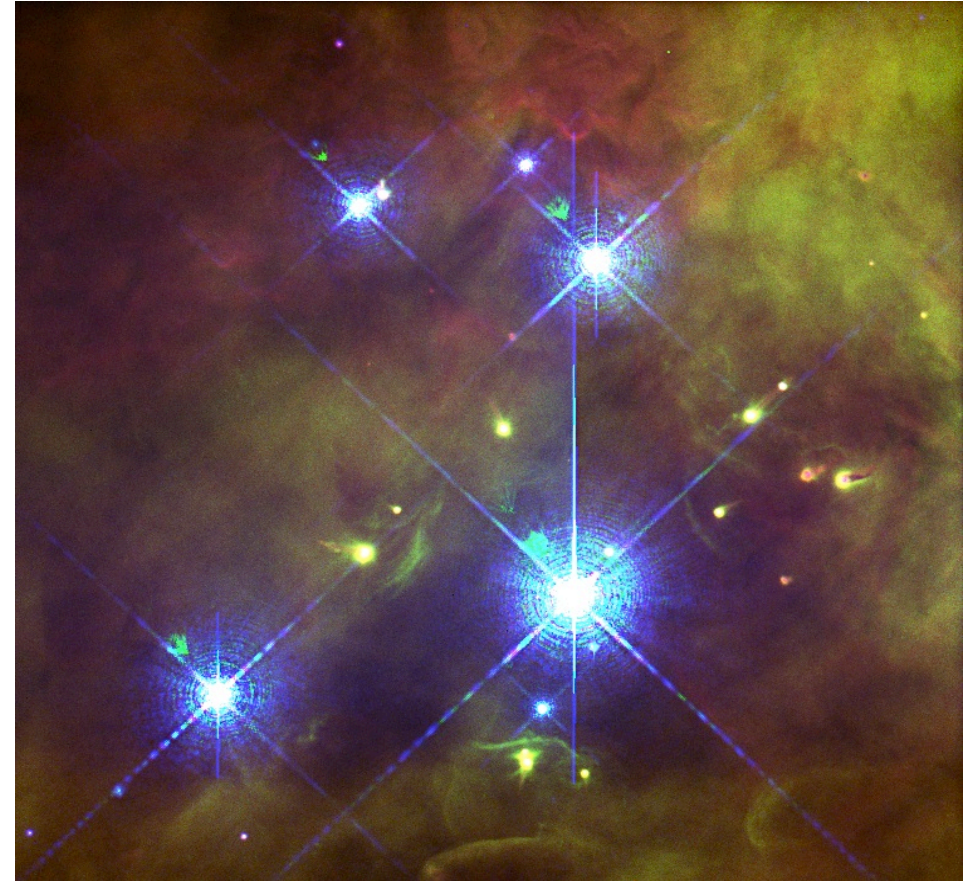
- Sterne entstehen in Haufen
- Sterne entstehen in Molekülwolken
- Rückkopplungseffekte sind wichtig

(Mehrfarbenaufnahme
in J,H,K: McCaughrean,
VLT, Paranal, Chile)

Trapezhaufen: Zentralgebiet



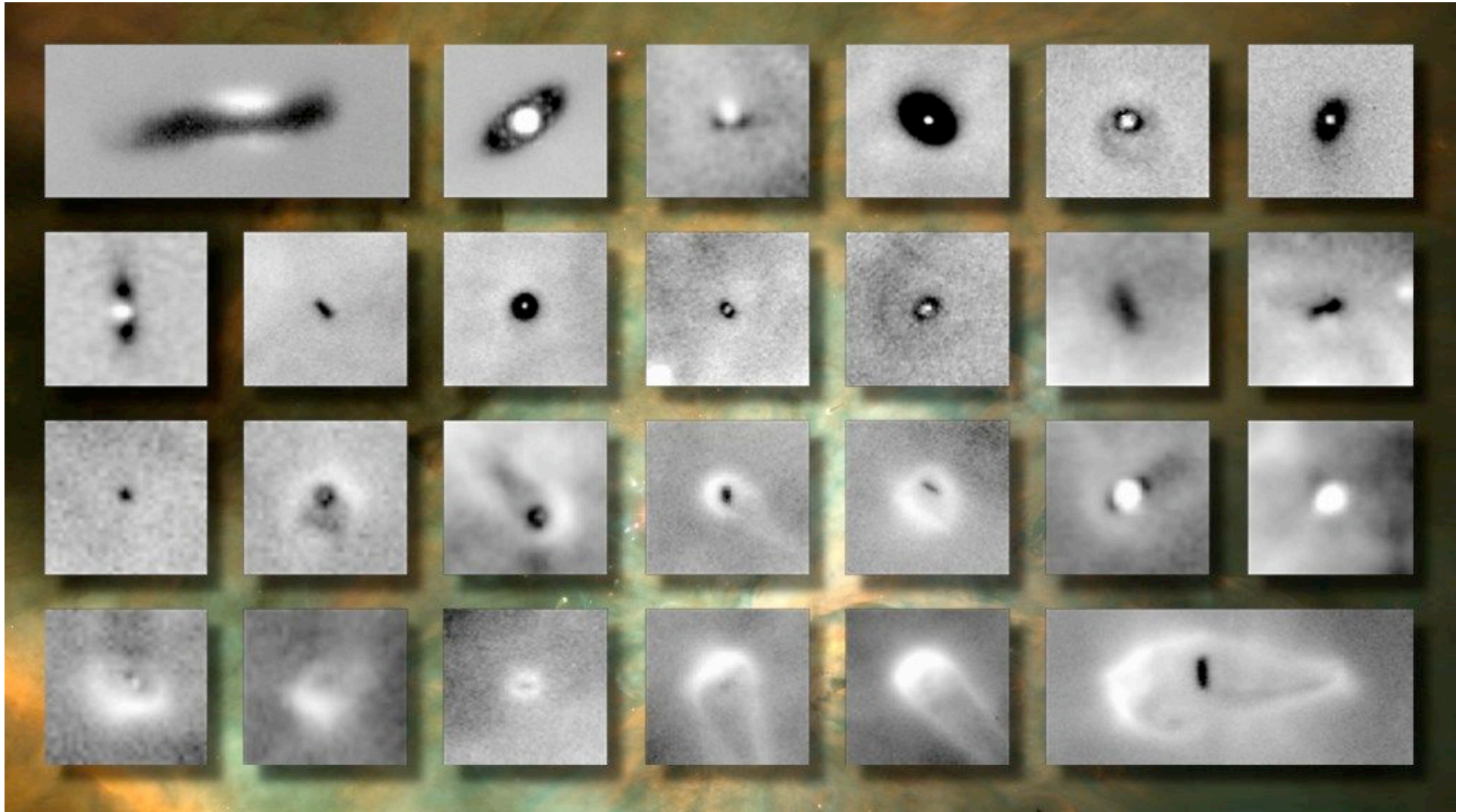
Der Großteil der ionisierenden Strahlung kommt vom Zentralstern $\Theta 1C$ Orionis



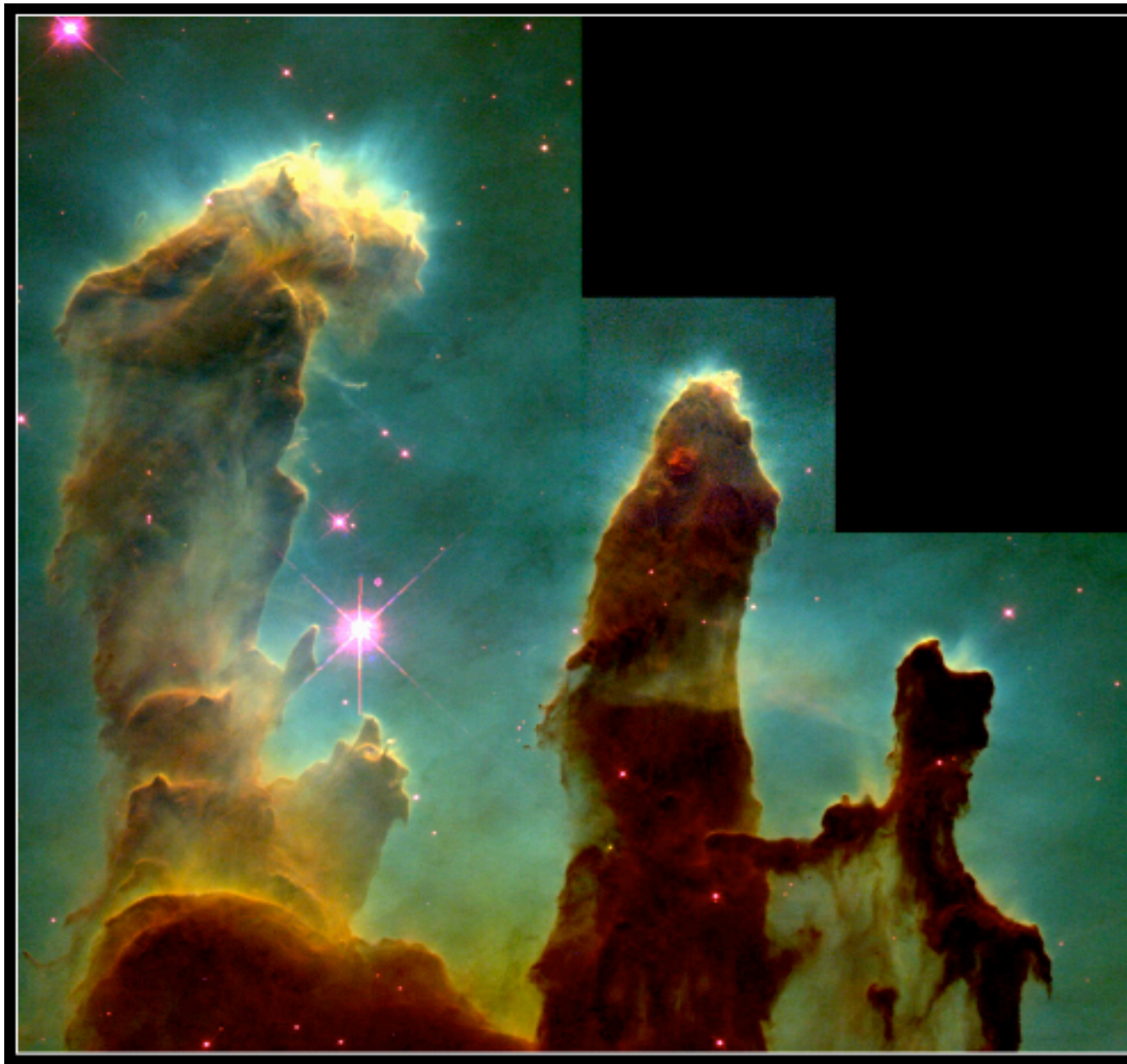
Proplyds: Verdampfende ``protoplanetare`` Scheiben um junge massearme Protosterne

(Abbildung Doug Johnstone et al.)

Weitere Details: Siluett-Scheiben in Orion



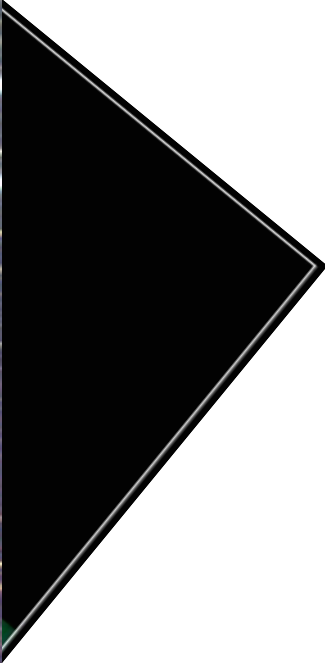
Protostellare Scheiben schatten die Photodissoziationsregion im Hintergrund ab. Jedes Bild ist 750 AU x 750 AU groß. (Daten von Mark McCaughrean)



HST Aufnahme

Pillars of God (im Adlernebel): Entstehung kleiner Gruppen junger Sterne in den "Spitzen" der Gas- und Staubsäulen....

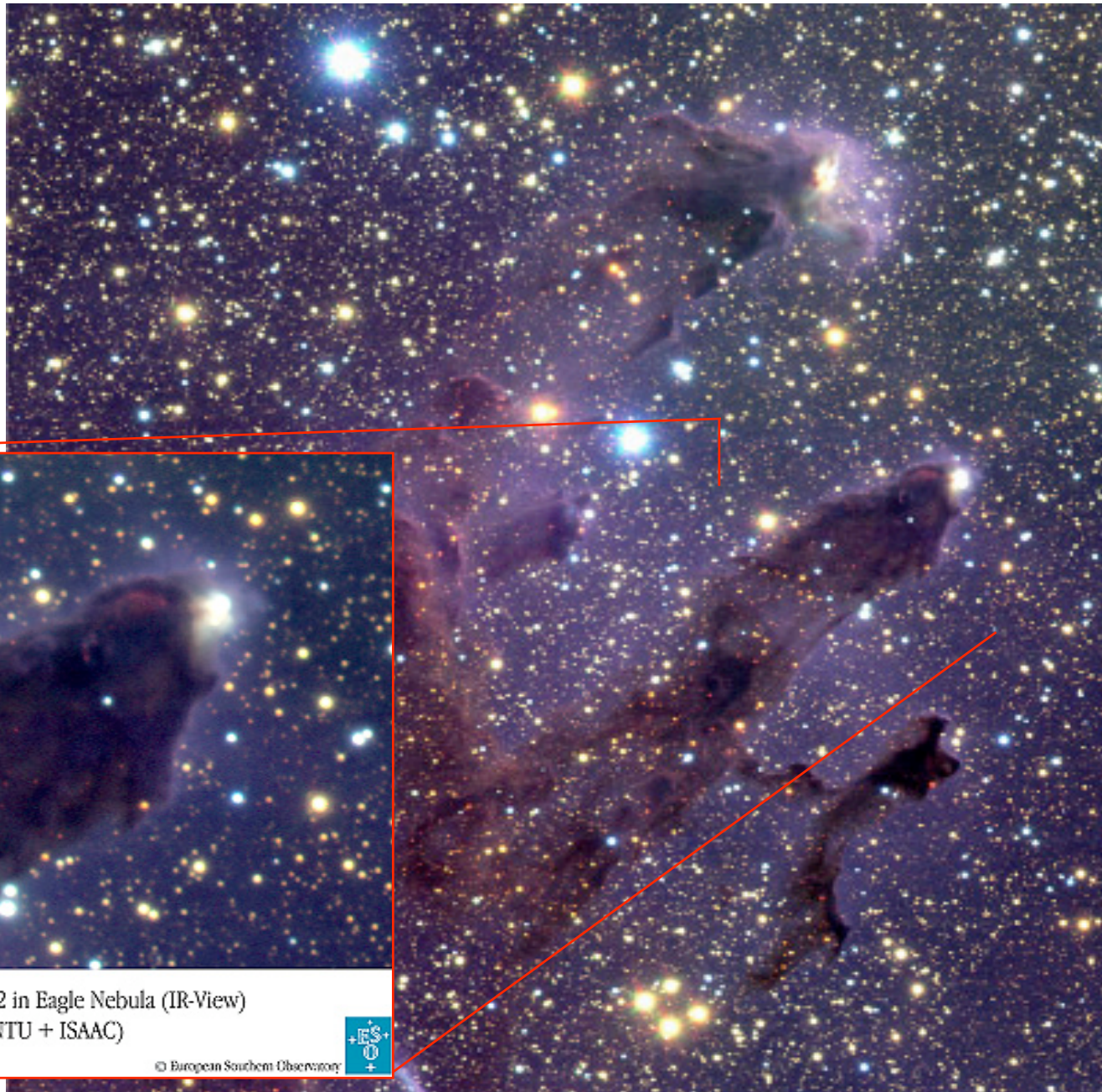
Aufnahme im
Infraroten.





IR Aufnahme mit dem ESO-VLT

Pillars of God (im Adlernebel): Entstehung kleiner Gruppen junger Sterne in den "Spitzen" der Gas- und Staubsäulen....



IR Aufnahme mit dem ESO-VLT



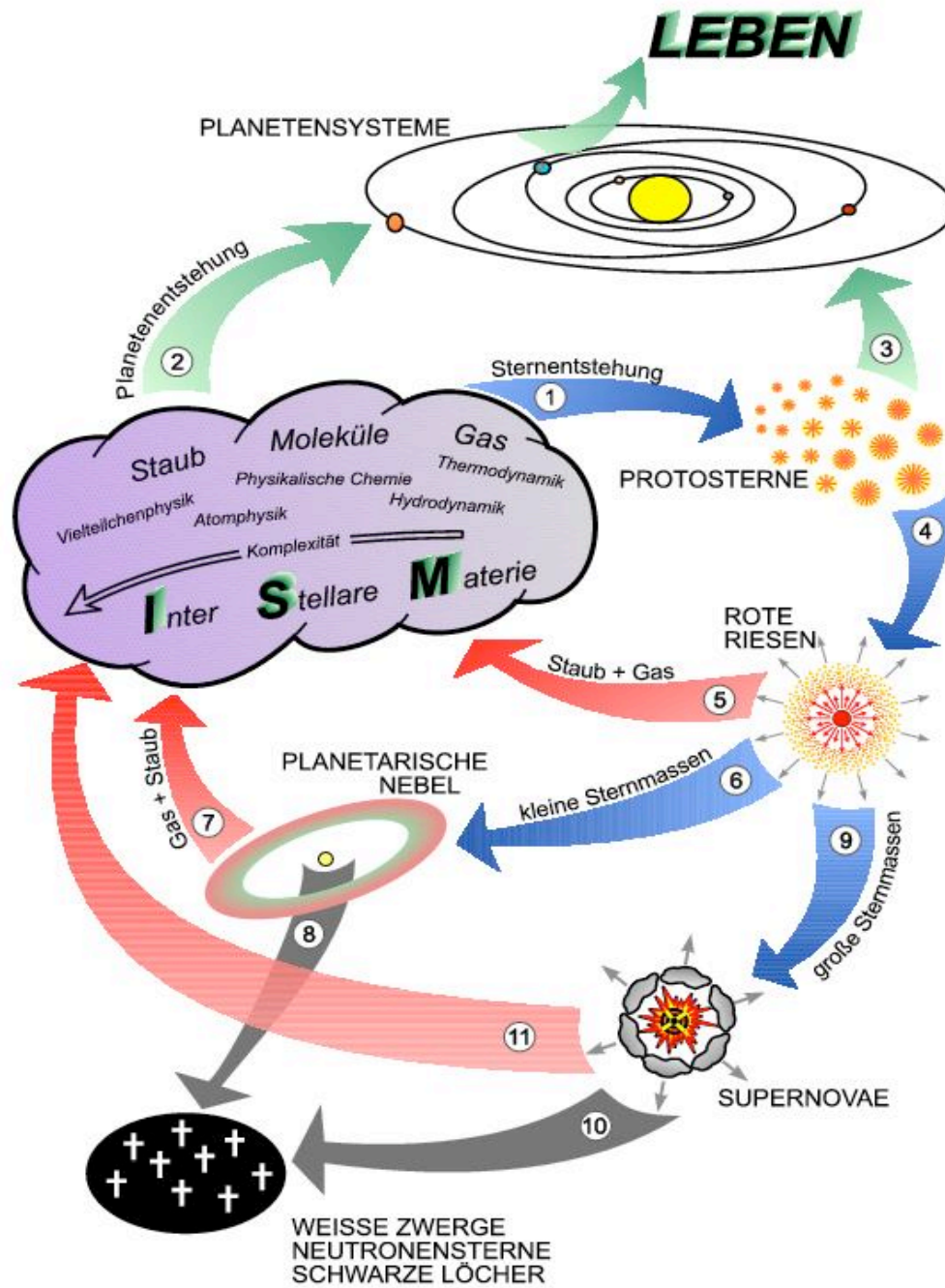
Head of Column No.2 in Eagle Nebula (IR-View)
(VLT ANTU + ISAAC)

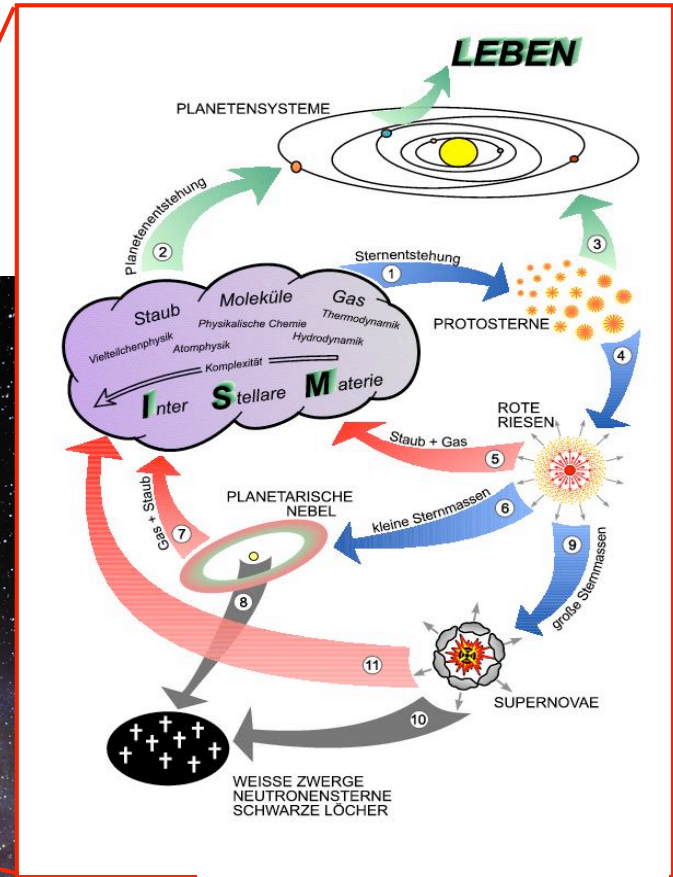
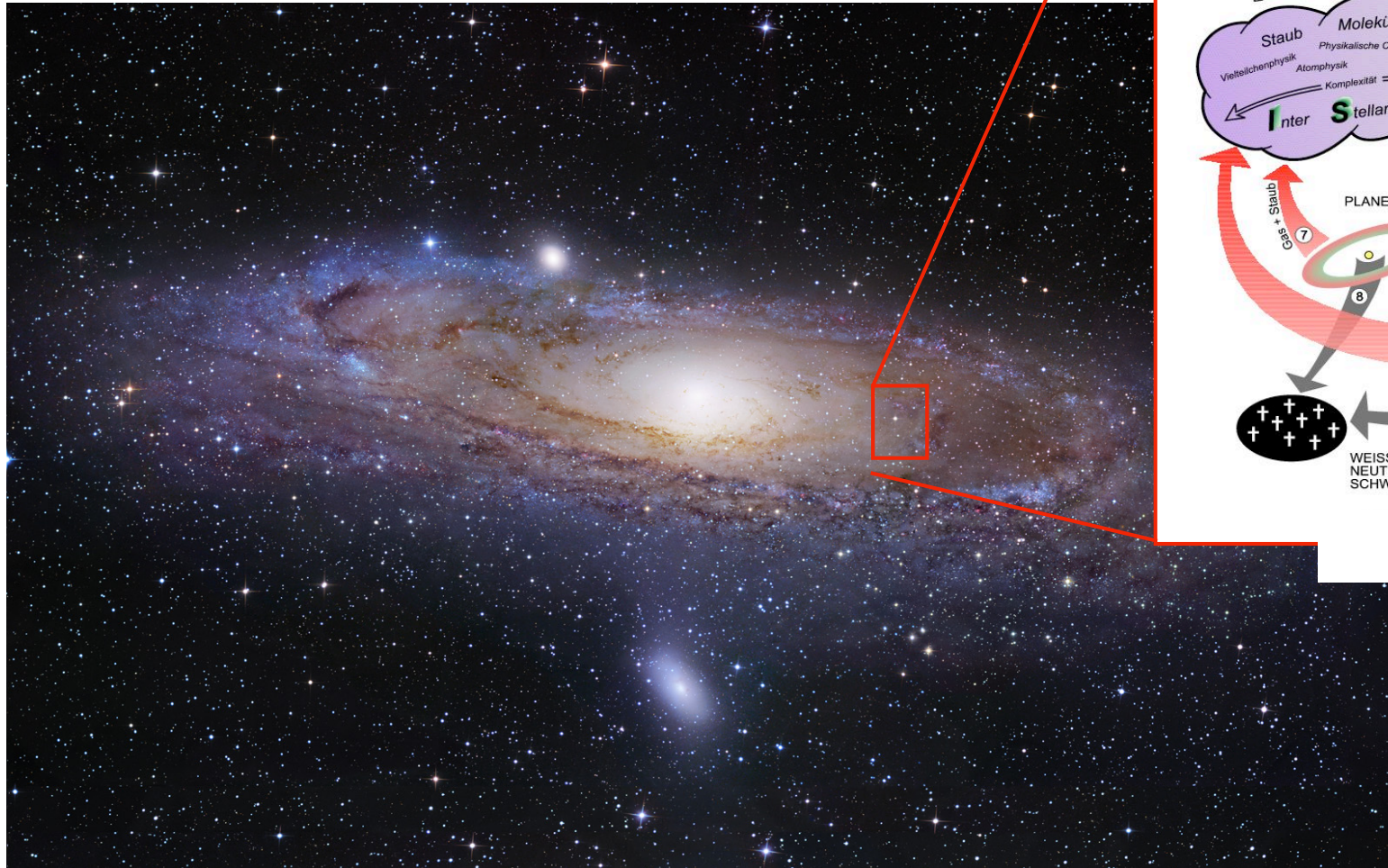
ESO PR Photo 37d/01 (30 December 2001)

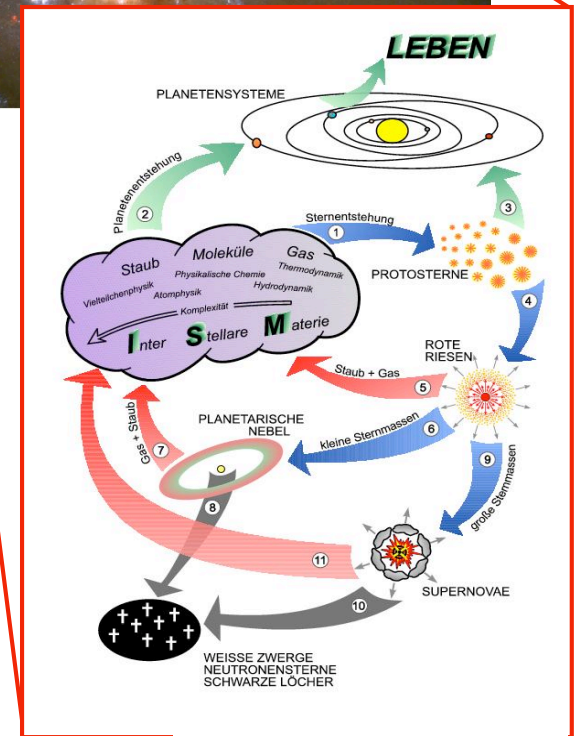
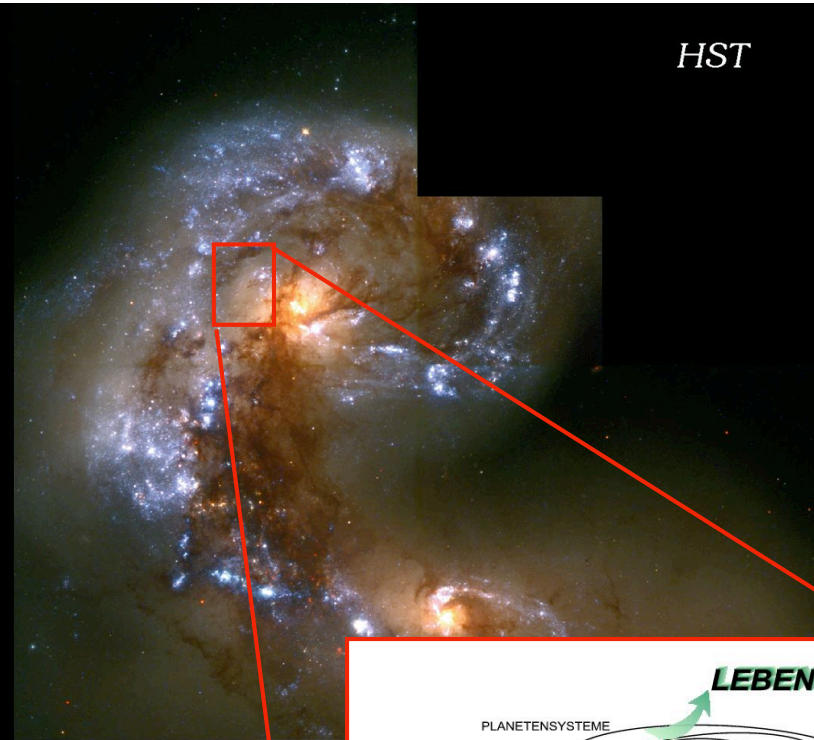
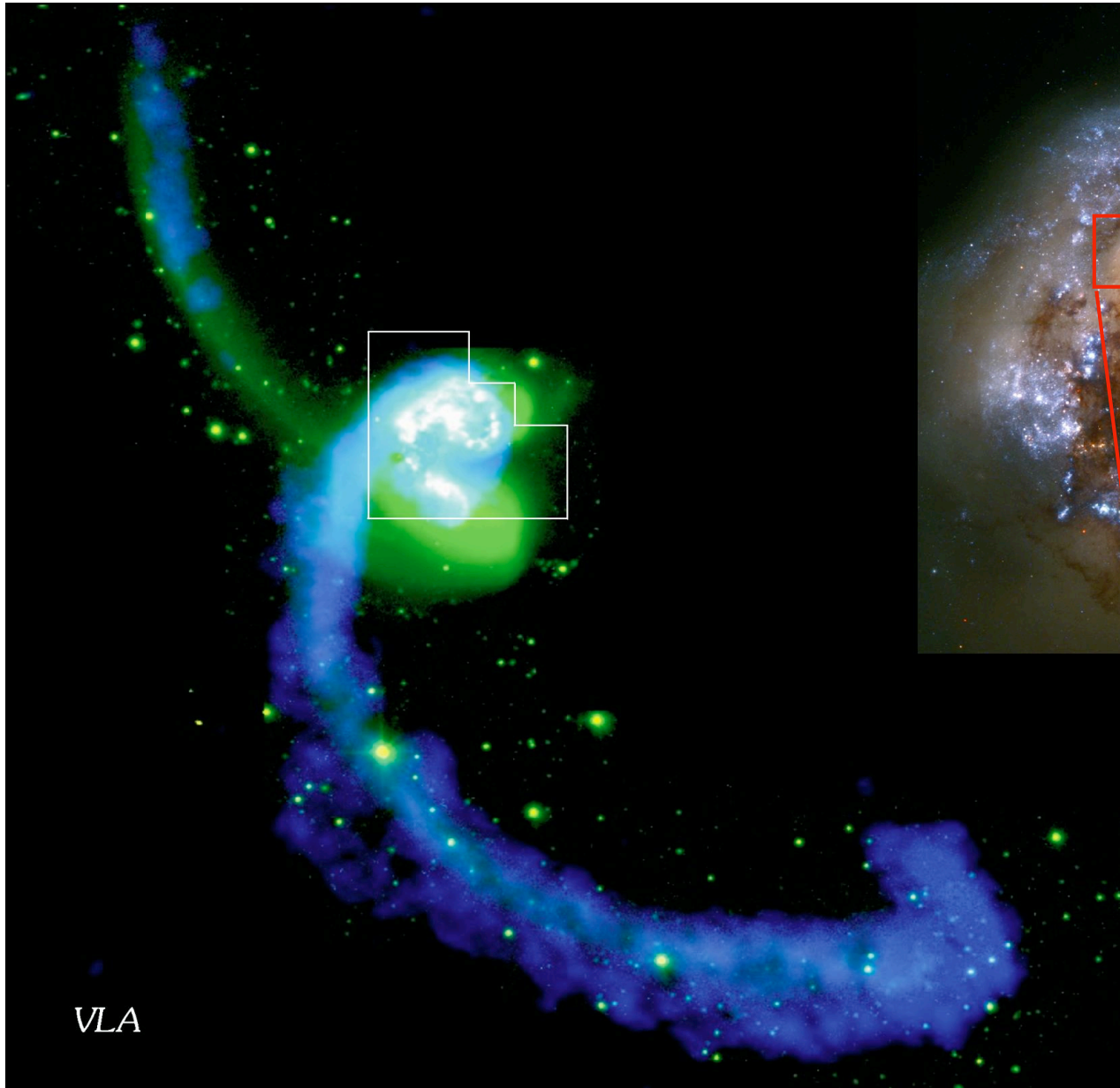
© European Southern Observatory



Pillars of God (im Adlernebel): Entstehung
kleiner Gruppen junger Sterne in den ``Spitzen``
der Gas- und Staubsäulen....







Why study ISM physics?

physical processes

turbulence theory
ISM: laboratory for plasm physics
ISM: laboratory for extreme chemistry

planets

initial conditions for planet formation (chemical composition)
diversity of planetary systems
habitability (life)

extreme environments

galactic center
starburst galaxies
primordial universe

stars & star clusters

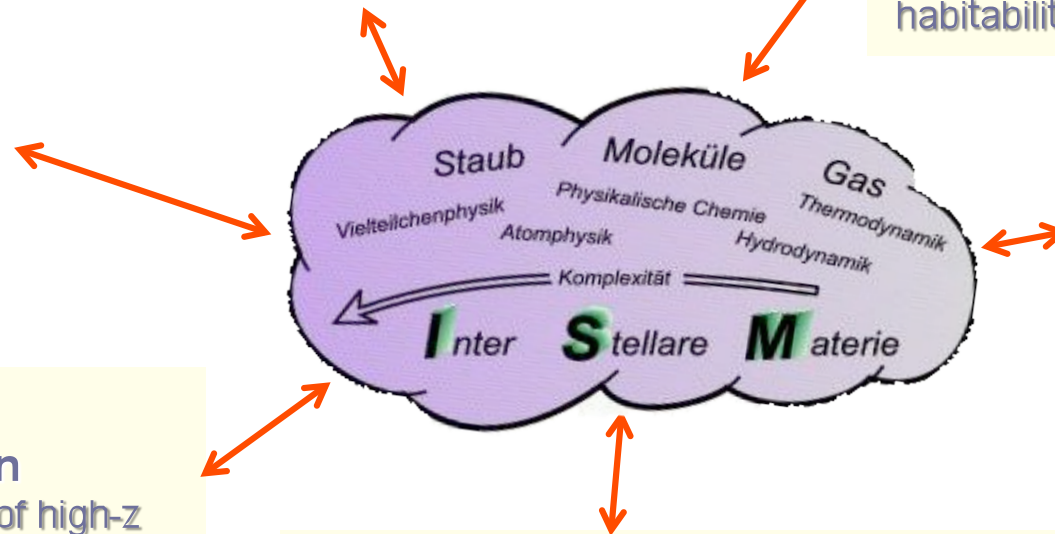
ISM: environment for star formation
IMF
feedback from stars (winds, radiation, SN)
MC turbulence

cosmology & galaxy formation

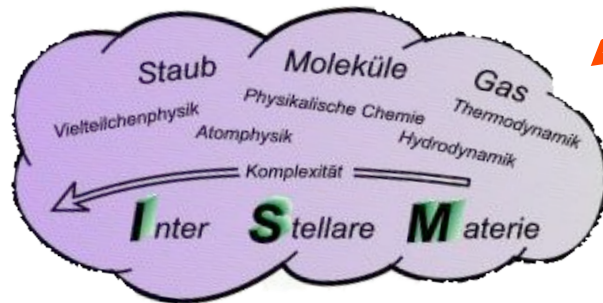
cooling properties of high-z halos
primordial star formation
relation between visible and dark matter

galactic structure & evolution

chemical enrichment
global star formation history (Milky Way)
interrelation between SF and galactic structure



What do we need to study ISM?



magneto-hydrodynamics
(multi-phase, non-ideal MHD,
turbulence)

chemistry (gas + dust, heating + cooling)

radiation (continuum + lines)

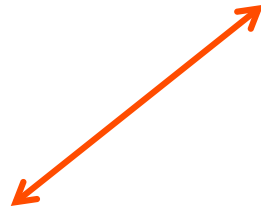
stellar dynamics
(collisional: star clusters,
collisionless: galaxies, DM)

stellar evolution
(feedback: radiation, winds, SN)

+ laboratory work
(reaction rates, cross sections,
dust coagulation properties, etc.)

What do we need to study ISM?

- **massive parallel codes**
- **particle-based: SPH with improved algorithms** (XSPH with turb. subgrid model, GPM, particle splitting, MHD-SPH?)
- **grid-based: AMR** (FLASH, ENZO, RAMSES, Nirvana3, etc), **subgrid-scale models** (FEARLESS)
- **BGK methods**



magneto-hydrodynamics
(multi-phase, non-ideal MHD, turbulence)

chemistry (gas + dust, heating + cooling)

radiation (continuum + lines)

stellar dynamics
(collisional: star clusters, collisionless: galaxies, DM)

stellar evolution
(feedback: radiation, winds, SN)

What do we need to study ISM?

- ever increasing chemical networks
- working reduced networks for time-dependent chemistry in combination with hydrodynamics
- improved data on reaction rates (laboratory + quantum mechanical calculations)



magneto-hydrodynamics

(multi-phase, non-ideal MHD, turbulence)

chemistry (gas + dust, heating + cooling)

radiation (continuum + lines)

stellar dynamics

(collisional: star clusters, collisionless: galaxies, DM)

stellar evolution

(feedback: radiation, winds, SN)

What do we need to study ISM?

- continuum vs. lines
- Monte Carlo, characteristics
- approximative methods
- combine with hydro



magneto-hydrodynamics

(multi-phase, non-ideal MHD, turbulence)

chemistry (gas + dust, heating + cooling)

radiation (continuum + lines)

stellar dynamics

(collisional: star clusters, collisionless: galaxies, DM)

stellar evolution

(feedback: radiation, winds, SN)

What do we need to study ISM?

- **statistics: number of stars (collisional: 10^6 , collisionless: 10^{10})**
- **transition from gas to stars**
- **binary orbits**
- **long-term integration**



magneto-hydrodynamics

(multi-phase, non-ideal MHD, turbulence)

chemistry (gas + dust, heating + cooling)

radiation (continuum + lines)

stellar dynamics

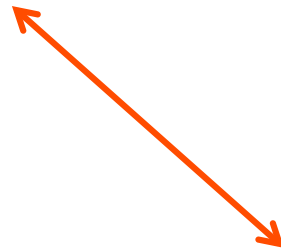
(collisional: star clusters, collisionless: galaxies, DM)

stellar evolution

(feedback: radiation, winds, SN)

What do we need to study ISM?

- very early phases (pre main sequence tracks)
- massive stars at late phases
- role of rotation
- primordial star formation



magneto-hydrodynamics

(multi-phase, non-ideal MHD, turbulence)

chemistry (gas + dust, heating + cooling)

radiation (continuum + lines)

stellar dynamics

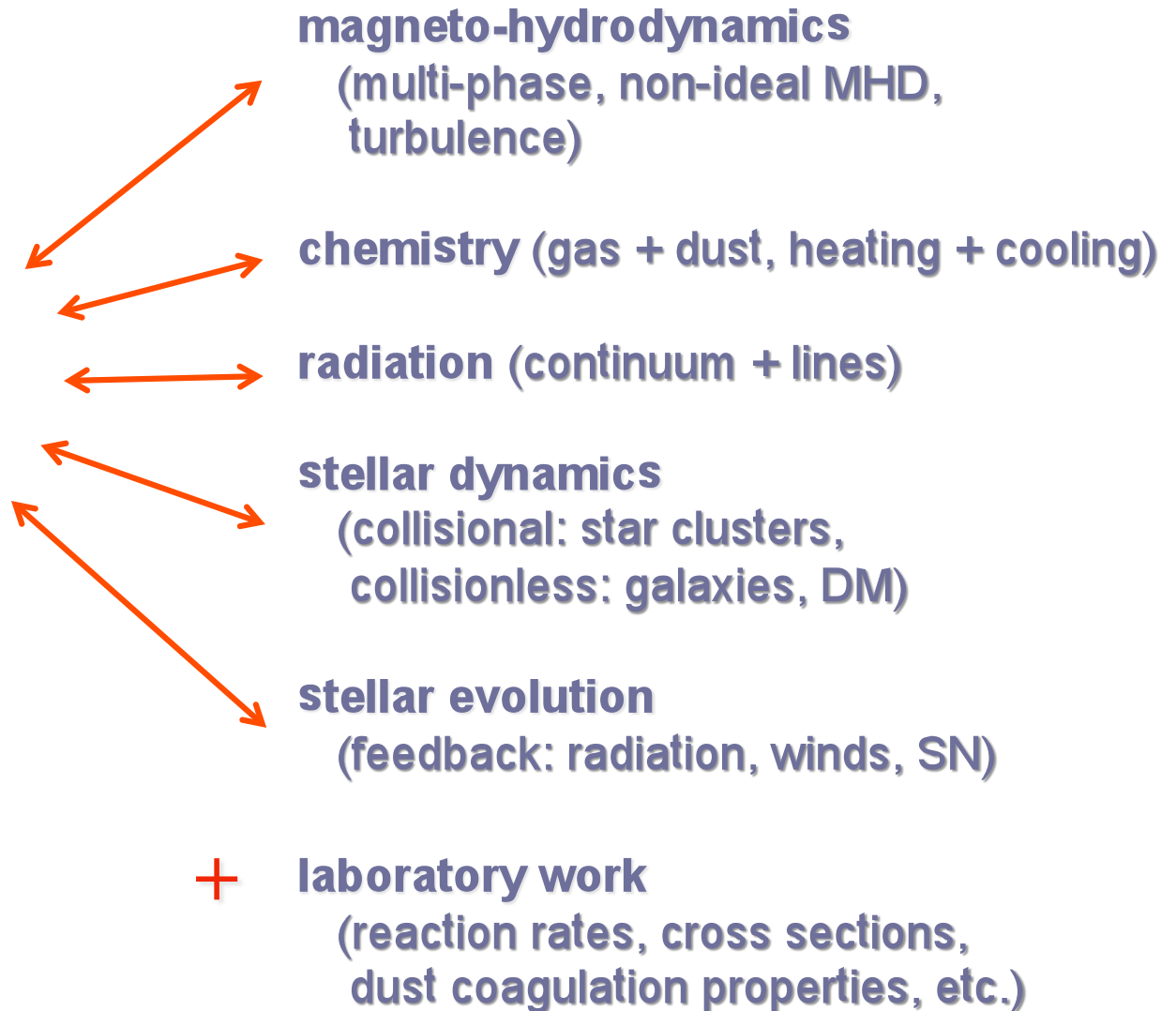
(collisional: star clusters, collisionless: galaxies, DM)

stellar evolution

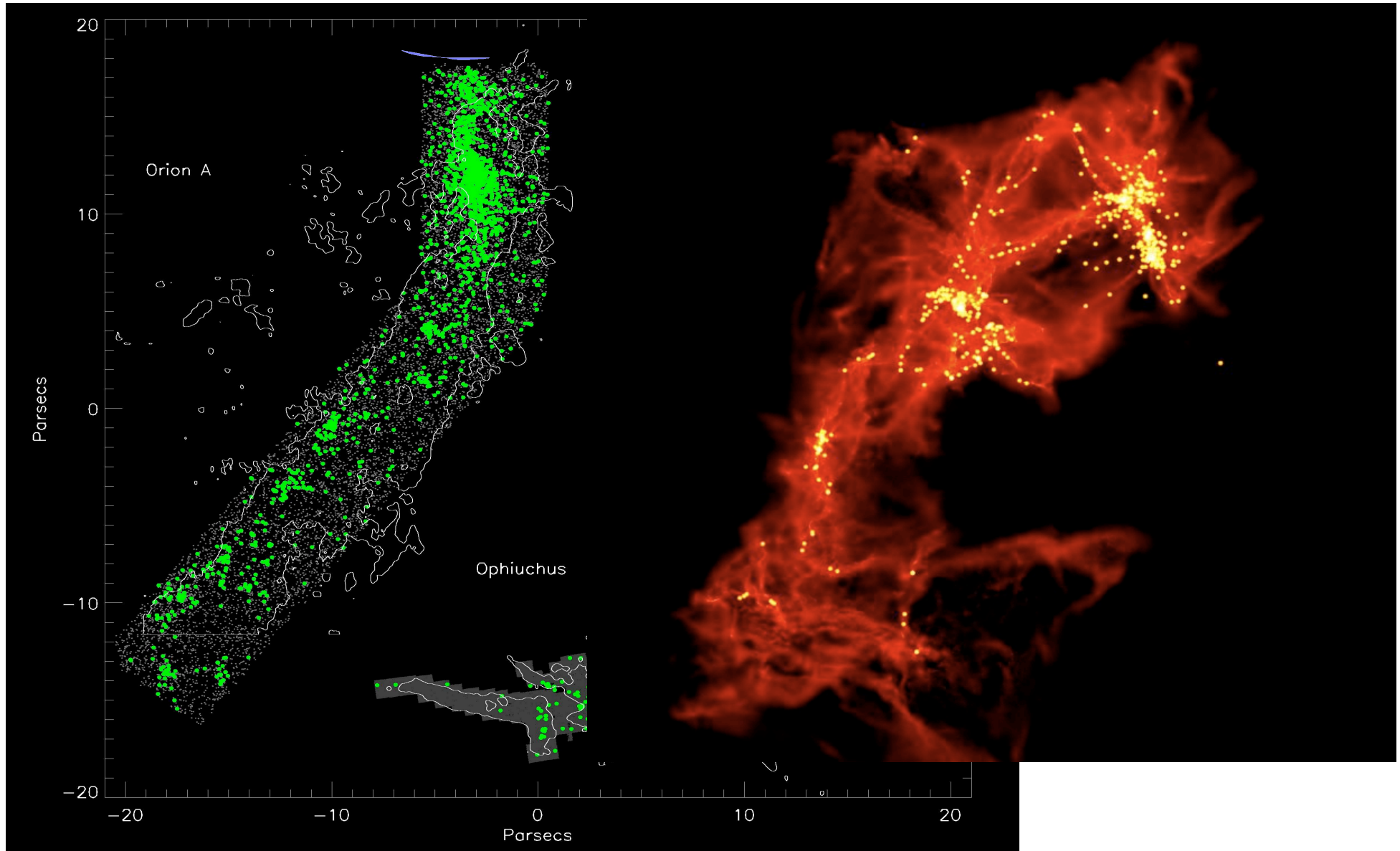
(feedback: radiation, winds, SN)

What do we need to study ISM?

methods
need to be
combined!



Gravitational collapse within MCs



Gravitational collapse within MCs

immediate future: SPH with radiation feedback (first validation runs)

