



Computer Physik

Computational Physics

Cornelius Dullemond, Max-Planck Inst. für Astronomie
Rainer Spurzem, Astronomisches Rechen-Institut
Zentrum für Astronomie, Universität Heidelberg

spurzem@ari.uni-heidelberg.de, dullemon@mpia.de
<http://www.ari.uni-heidelberg.de/mitarbeiter/spurzem/>
<http://www.mpia.de/homes/dullemon/index.html>

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, ...

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

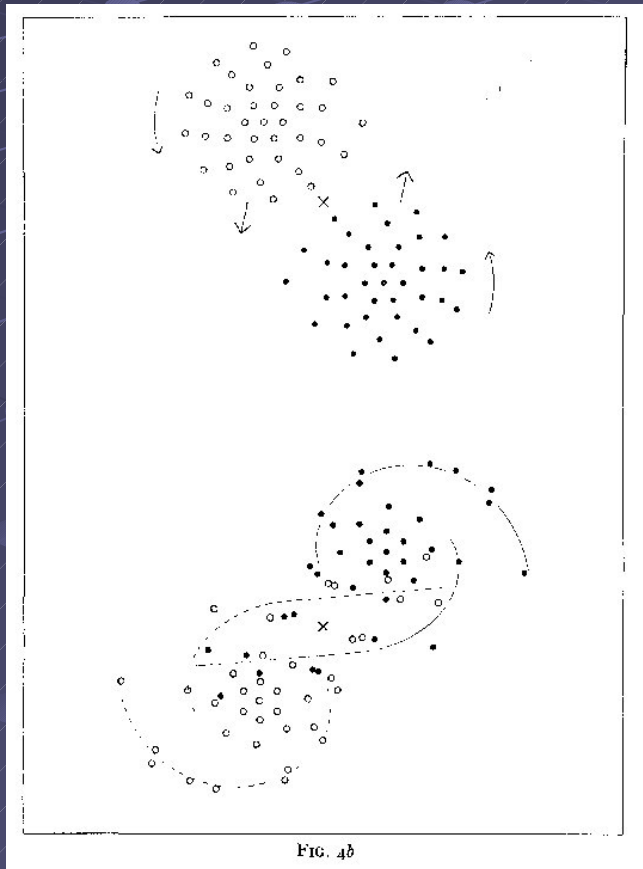


FIG. 4b

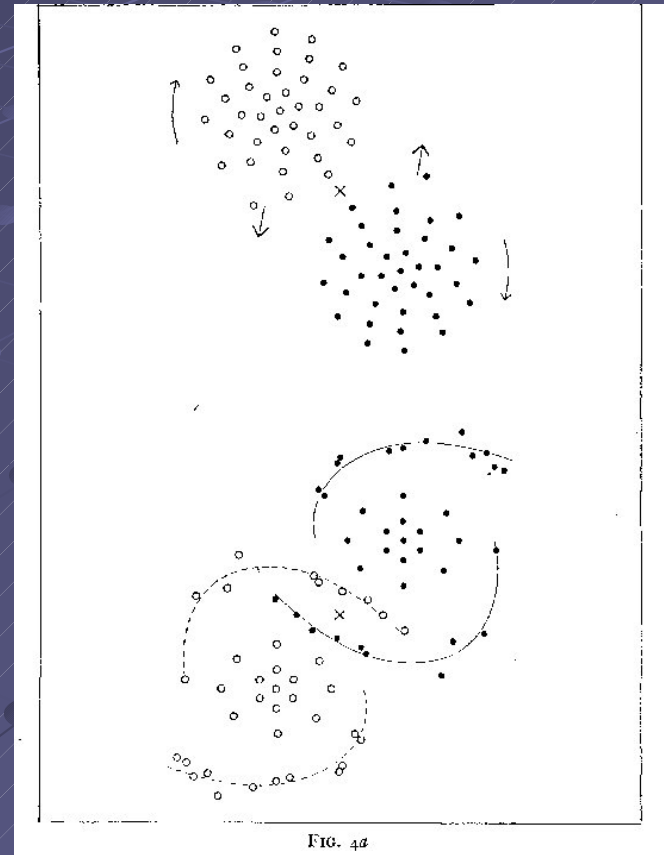


FIG. 4a

Geschichte

● Konrad Zuse (1910-1995) Berlin

Erfinder des frei programmierbaren Rechners



Dullemond/Spurzem SS10



Z1 in der elterlichen Wohnung 1936

Comp. Physik Univ. Heidelberg



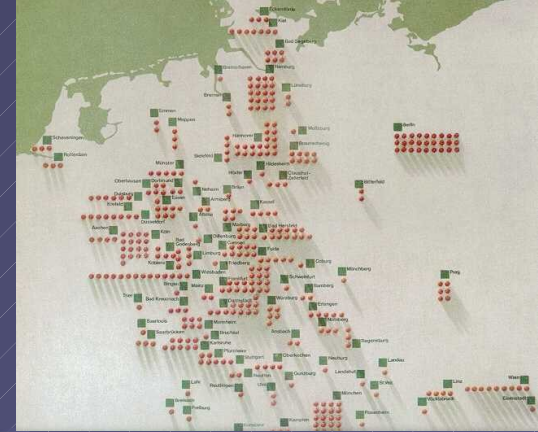
RT-Distribution

Schwingungen

Geschichte

0.03 Mflops

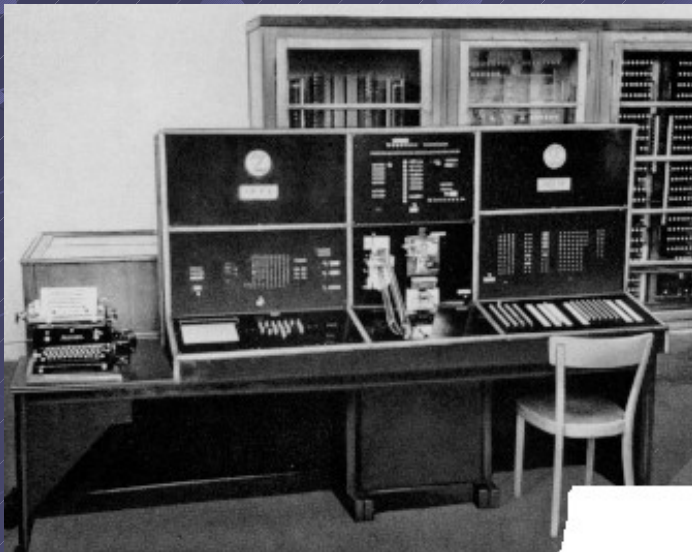
<http://www.rtd-net.de/Zuse.html>



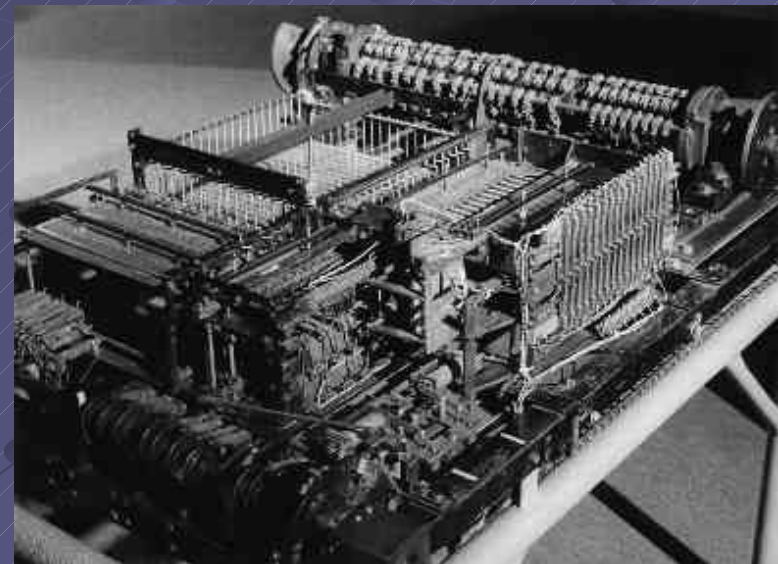
Zuse Z4: 1944 Berlin, 1950 Zürich

1954 Frankreich

1959 Deutsches Museum München



Rechenanlage 0.03 MHz



Speicher 256 byte

Geschichte

● Grundprinzipien des elektronischen Rechners

Verwirklicht bei Zuse, Theorie von Neumann

Freie Programmierbarkeit

Binäres Zahlenformat

Speicher

Gleitkommaarithmetik



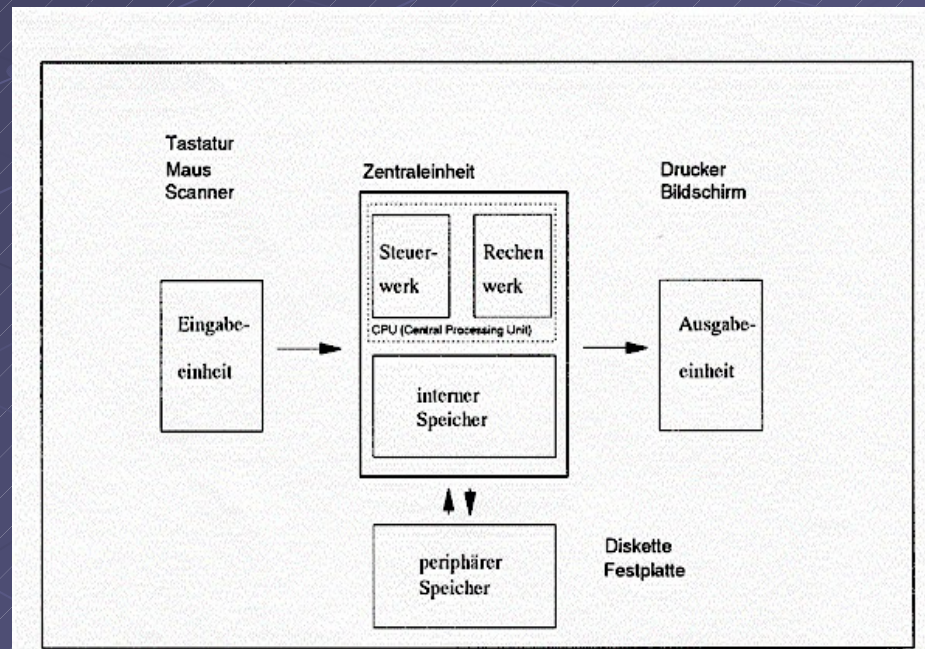
Geschichte

John von Neumann (1903-1957)

Geb. Budapest, Dozent Berlin,

ab 1930 Princeton Univ. NJ USA Princeton

„Requirements for an electronic computing machine“ (1946)



Geschichte

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)

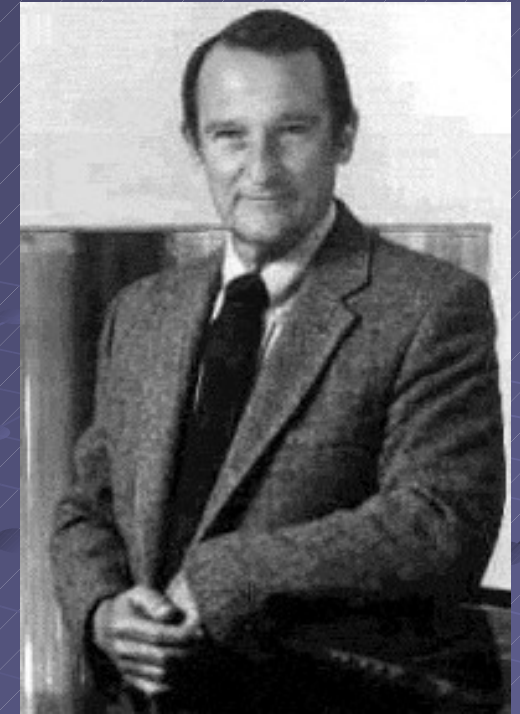


S.v. Hoerner,
1919 – 2003

Z.f.Astroph. 1960, 63

Sebastian von Hoerner, 2001: How it all started, in: Dynamics of Star Clusters and the Milky Way, ASP Conference Series, Vol. 228. Edited by S. Deiters, B. Fuchs, R. Spurzem, A. Just, and R. Wielen. San Francisco: Astronomical Society of the Pacific. ISBN: 1-58381-060-9, 2001.

Geschichte



● Seymour Cray (1925-1996)

● "The father of supercomputing"

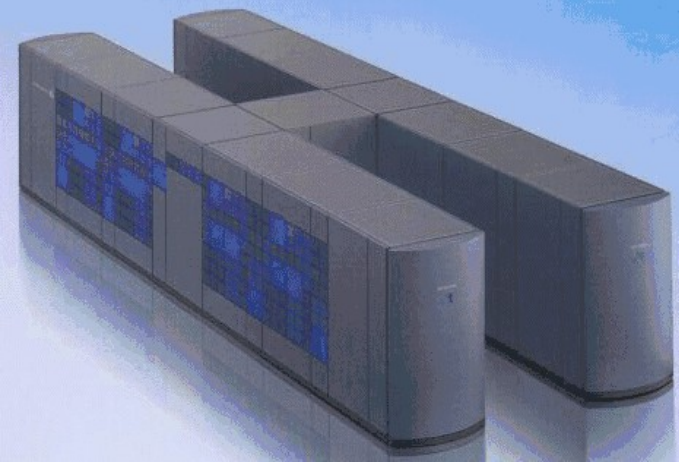


CRAY1: Vektorregister (1976)

160 Mflop, 80 MHz, 8 MByte RAM

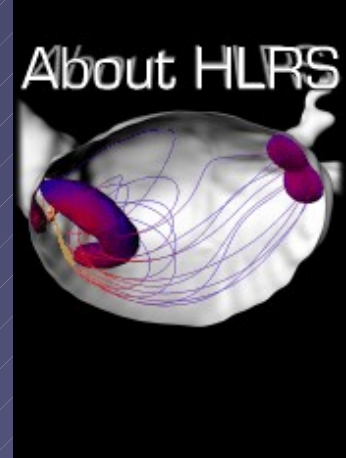
CRAY2: (1984)

1Gflop, 120MHz, 2GByte RAM



Geschichte

Hitachi SR8000 LRZ München
6 Tflops, TByte Memory

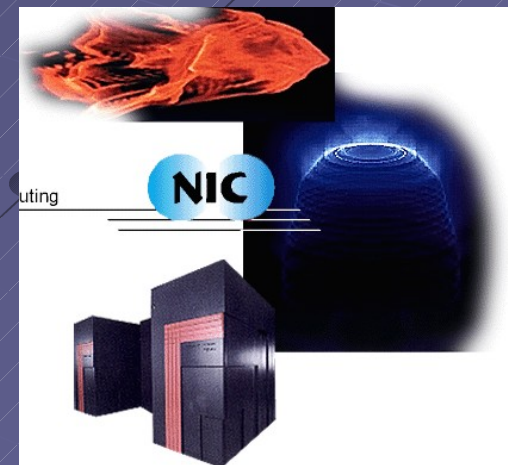


HLRS Stuttgart

● Für welche Zwecke?

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

NIC Jülich





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

SGI Altix 4700
62 Tflop/s



Einführung

*Superrechner
JUGENE
IBM Blue Gene
Jülich
Supercomputing
Centre (JSC)
223 Tflop/s
...Petaflop/s...
2015: Exaflop/s
Prototype with IBM
2019: Exaflop/s System
(...Trillion...)*



Eröffnet mit J. Rüttgers Juni 2008

Über Petaflop/s zu Exaflop/s?

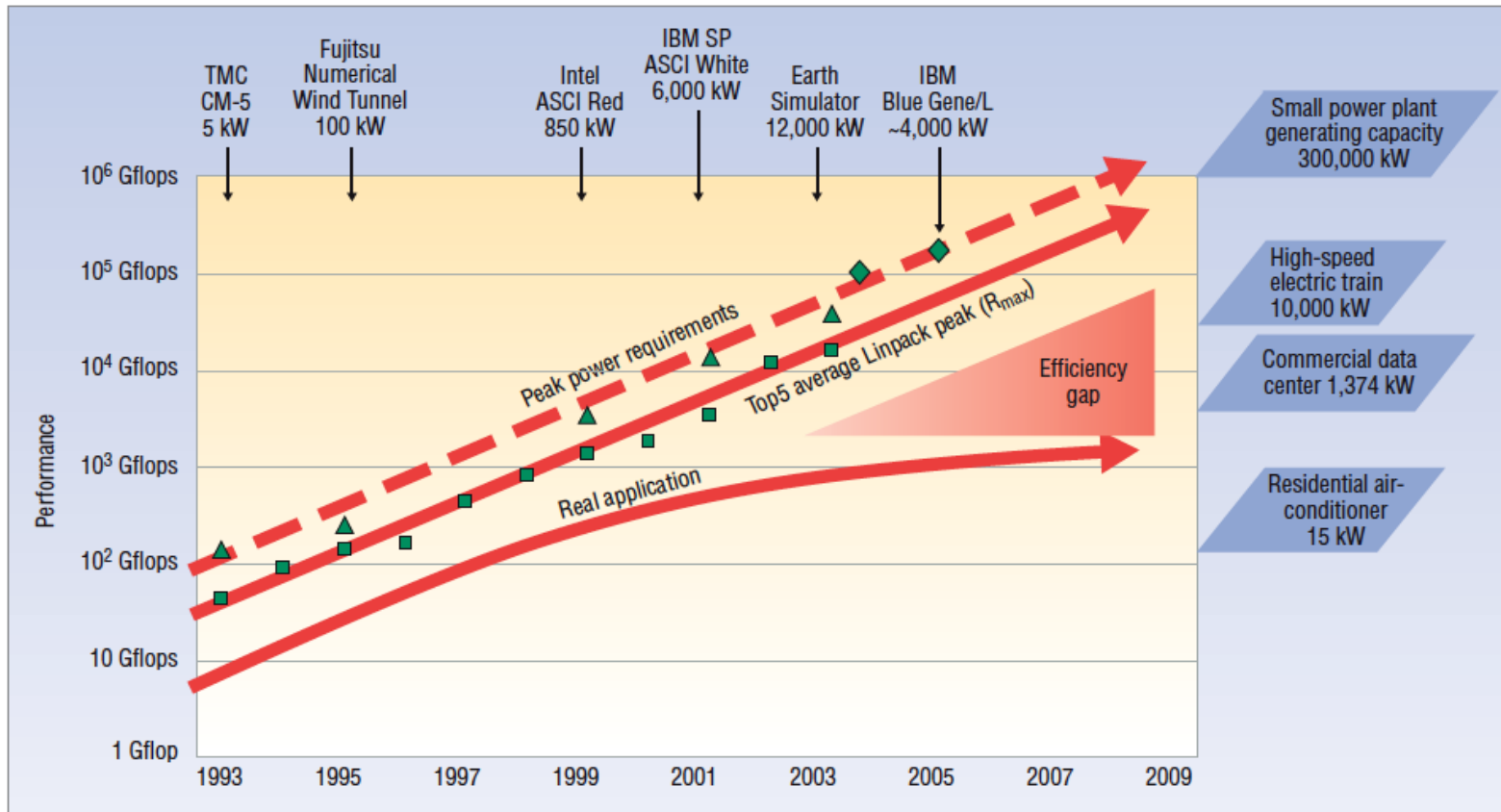


Figure 1. Rising power requirements. Peak power consumption of the top supercomputers has steadily increased over the past 15 years.

Lösungen dringend! Green Flash – Power Efficient Supercomputing
Exaflop/s Scale – UC Berkeley and Lawrence Berkeley, and Univ. of Heid
www.citris-uc.org/events/green_flash_power_efficient_scientific_computing_exascale

HARDWARE



2007...

GeForce 8800 GTX, 128 Stream Proc., 768 MB

GeForce 8800 GTS, 128 Stream Proc., 512 MB

GeForce 8800 GT, 112 Stream Proc., 512 MB

2008...

GeForce 9800 GTX, 128 Stream Proc., 512 MB

GeForce 9800 GX2, 256 Stream Proc., 1 GB

GeForce 9800 GT, 64 Stream Proc., 512 MB

<http://www.nvidia.com>



GPU Computing



PCI
Express 2.0



GPU

- Number of processor cores: 240
- Processor core clock: 1.296 GHz
- Voltage: 1.1875 V
- Package size: 45.0 mm × 45.0 mm 2236-pin flip-chip ball grid array (FCBGA)

Board

- Fourteen layer printed circuit board (PCB)
- PCI Express 2.0 ×16 system interface
- Physical dimensions: 4.376 inches × 10.50 inches, dual slot
- Board power dissipation: 187.8 W

External Connectors

- None

Internal Connectors and Headers

- One 6-pin PCI Express power connector
- One 8-pin PCI Express power connector
- 4-pin fan connector

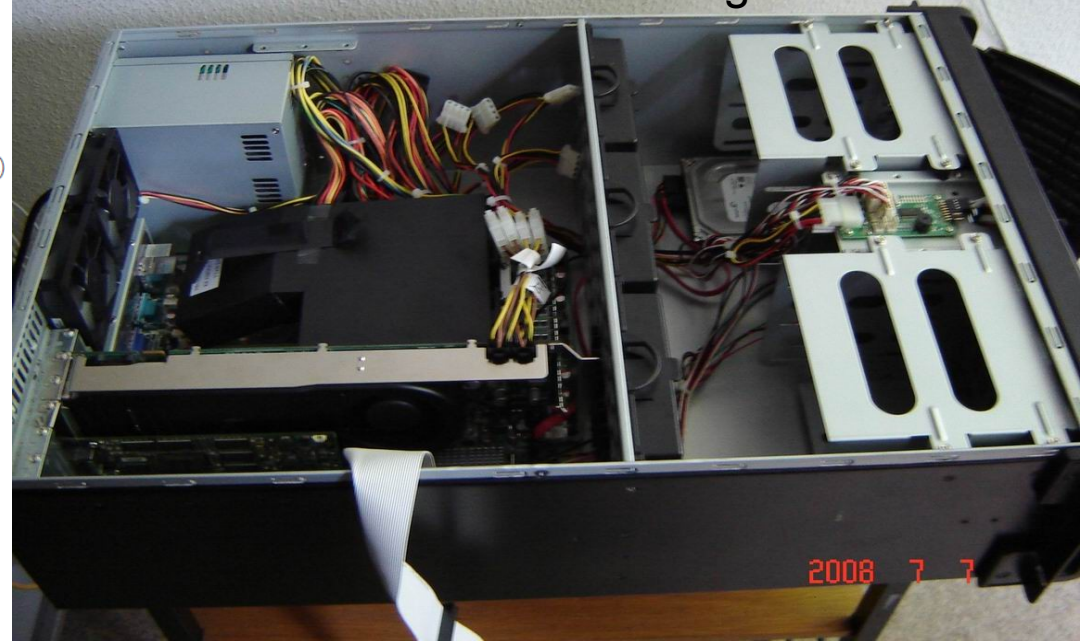
General Purpose GPU Supercomputing (GPGPU)

<http://www.nvidia.com>

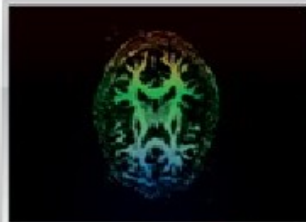
<http://www.astrogpu.org>

<http://gpgpu.org>

NVIDIA Tesla C1060
in kolob cluster Heidelberg Univ.

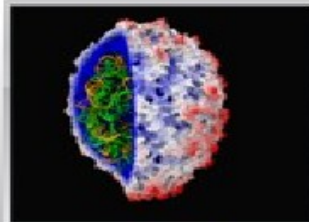


Speedups using GPU vs. CPU



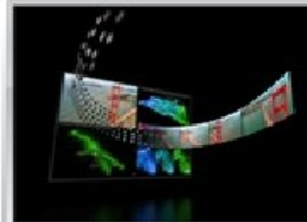
146X

Interactive visualization of volumetric white matter connectivity¹



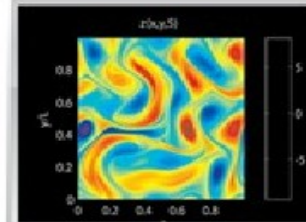
36X

Ionic placement for molecular dynamics simulation on GPU²



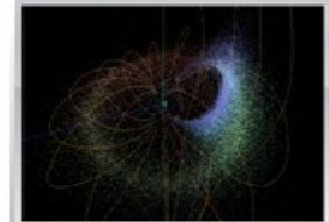
18X

Transcoding HD video stream to H.264 for portable video³



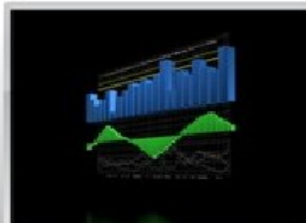
17X

Simulation in Matlab using mex file CUDA function⁴



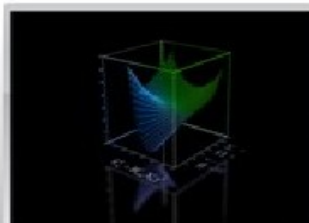
100X

Astrophysics N-body simulation⁵



149X

Financial simulation of LIBOR model with swaptions⁶



47X

GLAME@lab: M-script API for linear Algebra operations on GPU⁷



20X

Ultrasound medical imaging for cancer diagnostics⁸



24X

Highly optimized object oriented molecular dynamics⁹

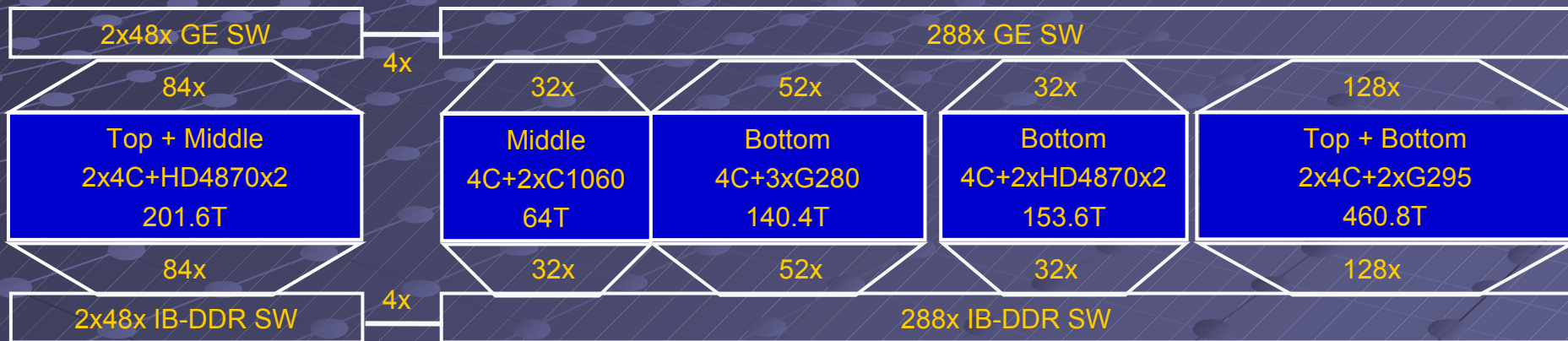


30X

Cmatch exact string matching - find similar proteins & gene sequences¹⁰



China's first HPC system with 1.0 Petaflops peak performance in single precision (2009.3.19)



200T(IPE/Dawning)



200T(IPE/Lenovo)



150T(IPE)



450T(IPE)

Mole-8.7 (<300kW)



中国科学院过程工程研究所

Institute Of Process Engineering, Chinese Academy Of Sciences

2 of 8 CUDA Centers of Excellence worldwide:

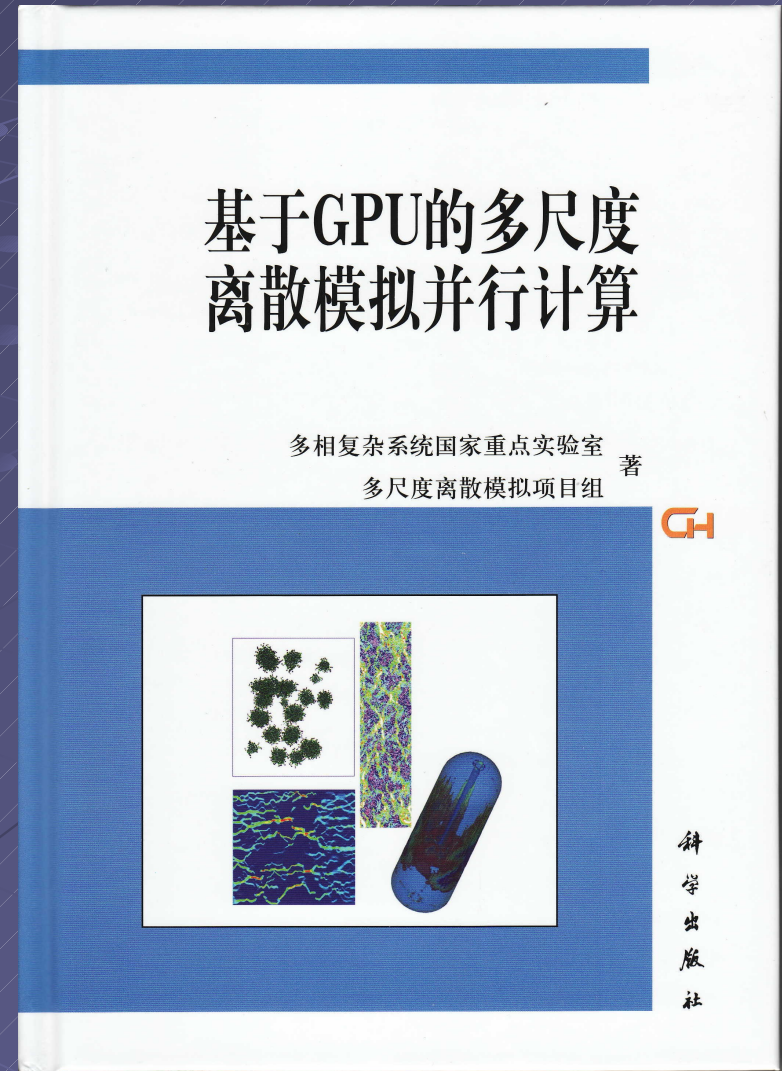
IPE, CAS & Tsinghua Univ.

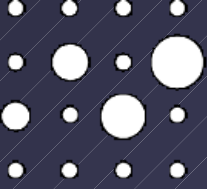


Monographs on CUDA:

IPE, CAS 2000 sold

The booming GPUs in China mainland





**MPRACE Card, ZITI
Zentrales Inst. Techn. Informatik
Univ.Heidelberg in Mannheim**

NAOC Beijing (**CAS and Silk Road Project**)

Bottom Right: NAOE Cluster

86x8 Cores, 170 Tesla C1060



HARDWARE

Custom PC Clusters

with manycore accelerator hardware:

Heidelberg (2x, GRAPE, FPGA, GPU)

Rochester, NY (only GRAPE)

Kiev, Ukraine (2x, GRAPE, GPU)

NAOC Beijing (**CAS and Silk Road Project**)

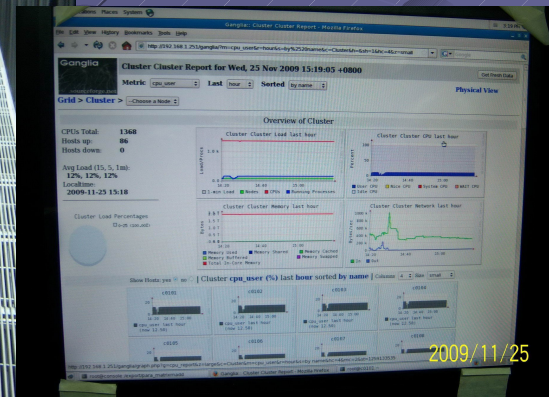
Bottom Right: NAOC Cluster

86x8 Cores, 170 Tesla C1060



Top: Frontier Cluster

41x8=328 Cores, 40 Tesla GPU
Klessen, Banerjee,
Spurzem, Männer et al.

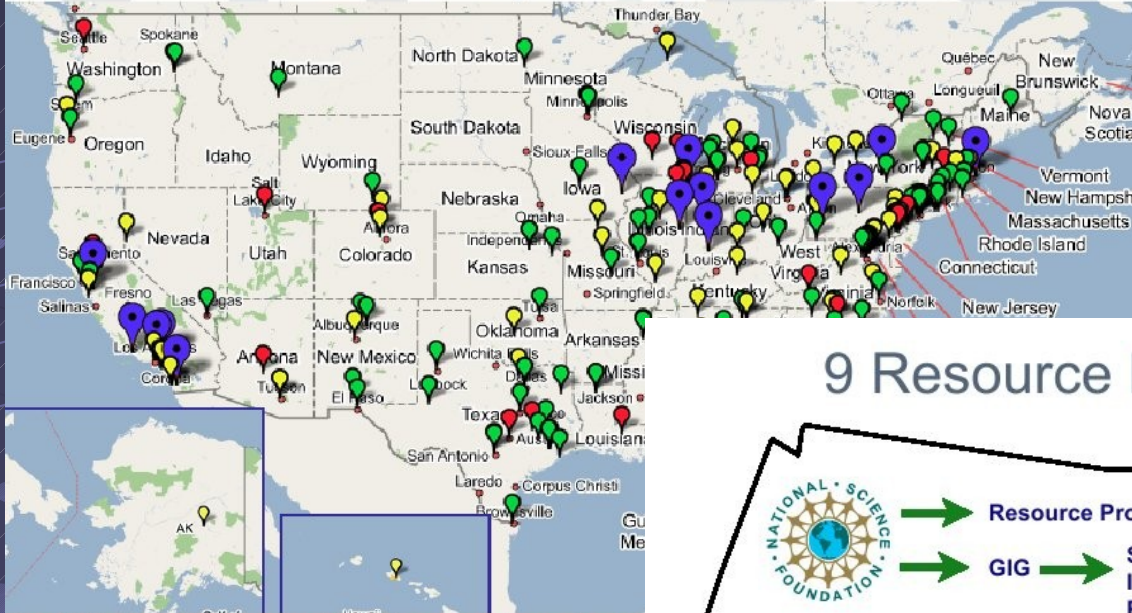


The GRID....

- 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

Teragrid – Science Grid in the USA

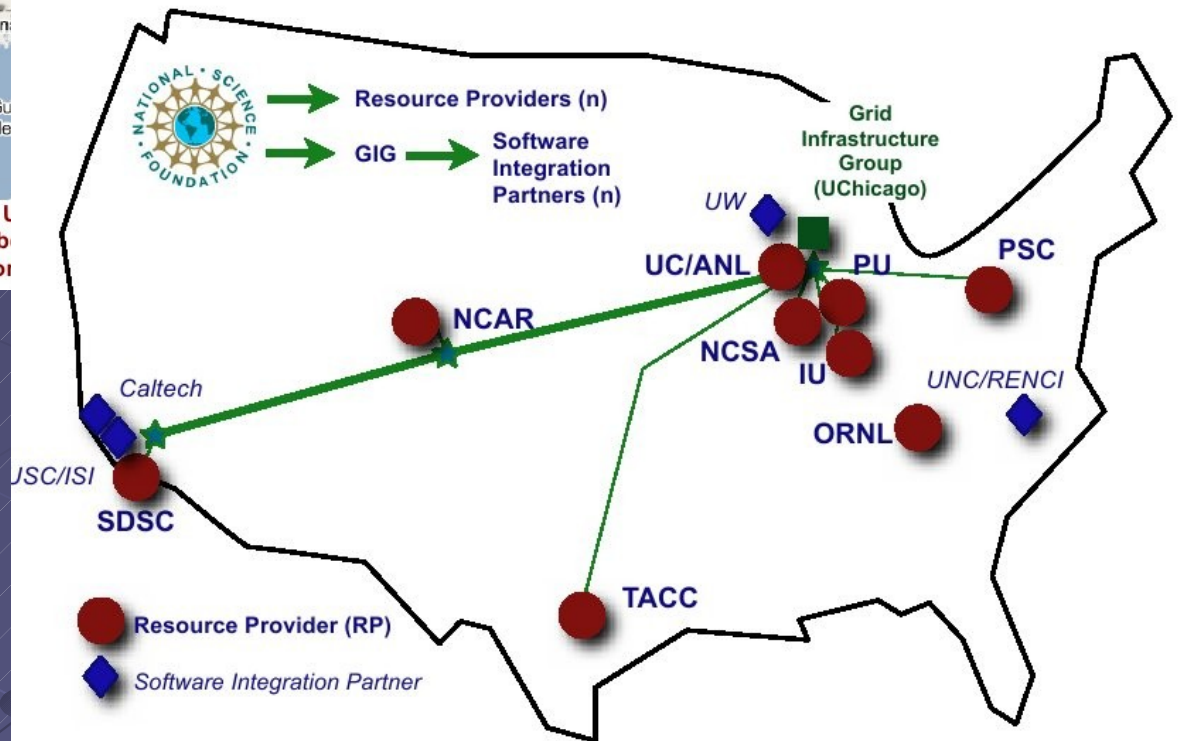
TeraGrid Projects by Institution



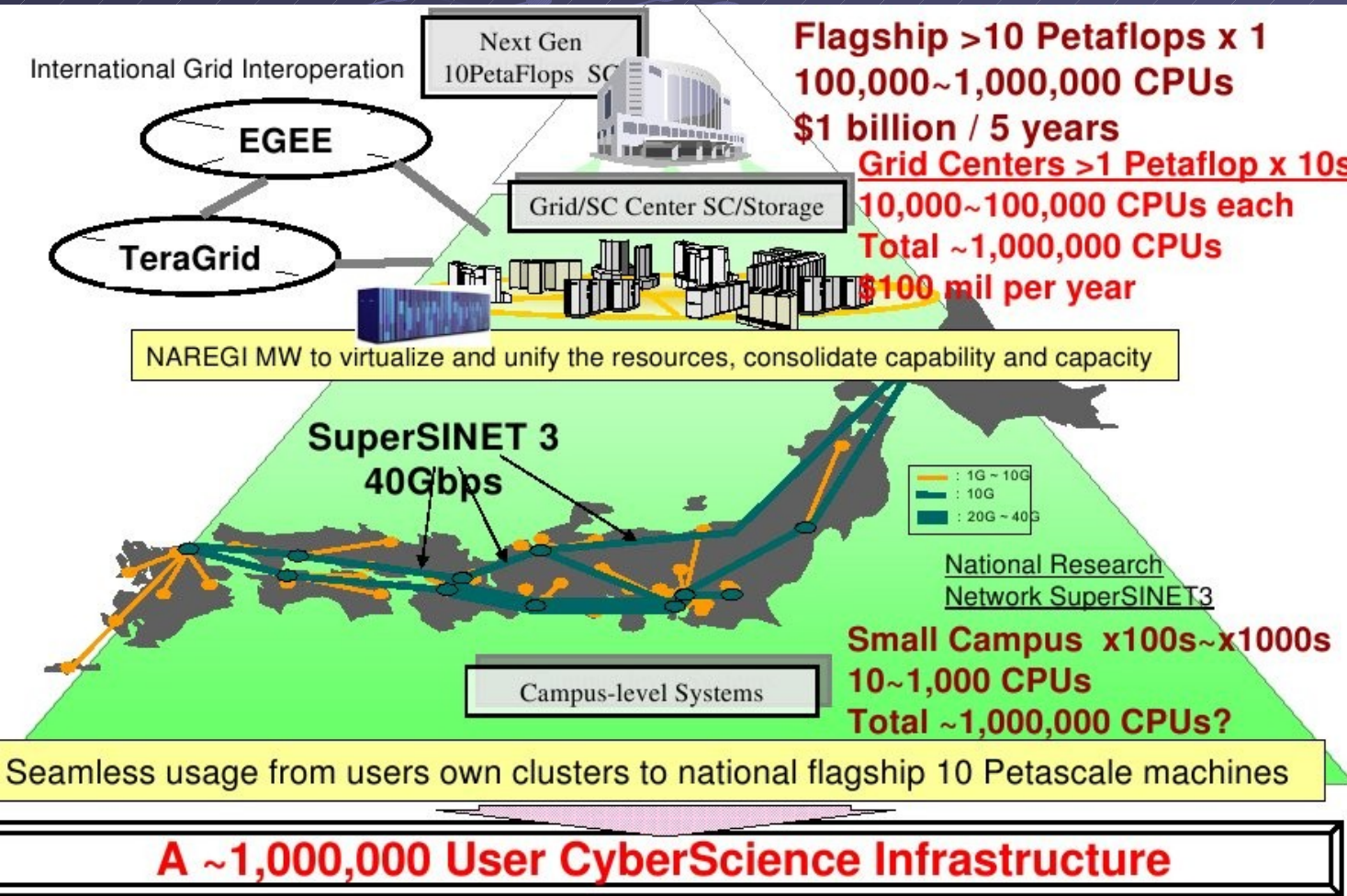
TeraGrid allocations are available to researchers at any U.S. institution by peer review. Exploratory allocations can be made through a biweekly review process. See www.teragrid.org

1000 projects (VOs),
4000 Users

9 Resource Providers, One Facility



NAREGI – Japanese Grid - the other example...



Seamless Network

Vertically (user to Supercomputing)

Horizontally (international connection)

With EGEE And Teragrid

Via GIN Grid Interface Network

Computerphysik

• Traditionell:

Theorie

Experiment/Beobachtung

• Modern:

Theorie

Computer-Experiment

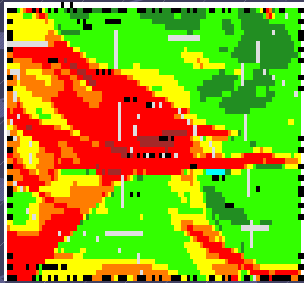
Beobachtung

Beobachtungen, die direkt nicht möglich sind!
Beobachtungen nicht existierender Objekte!

Computerphysik

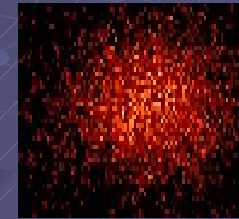
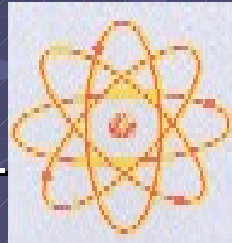
<http://www.fz-juelich.de/nic/Publicationen/Broschuere/Broschuere-d.html>

● Projekte am Jülich Supercomputing Centre (JSC)



Umwelt

Elementar-
Teilchen

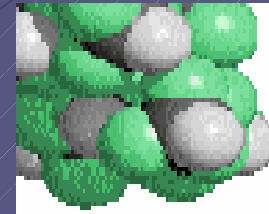


Astrophysik



Vielteilchen

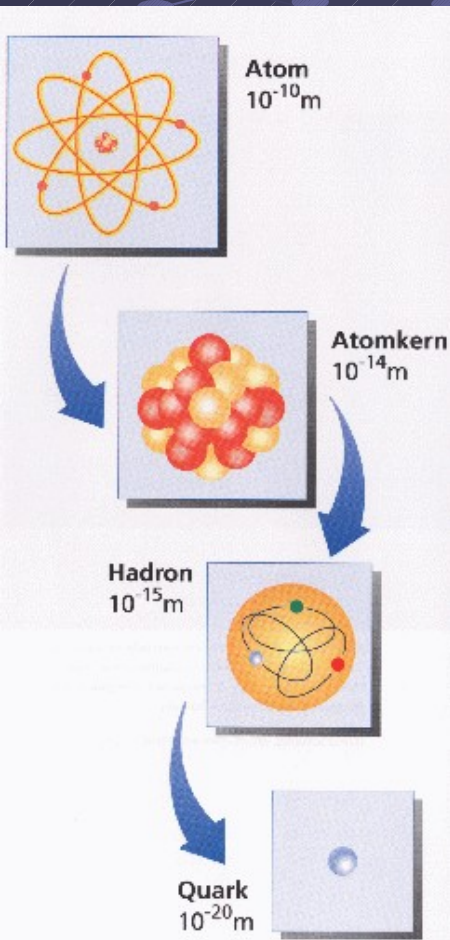
Polymere



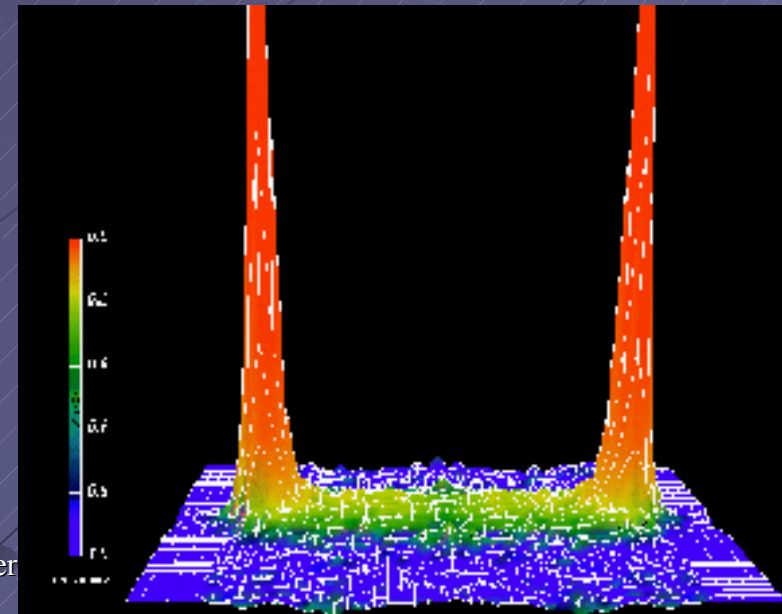
Chemie

Computerphysik - Teilchenphysik

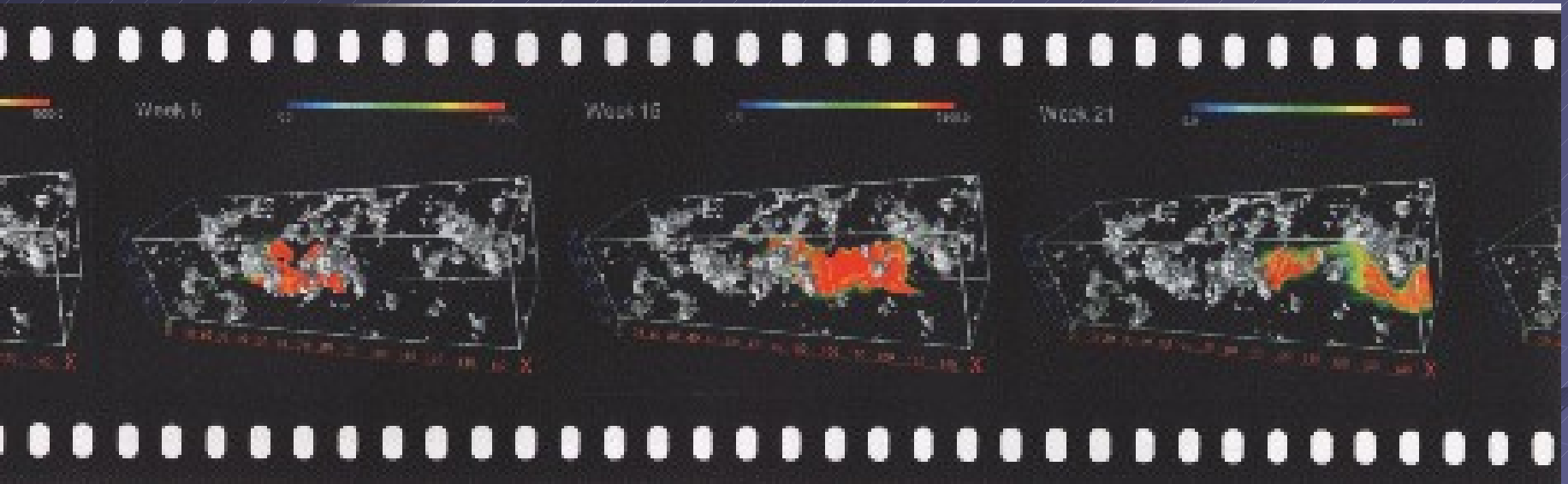
Nahezu die gesamte Masse der Atome ist im Atomkern konzentriert, der aus Protonen und Neutronen besteht und durch die starke Wechselwirkung zusammengehalten wird. Protonen und Neutronen (Hadronen) selbst sind wiederum aus drei Quarks aufgebaut, die durch den Austausch von Gluonen (glue = Klebstoff) zusammengehalten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



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.



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)

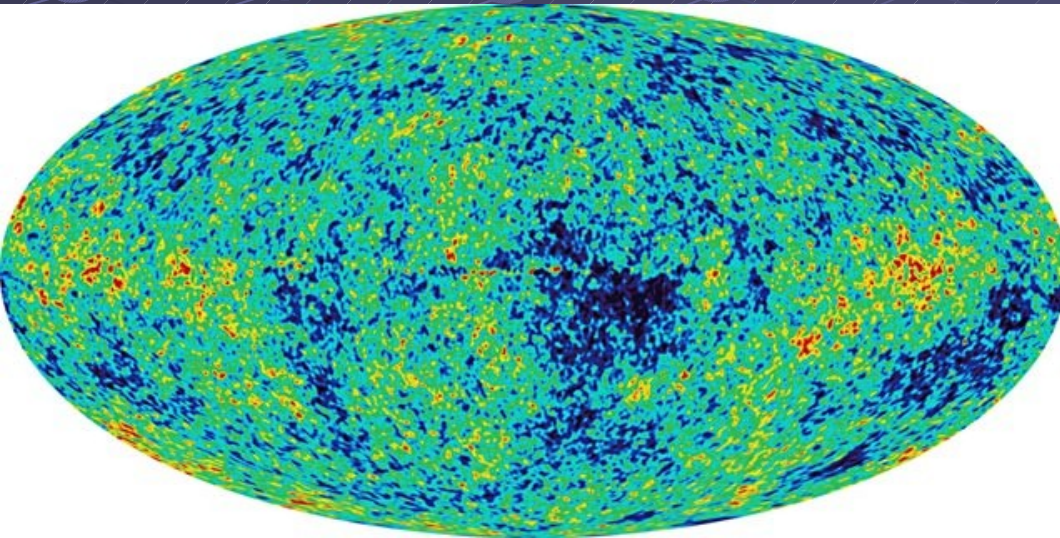
Computerphysik - Astrophysik

Kosmologie

Computerphysik - Astrophysik

● Strukturbildung im Universum

Im Jahre 100.000....



Wilkinson Microwave Anisotropy Probe (WMAP)

(Kosmischer
Mikrowellenhintergrund)

Dullemond/Spurzem SS10

Comp. Physik Univ. Heidelberg

...und ``heute''

A visualization of the Millennium Simulation, showing a vast field of particles. The particles are represented as small dots, with colors ranging from blue to red, indicating different temperatures or velocities. The overall structure is a complex, interconnected network of filaments and voids, characteristic of the cosmic web. A horizontal double-headed arrow is positioned above the text '1 Gpc/h', indicating the scale of the simulation.

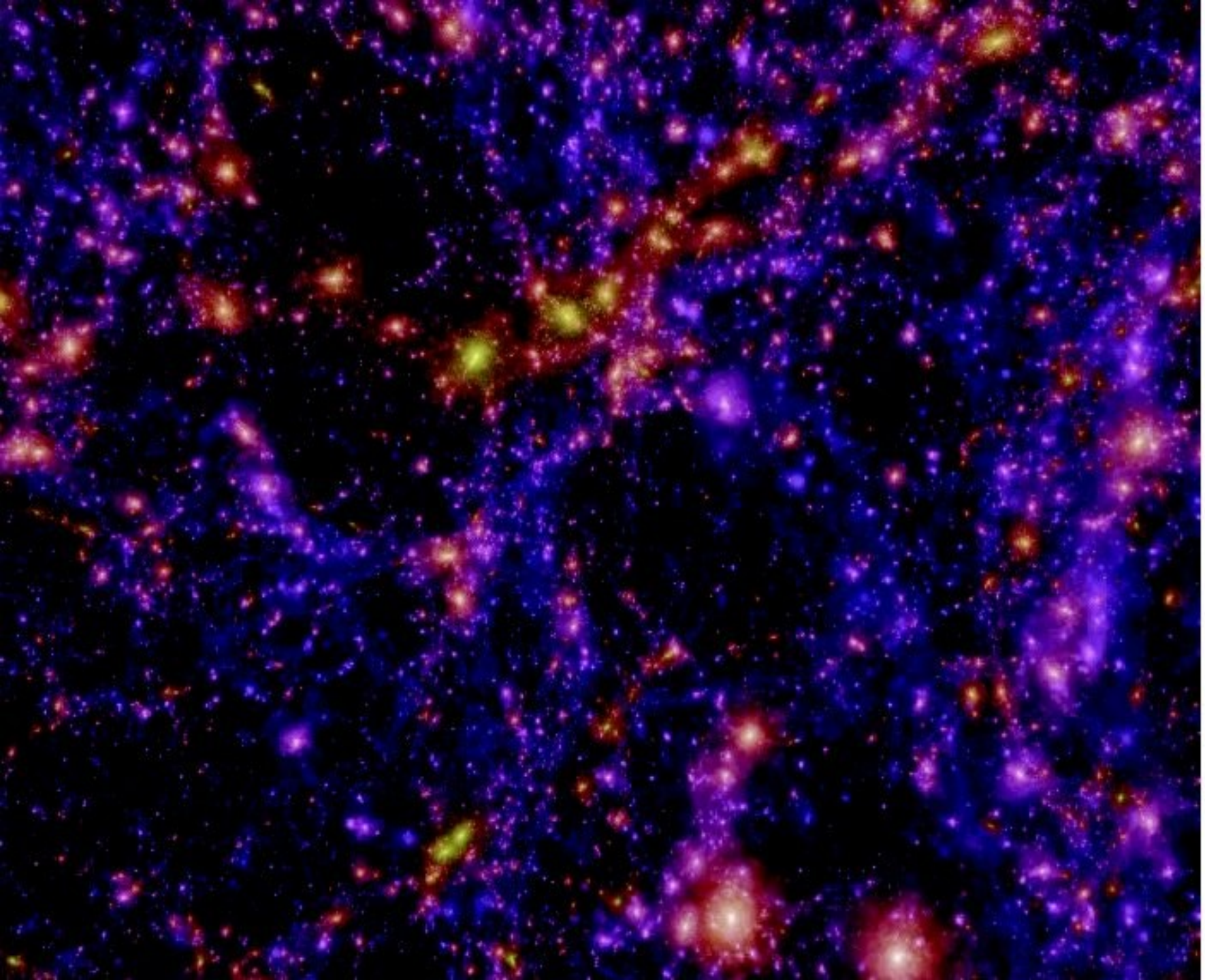
1 Gpc/h

Millennium Simulation

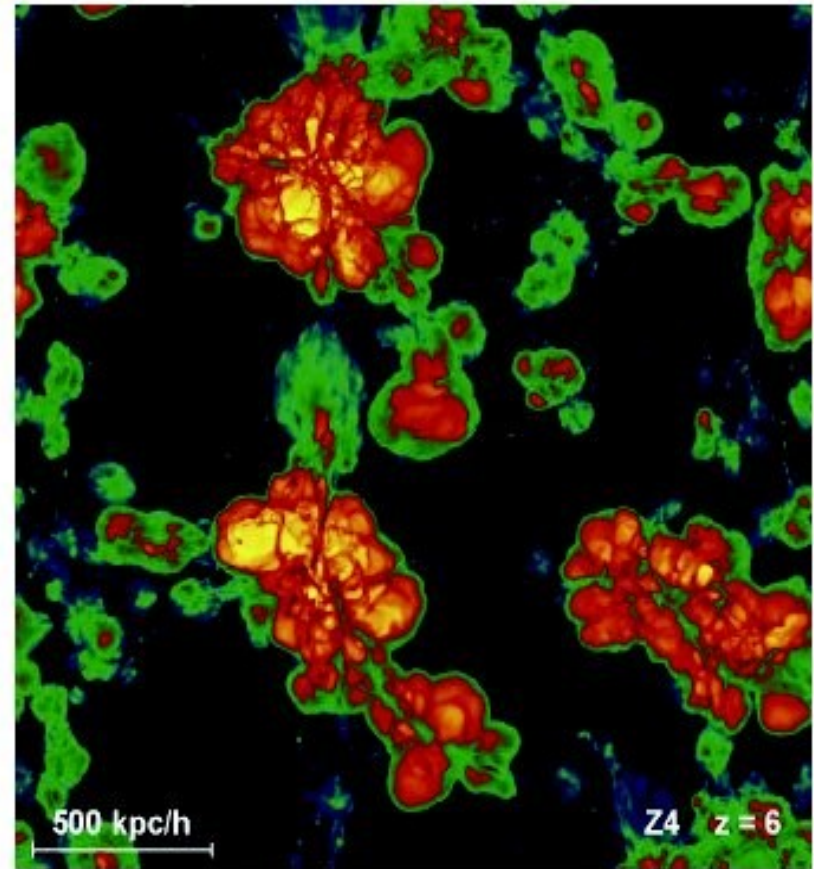
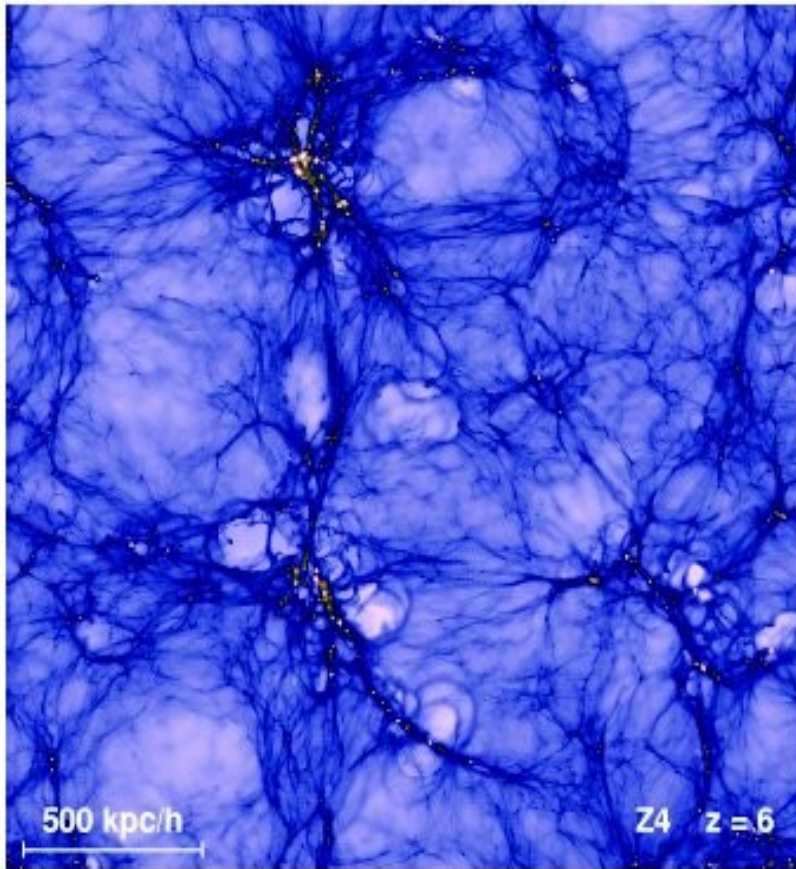
10,077,696,000 particles

($z = 0$)

Millennium Simulation (Springel et al.)

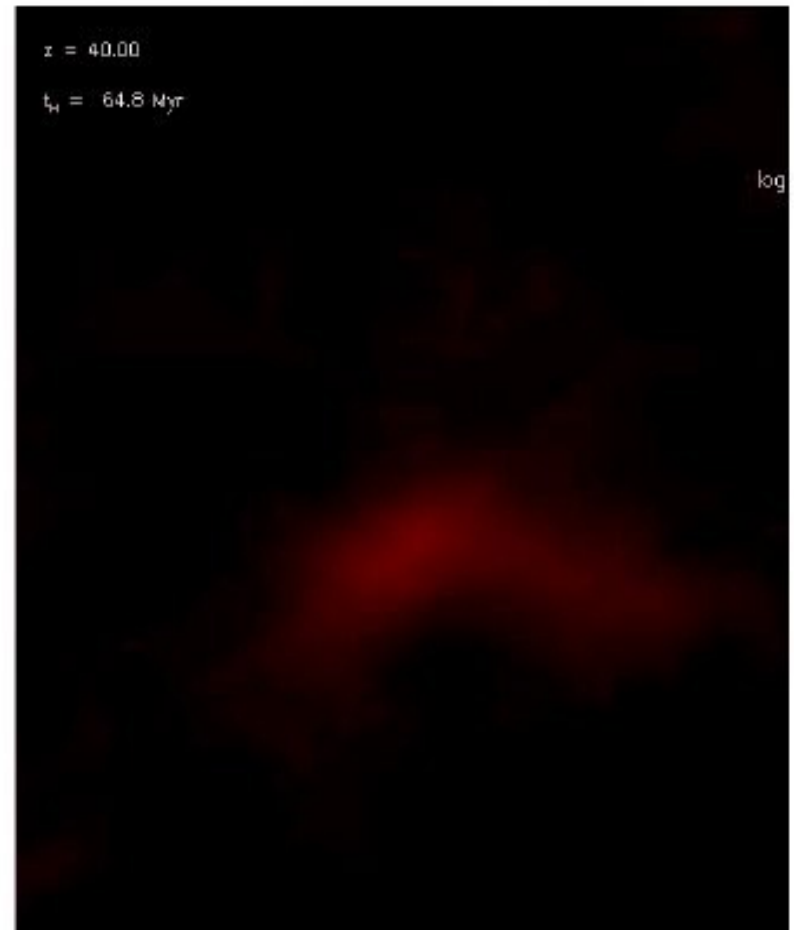
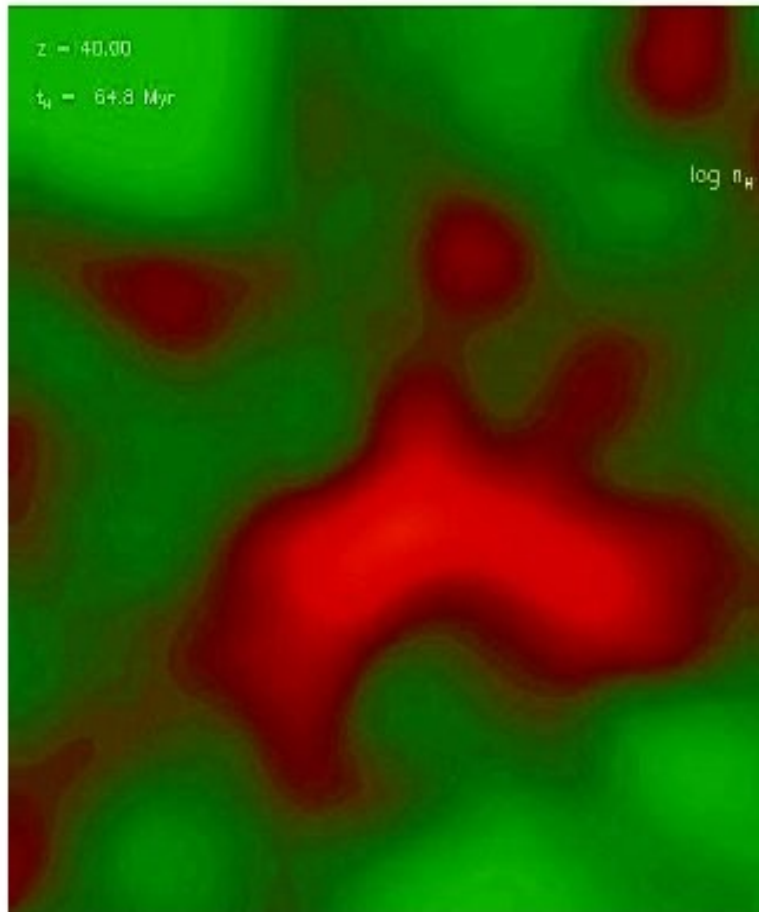


Challenges: mehr Physik



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

Galaxien



Galaxien- Entwicklung

NGC1232:

Nucleus

Bulge

Disk

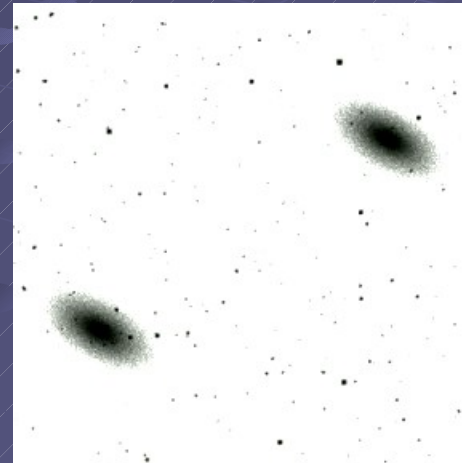
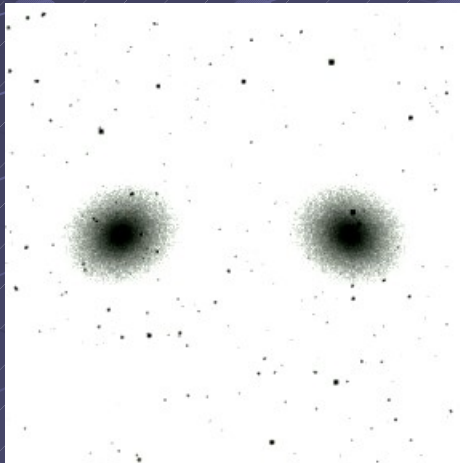
Wave Pattern

Star Formation

Satellites

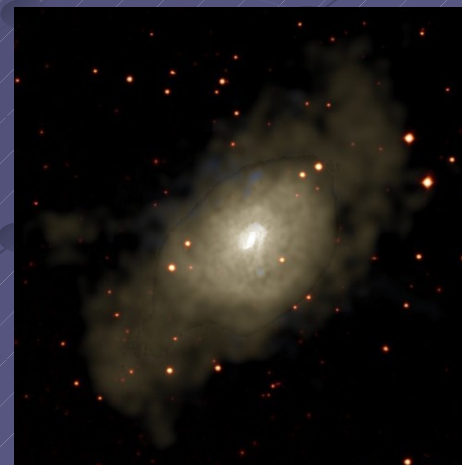
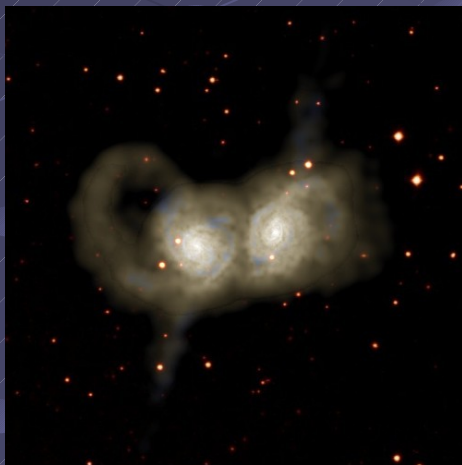
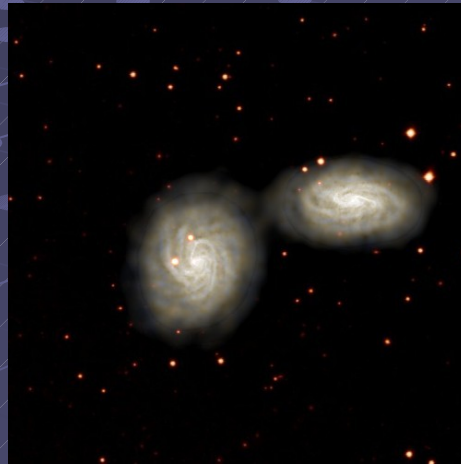
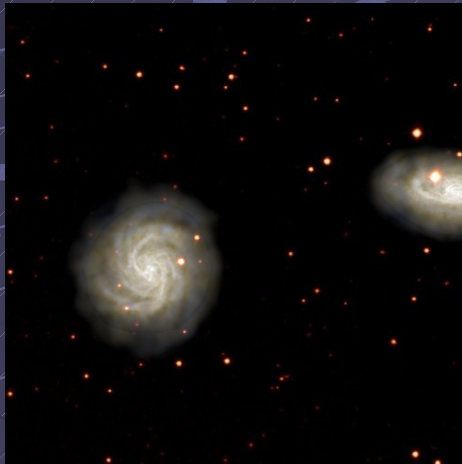
Computerphysik - Astrophysik

**Modelle von John Dubinski, Canadian Institute
for Theoretical Astrophysics**



Wie wird's gemacht? -> Vorlesung!

Computerphysik - Astrophysik



Gadget

(see webpage
Of Virgo)

(By V. Springel)

Gas Dynamics
Also treated
By Particles
(SPH)

Computerphysik - Astrophysik

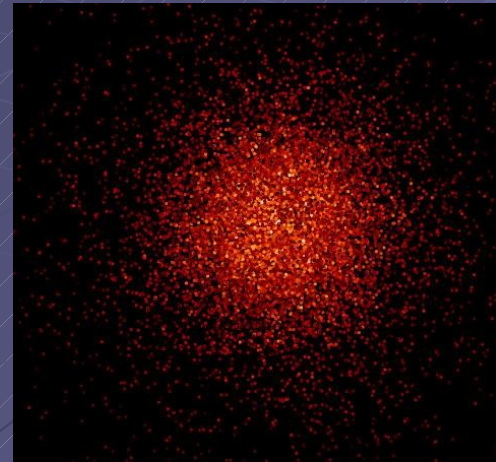
● Theorie:
Differentialgleichung

● Modell:
Diskretisierung

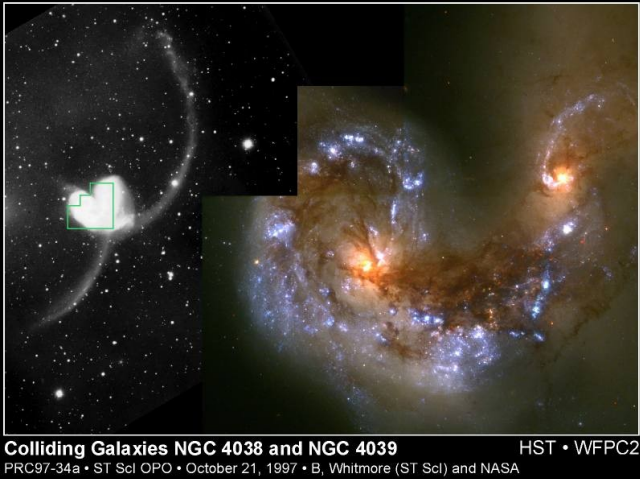
● Simulation:
Zeitablauf

● Ergebnisse:
Vergleich mit Beobachtung oder Theorie

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



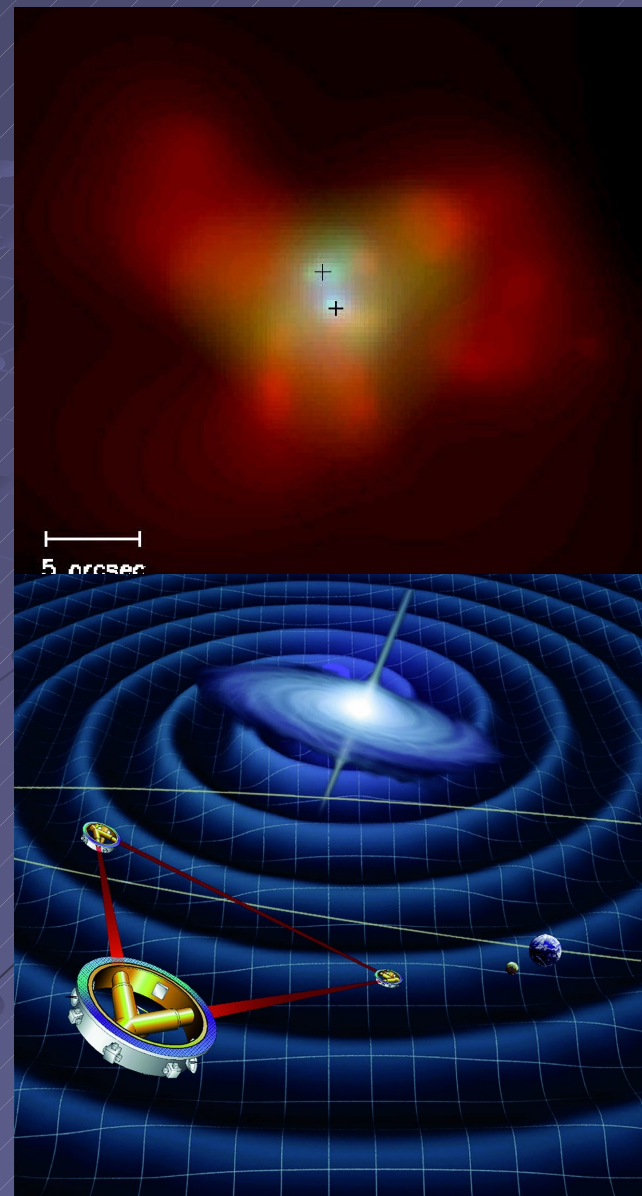
Computerphysik - Relativitätstheorie



Colliding Galaxies NGC 4038 and NGC 4039 HST • WFPC2
PRC97-34a • ST ScI OPO • October 21, 1997 • B. Whitmore (ST ScI) and NASA



Verschmelzung Massereicher Schwarzer Löcher Gravitationswellen

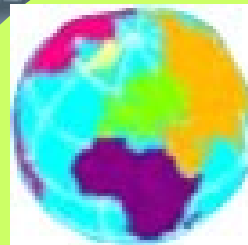
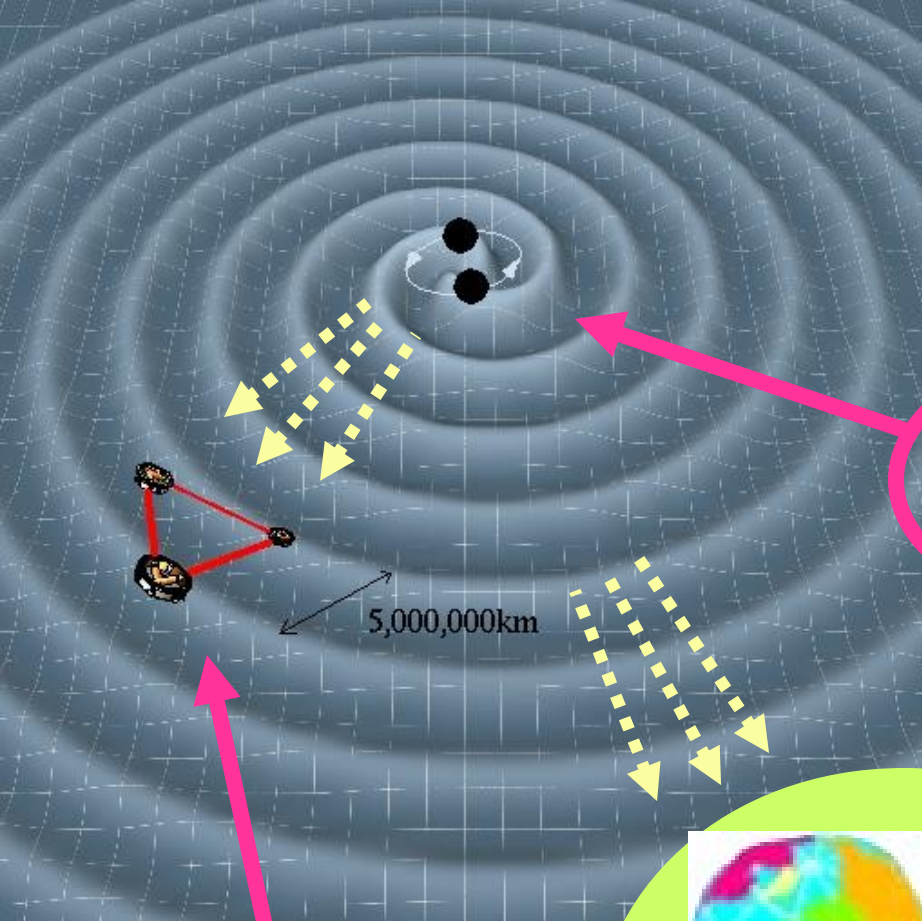


Direct Proof
still waiting

**Astrophysical
Sources**

**Terrestrial Detectors
VIRGO, LIGO, TAMA, AIGO**

**Space detectors
LISA**



EUROPEAN GRAVITATIONAL OBSERVATORY

EGO



Example: VIRGO Detector in Cascina near Pisa, Italy

Consortium of



Computerphysik - Relativitätstheorie

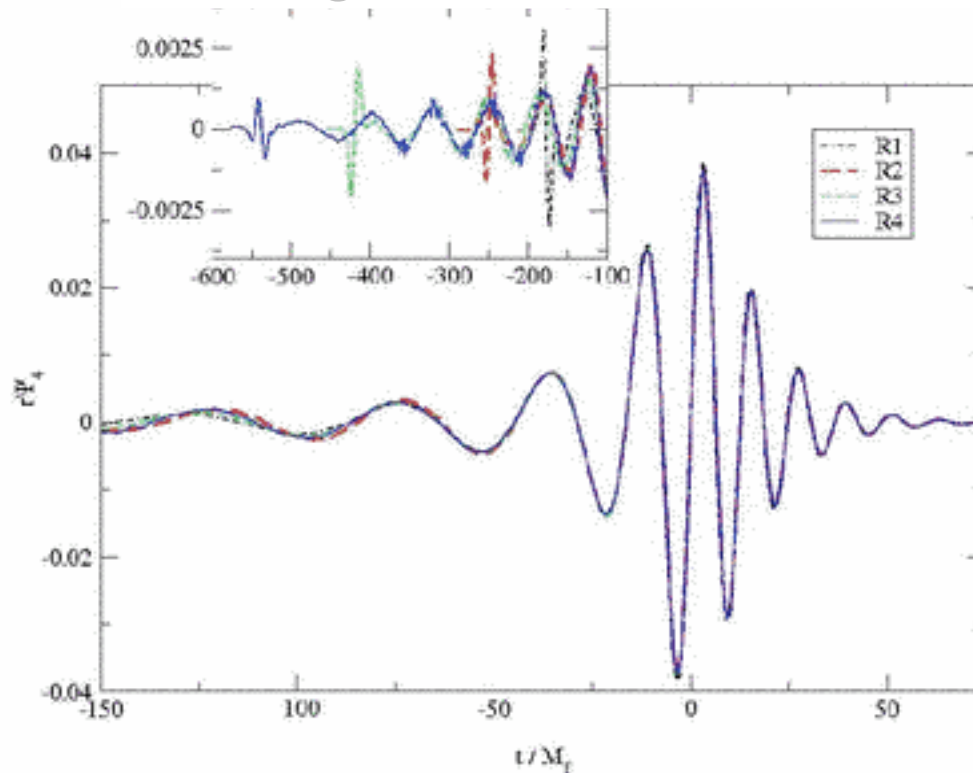


VIRGO – Pisa 3km
LIGO – Livingston, LA
Hanford, WA
1km
GEO600 – Hannover
600m
AIGO – Australien
(planned, 5 km)

<http://www.ligo-la.caltech.edu/>
<http://www.ego-gw.it>
<http://www.geo600.uni-hannover.de>

Outreach to 50 Millionen
light years (Neutron Stars)

Gravitationswellen-Spur der Verschmelzung Zweier Schwarzer Löcher – direkte Computer -Lösung der Einstein'schen Feldgleichungen!



Initial separations:

R1 = 6.5 M

R2 = 7.6 M

R3 = 8.5 M

R4 = 9.6 M

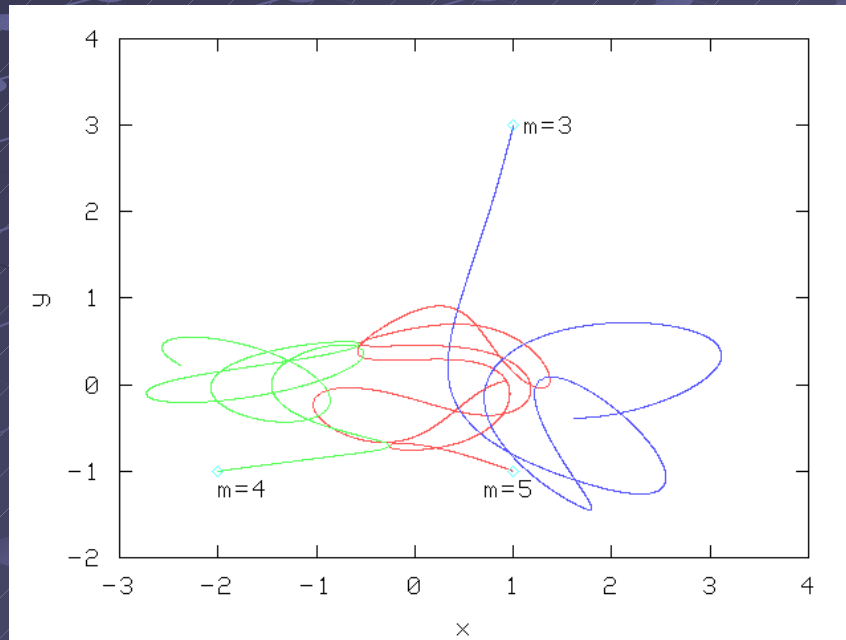
NASA-GSFC

Baker, Centrella, Choi, Koppitz, van Meter

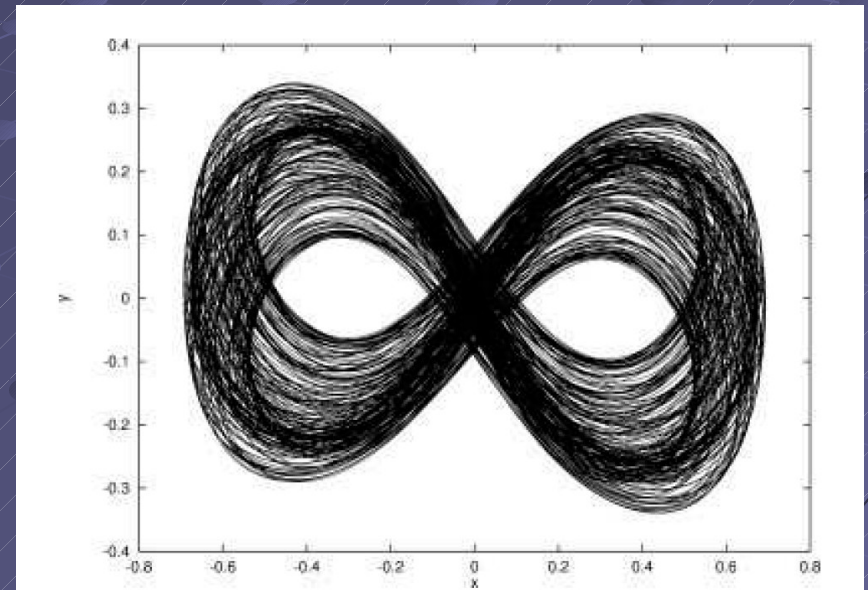
Phys.Rev. D73 (2006) 104002

3-Body Problems

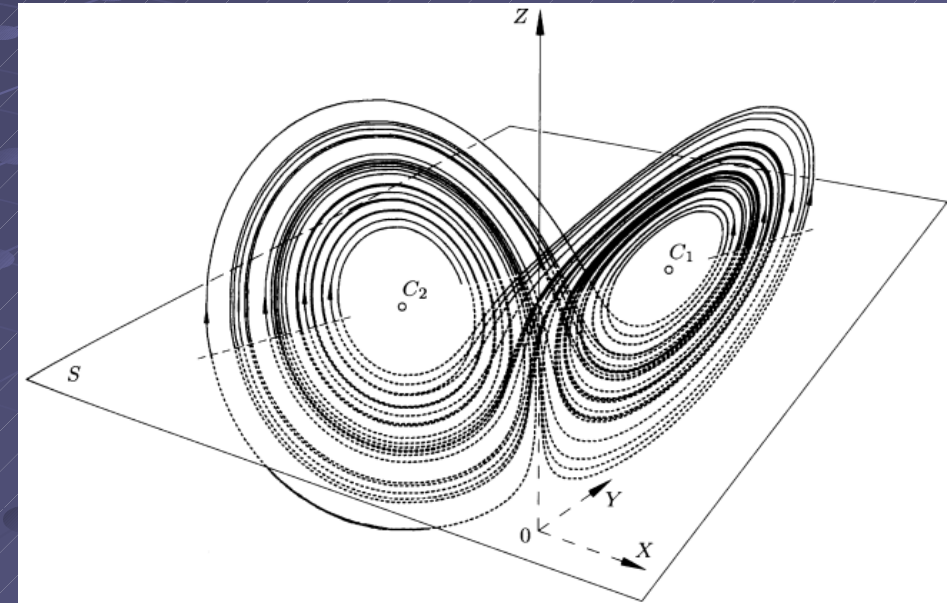
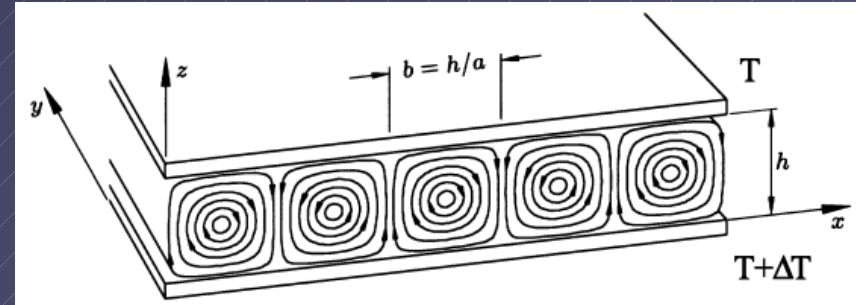
Burrau's Problem



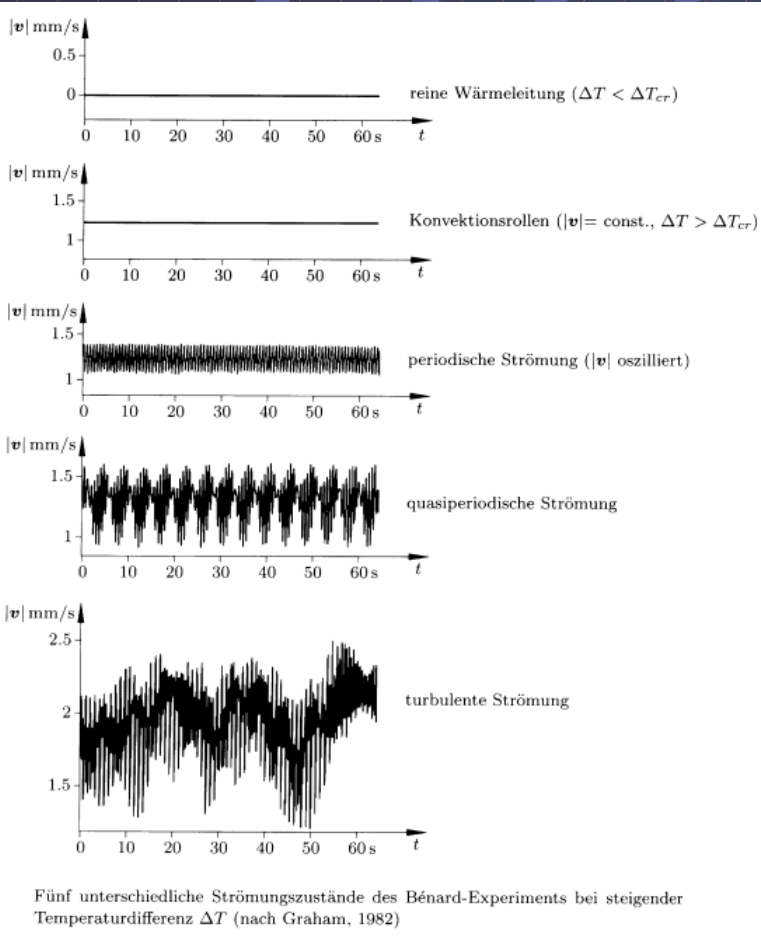
„The Eight“



Lorenz-Attraktor



Lorenz-Attraktor für $r = 28$, $\sigma = 10$ und $b = 8/3$.
 Der Trajektorienbereich, den die Ebene $Z = r - 1 = 27$ verdeckt, ist punktiert (Lanford, 1977)



Logistische Abbildung

