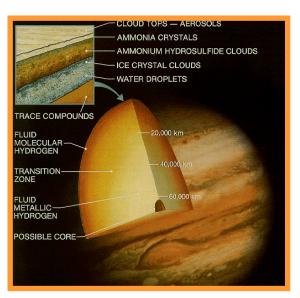
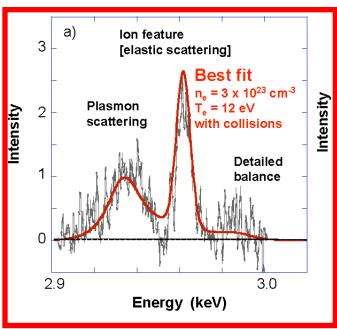
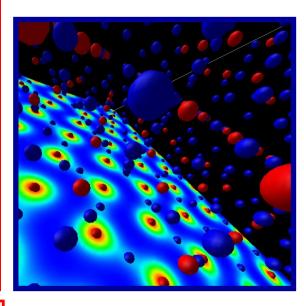
AG Statistische Physik

Prof. Ronald Redmer Materie unter extremen Bedingungen







Planetenphysik (solar/extrasolar):

C. Kellermann,
L. Scheibe, A.J. Poser,
J.M. Wissing
DLR Berlin

DLR Neustrelitz FSU Jena MPS Göttingen

Röntgen-Thomson-Streuung und Plasmadiagnostik:

Th. Bornath, M. Schörner, S. Kumar
DESY Hamburg
European XFEL Schenefeld
LLNL Livermore
SLAC Stanford
LULI Palaiseau

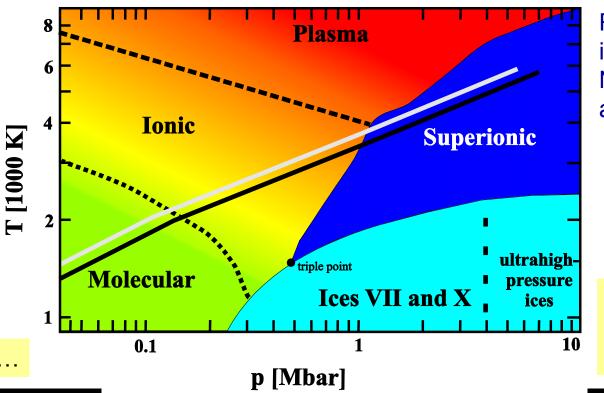
Ab-initio-Simulationen:

M. French, M. Preising,
A. Bergermann
ENS Lyon
Sandia National Laboratory
LANL Los Alamos

Methoden der Statistischen Physik und Vielteilchenphysik

Methoden, Zustandsgleichung, Phasendiagramm, Transport ...

Wasser-Phasendiagramm bei hohen Drücken



Relevant for the interiors of Neptune (black) and Uranus (white)

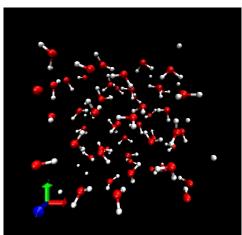
... and superionic water at 7 g/cm³ and 6000 K

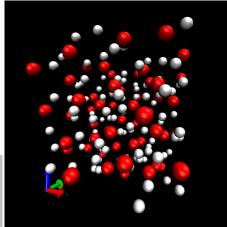
Normal ice...

EOS and phase diagram:

M. French et al., PRB **79**, 054107 (2009), Transport properties (diffusion, conductivity): M. French et al., PRB **82**, 174108 (2010)

see also C. Cavazzoni et al., Science **283**, 44 (1999), T.R. Mattsson, M.P. Desjarlais, PRL **97**, 017801 (2006), E. Schwegler et al., PNAS **105**, 14779 (2008)



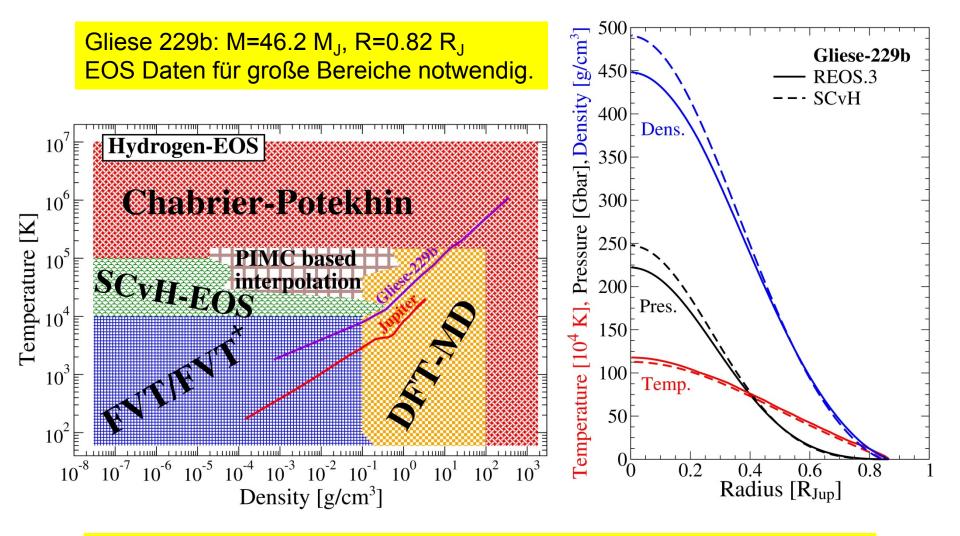


Planetenphysik und Astrophysik

Anwendung: solare und extrasolare Planeten, Braune Zwerge ...

Inneres von Braunen Zwergen mit LM-REOS

A. Becker et al., ApJS **716**, 1 (2015) 11/2017-02/2019: Experimente bei NIF, LLNL/USA



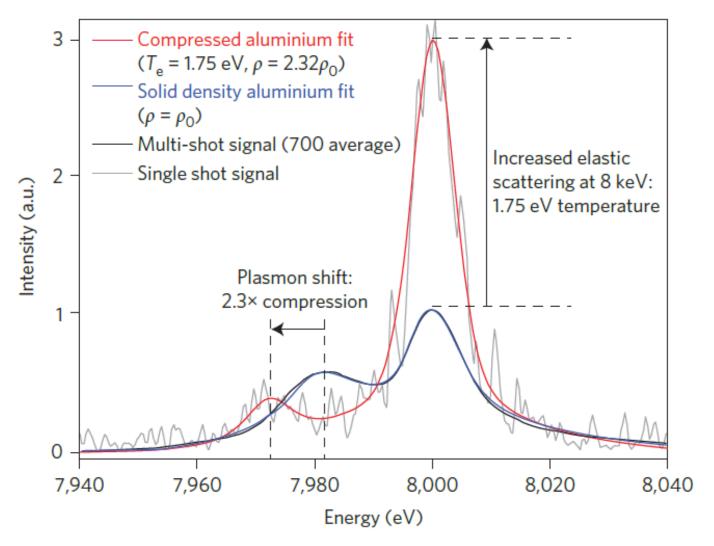
Density, pressure and temperature along the isentrope of Gliese 229b.

Diagnostik dichter Plasmen

Experiment: FLASH, LCLS, NIF, Röntgen-Thomson-Streuung ...

Röntgen-Thomson-Streuung

Experimentelle Resultate zu Al



L.B. Fletcher et al., Nature Phot. **9**, 274 (2015)

Zusammenfassung

Methoden der statistischen Physik, Theorie stark korrelierter Systeme

Ab-initio-Simulationen für Materie unter extremen Bedingungen

Eigenschaften/Aufbau/Evolution solarer und extrasolarer Planeten, Brauner Zwerge

Plasmadiagnostik: Thomson-Streuung

Themen Bachelorarbeiten AG Statistische Physik Sommersemester 2021

Machine-Learning Ansatz für Ab-initio-Simulationen Maximilian Schörner, Ronald Redmer

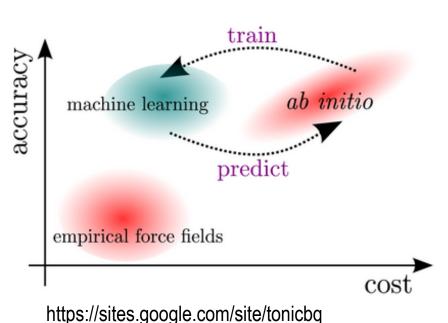
- DFT-MD-Simulationen sind "teuer"
- Übersetzen in klassische MD mit effektiver WW?
- Hier: Nutzung von Machine Learning

Berechnung der atmosphärischen Ionisation durch Teilcheneinfall während einen Elektronenereignisses Jan Maik Wissing, Ronald Redmer

- DLR-Institut f
 ür "Solar-Terrestrische Physik" Neustrelitz
- Coronale Massenauswürfe der Sonne → Polarlichter
- Modellierung der Ionisation bei einem Extremereignis



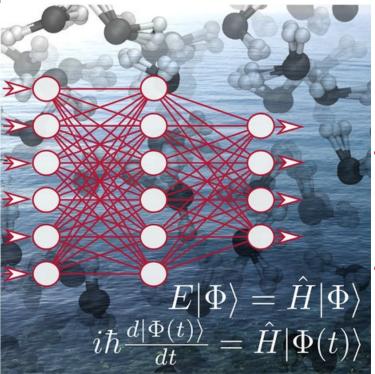
Machine-Learning Ansatz für Ab-initio-Simulationen



- DFT-MD-Simulationen berücksichtigen QMund Vielteilcheneffekte
- Sie sind "teuer" und langsam, da der DFT-Zyklus in jedem MD-Schritt ausgeführt wird
- Mit klassischen MD-Simulationen k\u00f6nnen sehr gro\u00dfe Systeme betrachtet werden
- Klassische Paarpotentiale berücksichtigen nur eingeschränkt QM- und Vielteilcheneffekte
- Machine-Learning ermöglicht das "Lernen" von DFT-MD-Interaktionen in kleinen Systemen
- Erlernte Interaktion wird auf große MD-Simulationen übertragen



Machine-Learning Ansatz für Ab-initio-Simulationen



PNAS January 22, 2019 116 (4) 1110-1115

Aufgaben:

- Grundlagen f
 ür neuronale Netze lernen
- Implementierung in verwendetem Code verstehen (eigenständige Recherche)
- Code installieren und Schnittstelle zu unseren DFT-MD-Ergebnissen bauen
- Funktionalität testen

Hilfreiche Skills:

- Interesse an künstlicher Intelligenz
- Interesse am Programmieren (Erfahrung mit Python und Linux wäre gut)

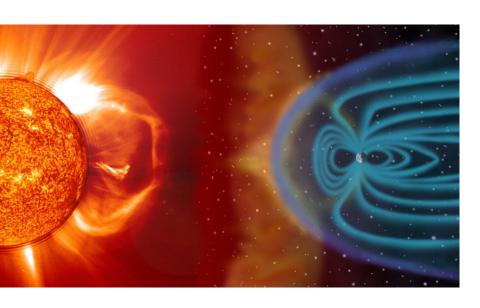
Warum dieses Projekt?:

- "Cutting edge research": Technologie der Zukunft
- Enge Zusammenarbeit mit aktuellen Projekten unserer AG

Literatur:

- Anwendung: PNAS, 116 (4) 1110-1115 (2019)
- Code: J. Chem. Theory Comput. 2019, 15, 3, 1827–1840
- Source Code: https://github.com/CompPhysVienna/n2p2

Bachelorarbeit: Berechnung der atmosphärischen Ionisation durch Teilcheneinfall während eines Elektronenereignisses



Im Nachgang des stärksten
Teilchenereignisses im Satellitenzeitalter
wurde am 20. November 2003 Polarlicht
über Griechenland gesichtet. Da Polarlicht
durch aus dem Weltall einfallende
Teilchen erzeugt wird, ist somit von einem
Teilcheneinfall bis in niedere Breiten
auszugehen, die normalerweise vom
Erdmagnetfeld abgeschirmt werden.

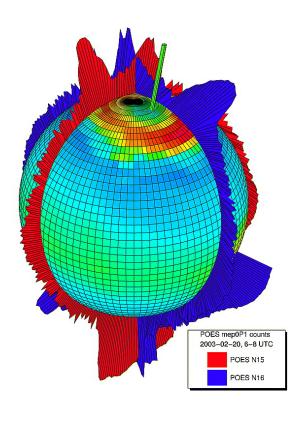
Aufgabe: Um dieses Teilchenereignis mithilfe von Klimamodellen analysieren zu können, wird die zugehörige atmosphärische Teilchenionisation benötigt, die im Rahmen des Projekts ermittelt werden soll.



Bachelorarbeit: Berechnung der atmosphärischen Ionisation durch Teilcheneinfall während eines Elektronenereignisses

Es kann hierbei auf an der Uni Rostock vorhandene Modelle (AIMOS/AISstorm) zurückgegriffen werden, wobei die Hauptaufgabe in der Anpassung der typischen Einfallsmuster an das in seiner Ausdehnung einmalige Ereignis besteht. Hierbei ist ein Vergleich mit Satellitendaten notwendig. Für die eigentliche Berechnung der Ionisationsraten stehen etablierte mathematische und informatische Methoden zur Verfügung, wobei abzuklären ist, ob die Ergebnisse des Projekts auch Eingang in den Entwicklungszweig nehmen oder separat davon ausgeführt werden.

Das Projekt bietet Einsichten in die Physik des erdnahen Weltraums, der Atmosphäre, Ionisationsmodellierung sowie Geant4 Monte-Carlo-Simulationen.



Anforderungsprofil: Programmierkenntnisse (vorhandene Modelle in C++, eigene Auswertung mit Programmiersprache eigener Wahl) und keine Angst im Umgang mit großen Datenmengen werden vorausgesetzt.