

# Calculs *ab initio* en chromodynamique quantique sur Blue Gene

## II. L'approche « twisted mass »

Jaume Carbonell



IDRIS, 24 juin 2010

# Menu

I. Quelques redites

II. LQCD un chemin plein d'embûches

III. Tous les chemins mènent-ils à Rome ? (ETMC)

IV. Quelques résultats

- Spectres
- Facteurs de forme
  - $g_A$
  - $r^2(N)$
- weak decay constants

Dans la longue « **saga des poupées gigognes** » que l'on nous raconte depuis des décennies à propos de la structure de la matière

Molécules formées d'atomes,  
Atomes formés d'un noyau et des e,  
Noyaux formés de protons et neutrons,  
Protons et neutrons formés de quarks...



### **la Nature a fini par nous jouer un sacré tour de passe-passe**

Jusqu'à maintenant la masse des objets composés était – à de petites perturbations près - la somme des masses de leurs composants

atome d'H  $M_H = m_p + m_e + o(0.000001)$

noyau de deuterium  $M_d = m_p + m_n + o(0.001)$

Or tout le monde sait que le proton est « formé » de 3 quarks, mais...

- la masse des trois quarks est de 10 MeV ...alors que le proton en pèse 940 MeV

- les « composantes » du proton n'existent pas isolément

...un peu comme les pôles qui « forment » un dipôle magnétique

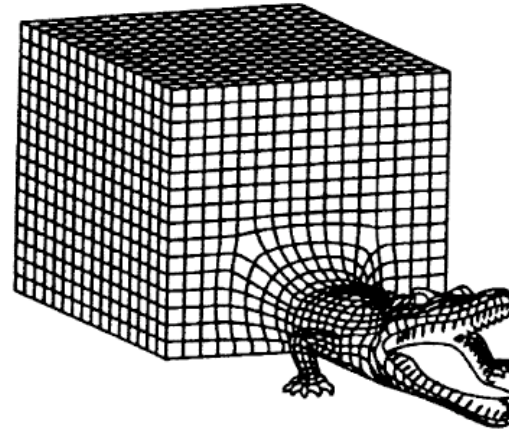
Ce sont les briques qui font la maison ou c'est la maison qui fait les briques ?

**Ce sont les notions mêmes de « masse » et « composant » qui en prennent un coup**

# I. Quelques redites

Le but est de résoudre sur ce « réseau » une version discrétisée de QCD (ou autre QFT)

L	T	V
16	32	130 000
24	48	660 000
32	64	2 100 000
48	96	10 600 000



Ici le « réseau » n'est pas une « grid » mais l'espace-temps discrétisé en  $V=L^3 \times T$  sites

Sur chaque site:

- 4 matrices de  $SU(3)$

(gluons)

$$U_\mu(x) = \exp \left\{ \frac{ia g}{2} \sum_{c=1}^8 \int_0^1 d\tau A_\mu^c(x + a\tau\mu) \lambda^c \right\} \in SU(3)$$

-  $3 \times 4 \times N_s$  « champs » complexes

(quarks)

$$q_f(x) = \begin{pmatrix} q_f^b(x) \\ q_f^r(x) \\ q_f^g(x) \end{pmatrix} = \left( \begin{array}{c} \left( \begin{array}{c} \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \end{array} \right) \\ \left( \begin{array}{c} \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \end{array} \right) \\ \left( \begin{array}{c} \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \end{array} \right) \end{array} \right) \quad f = 1, \dots, 6$$

# Les étapes d'un calcul de QCD sur réseau

1. Générer une ensemble statistique de “configurations de jauge”  $U = \{U_\mu(x), x \in V\}$  suivant un loi de probabilité

$$p(U) = \det[D(U)] e^{-S_g[U]}$$

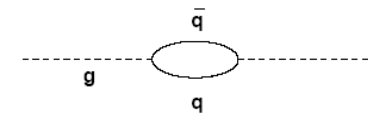
Où **D** est l'opérateur (de Dirac) qui apparait dans  $\mathcal{L}_{QCD} = \sum_{s=1}^6 \bar{q}_s D(U) q_s + \mathcal{L}_g(U)$

Paramètres:  $m_q, \beta(\text{“a”})$  avec  $q=u,d,c,s,\dots$

Une fois discretisé, **D** est une matrice complexe de dimension  $d=3 \times 4 \times V$

C'est la partie héroïque du calcul (Ph. Boucaud), à cause de  $\det(D)$

$N_f$  designe le nombre de  $q$  dans les boucles



On a besoin de  $N \sim 5000$  “confs” x “a” x “m”

L	T	Giga
24	48	0.4
32	64	1.2
48	96	6.1
64	128	19.3

Sans HPC, point de salut (BG/P)

# Les étapes d'un calcul de QCD sur réseau

## 2. "Propager" les quarks dans ce "fond", i.e. calculer

$$S_{ss'}^{cc'}(x) = \langle 0 | q_s^c(x) \bar{q}_{s'}^{c'}(0) | 0 \rangle$$



Pour une conf, on est ramené à la résolution d'un système linéaire

$$D_{s's}^{c'c}(x, y) S_{ss''}^{cc''}(y) = \delta^{c'c''} \delta^{s's''} \delta(x)$$

de taille conséquente, e.g. pour L=32 dim(D)=50 millions de réels\*8

Les « propagateurs » S sont les objets de base de la théorie, assez encombrants

L	T	Giga/quark
24	48	1.5
32	64	5.
48	96	25

qui se comptent aussi par milliers .... car il faut moyener sur les confs (U)

$$S(x, 0) = \langle 0 | q(x) \bar{q}(0) | 0 \rangle = \int dU_\mu(x) D^{-1}(x, 0) \det[D(U)] e^{-S_g[U_\mu]} \approx \sum_U S(x)$$

# Les étapes d'un calcul de QCD sur réseau

## 3. Calculer les observables

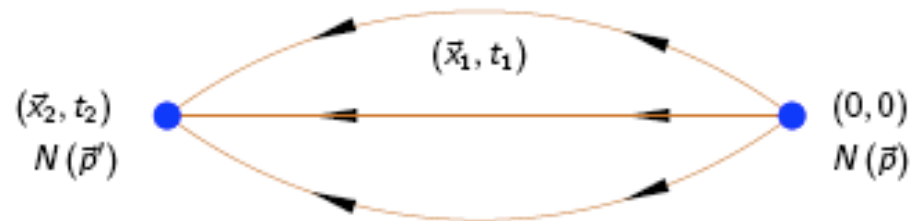
- masses
- Fonctions de structure (facteurs de forme , PDF, GPD)
- decay constants
- ....

On se ramène toujours à de « simples » manipulations algébriques avec les S

**Exemple:** calcul de la masse de N:

Créer N en 0      $\bar{N}_a \equiv \epsilon^{ijk} (\bar{u}^i C \gamma_5 \bar{d}^j) \bar{u}_a^k$   
 Annihiler N en x      $N_a \equiv \bar{\epsilon}^{ijk} (u^i C \gamma_5 d^j) u_a^k$

Obtenir les masses en propageant N de  $x \leftarrow 0$



$$C_{ab}(x) = \langle 0 | N_a(x) \bar{N}_b(0) | 0 \rangle$$

D'après le Th. de Wick, cette valeur moyenne se ramène à des sommes de produits de S, e.g; pour p

$$C_{ss'}^p(x) = -\epsilon^{abc} \epsilon^{a'b'c'} \left\{ -S_u^{cc'} [\Gamma^N S_d^{bb'} \tilde{\Gamma}^N]^T S_u^{aa'} + S_u^{ca'} \text{Tr}(S_u^{ac'} [\Gamma^N S_d^{bb'} \tilde{\Gamma}^N]^T) \right\}$$

L'intérêt de C vient de ce que  $C_{\alpha\beta}(t) = \sum_{\vec{x}} S_{\alpha\beta}(x) \sim e^{-aM_1 t}$

Calculs pas très longs

Sa difficulté vient de la taille de S (L=48, u+d+s=75 Go) et de ce qu'il faut moyener sur plusieurs centaines

## II. LQCD un chemin plein d'embûches

Une activité plusieurs fois enterrée,  
car devant faire face à des *“obstacles et vices insurmontables”*, e.g.

- Fermion double counting
- Mauvaises propriétés chirales
- Impossibilité des calculs “unquenched”
- Impossibilité d'utiliser les quarks physiques (“Berlin wall”)
- .....

**Eppur, si muove !**

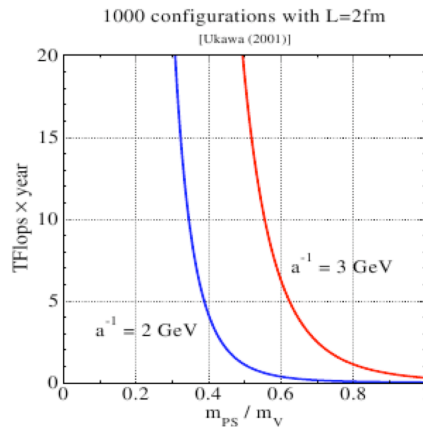


Leurs progrès ont été depuis lents mais constants.

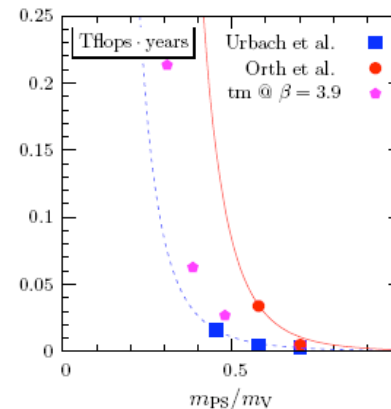
Fermion double counting:  
Mauvaises propriétés chirales:  
Approximation "quenched":  
"Berlin wall"

fermions naifs → fermions de Wilson  
fermions de Wilson → Overlap  
"unquenched" avec saga HMC  
Algorithmes, Twm

2001



2006



Ils ont atteint maintenant un haut degré de fiabilité, une précision de quelques % et plus personne (?) ne doute qu'ils soient l'outil incontournable pour résoudre la QCD ainsi que toute Théorie Quantique des Champs avec  $g > 1$

Int. Conf. Lattice 2010 (semaine dernière en Sardaigne): calcul du noyau d'He !!

Leur seul vrai défaut est d'être un peu chers, ...rien à voir avec les expériences !

### III. Tous les chemins mènent ils à Rome ?

Le but de LQCD est de reproduire sur un réseau discret les propriétés de le QCD continue

En particulier les symétries fondamentales de celle-ci:

1. Invariance de Lorentz
2. Invariance de jauge
3. Chiralité .....

A maille « a » non nulle et V fini seule 2 est OK, et on s'attend à retrouver les autres si  $a \rightarrow 0$  et  $V \rightarrow \infty$

Il existe plusieurs discrétisations de QCD, satisfaisant a un degré plus ou moins élevé ces exigences. Elles sont a l'origine des différentes collaborations.

Pami celles-ci **ETMC**, pour  
**European Twisted Mass Collaboration**

<http://www-zeuthen.desy.de/~kjansen/etmc/>

Regroupe **9 pays** européens (~50 chercheurs)  
autour d'une discrétisation de QCD  
dite « twisted mass »

Un taille inhabituelle pour les théoriciens !

- **Cyprus (Nicosia)**  
*C. Alexandrou, M. Constantinou, T. Korzec, G. Koutsou*
- **France (Orsay, Grenoble, CEA)**  
*R. Baron, B. Blossier, Ph. Boucaud, M. Brinet, J. Carbonell, V. Drach, P. Guichon, P.A. Harraud, M. Papinutto, O. Pène*
- **Italy (Rome I,II,III, Trento)**  
*P. Dimopoulos, R. Frezzotti, V. Lubicz, G. Martinelli, G.C. Rossi, L. Scorzato, S. Simula, C. Tarantino, A. Vladikas*
- **Netherlands (Groningen)**  
*A. Deuzeman, E. Pallante, S. Reker*
- **Poland (Poznan)**  
*K. Cichy, A. Kujawa*
- **Spain (Barcelona, Sevilla, Valencia)**  
*F. De Soto, V. Giménez, F. Mescia, D. Palao, J. Rodríguez Quintero*
- **Switzerland (Bern)**  
*U. Wenger*
- **United Kingdom (Cambridge, Glasgow, Liverpool)**  
*Z. Liu, G. McNeile, C. Michael, A. Shindler*
- **Germany (Berlin/Zeuthen, Hamburg, Münster)**  
*S. Dinter, F. Farchioni, X. Feng, J. González López, G. Herdoiza, K. Jansen, I. Montvay, G. Münster, M. Petschlies, D. Renner, T. Sudmann, C. Urbach, M. Wagner*



# Twisted mass quarks

$$\bar{\psi}(x) \left[ \gamma_\mu \overleftrightarrow{\nabla}_\mu + m - \frac{a}{2} \sum_\mu \nabla_\mu^* \nabla_\mu \right] \psi(x)$$

Ajout d'un terme de « masse imaginaire » dans l'action

Frezzotti, Grassi, Sint, Weisz, 1999

Frezzotti, Rossi, 2003

Frezzotti, Martinelli, Papinutto, Rossi, 2005

$$\bar{\chi}(x) \left[ \gamma_\mu \overleftrightarrow{\nabla}_\mu + m + i\mu\gamma_5\tau^3 - \frac{a}{2} \sum_\mu \nabla_\mu^* \nabla_\mu \right] \chi(x)$$

Dans le continu les deux formulations sont équivalentes pourvu

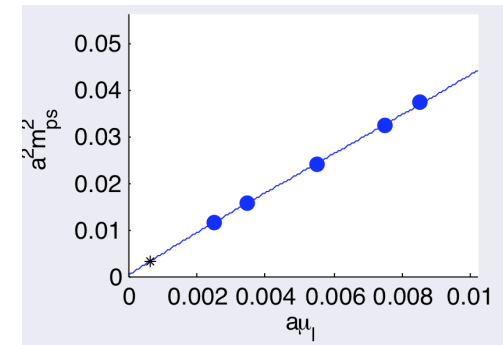
$$\chi \rightarrow \exp(-i\gamma_5 \frac{\omega}{2} \tau^3) \psi,$$

$$\bar{\chi} \rightarrow \bar{\psi} \exp(-i\gamma_5 \frac{\omega}{2} \tau^3)$$

Les simulations ETMC se font avec les « quarks twistés  $\chi$

Pour  $a \neq 0$  ce formalisme présente **quelques avantages**:

- Bonne limite du continu:  $\mathcal{O}(a^2)$
- « Bonnes » propriétés chirales: e.g.  $m_p^2 = B m_q$
- Protection contre les valeurs propres nulles de D
- Renormalisation des opérateurs facilitée
- un coût « raisonnable »



et des **inconvénients** «artefacts» qui doivent disparaître si  $a=0$ , en fait  $\mathcal{O}(a^2)$

- Parité non conservée ☹
- Isospin non conservé (pions) ☹☹
- Flavour violation: pour  $nf=2+1+1$  il y a un couplage entre c-s ☹

En principe des petits effets mais qui peuvent devenir gênants et dont il faut tenir compte

Les codes de la collaboration sont publics et mis à disposition de la communauté internationale :

[www.carsten-urbach.eu](http://www.carsten-urbach.eu)

Compilés et exécutés sur diverses plateformes : i686 et compatible, x64 et compatible, IBM Regatta, IBM BlueGene/L, IBM BlueGene/P, SGI Altix, clusters powerpc.

Options pour p4, opteron, sse2, sse3, BlueGene.

Utilisent la bibliothèque LIME (Lattice QCD Interchange Message Encapsulation ou Large Internet Message Encapsulation) <http://usqcd.jlab.org/usqcd-docs/c-lime/> ou une version parallélisée, LEMON, développée par ETMC : PoS (LAT2009) 037

## Programme tmLQCD sur la BG/P

- Mode « générer des configurations » (nf=2 ou nf=2+1+1)
- Mode « calcul propagateur » (légers ud, doublet cs)

$V=L^3 \times T=32^3 \times 64, 48^3 \times 96, 64^3 \times 128$

Puissance soutenue par cœur de tmLQCD 0.54 Gflops (BG/P=3.4 Gflops)

Efficacité = 16% de la puissance PIC en **double précision** (0.54/3.4 BG/P)

MPI toujours 4d

Partition qui dépend de L

## RUN TYPIQUE nf=2 (Mode Invert)

Taille reseau      L=48 T=96  
Masse quark      mu=0.002 (mp=260 MeV)  
Lattice spacing    beta=4.2 (a=0.05 fm)

Sur 1 rack (4096 cœurs)

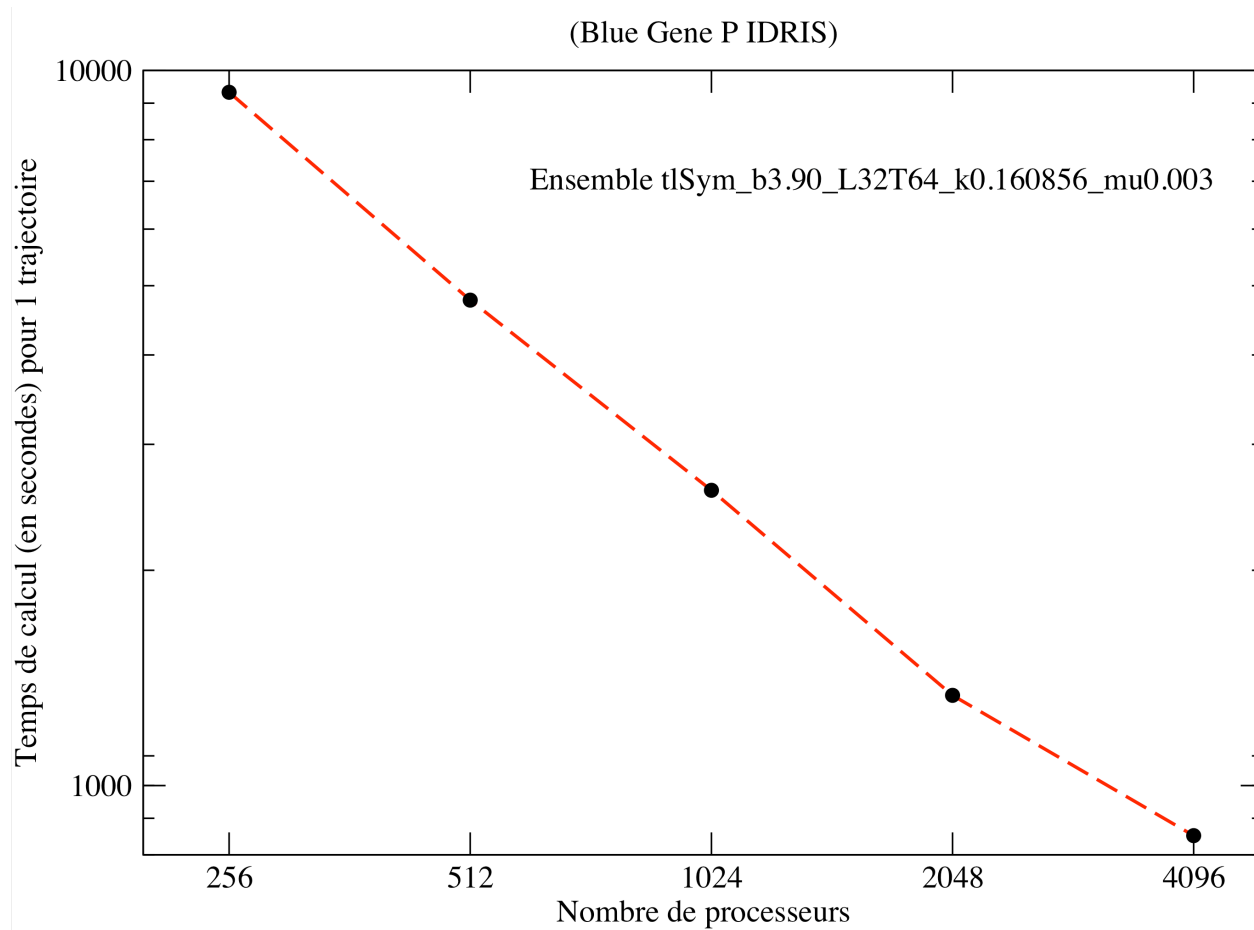
Taille réseau local (t,x,y,z)=6x6x6x12

T\_read\_source/scq = 30 sec

T\_inv/scq            =140 sec

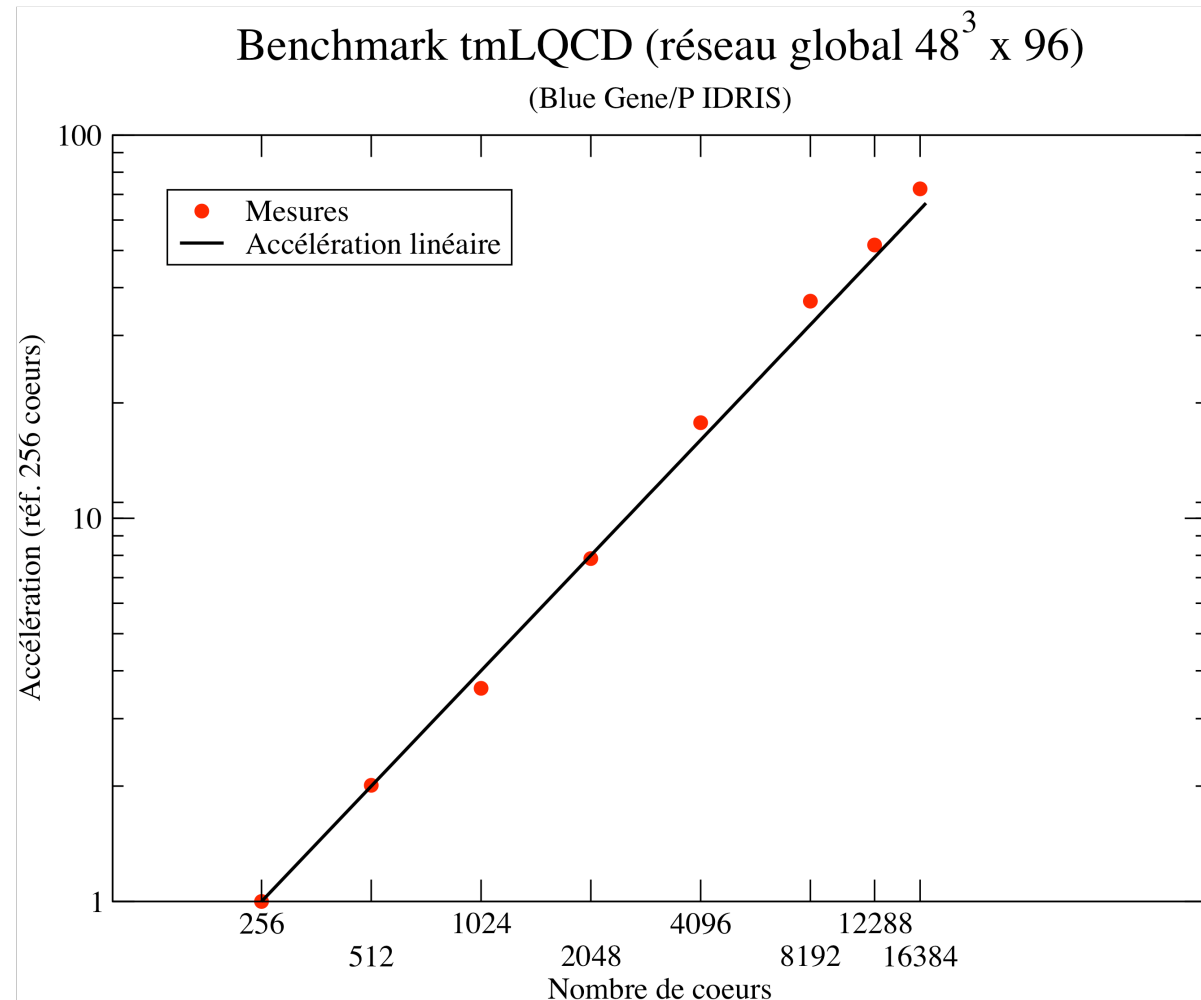
T\_write\_Propa/scq = 60 sec

Propagateur entier doublet (u,d)= 2x3x4x230 = 1h30



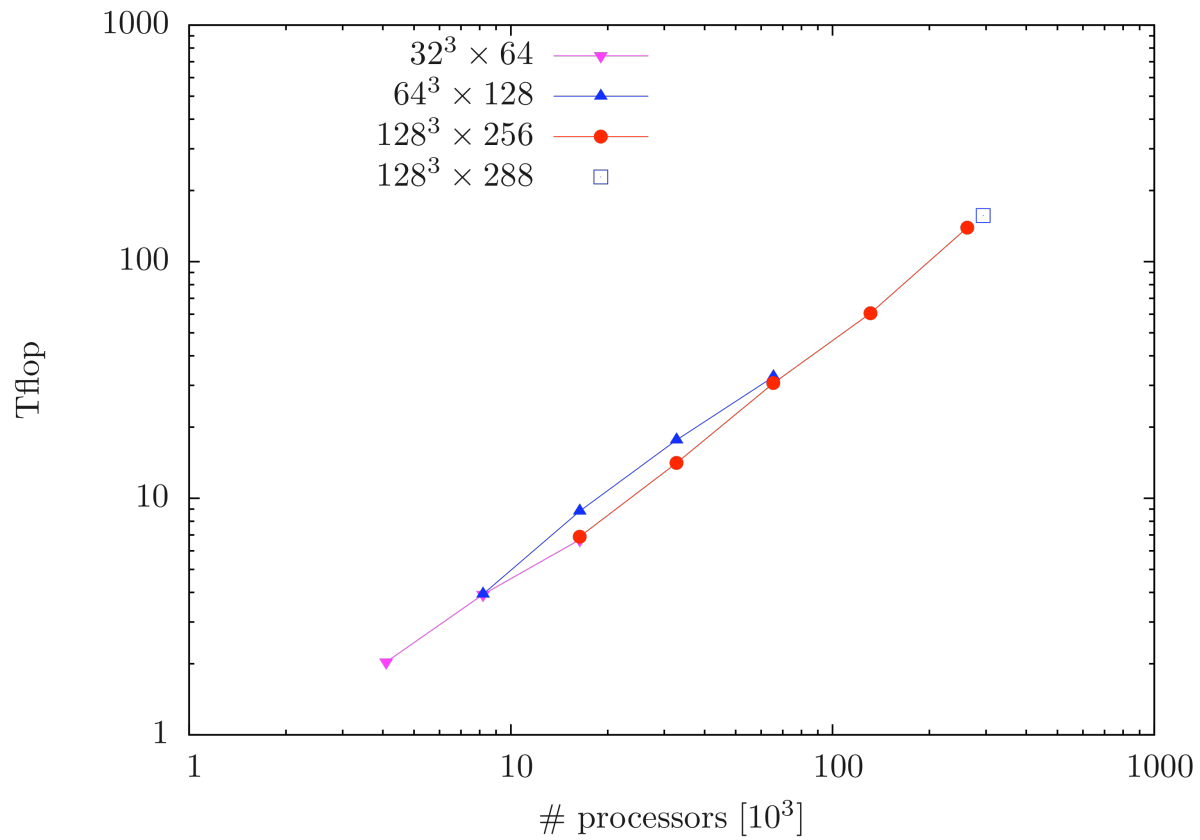
Strong scaling obtenu avec le programme hmc\_tm.

$$A(n) = \frac{T_{ref}}{T(n)}$$





# Scaling test obtenu(\*) avec tmHMC sur (toute) la BG/P de Juelich (300 000 proc)



(\*) C.Urbach, Ph. Gerhold

Un très bonne efficacité

Une scalabilité presque parfaite sur toutes la tailles testées

Quel est le secret ?

Derrière tous les « gros mots » la LQCD consiste essentiellement à faire du  $\text{matrice} \cdot \text{vecteur}$

$$D \cdot x$$

... avec une matrice  $D$  - opérateur de Dirac - pratiquement vide (quelques dizaines d'éléments non nuls par ligne)

# La grille ILDG

Devant le coût des simulations, une bonne partie des différentes équipes travaillant sur ce sujet au niveau mondial a décidé de mettre leurs productions à la disposition de la communauté internationale.

En pratique les différentes collaborations se réservent l'usage de leurs propres productions pendant quelques mois, puis les ouvrent à la communauté dans un second temps.

- ➔ Accord sur un format des binaires et sur la structures métadonnées .
- ➔ Organisation de la VO ILDG (International Lattice Data Grid)

Ce projet implique des équipes en Australie, USA, Royaume-Uni, Japon, Allemagne, Italie, France, Pays-Bas.  
ETMC est membre.

En France → storage element : Lyon

## Paramètres des simulations ETMC

$L=16,20,34,32,48,64(?)$      $T=2L$   
 $N \sim 5000$  / run ( $\beta, m_q, L$ )

$N_f = 2$

- ◆ 4 lattice spacings: 0.053 – 0.1 fm ( $\beta = 4.2, 4.05, 3.9, 3.8$ )
- ◆  $270 \lesssim m_{PS} \lesssim 600$  MeV
- ◆  $L > 2$  fm
- ◆  $m_\pi L > 3.2$

$N_f = 2 + 1 + 1$  (in production)

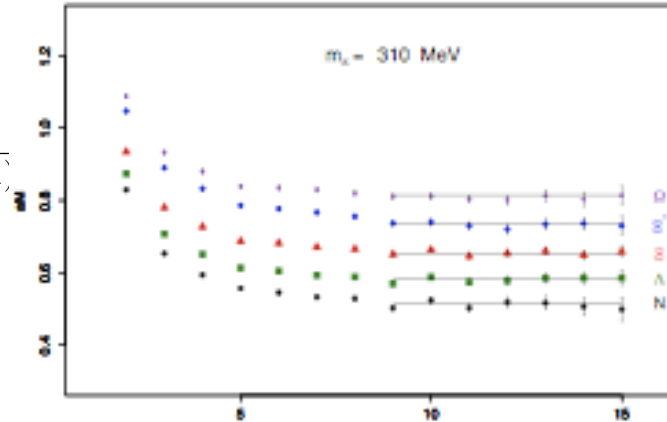
- ◆ 2 lattice spacings: 0.079 – 0.09 fm ( $\beta = 1.90$  and  $\beta = 1.95$ )
- ◆  $270 \lesssim m_{PS} \lesssim 600$  MeV
- ◆ Heavy sector tuned
- ◆  $L > 2$  fm
- ◆  $m_\pi L > 3$
- ◆ Finite size effect :  $\beta = 1.90$   $a\mu = 0.004$   $L = 20, 24, 32$
- ◆ Now running 4 light masses at  $\beta = 2.10$  on  $48^3 \times 96$  and  $64^3 \times 128$  lattices

# Résultats. Spectre des hadrons

Lorsque l'on utilise des masses de quarks (donc de pions) trop grandes

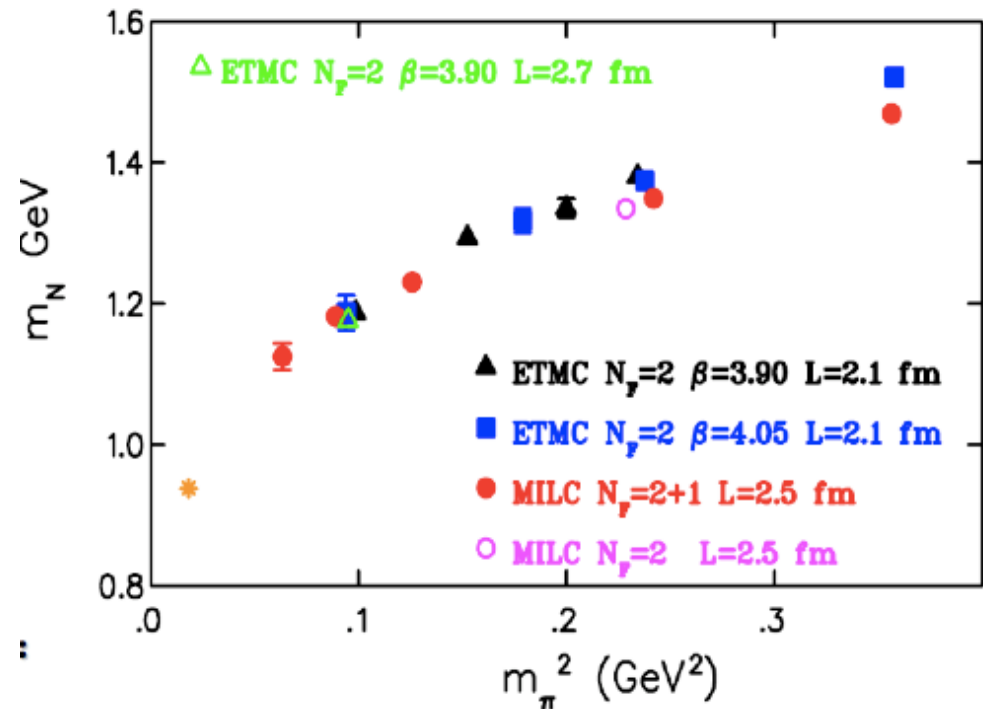
1. Calculer  $M$  pour différents  $m_\pi$

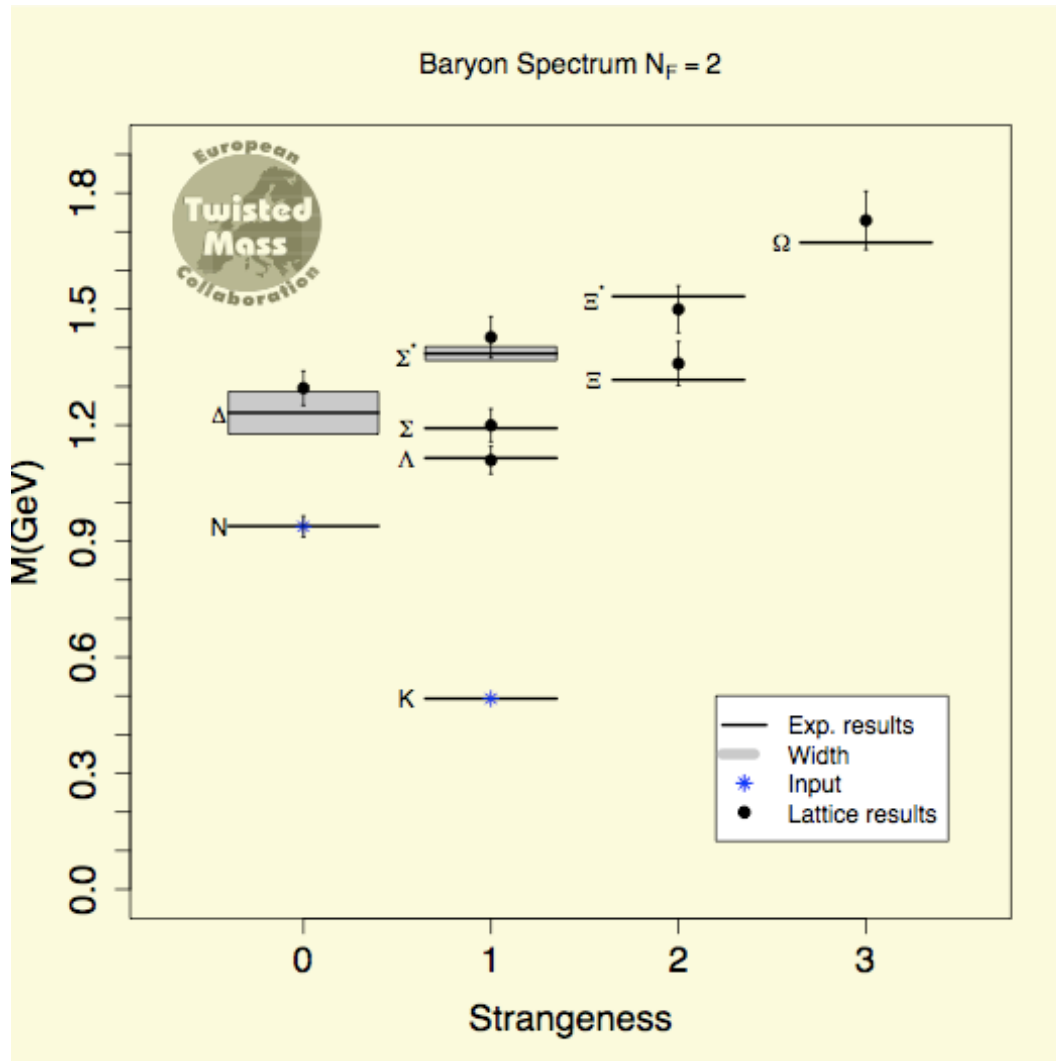
$$aM_{eff}(t) = \log \frac{C(t)}{C(t+1)}$$



2. Extrapoler  $M$  à la valeur  $m_\pi$  physique

Procédure délicate (Sym. chiral)  
Nécessite output extérieur (terme cubique)  
Domine les erreurs actuelles



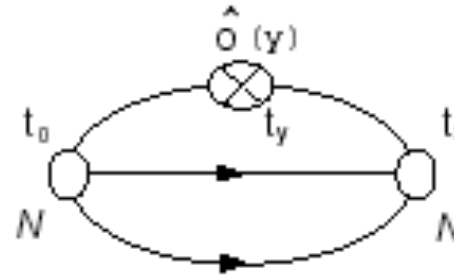


ETMC, Phys. Rev. D (2009)

## Résultats. Fonctions de structure

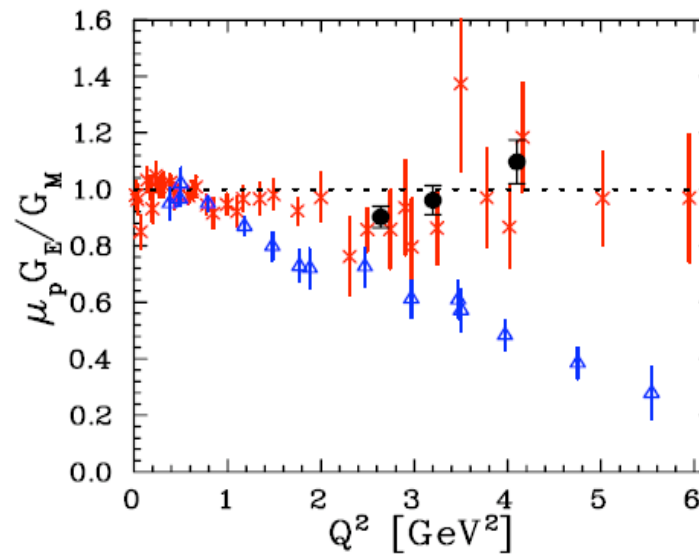
### - Facteurs de Forme e.m.

Il faut introduire un couplage à “mi chemin” de la propagation (F. de Green à 3 points)

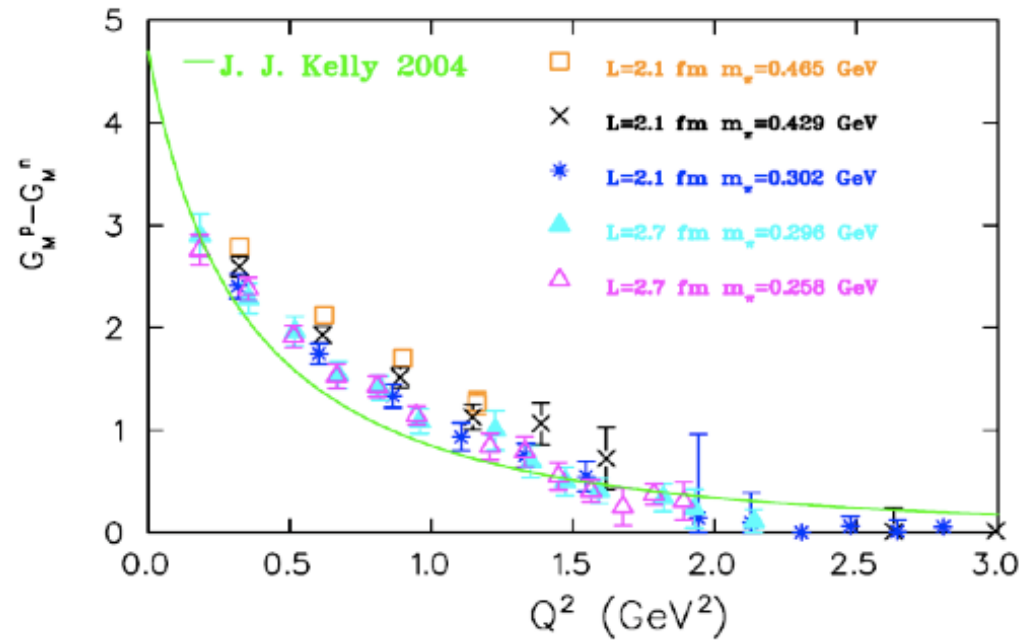
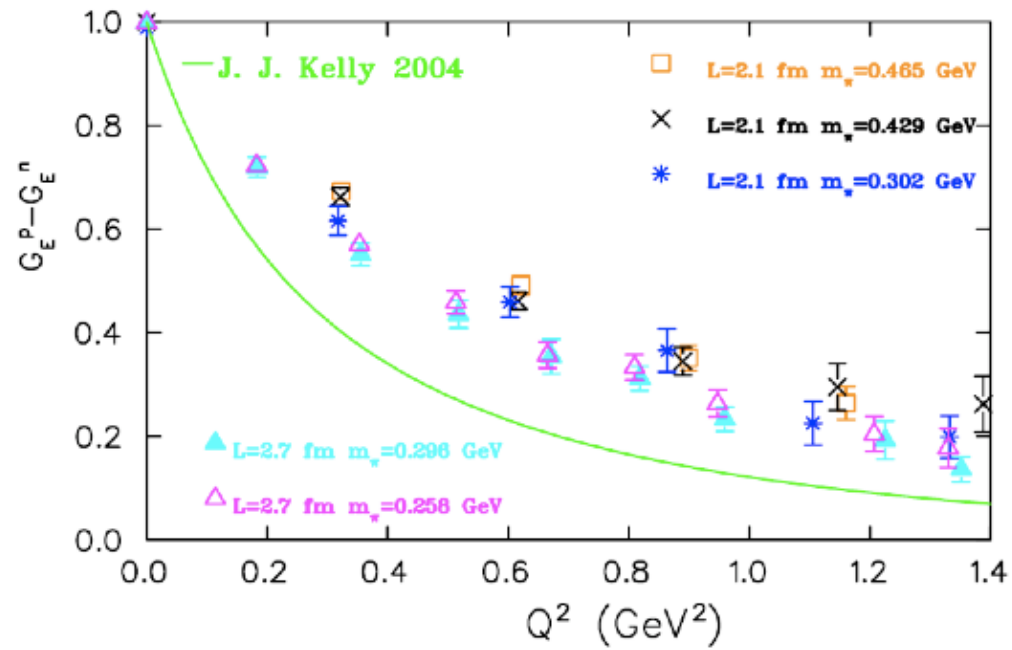


$$C_{ab}^{\mu}(x, y) = \langle 0 | N_a(x) q(y) \gamma^{\mu} q(y) \bar{N}_b(0) | 0 \rangle = \bar{u}(p', s') \left\{ F_1(q^2) \gamma^{\mu} + F_2(q^2) \frac{i \sigma^{\mu\nu} q^{\nu}}{2M_N} \right\} u(p, s)$$

JLab

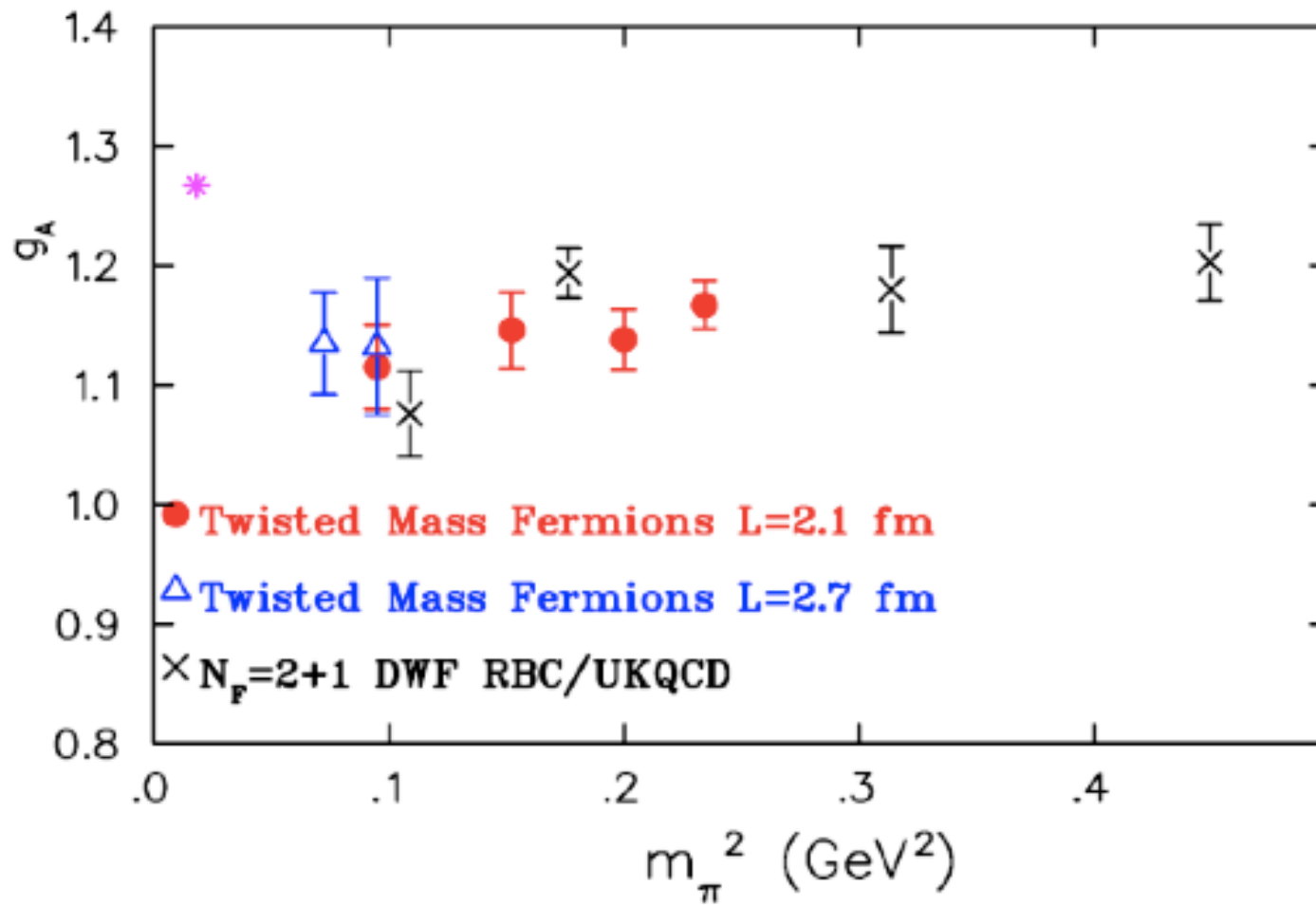


- Generalized Form Factors (PDF et GPD)
- Facteurs de forme étrange



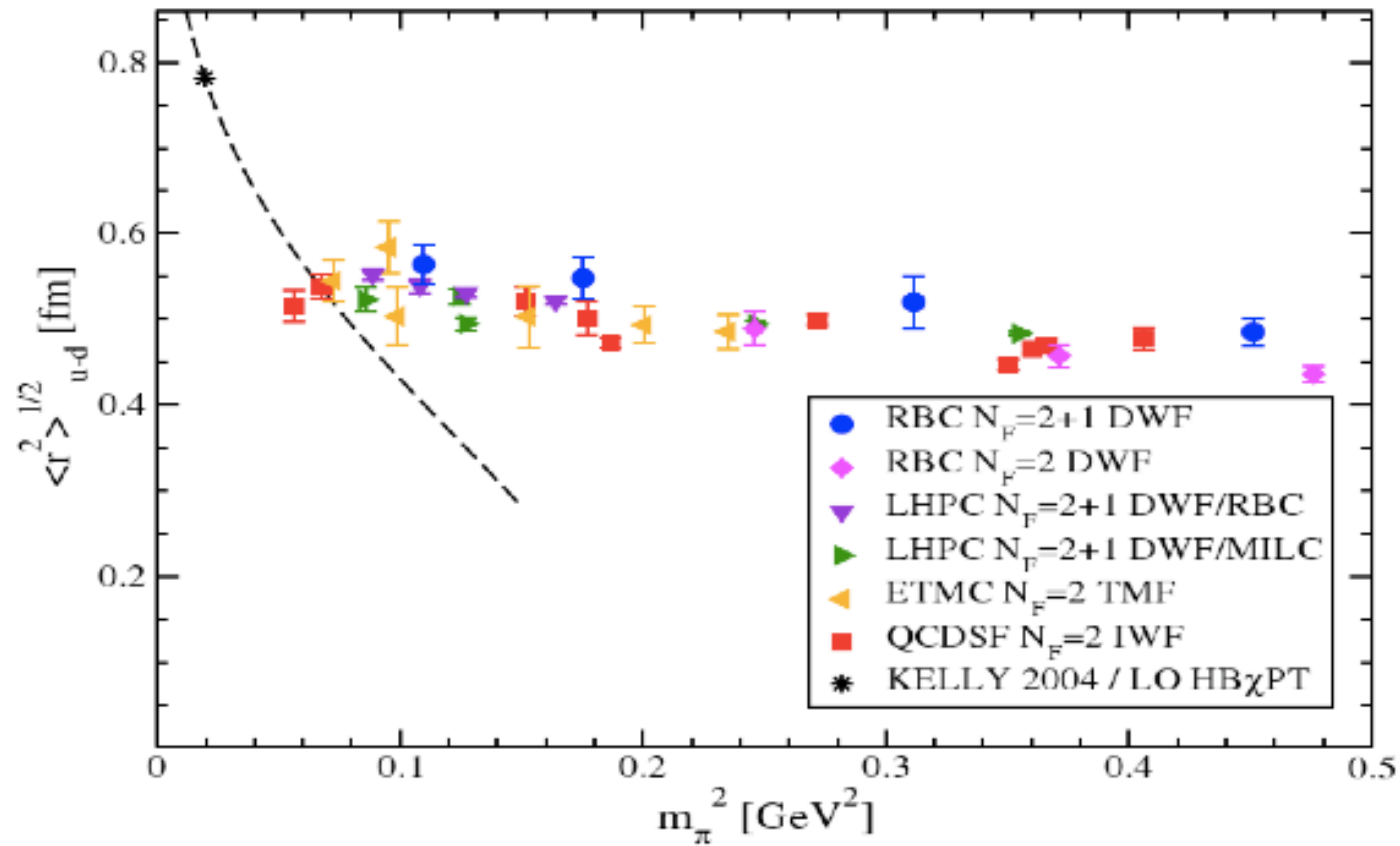
C. Alexandrou et al, Lattice 09 (PoS 2009)





Peut être que la nouvelle physique se trouve dans des vieilles outres...

$$\langle r^2 \rangle = \frac{-6}{G_E(0)} \left. \frac{dG_E(Q^2)}{dQ^2} \right|_{Q^2=0}$$



## Résultats. Physique des saveurs

Etude des désintégrations:

- Léptoniques  $D \rightarrow l \nu_l$  avec  $l=e,\mu,\tau$
- Sémiléptoniques  $D \rightarrow \pi l \nu_l$  avec  $l=e,\mu,\tau$

Principale motivation: Tester le Modèle Standard (matrice CKM)

Activité expérimentale

CLEOC

BaBar Stanford

BELLE Japon

**LHCb CERN**

qui n'est pas prête de s'arrêter dans les années qui viennent

$$\frac{d\Gamma}{dq^2}(D \rightarrow \pi l \nu) \sim |V_{cs}|^2 F_+(q^2)$$

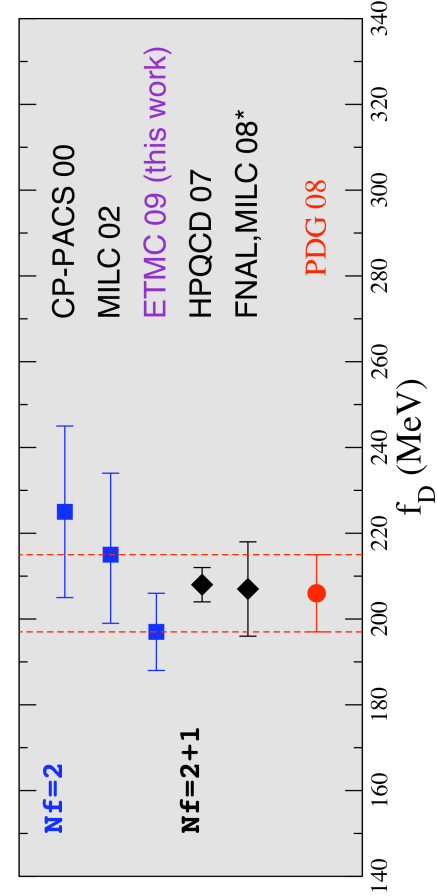
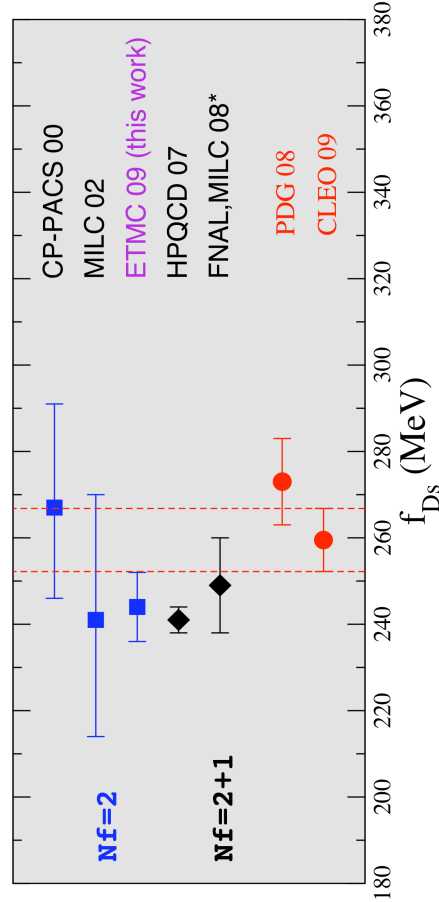
On mesure les **largeurs**. On peut en déduire qqchose (CKM) **ssi** on calcule les **F's**

Les erreurs sur **V** sont dominées par les « mauvais calculs des **F's** »

La balle est tantôt dans le camp des expérimentateurs, tantôt dans celui des théoriciens

# Decay constants leptoniques du D(cd) et D<sub>s</sub>(cs)

B. Blossier et al, JHEP 0907:043,2009



$$\Gamma_{exp}(D \rightarrow l\nu) = Kine |V_{cu}|^2 f_D^2$$

$$f_D = \frac{\langle D | A_0 | 0 \rangle}{M_D}$$

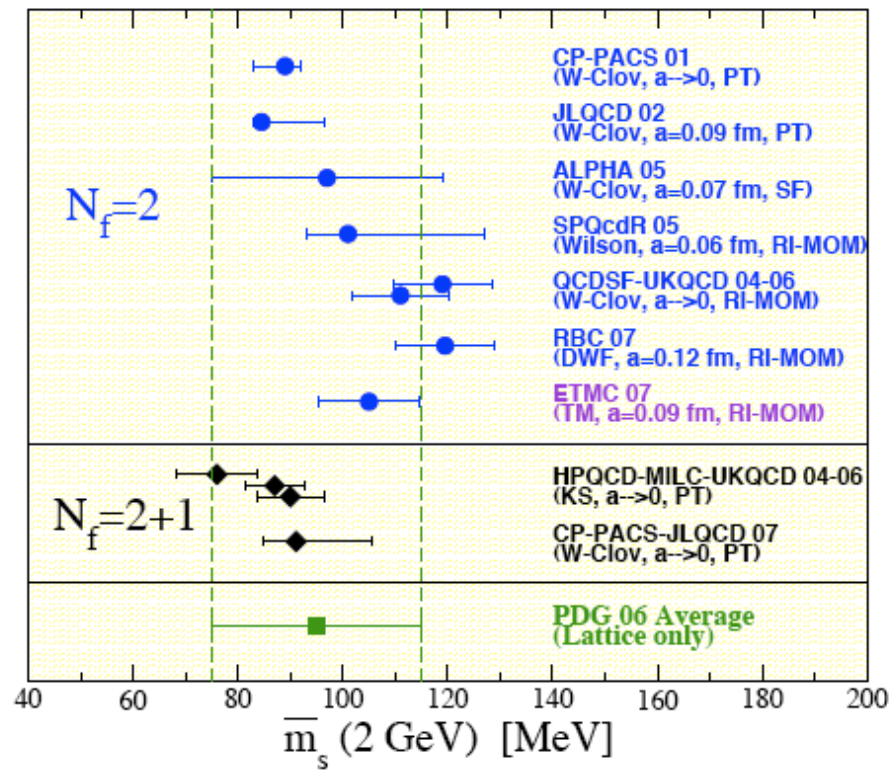
$$\Gamma_{exp}(D_s \rightarrow l\nu) = Kine |V_{cs}|^2 f_{D_s}^2$$

$$f_{D_s} = \frac{\langle D_s | A_0 | 0 \rangle}{M_{D_s}}$$

## Calcul des masses des quarks

$$m_{ud}^{\overline{\text{MS}}}(2 \text{ GeV}) = 3.85 \pm 0.12 \pm 0.40 \text{ MeV}$$

$$m_s^{\overline{\text{MS}}}(2 \text{ GeV}) = 105 \pm 3 \pm 9 \text{ MeV}$$

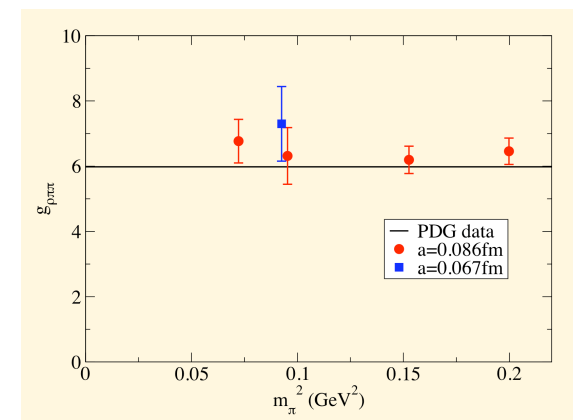
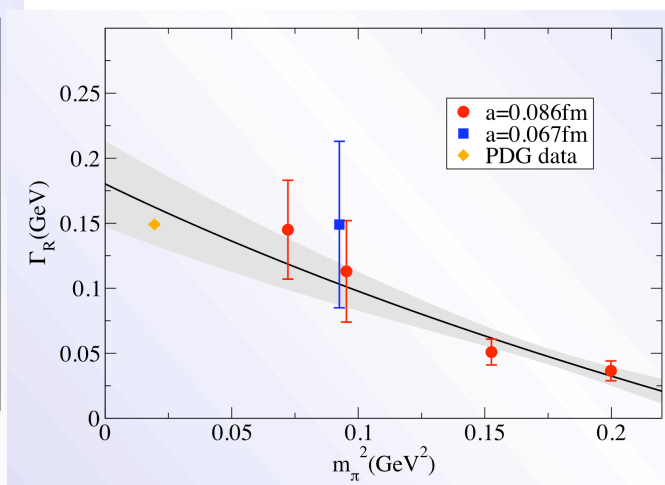
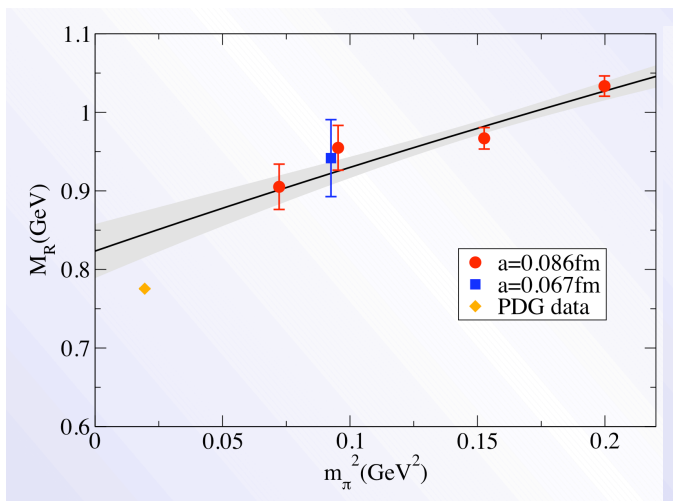
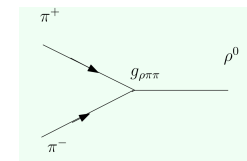
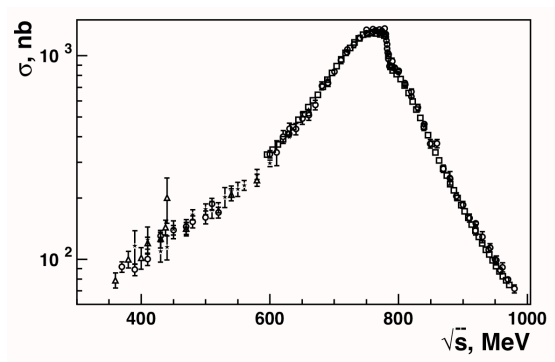


B. Blossier, Ph. Boucaud, M. Papinutto et al,

# Résultats. Particules instables (resonances)

$\rho(770)$   $\Gamma_R=149$  MeV

$$\sigma(e^+e^- \rightarrow \pi^+\pi^-)$$



# Conclusion

La France dispose actuellement des moyens de Calcul Scientifique de tout premier ordre.  
Pilotés par GENCI (IDRIS, CINES, CCRT) et bien insérés dans PRACE au niveau européen

Activité plusieurs fois enterrée, la LQCD vit une période de fort développement:

- Inclusion des quarks (u,d,c,s) dynamiques  $N_f=2$ ,  $N_f=2+1$ ,  $N_f=2+1+1$
- $m_\pi \approx 140$  MeV (3 collaborations)
- $a \approx 0.05$  fm (control des effets de discretisation)
- $m_\pi L > 4$  (control effets de volume fini)

La communauté de “QCD sur réseau” est une grosse utilisatrice de ces machines, qu’elle a contribué à développer (e.g. APE, BG/P).

Malgré des processeurs relativement lents, la BG/P est la mieux adaptée à nos simulations, rendu caduques les autres machines (APE, Altix,...) et permis  $L=16 \rightarrow 24 \rightarrow 32 \rightarrow 48 \rightarrow 64(?)$ . Du jamais vu!

En France plusieurs groupes (LPT Orsay, SPhN Saclay, CPT Marseille, LPM Tours, LPSC Grenoble) réalisent des travaux de premier plan, au sein des collaborations les plus réputées (ETMC, BMW).

ETMC “Laboratoire Européen”

Résultats publiés ( $N_f=2$  et  $N_f=2+1+1$ ) avec  $a=0.05$  fm,  $m_\pi=260$  MeV,  $m_\pi L=3.5$

Runs  $m_\pi=220$  MeV finis et en train d’être analysés

Premiers tests de thermalisation pour  $m_\pi=180$  MeV

Concernant IDRIS:

**UN GRAND MERCI !**

.... juste un peu de souplesse vis à vis les logon des nos étudiants,  
pendant le durée (souvent courte) de leur « exile postdoctoral »



