Le interazioni fondamentali dentro un computer

Massimo D'Elia



Colloquia Pontecorvo - 15 maggio 2019

DI COSA ANDIAMO A DISCUTERE ...

di come la teoria delle interazioni fondamentali possa essere simulata al calcolatore (quando altri usuali strumenti del fisico teorico falliscono)

di come la simulazione numerica delle interazioni fondamentali sia un continuo stimolo per lo sviluppo dei supercomputer Una simulazione numerica è la riproduzione al calcolatore del comportamento di un modello complesso (con molti gradi di libertà) che non si sa studiare analiticamente:

- Fisica dell'atmosfera
- Fisica dei plasmi
- Relatività numerica, cosmologia
- Fisica della materia
- Biofisica
- Fisica delle alte energie
- Fluidodinamica, turbolenza
- Fisica medica
- ...

L'idea si sviluppa insieme alla nascita dei calcolatori elettronici prima simulazione Monte-Carlo: diffusione di neutroni, Ulam, von Neumann su ENIAC, 1947

Brevissima ed inaccurata storia del calcolo elettronico in Flops ENIAC, 1946, $O(10^3)$... CEP (Pisa), 1957, $O(10^4)$... APE, 1988, $O(10^9)$... Top1 2018, $O(10^{17})$

COSA SIMULIAMO NEL CASO DELLE INTERAZIONI FONDAMENTALI?

Per capirlo dobbiamo ripercorrere quella che è la nostra attuale descrizione delle interazioni fondamentali (modello standard), basata sulla teoria quantistica dei campi (QFT)

- Una teoria di una più funzioni locali dello spazio tempo: i campi
- Ingredienti fondamentali sono le simmetrie dello spazio-tempo (relatività) e quelle legate alle trasformazioni interne dei campi, globali o locali
- Infine, si tratta di una teoria quantistica ...

Uno dei più semplici esempi parte da una catena discreta di oscillatori accoppiati

$$L = T - U = \frac{m}{2} \sum_{j} \dot{\eta}_{j}^{2} - \frac{k}{2} \sum_{j} (\eta_{j+1} - \eta_{j})^{2}$$

può essere un modello per un reticolo cristallino 1D

il sistema descrive la propagazione di onde con minima lunghezza d'onda $\lambda_{min} \sim a$, cioè frequenza massima $u_{max} \sim c_s/a$: cut-off ultravioletto (UV)

Possiamo fare il limite al continuo di tale sistema $a \to 0 \ {\rm con} \ ka = \tau \ \ \rho = m/a$

Arriviamo ad una teoria di campo scalare in 1+1 dim.

la corda elastica continua

$$L \to \int dx \, \mathcal{L} = \int dx \left(\frac{\rho}{2} \left(\frac{\partial \eta}{\partial t} \right)^2 - \frac{\tau}{2} \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 \right)$$

descrive la fisica a tutte le scale, $\lambda_{min} \to 0$, $\nu_{max} \to \infty$





La teoria di cui vogliamo trattare è quantistica e relativistica

• Le eccitazioni di frequenza ν sono quantizzate in pacchetti di energia $h\nu$ che descrivono la propagazione di particelle identiche

(ad esempio fononi per la corda, fotoni per il campo elettromagnetico)

- Possiamo avere più campi con diverse componenti interne che trasformano in modo non banale sotto trasformazioni di Lorentz, descrivendo particelle di spin intero (bosoni) o semi-intero (fermioni)
- La teoria è invariante sotto trasformazioni di Lorentz

La teoria può essere invariante sotto ulteriori simmetrie "interne" che trasformano le componenti del campo.

Un caso particolarmente rilevante è quello delle simmetrie di gauge locali:

Il riferimento per le componenti interne del campo (ad esempio, per decidere la sua fase se è un numero complesso) "ruota" da punto a punto.

I campi di gauge A_{μ} hanno l'informazione su tali rotazioni, definendo i cosiddetti *trasporti paralleli*

$$U = \exp\left(i\int_{A}^{B} dx_{\mu} A^{\mu}\right)$$





dove per esempio le interazioni forti (quark e gluoni) sono descritte da:

$$\mathcal{L}_{QCD} = \sum_{f} \bar{q}^{f} \left(i\partial^{\mu}\gamma_{\mu} - gA^{\mu}_{a}T^{a}\gamma_{\mu} - m_{f} \right) q^{f} - \frac{1}{4}G^{a}_{\mu\nu}G^{\mu\nu}_{a}$$

gruppo di gauge: SU(3) (i quark hanno 3 componenti complesse, cioè 3 diverse cariche di colore)

È una teoria fondamentale, di principio vuole descrivere la fisica a tutte le scale

Divergenze UV cancellate da una ridefinizione dei parametri "bare" (rinormalizzabilità)

Simulazioni e path-integral

La simulazione numerica passa attraverso la formulazione della meccanica quantistica in termini di integrale sui cammini

Path Integral (R. Feynman, 1948)



L'ampiezza di probabilità, $P_{(x_A,t_A) \to (x_B,t_B)} = |\langle x_b | e^{-iH(t_b-t_a)/\hbar} | x_a \rangle|^2$, si scrive:

$$\langle x_b | e^{-iH(t_b - t_a)/\hbar} | x_a \rangle = \mathcal{N} \int_{x(t_{a/b}) = x_{a/b}} \mathcal{D}x(t) \exp\left(\frac{iS[x(t)]}{\hbar}\right)$$

Tutti i possibili cammini contribuiscono, pesati dal fattore complesso $\exp\left(\frac{iS[x(t)]}{\hbar}\right)$ S è l'azione associata al cammino $S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} dt'L$; $L = \frac{1}{2}m \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 - U(x)$ Portando $t \rightarrow -i\tau$ il "peso" diventa (di solito) definito positivo, una probabilità

$$e^{iS/\hbar} \rightarrow e^{-S_E/\hbar}$$
; $S_E = \int_{\tau_a}^{\tau_b} d\tau' L_E$; $L_E = \frac{1}{2}m\left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 + U(x)$

Passaggio naturale considerando la termodinamica del sistema (funzione di partizione):

$$Z(T = 1/\beta) = \sum_{a \in \text{stati}} e^{-\beta E_a} = \text{Tr}\left(e^{-\beta H}\right) = \int dx \langle x|e^{-\beta H}|x\rangle = \mathcal{N}\int_{x(0)=x(\beta\hbar)} \mathcal{D}x(\tau) e^{-S_E[x(\tau)]/\hbar}$$

Medie termodinamiche riespresse come medie su una distribuzione di cammini periodici.

$$\langle O \rangle_T = \frac{\operatorname{Tr}\left(e^{-\beta H}O\right)}{\operatorname{Tr}\left(e^{-\beta H}\right)} = \frac{\int \mathcal{D}x(\tau)e^{-S_E[x(\tau)]/\hbar}O[x(\tau)]}{\int \mathcal{D}x(\tau)e^{-S_E[x(\tau)]/\hbar}} \equiv \int \mathcal{D}x(\tau)P[x]O[x] \qquad \lim_{T \to 0} \langle O \rangle_T = \langle 0|O|0 \rangle_T$$

 $QFT \rightarrow$ distribuzione su tutte le possibili configurazioni (3+1D) del campo

È possibile calcolare tali medie numericamente?

→ Metodo Monte-Carlo (Buffon ... Fermi Ulam, 1946)

ldea: estraggo un campione di configurazioni secondo la distribuzione $P[x(\tau)]$: $x_1(\tau), x_2(\tau), \ldots, x_N(\tau)$

La media sul campione approssima la media vera $\langle O \rangle = \int \mathcal{D}x(\tau) P[x(\tau)] O[x(\tau)]$

$$\bar{O} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} O[x_i(\tau)] \simeq \langle O \rangle$$

con un errore statistico di ordine $1/\sqrt{N}$, fissato dal *Teorema del Limite Centrale*

Un semplice esempio: estraggo (x, y) a caso in $[0, 1] \times [0, 1]$ quante volte $x^2 + y^2 < 1$? Percentuale attesa $\pi/4$ Nell'esempio: 2×10^4 estrazioni, $\rightarrow \pi = 3.148(12)$



Il metodo è vincente quando il numero di variabili stocastiche diventa molto grande

Il nostro numero di variabili è in effetti molto grande, anzi ... troppo grande:

- Per averne un numero finito è necessario portare la teoria su un reticolo discreto e finito. Tipicamente un reticolo (iper)cubico con $N_x \times N_y \times N_z \times N_t$ siti e spaziatura a
- Path-integral \rightarrow integrale in molte variabili. È come tornare agli oscillatori discreti:
 - Compare una frequenza (energia) massima: cut-off ultravioletto $\Lambda \sim 1/a$
 - La teoria è "regolarizzata" (non ci sono divergenze UV)
 - È come un sistema statistico in 4 dim. con e^{-S_E} peso di Boltzmann
- Gli algoritmi di campionamento possono essere non banali (Catene di Markov)
- Alla fine, dobbiamo essere in grado di estrapolare al limite continuo

Due esempi:

3 cammini tipici che contribuiscono all'ampiezza (Euclidea) di un oscillatore ^x armonico, insieme al cammino classico

$$m=\omega=1$$
 ; $a\,\omega=0.004$

una configurazione tipica per un campo scalare massivo in (1+1) dimensioni

(parente della corda elastica quantistica)



Cosa possiamo "misurare" su queste configurazioni?

Ad esempio: le correlazioni fra le fluttuazioni del campo in punti diversi

È come misurare la funzione correlazione fra le variabili di spin di un sistema statistico. Tipicamente, per grandi distanze:

$$\langle s_i s_j \rangle - \langle s \rangle^2 \sim \exp(-|i-j|/\xi)$$

 $\boldsymbol{\xi}$ è la lunghezza di correlazione



Nella teoria quantistica, ξ è inversamente proporzionale alla minima frequenza ν di eccitazione del campo, $h\nu$ è il minimo quanto di energia eccitabile sul vuoto.



In una QFT, le eccitazioni elementari del vuoto sono gli stati di singola particella

Misurando $\Delta E = 1/\xi$ stiamo misurando l'energia di riposo di tali stati, cioè

la massa della particella $m=1/\xi$

In una teoria complessa come il modello standard, la correlazione di diversi tipi di campi da accesso alle masse di particelle con diversi numeri quantici

Due parole sul limite al continuo ...



FAQ: nelle vostre simulazioni, il lattice spacing è uno dei parametri che si possono cambiare a piacere per andare al limite al continuo?

NO abbiamo solo parametri adimensionali, come $a\omega$, $\hat{m}_q = am_q$ o altri accoppiamenti adimensionali, che nulla sanno di quanto sia il cut-off $\Lambda = 1/a$

Come facciamo, allora, il limite continuo? ...



Cerchiamo particolari valori dei parametri bare adimensionali per cui $\hat{\xi} = \xi/a
ightarrow \infty$

Nel linguaggio della meccanica statistica, cerchiamo punti critici del secondo ordine

Se il modello discreto non ha punti critici, il limite continuo non è possibile (la teoria non è definibile a tutte le scale, non è rinormalizzabile)

Intorno ad un punto critico, diverse ξ sono proporzionali (scaling): in tale regione, è agevole estrapolare al continuo i rapporti fra diverse masse, $m_1/m_2 = \xi_2/\xi_1$ L'input sperimentale su una massa fissa a posteriori il valore fisico del lattice spacing

Perché le simulazioni numeriche delle QFT?

L'approccio tradizionale è perturbativo: la soluzione è nota solo nel caso non-interagente, ma l'interazione è piccola. In alcuni casi questo non è vero: la Cromodinamica Quantistica (QCD)

In QFT l'accoppiamento dipende dalla scala di energia (running coupling).

In QCD g è asintoticamente piccolo ad alte energie (libertà asintotica), ma cresce alle basse energie.

 $\overline{\mathbf{q}}$



>**0** (]

A basse energie (grandi distanze) la QCD è non-perturbativa e la simulazione numerica è l'unico strumento teorico basato sui principi primi della teoria

Vari aspetti non comprensibili perturbativamente

Il confinamento del colore

Non esistono quark (o gluoni) liberi in Natura

Gli unici stati fisici hanno carica di colore nulla (adroni)

Esperienza diretta da esperimenti di Deep Inelastic Scattering, che sondano le piccole distanze dentro un nucleone.

Quale la massa e la struttura degli adroni (protone, nucleone, ...)?

La termodinamica delle interazioni forti: nuove possibili fasi?

Fasi e simmetrie della QCD



. . .

Come discretizzare la QCD su reticolo (K. G. Wilson 1974)



$$Z \Rightarrow \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} e^{-(S_G[U] + \bar{\psi}M[U]\psi)} = \int \mathcal{D}U e^{-S_G[U]} \det M[U]$$

Cosa riusciamo a capire? Alcuni esempi basilari





Riusciamo a misurare il potenziale confinante $V(r) = a/r + \sigma r$ fra una coppia $Q\bar{Q}$ e vedere come questo venga fuori dalla creazione di un tubo di flusso cromoelettrico



questo spiega l'interpretazione in termini di modelli di stringa efficace

le masse degli adroni

le funzioni di correlazione di $\bar{q}q$ o qqq danno accesso alle masse dei mesoni e dei barioni

Lattice QCD

valore sperimentale

da S. Aoki et al., Phys.Rev. D81 (2010) 074503

Quasi tutta la materia visibile nell'Universo viene dall'energia di legame non-perturbativa della QCD

$$m_{p/n} c^2 = E_{p/n,CM}$$

variando m_{quark} nella lagrangiana, sappiamo come sarebbe $m_{p/n}$ se fosse $m_{quark} = 0$: solo qualche % più piccola





da L. Alvarez-Ruso et al., arXiv:1304.0483

Quanto costa simulare la QCD?

Il numero totale di siti del reticolo è $\sim (L/a)^4$

Le condizioni minimali sono $L \gg \xi \gg a \ \Rightarrow L/a \sim O(10^2) \Rightarrow (L/a)^4 \sim O(10^8)$

le configurazioni sono pesate con $e^{-S_G[U]} \det M[U]$ la parte più dispendiosa è tenere in conto $\det M$, M matrice sparsa $\sim 10^9 \times 10^9$ anni '80 solo pura gauge \rightarrow '90, '00 quark non fisici \rightarrow 2010 ... QCD u,d,s, .. c fisici Operazioni in virgola mobile per una simulazione tipica al punto fisico $\gtrsim 10^{21} - 10^{22}$ È usuale condividere campioni di configurazioni di campo fra diversi gruppi di ricerca

Fortunatamente, le simulazioni sono facilmente parallelizzabili



Progresso tecnologico \Rightarrow **Lattice QCD al punto fisico** \leftarrow **Progresso algoritmico**

La Lattice QCD è stata un continuo stimolo allo sviluppo del supercalcolo

Un esempio: la serie di macchine APE "made in INFN"

Computer Physics Communications 45 (1987) 345-353 North-Holland, Amsterdam



THE APE COMPUTER: AN ARRAY PROCESSOR OPTIMIZED FOR LATTICE GAUGE THEORY SIMULATIONS

M. ALBANESE ^d, P. BACILIERI ^a, S. CABASINO ^b, N. CABIBBO ^c, F. COSTANTINI ^d, G. FIORENTINI ^d, F. FLORE ^d, L. FONTI ^a, A. FUCCI ^c, M.P. LOMBARDO ^d, S. GALEOTTI ^d, P. GIACOMELLI ^h, P. MARCHESINI ^c, E. MARINARI ^c, F. MARZANO ^b, A. MIOTTO ^f, P. PAOLUCCI ^b, G. PARISI ^c, D. PASCOLI ^f, D. PASSUELLO ^d, S. PETRARCA ^b, F. RAPUANO ^b, E. REMIDDI ^{a,g}, R. RUSACK ^h, G. SALINA ^b and R. TRIPICCIONE ^d

^a INFN-CNAF, Bologna, Italy

- ^b Dipartimento di Fisica, I Universita' di Roma "La Sapienza" and INFN-Sez. di Roma, Italy
- ^c Dipartimento di Fisica, 11 Universita' di Roma "Tor Vergata" and INFN-Sez. di Roma, Italy
- ^d Dipartimento di Fisica, Universita' di Pisa and INFN-Sez. di Pisa, Italy

- ^f Dipartimento di Fisica, Universita' di Padova and INFN-Sez. di Padova, Italy
- ⁸ Dipartimento di Fisica, Universita' di Bologna and INFN-Sez. di Bologna, Italy

^h The Rockefeller University, New York, USA

APE, 1988, 250 Mflops \rightarrow APE100 \rightarrow APEmille \rightarrow apeNEXT, 2006, 10 TeraFlops

Dove simuliamo noi oggi: Centro di Calcolo dell'INFN-Pisa, UNIPI IT Center, CINECA

Su cosa simuliamo: processori tradizionali, schede grafiche (GPU), supercomputer

Un occhio al futuro (remoto?): calcolo quantistico?

^e CERN, Geneva, Switzerland

Tornando alla fisica ... il confinamento è per sempre?

N. Cabibbo and G. Parisi, 1975: congetturano l'esistenza di una fase deconfinata della materia, ad alte T e/o alte densità barioniche: Quark-Gluon Plasma (QGP)?

Questo stato della materia potrebbe aver caratterizzato i primi istanti di vita dell'Universo



Possibili verifiche?

- Teoriche: Lattice QCD
 - $T_c \simeq 155 \text{ MeV} \sim 1.8 \ 10^{12} \ ^{\circ}\text{K} \ \sim 10^{-6} \text{s}$ dopo il Big-Bang
 - non una vera e propria transizione di fase
- Sperimentali: Heavy Ion Collisions (LHC, RHIC,) confermano una simile T_c

Come al solito, la termodinamica ci racconta quali sono i gradi di libertà rilevanti



left: HotQCD collab, arXiv:1407.6387 right: MD, G. Gagliardi, F. Sanfilippo, arXiv:1611.08285 B, Q, S fluctuations

- A basse T, il mezzo termico eccita solo la produzione di adroni (modello HRG)
- A T più alte, descrizione con gradi di libertà più semplici quasi liberi
- Stefan-Boltzmann per gas di gluoni e fermioni liberi: densità di energia

$$\epsilon = T^4 \frac{\pi^4}{30} \left(2(N_c^2 - 1) + 4\frac{7}{8}N_c N_f \right) \simeq 62.5 T^4$$

• alla stessa T succedono molte altre cose (ripristino simmetria chirale, ...)

È possibile estendere la nostra conoscenza a piccole densità barioniche ...



quark (trascurabili a 150 MeV)

... ma ancora non abbiamo accesso completo al diagramma di fase della QCD



Non è possibile effettuare simulazioni dirette a $\mu_B \neq 0$ Il "peso" delle configurazioni, $e^{-S_G} \det M$, diventa complesso, non è più possibile applicare il metodo Monte-Carlo

Le attuali tecniche permettono un controllo sui sistematici solo per $\mu_B/T \lesssim 1$

Le interazioni fondamentali dentro un computer: le sfide in corso

- Una migliore comprensione delle simmetrie della QCD e della loro relazione con il confinamento e la natura della transizione di fase
- Il diagramma di fase, le proprietà di trasporto dentro il plasma di quark e gluoni
- Funzioni di struttura ed elementi di matrice adronici per la fenomenologia del modello standard
 - fisica del flavor e dei quark pesanti
 - momento di dipolo elettrico, fisica della violazione di CP, dipendenza dal parametro heta
 - contributi adronici a g-2
 - fattori di forma adronici per vari scopi (neutrino/dark_matter/.... scattering, ...)
 - spettroscopia adronica (stati eccitati degli adroni, tetraquark, ...)
 - ...
- Interazioni fra nuclei
- Studio di teorie simili alla QCD come modello di teorie oltre il modello standard

S. Aoki et al.		FLAG Revie	ew 2019			1902.0819
		Uliation Satur utination Satur tial une Satur uie extrapolation normation arriture ation arriture	art treatment			
Collaboration	Ref. N_f	र ४ ४ ५ ४ ४	f_{B^+}	f_{B^0}	f_B	f_{B_s}
FNAL/MILC 17	[13] 2+1+	-1 A ★ ★ ★ 🖌	189.4(1.4)	190.5(1.3)	189.9(1.4)	230.7(1.2)
HPQCD 17A	[14] 2+1+	-1 A \star ★ 🛧 o 🗸		-	196(6)	236(7)
ETM 16B	[10] 2+1+	-1 A \star o o o 🗸	-	-	193(6)	229(5)
ETM 13E	[15] 2+1+	-1 C ★ o o o 🗸		-	196(9)	235(9)
HPQCD 13	[16] 2+1+	-1 A \star ★ 🛧 o 🗸	184(4)	188(4)	186(4)	224(5)
RBC/UKQCD 14	[17] 2+1	Αοοοο	195.6(14.9)	199.5(12.6)	L	235.4(12.2)
RBC/UKQCD 14A	[18] 2+1	AOOOOV	_	-	219(31)	264(37)
RBC/UKQCD 13A	[19] 2+1	COOOOV	-	_	191(6)°+++	233(5) ^o
HPOCD 12	[11] 2+1	AOOOOV	_	_	191(9)	228(10)
HPOCD 12	[11] 2+1	AOOOO		-	189(4) [△]	_ ``
HPQCD 11A	[20] 2+1	Atott	_	-	-	$225(4)^{\nabla}$
FNAL/MILC 11	[21] 2+1	AOOXOV	197(9)	-	-	242(10)
HPOCD 09	[22] 2+1	AOOOOV	_	_	190(13)°	231(15)*

 $_{1902.08191}$ II progresso è sostanziale, iniziamo ad avere controllo sulla fisica del B

FLAG Review: gruppo di lavoro che analizza i sistematici di vari "esperimenti" di lattice QCD per la fenomenologia

Una sfida aperta oltre il modello standard

La gravità quantistica

La gravità non è rinormalizzabile perturbativamente

è possibile studiarne il path integral su uno spazio-tempo discreto: triangolazioni dinamiche, calcolo di Regge

un punto critico della teoria discretizzata ($\xi \to \infty$) potrebbe rappresentare un possibile limite al continuo per una gravità rinormalizzata a livello non-perturbativo

è una delle (tante) possibili strade aperte verso la comprensione della gravità



GRAZIE PER L'ATTENZIONE!