

WP1 - Lattice Field Theories

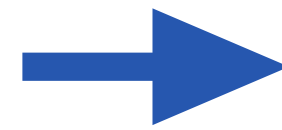
contributi da:

Mattia Bruno (UniMiB), Leonardo Cosmai (INFN), Leonardo Giusti (UniMiB), Alessandro Papa (UniCal), Michele Pepe (INFN), Francesco Sanfilippo (INFN)

Kick-off meeting Spoke 2 Centro HPC
13 Ottobre 2022

HIGH PERFORMANCE COMPUTING & LQCD: a paradigmatic use case

Lattice QCD calculations typically require multidimensional integration over the gauge fields

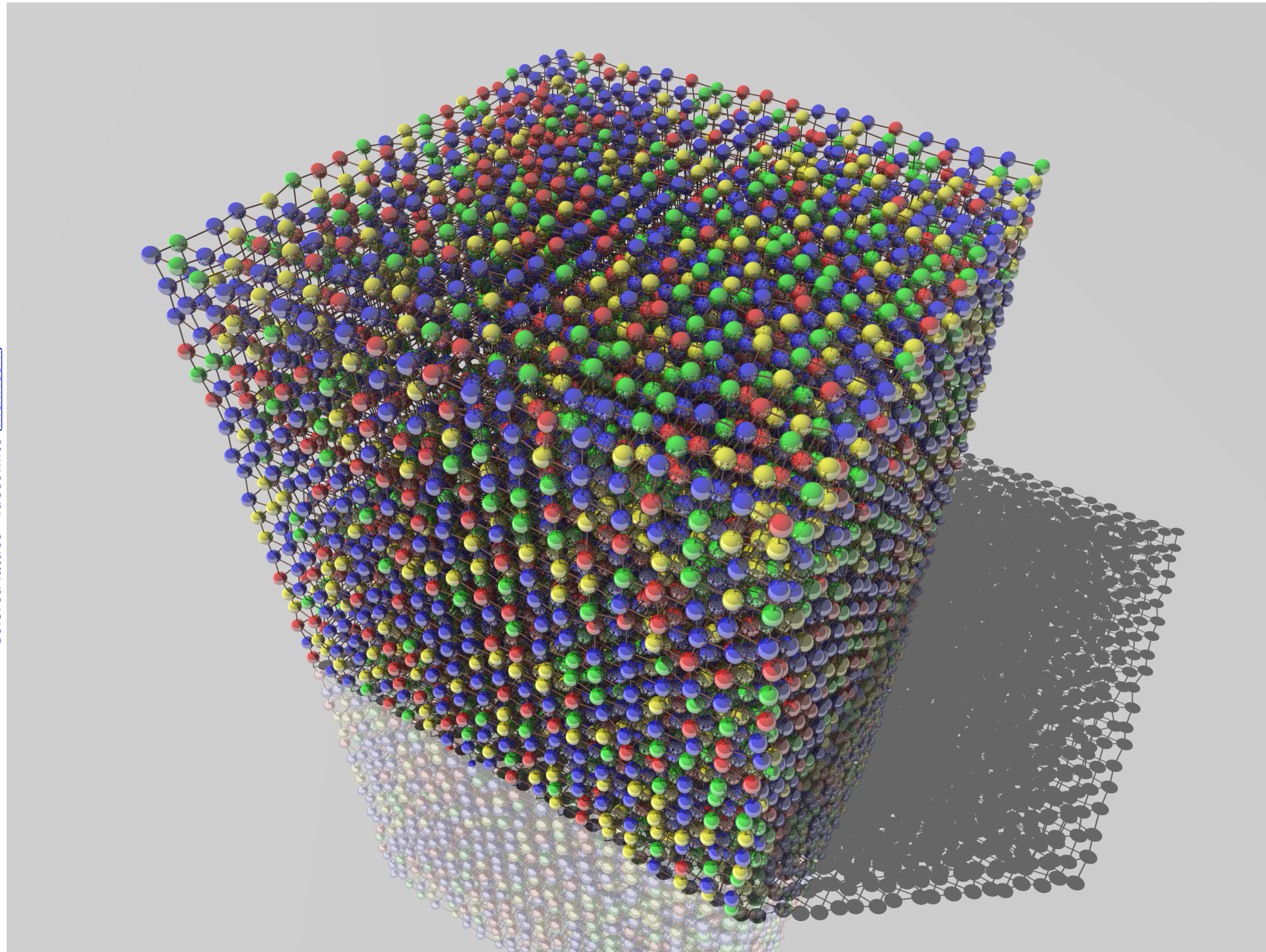


The integration dimension in state-of-the-art calculations is $\mathcal{O}(10^{10})$

Markov Chain Monte Carlo methods are used to perform the multidimensional integrations

Generation of ensembles of configurations with importance sampling via Monte Carlo methods is an essential step in numerical simulations of the path-integral of statistical mechanics systems and field theories.

The development of numerical algorithms is crucial: over the history of lattice gauge theory calculations, the improvement from algorithm development has been similar to the gain from **Moore's law**.



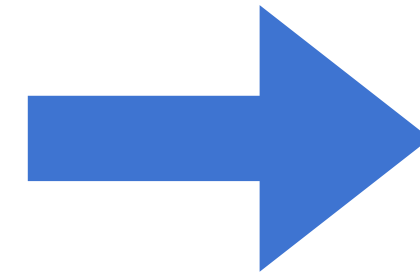
HIGH PERFORMANCE COMPUTING & LQCD: a paradigmatic use case

The Lattice QCD workflow

Monte Carlo sampling phase

$$P_{\text{eq}}(U) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Det}(M^\dagger M) e^{-S(U)}$$

- Generates an ensemble of gluon field configurations U distributed according to the QCD action (using the hybrid Monte Carlo algorithm): $\text{Cost} \propto V^{9/8} a^{-2}$
- This ensemble generation is serially dependent and represents a **strong scaling computational problem**.
- A large number of computing nodes is required. On the largest scales this becomes a **halo-exchange communication problem** since the local data bandwidths vastly exceed those of inter-node communication.



Hadronic observables are calculated on each sampled configuration U :

$$\langle \mathcal{O} \rangle \approx \bar{\mathcal{O}} = \frac{1}{N} \sum_U \mathcal{O}(U)$$

- High degree of trivial parallelism: computer interconnect limitations are more easily avoided by exploiting this trivial parallelism.

Physics goals:

calculations with ensembles of gauge fields with physical volumes V large enough to ensure that finite-volume effects are under control.

● Example at the *exascale frontier*:

Simulation with up/down, strange, charm and bottom quarks at their physical masses with physical volume $V = (10 \text{ fm})^4$ at a lattice spacing $a = 0.04 \text{ fm}$ ($a^{-1} \sim 5 \text{ GeV}$) (lattice size $256^3 \times 512$)
 $\sim 12,000$ Exaflop hours = $12,000 \times (3600 \times 10^{18})$ floating-point operations

I ricercatori coinvolti in WP1 - Lattice Field Theories

- **Mattia Bruno (UniMiB)**
- **Leonardo Giusti (UniMiB)**
- **Alessandro Papa (UniCal)**
- **Leonardo Cosmai (INFN)**
- **Michele Pepe (INFN)**
- **Francesco Sanfilippo (INFN)**

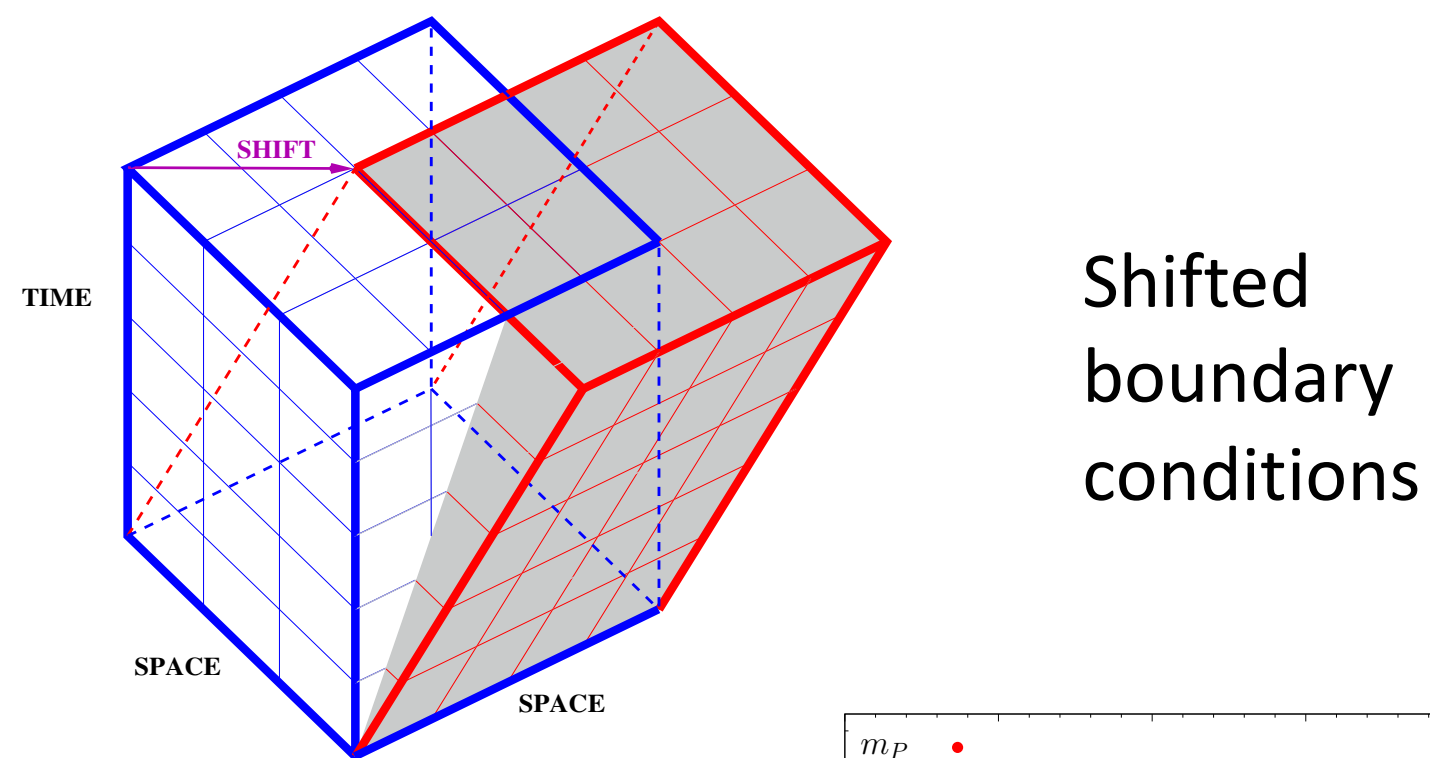
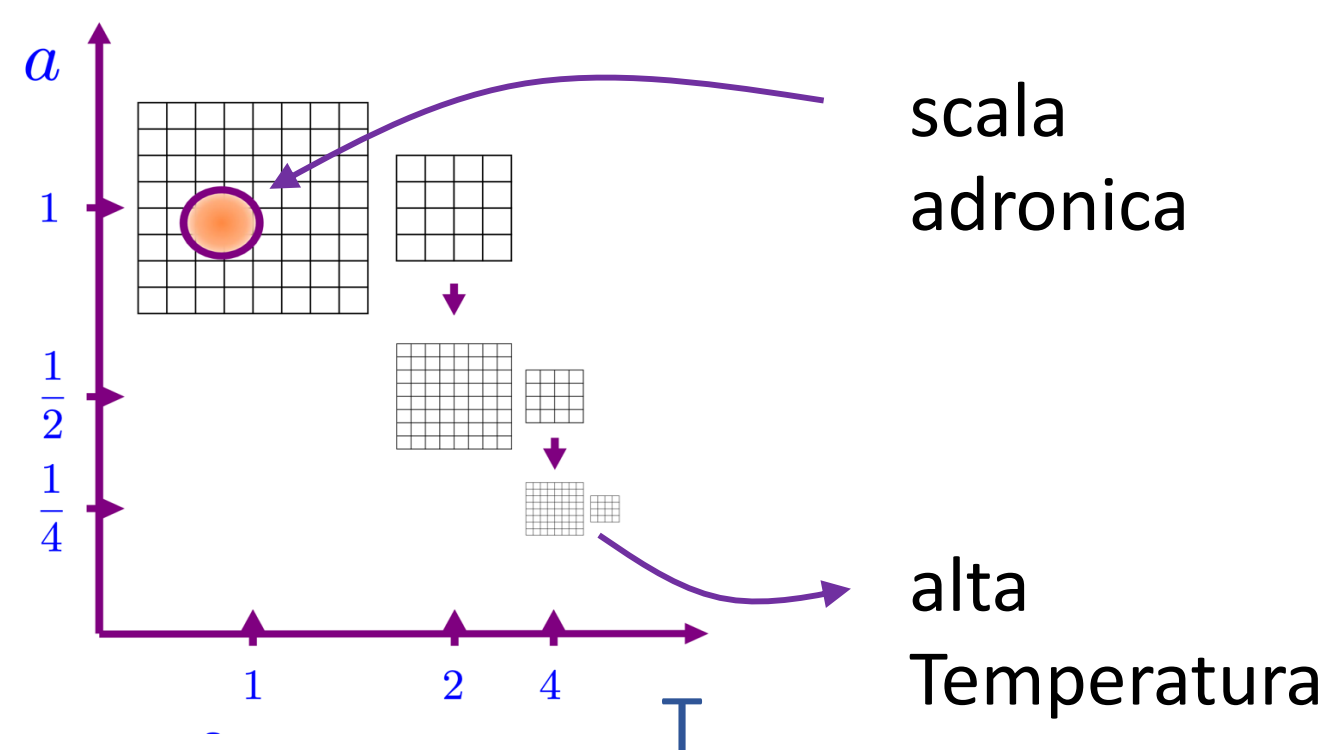
USE CASES

Stato dell'arte

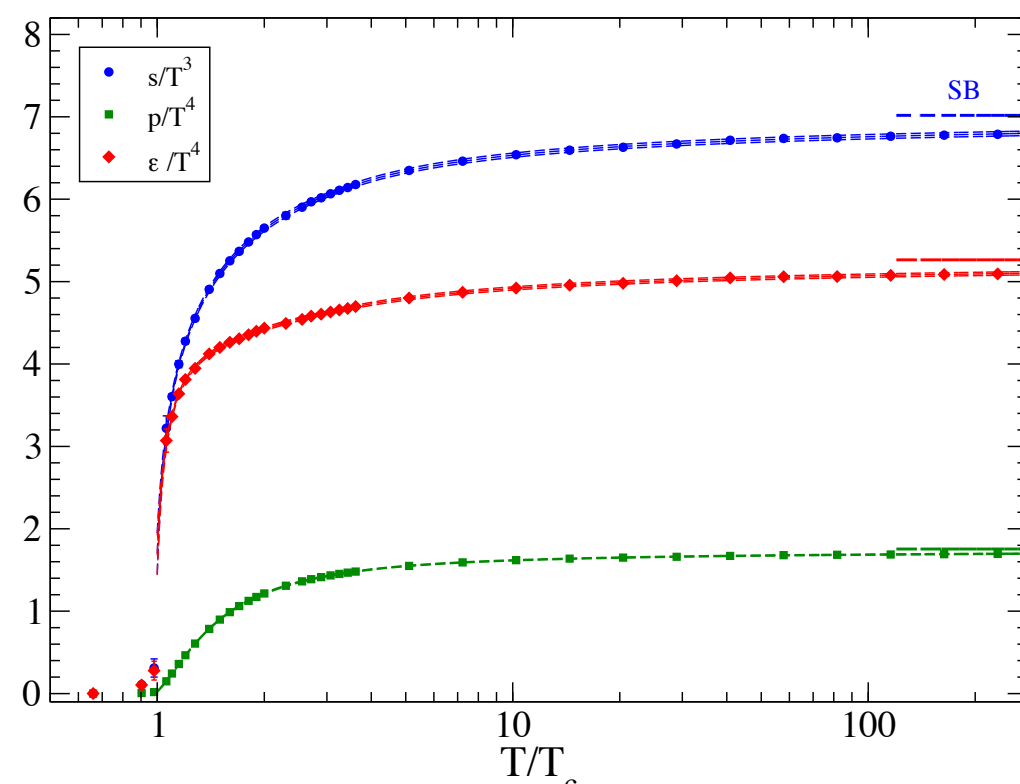
Lo studio di QCD da principi primi a temperatura finita ($T > 1-2 \text{ GeV}$) è computazionalmente molto oneroso.

- Problemi:
- avere nella stessa simulazione due scale di energia molto diverse: T e $\Lambda_{\text{QCD}} \sim 300 \text{ MeV}$
 - sottrazione non-perturbativa del contributo di vuoto

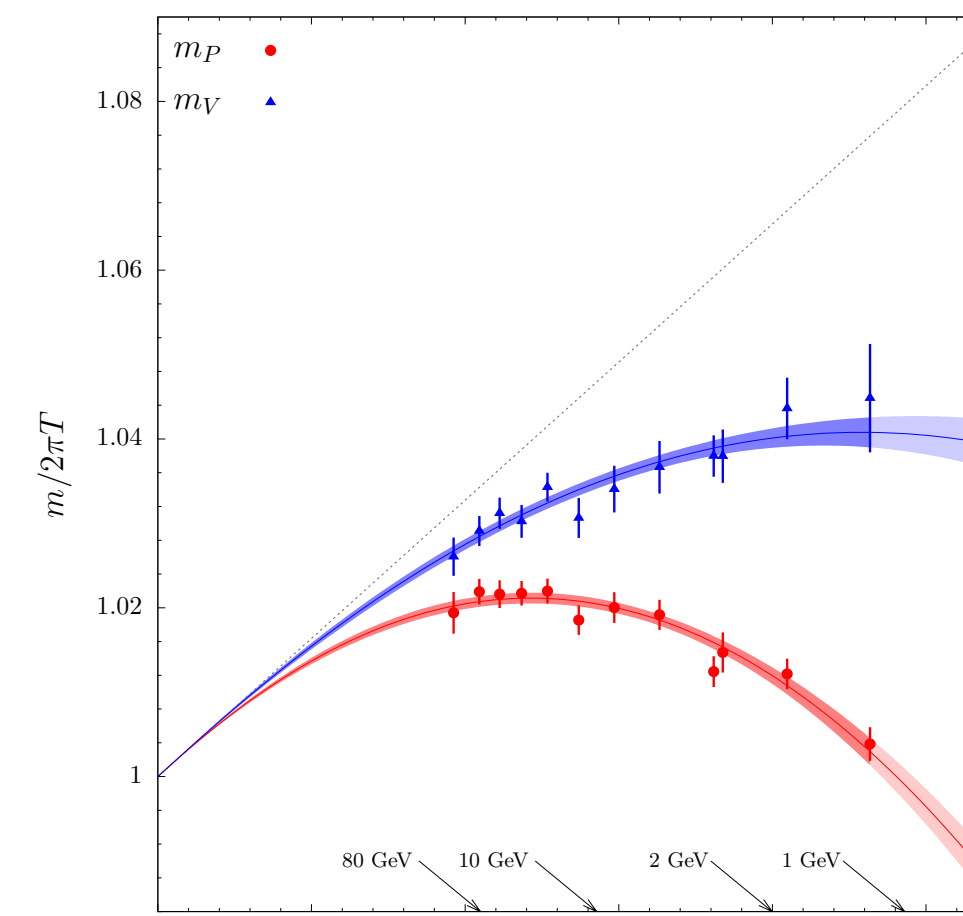
Nuove tecniche numeriche sono state sviluppate di recente



È stato possibile studiare con elevata precisione l'Equazione di Stato nel settore di pura gauge



Primi risultati in QCD per osservabili semplici: masse di screening mesoniche



Use case

Sviluppo di una strategia computazionale e di un algoritmo per la simulazione su reticolo di QCD ad alta temperatura.

La tecnica numerica consentirà di effettuare simulazioni Monte Carlo sfruttando la potenza di calcolo di sistemi HPC pre-Exascale ed Exascale.

Impatto atteso

Il nuovo algoritmo fornirà la comunità scientifica di una tecnica numerica efficiente per lo studio non-perturbativo di QCD ad alta temperatura, da $T \sim 1-2$ GeV fino alla scala Elettro-Debole.

Interazione con WP5

In fase di produzione si vorrebbe creare una repository di configurazioni che potranno essere messe a disposizione di altri gruppi di ricerca

Istituzioni coinvolte

INFN e Università di Milano Bicocca

Multi-level Monte Carlo for lattice QCD: motivation

- Nucleon propagator

$$C_N(x_0) = \langle O_N(x_0) O_{\bar{N}}(0) \rangle \propto e^{-M_N |x_0|}$$

when $|x_0| \rightarrow \infty$ its variance goes as

$$\sigma_{C_N}^2(x_0) \propto \frac{1}{n_0} e^{-3M_\pi |x_0|}$$

so that

$$\frac{\sigma_{C_N}^2(x_0)}{[C_N(x_0)]^2} \propto \frac{1}{n_0} e^{(2M_N - 3M_\pi) |x_0|}$$

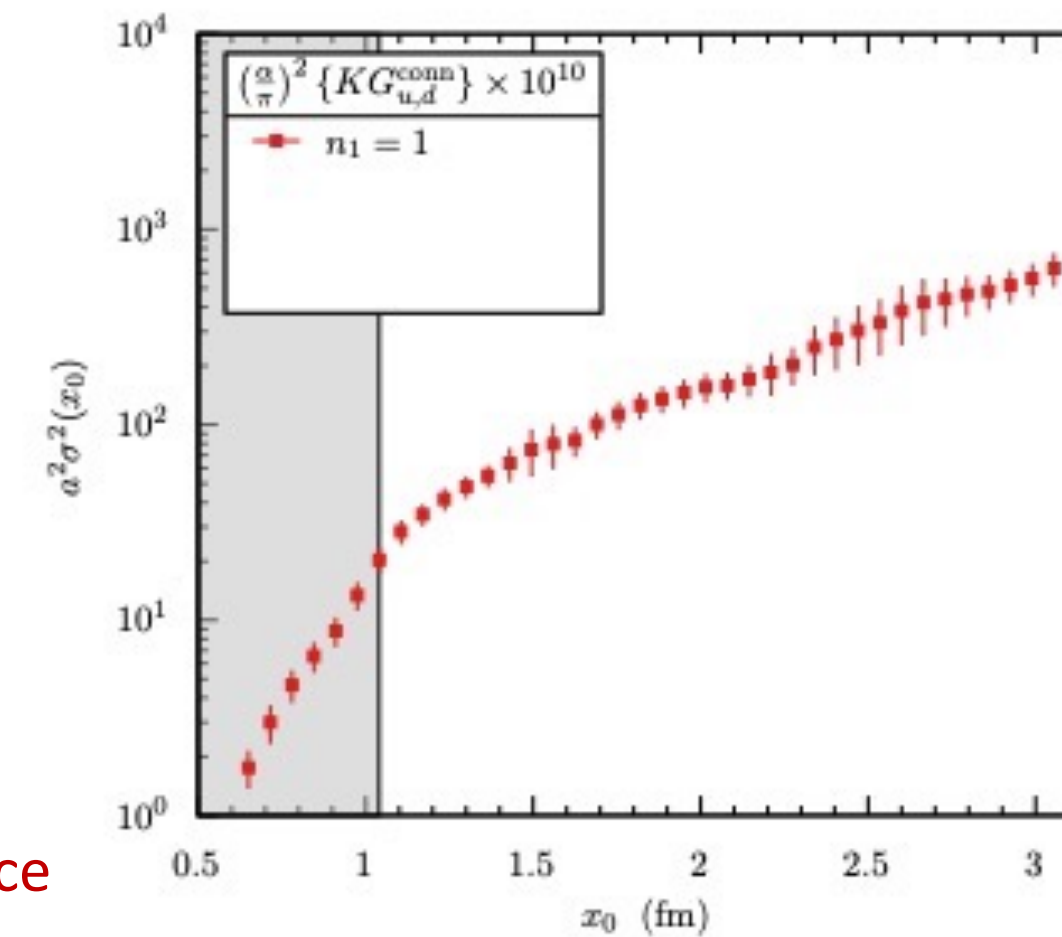
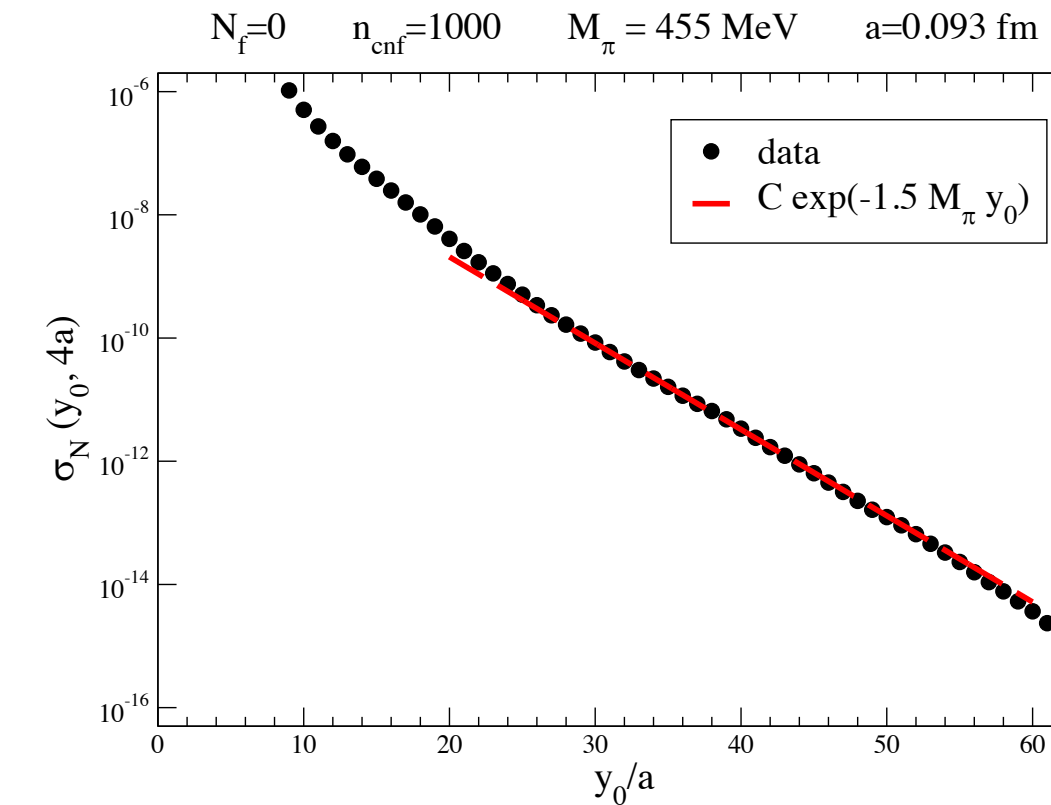
and analogously for other baryonic correlation functions

- For the largest contribution to HVP (light-connected)

$$\frac{\sigma_{G_{u,d}^{\text{conn}}}^2(x_0)}{[G_{u,d}^{\text{conn}}(x_0)]^2} \propto \frac{1}{n_0} e^{2(M_\rho - M_\pi) |x_0|}$$

- Analogous problem for many other hadronic quantities (correlators), e.g. semi-leptonic B-decays, hadron vacuum polarization (HVP), etc.

- We need to reduce the statistical error exponentially with the time-distance of the operators. Cannot be done by brute force since the error in Monte Carlo reduces as $1/\sqrt{n_0}$ where n_0 is proportional to the cost of the simulation



Multi-level Monte Carlo for lattice QCD: the algorithm

- ▶ If the action and the observable can be factorized

$$S[U] = S_0[U_{\Omega_0}] + S_2[U_{\Omega_2}] + \dots$$

$$O[U] = O_0[U_{\Omega_0}] \times O_2[U_{\Omega_2}]$$

then

$$\langle O[U] \rangle = \langle \langle \langle O_0[U_{\Omega_0}] \rangle \rangle_{\Lambda_0} \times \langle \langle \langle O_2[U_{\Omega_2}] \rangle \rangle_{\Lambda_2} \rangle_{\Lambda_1}$$

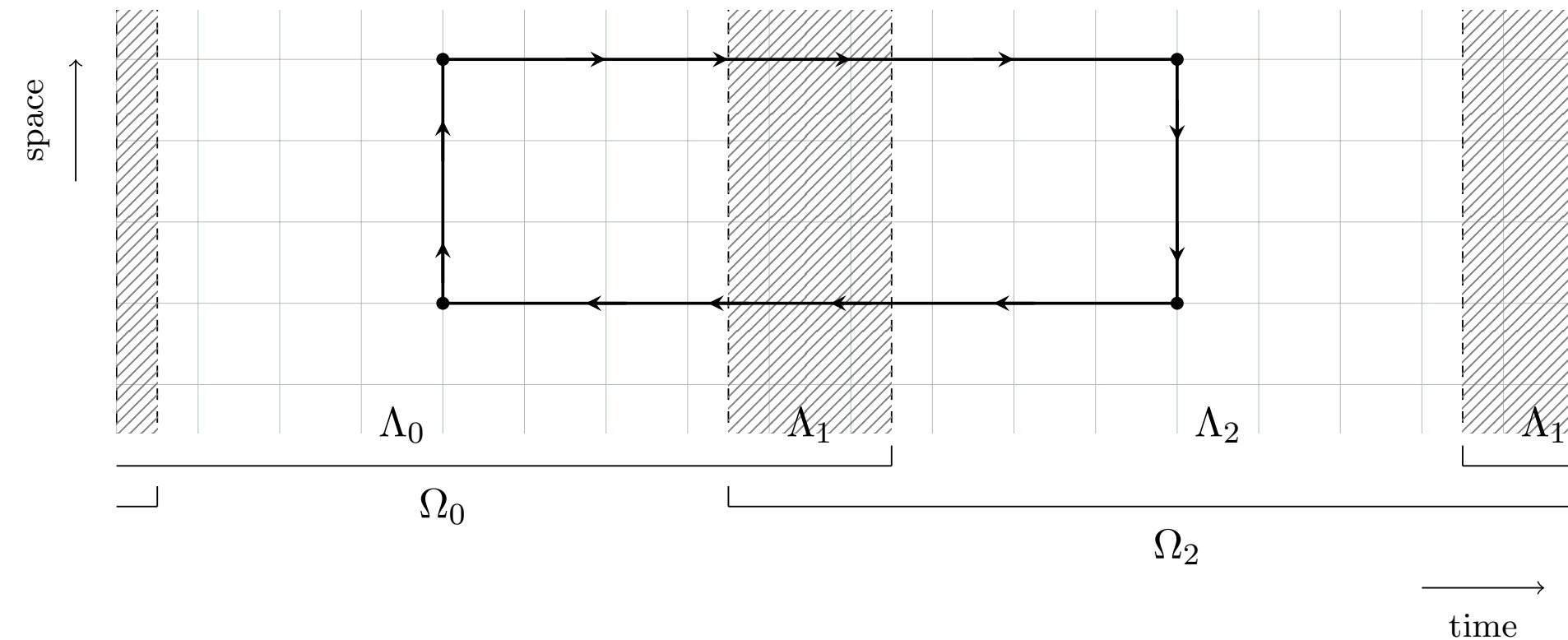
where

$$\langle \langle \langle O_0[U_{\Omega_0}] \rangle \rangle_{\Lambda_0} = \frac{1}{Z_{\Lambda_0}} \int \mathcal{D}U_{\Lambda_0} e^{-S_0[U_{\Omega_0}]} O_0[U_{\Omega_0}]$$

- ▶ Two-level integration:
 - n_0 configurations U_{Λ_1}
 - n_1 configurations U_{Λ_0} and U_{Λ_2} for each U_{Λ_1}
- ▶ With more active blocks, at the cost of approximately $n_0 n_1$ level-0 configurations,

$$n_0 \rightarrow n_0 n_1^{n_{\text{block}}}$$

and gain increases exponentially with the distance since $n_{\text{block}} \propto |y_0 - x_0|$. For the same relative accuracy of correlator, computational effort would then increase approximately linearly with the distance



Multi-level Monte Carlo for lattice QCD: the use case

Use case

Multi-level Monte Carlo for lattice QCD. Development of the computational strategy and of the Monte Carlo code for the numerical simulations.

The numerical strategy and the corresponding code is being designed to run pre-exascale and exascale HPC systems with CPUs

Impact

The multi-level integration will enable the lattice community to compute hadronic physical quantities in QCD with unprecedented precision

Interaction with WP5

The generation of gauge configurations represent the most expensive part of these computations. These configurations need to be stored in a repository and they can be made available to other national and international collaborations

Institutions

University of Milano – Bicocca and INFN

Algorithms and code for computing the isospin breaking corrections to hadronic observables

Isospin breaking in Lattice QCD

M. Bruno

Lattice QCD calculations in isosymmetric limit

i.e. w/o QED and up/down quark masses equal ($m_u = m_d$)

isospin-breaking effects of order a few percent

High-precision tests of the Standard Model require inclusion of QED and $O(m_u - m_d)$ effects:

- ▶ development of numerical strategies and codes (e.g. optimized point source sampling)
- ▶ GPU support for efficient contractions

Requires support: storage of propagators on disk (WP5), GPU code-base (WP4), parallel I/O for fast reading ...

F. Sanfilippo

vedi presentazione in WP4

Simulazioni Monte Carlo di sistemi di spin a bassa dimensionalità come modelli efficaci di teorie di gauge su reticolo a temperatura finita

➔ **Impatto/rilevanza:** estendere la nostra comprensione del diagramma di fase della QCD sul piano temperatura-potenziale chimico barionico, mediante modelli efficaci 3D del loop di Polyakov nel regime di accoppiamento forte e nel limite di quark statici. Il modello efficace può essere formulato nella cosiddetta versione duale, che è esente dal problema del segno che affligge le simulazioni Monte Carlo diretta della QCD a densità finita.

➔ I setup da considerare saranno i seguenti:

- a) teoria di gauge SU(2) con un fermione staggered in 2D;
- b) teoria di gauge SU(3) con due fermioni staggered in 3D;
- c) teoria di gauge SU(2) con due fermioni di Wilson in 3D.

➔ **Tempi:** il tempo stimato è di circa un anno per ciascuna delle voci a)-c), incluso il tempo di sviluppo e test che può essere stimato in 3-4 mesi per voce.

Bibliografia: O. Borisenko, V. Chelnokov, E. Mendicelli, A. Papa, Nucl.Phys.B 965 (2021) 115332, arXiv:2011.08285 [hep-lat]

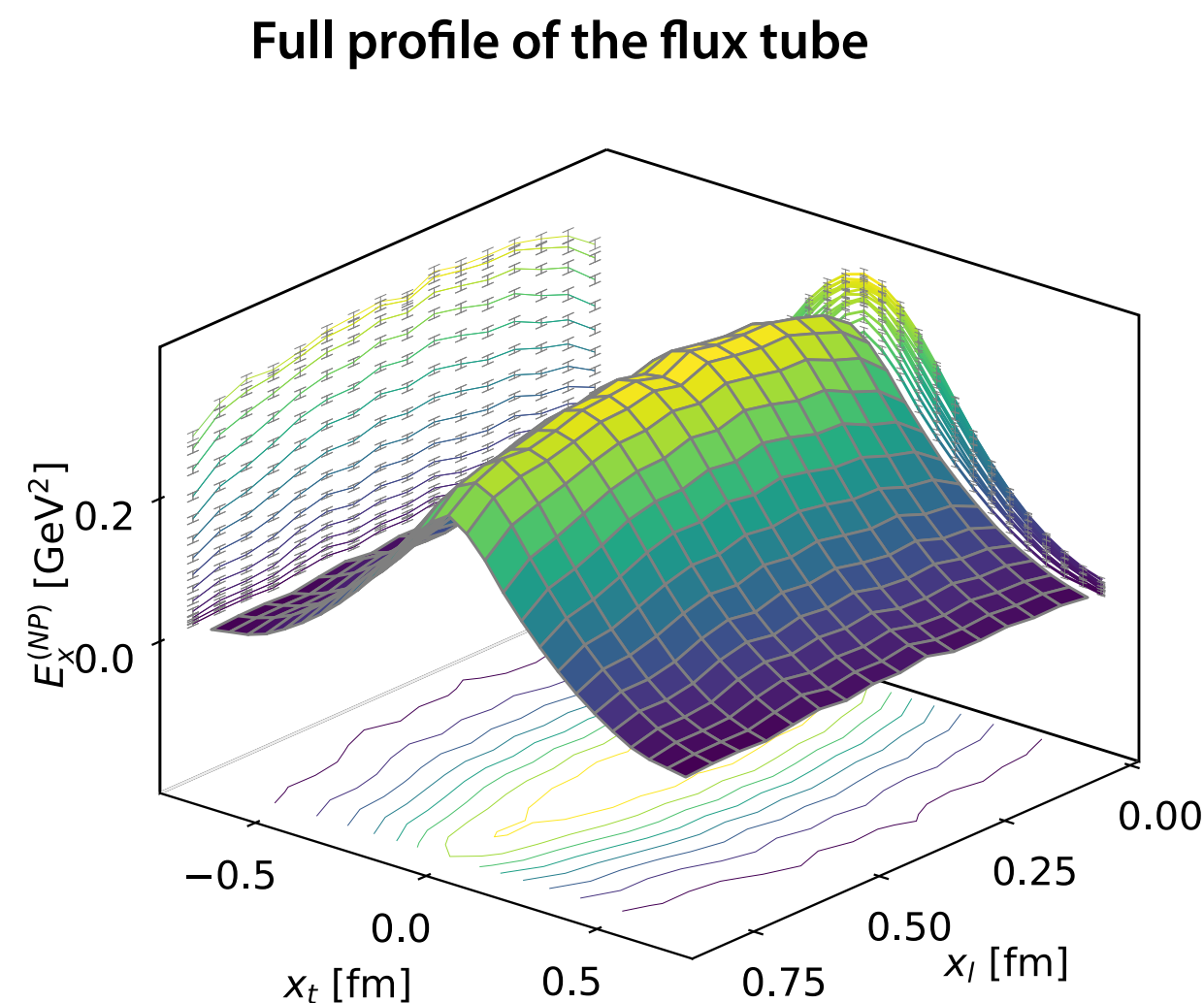
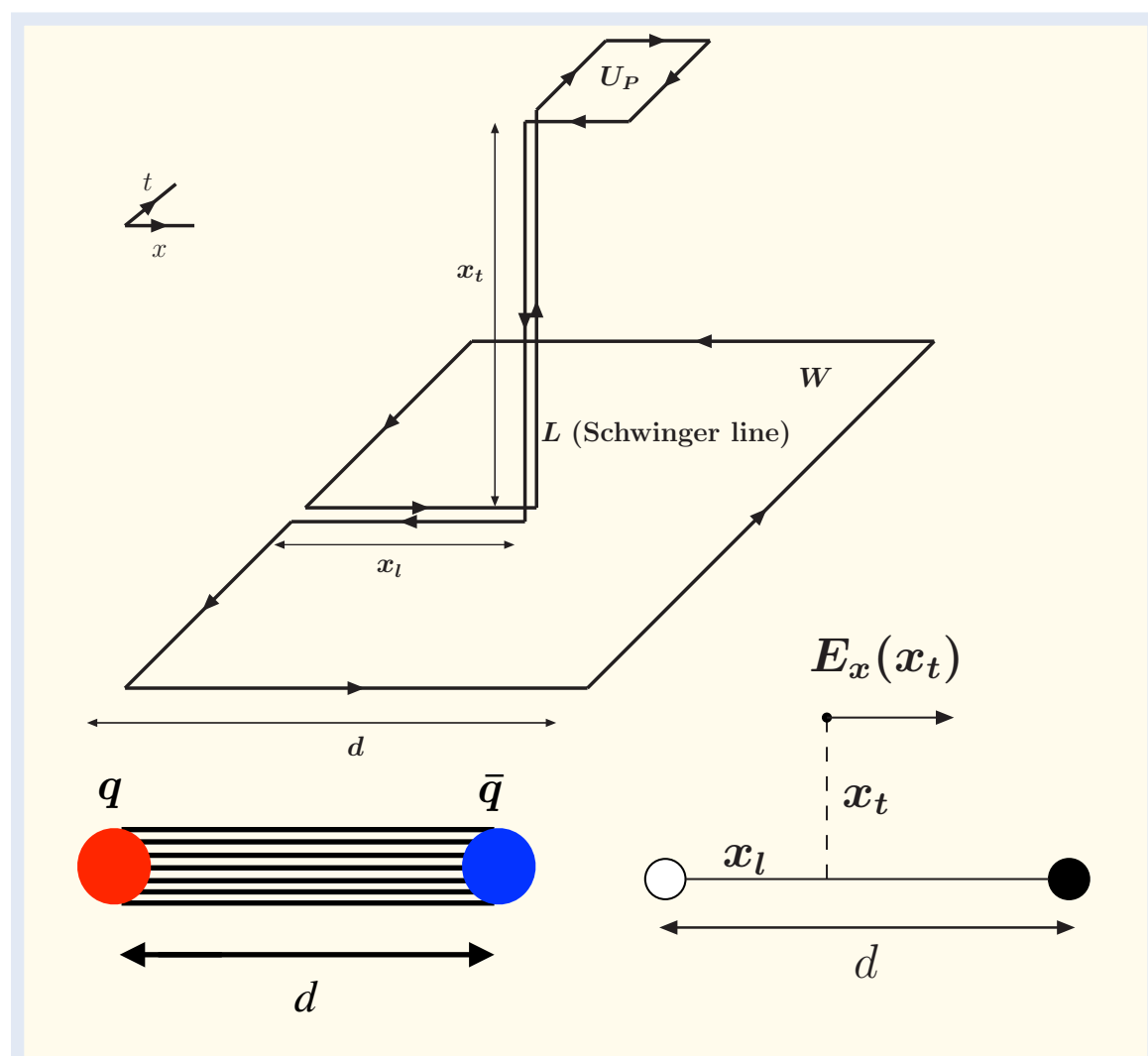
➔ **Risorse di calcolo:** sistemi di calcolo con architetture CPU o GPU connesse con rete tipo Infiniband.

Probabilità di successo: alta

Deliverable:

- codici Fortran per la generazione di ensemble Monte Carlo e per la misura delle osservabili di riferimento
- codici Fortran per l'analisi statistica dei dati
- tool grafici per la visualizzazione dei risultati

Misura del tensore cromoelettromagnetico su configurazioni di gauge in Lattice QCD



[M. Baker, P. Cea, V. Chelnolov, L. Cosmai, F. Cuteri, A. Papa, [arXiv:1810.07133](https://arxiv.org/abs/1810.07133), [arXiv:1912.04739](https://arxiv.org/abs/1912.04739)]

$$\rho_{W, \mu\nu}^{\text{conn}} = \frac{\langle \text{tr}(W L U_P L^\dagger) \rangle}{\langle \text{tr}(W) \rangle} - \frac{1}{N} \frac{\langle \text{tr}(U_P) \text{tr}(W) \rangle}{\langle \text{tr}(W) \rangle}$$

$U_P = U_{\mu\nu}(x)$ plaquette in the (μ, ν) plane L Schwinger line N number of colors

$$\rho_{W, \mu\nu}^{\text{conn}} \xrightarrow{a \rightarrow 0} a^2 g \left[\langle F_{\mu\nu} \rangle_{q\bar{q}} - \langle F_{\mu\nu} \rangle_0 \right]$$

$\langle \rangle_{q\bar{q}}$ average in the presence of a static quark-antiquark pair $\langle \rangle_0$ vacuum average (expected to vanish)

Impatto/rilevanza: comprensione dei meccanismi di confinamento in QCD mediante simulazioni su reticolo spazio-temporale di due sorgenti statiche (un quark e un antiquark) e determinazione con metodi Monte Carlo della distribuzione spaziale dei campi di colore e delle correnti nella regione intorno alle sorgenti.

I setup da considerare saranno i seguenti:

1. QCD con 2+1 fermioni fisici a temperatura nulla;
2. QCD con 2+1 fermioni fisici a temperatura non nulla;
3. QCD con 2+1 fermioni fisici a temperatura e potenziale chimico barionico non nulli e in presenza di campi cromomagnetici esterni

[M. Baker, V. Chelnokov, L. Cosmai, F. Cuteri, A. Papa, [arXiv:2207.08797](https://arxiv.org/abs/2207.08797) e riferimenti ivi contenuti.]

- ➔ **I risultati ottenuti** avranno anche impatto sulla fenomenologia delle particelle elementari, fornendo input quantitativi per i modelli di adronizzazione basati sulla rottura di stringa, come, ad esempio, il modello di Lund.
- ➔ **Tempi:** il tempo stimato è di circa un anno per ciascuna delle voci 1)-3), incluso il tempo di sviluppo e test, che sarà circa pari a zero per la voce 1), mentre può essere stimato in 2-3 mesi per le voci 2) e 3).
- ➔ **Risorse di calcolo:** sistemi di calcolo con architetture CPU o GPU connesse con rete tipo Infiniband.
- ➔ **Sinergie:** WP4, per il porting alle GPU degli algoritmi Monte Carlo e delle routine di determinazione delle osservabili.
- ➔ **Probabilità di successo:** molto alta

L. Cosmai

Condensazione cromomagnetica e confinamento in QCD

Impatto/rilevanza: verifica di un meccanismo per il confinamento del colore proposto da Feynman (R. P. Feynman, "The Qualitative Behavior of Yang-Mills Theory in 2 + 1 Dimensions", Nucl. Phys. B 188 (1981) 479).

Simulazione Monte Carlo di QCD con 2+1 flavor dinamici in presenza di un campo cromomagnetico di background (**modifiche al codice pubblico MILC**).

Tools

● Generazione delle configurazioni di gauge:

Codice pubblico MILC : https://github.com/milc-qcd/milc_qcd

I moduli del codice MILC dedicati alla generazione delle configurazioni di gauge possono essere compilati anche per girare su GPU

MILC collaboration code for lattice QCD calculations

The MILC Code is a body of high performance research software written in C (with some C++) for doing SU(3) lattice gauge theory on high performance computers as well as single-processor workstations.

● Algoritmi di smearing per migliorare il segnale nelle misure su configurazioni di gauge

Introdurre nel codice MILC un nuovo modulo che implementi lo "smearing" di configurazioni di gauge mediante algoritmi di smearing ipercubico su link in direzione tempo (algoritmo HYP) e su link spaziali (algoritmo HYP3d)

Modulo scritto per architetture parallele. Obiettivo di portarlo anche su GPU.

● Misura del tensore del campo cromoelettromagnetico

Il modulo per la misura del tensore cromo e.m. non è presente nella parte pubblica del codice MILC e deve essere prodotto autonomamente e inserito fra i moduli di MILC

Modulo scritto per architetture parallele. Obiettivo di portarlo anche su GPU.

● Script per fare I/O sulle configurazioni di gauge ed effettuare le misure

● Tools per fare analisi statistica sull'insieme di misure prodotte sulle configurazioni di gauge

● Tools per il calcolo di osservabili derivate dalle misure su configurazioni di gauge

● implementazione di un algoritmo di reweighting per misure di osservabili fisiche

● Implementazione, sempre all'interno del codice pubblico MILC, di moduli opportuni per effettuare produzione di configurazioni di gauge per QCD in presenza di densità finita e/o campi di background.

Le risorse di calcolo

- **Accordo Attuativo Cineca-INFN: cluster CPU (Marconi-A3, Galileo100, cluster GPU (Marconi100, Leonardo)**
- **ISCRA-B (produzione); ISCRA-C (sviluppo)**
- **PRACE, EuroHPC JU (produzione)**