

数値解析から見たファインマンループ積分の特徴と多倍長精度積分の適用

高エネルギー加速器研究機構 素粒子原子核研究所 濱口信行(Nobuyuki Hamaguchi)

Institute of Particle and Nuclear Studies,
High Energy Accelerator Research of Organization(KEK)

1. はじめに

素粒子反応の計算は,現在スーパーコンピュータで実行されている広範囲の科学技術計算分野での計算とは全く異なった特徴がある.ここでは,その特徴と問題点を述べ,これに対する対策とその効果,更に今後の取り組みに関して記述した.

2.ループ積分

素粒子反応の計算では,Feynman 図を作成し,この図に対する散乱振幅を導出するループ積分が現れ,これを数値計算で求める事により,通常の数値計算の問題に帰着される.一般的な表式は以下の様になる.[1]

$$I(\varepsilon) = (-1)^N \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{nL/2} \Gamma(N - nL/2) \int_0^1 \prod_{i=1}^N dx_i \delta(1 - x_1 - x_2 - \dots - x_N) \frac{C^{N-n(L+1)/2}}{(D - i\varepsilon C)^{N-nL/2}}$$

n : 時空次元($n=4$), N : ループ内の素粒子の数, L : ループの多重度
 ε : 実定数, C, D : x_1, x_2, \dots, x_N の多項式

今回は,解析解が計算出来ると言われていて,積分法の検討の容易な,赤外発散する一重ループ(vertex type, box type)積分とそれに付随する計算について検討している.[2] 数式で表現すると以下の様になる.素粒子実験との対応では,0.1%の精度が要求される.

(1) infra vertex

$$I(s) = \int_0^{1-x} \int_0^1 \frac{1}{D} dy dx \quad (D = -xys + (x+y)^2 m_e^2 + (1-x-y)\lambda^2)$$

(2) infra box

$$I(s) = \int_0^{1-x} \int_0^{1-x-y} \int_0^1 \frac{1}{D^2} dz dy dx$$

$$(D = -xys - tz(1-x-y-z) + (x+y)\lambda^2 + (1-x-y-z)(1-x-y)m_e^2 + z(1-x-y)m_t^2)$$

パラメータの物理的意味は以下の様になっている。

m_e : 電子の質量 GeV , m_f : フェルミ粒子の質量 GeV , s, t : 衝突エネルギー (GeV^2), $t < 0$

λ : 仮想光子質量 (GeV): 実際の物理計算では $\lambda = 10^{-30}$ あたりが要求される。

3. 数値積分の特徴と問題点

数値積分では、積分領域内に特異点があるので、微小量 ε を使用して、被積分関数 D を $D-i\varepsilon$ にして有理化し、 $\varepsilon \rightarrow 0$ で得た値を求める積分値としている。

この計算の特徴と問題点として以下の3項目が挙げられる。

- (1) 桁落ちが激しく、4倍精度演算を使用しても、積分計算と解析解が計算できない。
- (2) 同じ式で、少ない数のパラメータに対し、実行時間がパラメータの値に依存し、数秒以内から、数日まで大幅に変動する。
- (3) 有理化の方法により、実行時間が大きく変わったり、積分結果が異なる場合がある。

4. 必要な対策

3で記述した問題点から以下の項目について検討した所、それぞれの要因が複雑に絡みあっている事がわかった。

- (1) 4倍精度演算の見直しと4倍精度超の多倍長精度演算
- (2) 解析近似解及び式の誤差の算出
- (3) 桁落ちの激しい原因の追究と、回避に適していて、並列化効果のある数値積分法の選択
- (4) 有理化の方法により積分結果の異なる原因の追究と対策

5. 解析近似解及び誤差

infra vertex, infra box とともに、 $s < 0$ での解析近似解をもとめ、 $s \rightarrow s+i\varepsilon$ で解析接続した値と積分結果を比較し、その精度を求めている。

5.1 infra vertex

$$s = -500^2, t = -150^2, m_e = 0.0005, \lambda = 10^{-30}$$

$$\text{解析近似解} \quad \left(\frac{1}{-s} \right) \left[\ln \left(\frac{\lambda^2}{m_e^2} \right) \ln \left(\frac{m_e^2}{-s} \right) + \frac{1}{2} \ln^2 \left(\frac{m_e^2}{-s} \right) - \frac{\pi^2}{6} \right]$$

$$\text{相対誤差} \quad \frac{m_e^2}{-s} = 10^{-12}$$

算出に当たり以下の近似式[2]を使用している.

$$\int_0^1 \frac{1}{-sx(1-x) + m_e^2} dx = \frac{2}{-s} \ln \left(\frac{-s}{m_e^2} \right)$$

$$\int_0^1 \frac{1}{-sx(1-x) + m_e^2} \ln \left[\frac{-sx(1-x) + m_e^2}{m_e^2} \right] dx = \frac{1}{-s} \left[\ln^2 \left(\frac{-s}{m_e^2} \right) - \frac{\pi^2}{3} \right]$$

5.2 infra box

$$s = -500^2, t = -150^2, m_f = 150, m_e = 0.0005, \lambda = 10^{-30}$$

$$A(z) = tz^2 + (-t + m_f^2 - m_e^2)z + m_e^2$$

解析近似解

$$\frac{1}{2} \int_0^1 \frac{1}{A(z)} dz \times \int_0^1 \frac{1}{-sx(1-x) + \lambda^2} dx = \frac{1}{-s(-t + m_f^2)} \ln \left(\frac{-s}{\lambda^2} \right) \ln \frac{(-t + m_f^2)^2}{m_f^2 m_e^2}$$

$$\int_0^1 \frac{1}{A(z)} dz = \frac{1}{-t + m_f^2} \ln \frac{(-t + m_f^2)^2}{m_f^2 m_e^2}, \int_0^1 \frac{1}{-sx(1-x) + \lambda^2} dx = \frac{2}{-s} \ln \left(\frac{-s}{\lambda^2} \right)$$

$$\text{相対誤差} \quad \frac{\lambda}{\ln \left(\frac{-s}{\lambda^2} \right)} \frac{\pi(-t + m_f^2)}{m_e \ln \frac{(-t + m_f^2)^2}{m_e^2 m_f^2}} = 7 \times 10^{-26} \text{以下}$$

注意点としては解析近似解を求める際, $D = -xys + (x+y)\lambda^2 + (1-x-y)^2 A(z)$,

$$x+y=\rho \text{として} \int_0^1 \int_x^1 \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{x}{D} \right) + \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\rho}{D} \right) \right) d\rho dx = \int_0^1 \frac{1}{-sx(1-x) + \lambda^2} dx$$

を算出しているが,

$$\int_0^1 \int_x^1 \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{x}{D} \right) + \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\rho}{D} \right) \right) d\rho dx = \int_0^1 \int_0^\rho \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{x}{D} \right) dx d\rho + \int_0^1 \int_x^1 \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\rho}{D} \right) d\rho dx$$

$$= \int_0^1 \frac{\rho}{\rho\lambda^2 + (1-\rho)^2 A(z)} d\rho + \int_0^1 \frac{1}{-sx(1-x) + \lambda^2} dx - \int_0^1 \frac{x}{x\lambda^2 + (1-x)^2 A(z)} dx$$

$$= \int_0^1 \frac{1}{-sx(1-x) + \lambda^2} dx$$

と積分路を変更している事である.

以上からどちらのケースも積分計算結果の精度検証には十分な精度をもった解析近似解となっている.

6. 数値積分法

解析近似解の算出より, $a \gg 1 \gg c > 0$ で $\int_0^1 \frac{1}{ax^2 - ax + c} dx$ の計算の問題である事が

わかる.

$$x=0, x=1 \text{ で } ax^2 - ax + c = c, \quad x \doteq \frac{c}{a}, x \doteq 1 - \frac{c}{a} \text{ で } ax^2 - ax + c = 0$$

より,境界と特異点が近く,有理化した場合でも

$$x=0, x=1 \text{ で実数部は } \frac{1}{ax^2 - ax + c - i\varepsilon} = \frac{c}{c^2 + \varepsilon^2}$$

$$x \doteq \frac{c}{a}, x \doteq 1 - \frac{c}{a} \text{ で実数部は } \frac{1}{ax^2 - ax + c - i\varepsilon} = 0$$

と $\varepsilon \rightarrow 0$ としたときの境界付近での被積分関数の変動が大きく,桁落ちが激しくなる. この事から,以前使用していた誤差を評価しながら領域を二分割して行く Gauss-Kronrod 積分法[3]は 0 付近に達するまでの分割回数の多さ,1 付近の計算機イプシロン(閾値)の制限により不向きなため,端点特異点を持つ被積分関数の積分に強く,基本的には領域は分割せず,標本点をふやして積分計算結果の精度をあげていくため,並列化効果の大きい二重指数関数型積分法[4]を使用する事になった.

7. 有理化と加速法

被積分関数は実有理関数であり,算出した解析近似解から被積分関数を微小量 $i\varepsilon$ で有理化して得た積分値の数列は $\varepsilon^k \ln^l(\varepsilon)$ ($l \geq 0, k > 0$ の整数)を含んだものとなる.この数列に対しては,Aitken 加速法の一般形である ε -算法[5]が適している.

以上から加速法は ε -算法を使用した.

有理化の方法により積分結果が異なったのは *infra box*

$$s = 500^2, t = -150^2, m_e = 0.0005, m_f = 150, \lambda = 10^{-30}$$

$$D = -xys - tz(1-x-y-x) + (x+y)\lambda^2 + (1-x-y-z)(1-x-y)m_e^2 \\ + z(1-x-y)m_f^2$$

$$I = \int_0^1 \int_0^{1-x} \int_0^{1-x-y} \frac{1}{D^2} dz dy dx \quad \text{で } D \rightarrow D - i\varepsilon \text{ で有理化して得た虚数部の値である.}$$

ε の初期値 ε_0 により, $\varepsilon \rightarrow 0$ として得られた値は以下の様になっている.

(数列としては十分な精度で収束している.)

(1) $\varepsilon_0 \gg m_e^2$	0.142647572794761143d-09
(2) $m_e^2 \gg \varepsilon_0 \gg \lambda^2$	0.371536892867592250d-08
(3) $\lambda^2 \gg \varepsilon_0$	0.743073784900021472d-08

$$s = -500^2 \text{ の場合の解析近似解 } I = \frac{1}{-s(-t+m_f^2)} \ln\left(\frac{-s}{\lambda^2}\right) \ln\left(\frac{-t+m_f^2}{m_e^2 m_f^2}\right)$$

で $s = 500^2 + i\varepsilon$ とすると虚数部の値は $\ln\left(\frac{-s}{\lambda^2}\right)$ の項が $-\pi$ となり, (3) の結果と一致

する. $\ln\left(\frac{-s}{\lambda^2}\right)$ の項が $-\frac{\pi}{2}$ の場合, (2) の結果と一致するので (2) と (3) の違いは

$$\int_0^1 \frac{1}{-sx(1-x) + \lambda^2} dx \text{ の有理化に原因がある事がわかる. また物理現象とは相入れない}$$

が λ^2, m_e^2 を $i\varepsilon$ とすると (1) の結果となる. これは, 特異点のない被積分関数を有理化し

て積分した事による. これは解析近似解の算出で積分路を変更した部分

$$\int_0^1 \int_x^1 \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{x}{D} \right) + \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\rho}{D} \right) \right) d\rho dx = \int_0^1 \int_0^\rho \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{x}{D} \right) dx d\rho + \int_0^1 \int_x^1 \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\rho}{D} \right) d\rho dx$$

$$D = -sx(\rho-x) + \rho\lambda^2 + (1-\rho)^2 A(z) \text{ で右辺の } D \text{ にそれぞれ } D - i\varepsilon_1, D - i\varepsilon_2$$

をいれると, 特異点のない $\int_0^1 \frac{x}{x\lambda^2 + (1-x)^2 A(z)} dx$ ($A(z) \geq m_e^2 > 0$) を有理化する

事になるためである。 s にそれぞれ $s+i\varepsilon_1, s+i\varepsilon_2$ を入れると,右辺は

$$\int_0^1 \frac{1}{-(s+i\varepsilon_2)x(1-x)+\lambda^2} dx \text{ となり, } \int_0^1 \frac{x}{x\lambda^2+(1-x)^2 A(z)} dx \text{ の形の積分の項は出てこ}$$

ない。 $\varepsilon \gg m_e^2$ とすると $A(z) = tz^2 + (-t + m_f^2 - m_e^2)z + m_e^2$.

$$\left| \frac{\varepsilon}{A(z)^2 + \varepsilon^2} - \frac{\varepsilon}{(A(z) - m_e^2)^2 + \varepsilon^2} \right| \leq \frac{m_e^4}{\varepsilon(m_e^4 + \varepsilon^2)}, \frac{\varepsilon}{A(z)^2 + \varepsilon^2} \leq \frac{1}{\varepsilon} \text{ より}$$

$$\int_0^1 \frac{\varepsilon}{A(z)^2 + \varepsilon^2} dz \text{ と } \int_0^1 \frac{\varepsilon}{(A(z) - m_e^2)^2 + \varepsilon^2} dz \text{ の相対誤差は } \frac{m_e^4}{m_e^4 + \varepsilon^2} \text{ 以下 となる.}$$

$$m_e^4 = 6.25 \times 10^{-14} \text{ より, 虚数部の計算では } \int_0^1 \frac{1}{A(z) - i\varepsilon} dz \text{ は } \int_0^1 \frac{1}{A(z) - m_e^2 - i\varepsilon} dz$$

と十分な精度で一致する事になる.以上から $\varepsilon \gg m_e^2$ の場合, $D \rightarrow D - i\varepsilon$ と有理化すると実際の物理現象と異なる計算をする事になる.

(2)と(3)に関しては, $D = -s(1-x) + \lambda^2$ とし, $\int_0^1 \frac{1}{D} dx$ の有理化を考えれば良い.

超関数との関連で,有限区間の実有理関数の積分[6]により

$D \rightarrow D - i\varepsilon, s \rightarrow s + i\varepsilon$ とした場合の虚数部の値は以下の様になる.

$$\begin{aligned} D \rightarrow D - i\varepsilon \text{ の場合 } \quad I(\text{虚数部}) &= \frac{2}{s} \left[\arctan\left(\frac{s - \lambda^2}{\varepsilon}\right) + \arctan\left(\frac{\lambda^2}{\varepsilon}\right) \right] \\ s \rightarrow s + i\varepsilon \text{ の場合 } \quad I(\text{虚数部}) &= \frac{2}{s} \left[\arctan\left(\frac{s^2 + \varepsilon^2 - s\lambda^2}{\lambda^2 \varepsilon}\right) + \arctan\left(\frac{s}{\varepsilon}\right) \right] \end{aligned}$$

$$s = 500^2, \lambda^2 = 10^{-60} \text{ より } \varepsilon \gg \lambda^2 \text{ なら } D \rightarrow D - i\varepsilon \text{ では } I \doteq \frac{2\pi}{s2},$$

$s \rightarrow s + i\varepsilon$ では $I \doteq \frac{2}{s}\pi$ となる.以上より,有限個の数値で, $\varepsilon \rightarrow 0$ での値を求めるには,

$s \rightarrow s + i\varepsilon$ で有理化する方が, $D \rightarrow D - i\varepsilon$ で有理化するより,収束が速く,正しい値を得る事が出来る.

8. 多倍長精度演算

桁落ちなどで解析解が計算出来ない場合がある等,浮動小数点演算には減算による桁落

ちの問題がある.

例えば,Rump's の例題[7]

$$a=77617.0, b=33096.0$$

$$f = 333.75b^6 + a^2(11a^2b^2 - b^6 - 121b^4 - 2) + 5.5b^8 + \frac{a}{2b} \text{ で } a^2 = 5.5b^2 + 1 \text{ の}$$

$$\text{関係を用いると, } f = -2 + \frac{a}{2b} = -\frac{54767}{66192} = -0.82736059946\dots \text{となるが計算機では,}$$

$$\text{倍精度演算 } f = -0.118059162071741130 \times 10^{22}$$

4倍精度演算 $f = 1.17260394053\dots$ と全く異なった結果となる.これは

$$A = 333.75b^6 + a^2(11a^2b^2 - b^6 - 121b^4 - 2) \\ = -7917111340668961361101134701542942850$$

$$B = 5.5b^8 = 7917111340668961361101134701542942848$$

でA+Bの演算で121ビットの桁落ちが発生する事による.すなわち有効桁数10進37桁以上(4倍精度演算超)の多倍長精度演算が必要になる.

多倍長精度演算(4倍精度演算も含む)は,多倍長精度変数を複数個の倍精度変数の和で表し,演算は倍精度変数a,bの加減算 $a \pm b$,乗算 $a \times b$ を2つの倍精度変数c,dの和 $c + d$ で誤差なく求める浮動小数点演算方式[8]を使用した.この演算はコンパイラの最適化機能の一部を抑制する必要があり,その影響が及ぶ範囲により,性能が大きく左右されるので注意が必要となる.逆に影響する範囲が少なくなる改善がなされると,性能が大きく向上する可能性を秘めている事になる.

9. 領域分割

$\lambda = 10^{-30}$ の様な場合,二重指数関数型積分では,積分領域を数個の領域に分割すると精度の良い結果が得られる.積分領域を分割する場合,変数変換により積分領域をvertexでは, $[0,1] \times [0,1]$,boxでは, $[0,1] \times [0,1] \times [0,1]$ にする.また0.5に対する対称性を利用して,積分領域を $[0,1]$ から $[0,0.5]$ にして計算機イプシロンの制限にかからない様にして,精度を上げる.

9.1 vertex の領域分割

$$\text{積分計算前に, } \gamma = \frac{2\lambda^2(\sqrt{1 + \frac{(s-4m_e^2)}{\lambda^2}} - 1)}{s - 4m_e^2}, \alpha = \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{4m_e^2}{s}}}{2}$$

を計算して,(x,y)=[0,1]×[0,0.5]の領域を以下の3つの領域に分割する.

$$\begin{array}{ll} \text{[I]} & [0, \gamma] \times [0, 0.5] \\ \text{[II]} & [\gamma, 1] \times [0, \alpha] \\ \text{[III]} & [\gamma, 1] \times [\alpha, 0.5] \end{array}$$

9.2 box

box では z 軸積分を最外側にする.

積分実行前に $\alpha = \frac{4m_e^2}{s-4m_e^2} \left(\sqrt{1 + \frac{s-4m_e^2}{4m_e^2}} - 1 \right)$ を計算する. また z の値が定まると

$A(z)$ の値が定まるので, $\beta = \frac{4A(z)}{s-4A(z)} \left(\sqrt{1 + \frac{s-4A(z)}{4A(z)}} - 1 \right)$ を求める.

この値より, $(x,y) = [0, \beta] \times [0, 1] \oplus [\beta, 1] \times [0, 0.5]$ の領域を以下の 4 つに分割する.

- [I] $[0, \alpha] \times [0, 1]$
- [II] $[\alpha, \beta] \times [0, 1]$
- [III] $[\beta, 1] \times [0, \beta]$
- [IV] $[\beta, 1] \times [\beta, 0.5]$

(注-1) vertex, box の領域分割では $0 < \lambda^2 \ll 1$ を使用している.

(注-2) \oplus は領域の和を表している.

10. 実行結果

以上の項目を検討し, パラメータの値

$s = 500^2, t = -150^2, m_t = 150, m_e = 0.0005, \lambda = 10^{-30}$ での実行結果は以下の様に,

ともに素粒子実験から要求される精度, 物理計算で要求される λ の値を満たしている.

infra vertex 演算結果 (4倍精度演算)

実数部: 解析近似解	-0.15089928D-01	虚数部: 解析近似解	0.18922983D-02
計算値	-0.15089928D-01	計算値	0.18922983D-02

infra box 多倍長精度演算結果 (実数部)

解析近似解	-0.3561736812D-06		
4倍精度(改善前)	-0.3560350627D-06	相対誤差	0.039%
4倍精度(改善後)	-0.3560594322D-06	相対誤差	0.032%
6倍精度	-0.3561608223D-06	相対誤差	0.004%
8倍精度	-0.3561449971D-06	相対誤差	0.008%

また 4 倍精度で single CPU で数日かかっていた infra box の計算が並列化効果 (4 倍精度はすでに並列化していたものを更に改善)により,以下の仕様の T2K 筑波システム

T2K 筑波システム AMD quad-core Opteron 8000 シリーズ(Barcelona)
1 node:ピーク性能 147GFLOPs,16MPI/node

を使用して 2~3 分で計算出来ている.

実行時間一覧表(秒)

演算精度	64MPI	128MPI	256MPI	
4倍精度	2445	1226	626	(改善前)
4倍精度	414	207	103	(改善後)
6倍精度	372	195	102	
8倍精度	708	373	196	

この結果では,精度,性能を合わせると 6 倍精度演算が最も適している.
また 4 倍精度演算での性能向上はプログラムチューニングで 2 倍,最適化機能の一部抑止の影響範囲の縮小の改善により 3 倍の計 6 倍となっている.

11.まとめ

解析近似解の算出とその誤差の評価,数値積分法の変更,多倍長精度演算により,infra vertex,infra box の計算の大幅な改善が得られた.今後はより複雑な 1 ループ積分(pentagon,hexagon),2 ループ積分での精度向上及び実行時間の短縮に取り組んでいく.

謝辞

様々な助言,および計算機使用に関して配慮いただいた高エネルギー加速器研究機構の石川正准教授,湯浅富久子准教授に感謝いたします.

参考文献

- [1]高エネルギー素粒子反応に対する高次補正を含む自動計算プログラム (その2)
高エネルギー加速器研究機構:湯浅富久子,石川正,栗原良将,清水韶光,濱口信行
工学院大学院大学:加藤潔
日本物理学会 第 66 回年次大会
- [2]Radiative Corrections to e^+e^- Reactions in Electroweak Theory :
JUNPEI FUJIMITO,Masataka IGARASHI,NOBUYA NAKAZAWA,
YOSHIMITSU SHIMIZU and KEIJIRO TOBIMATSU
Reprinted from Progress of Theoretical Physics Supplement NO.100(1990)
- [3]QUADPACK a subroutine Pacage for Automatic integration
R.Piessens,E.de Doncker-Kapenga,C.W.Uberhuber,D.K.Kahaner

Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York Tokyo 1983

[4]数值解析 森正武 2002年 共立出版

[5]数值計算 伊理正夫 1981年 朝倉書店

[6]複素関数論 森正武,杉原正顯 2003年 岩倉書店

[7] **Interval Computation**

**Regivan rlugo Nunes Santiago Departamento de informática e
Matemática Aplicada Universidade Federal do Rio Grande do Norte
Natal-Rio Grande do Norte-Brasil 24 de outubro de 2007**

[8]Quad-Double Arithmetic : Algorithms,Implementation,and Application

Yozo Hida,Xiaoye S.Li,David H.Bailey October 30,2000