

二重指数関数型積分法の素粒子物理学への応用

湯浅 富久子[†] 濱口 信行^{††}

素粒子反応の散乱断面積の計算に現われるファインマン・ループ積分(積分領域内に特異性をもつ多次元複素積分)を二重指数関数型積分法と ϵ 算法を組み合わせて直接計算を遂行する方法(DE-直接計算法)について、最近の進捗を報告する。MPI ライブラリを用いて同方法の並列化を行い、計算実行時間の大幅短縮を実現したので、その試験結果もあわせて報告する。

Double Exponential Integration Method with ϵ algorithm for the Feynman Loop Integration Calculation

FUKUKO YUASA[†] and NOBUYUKI HAMAGUCHI^{††}

We present a recent progress of the direct numerical method of Feynman loop integrals appearing in the calculation of the scattering amplitudes. Our direct numerical method is based on an efficient numerical multi-dimensional integration method and an efficient extrapolation. In this article, we examine the applicability of the Double Exponential Integration method with ϵ algorithm to the Infrared divergent physics process. Test results are given for one-loop vertex and box type loop integrals. Parallelization to reduce the execution time by using MPI library are also discussed.

1. はじめに

摂動論による素粒子反応の散乱断面積の計算では、素粒子反応をファインマン図で表し、ファインマン則に従って散乱振幅を書き下す、というものがある。その散乱振幅の絶対値の2乗を位相空間で積分し反応断面積を理論値として得、これを実験での観測量と比較する。理論値を得る過程は、従来は人手で解析的手法で行われていたが、実験の重心系の衝突エネルギーが増加し、発生する素粒子反応が複雑化したため、一連の過程を人手でやり遂げる事は困難になった。代わりに近似を用いた計算を行うことも多くされているが、近年の情報科学の発展を考えれば、過程の全てを計算機で行なう「自動計算システム」という発想は極めて自然である。この発想のもとに開発されたシステムは、いまや素粒子物理学の分野で重要な課題と認識され、世界の複数の研究グループによって開発が活発に進められている。特に我が国の高エネルギー加速器研究機構で開発された GRACE¹⁾ は、欧州素粒子原子核研究

所(CERN)のLEP実験^{*}のデータ解析で重要な役割を果たした。自動計算システムの基本機能は

- (1) 散乱の始・終状態と摂動の次数を指定し、関与するファインマン図すべてを生成する。
- (2) 個々のファインマン図に対応する散乱振幅を数値計算で求める。
- (3) 散乱振幅の和の絶対値の2乗を位相空間内で多次元数値積分する。
- (4) 物理実験シミュレーションのための物理イベントを発生する。

である。既にいくつかの自動計算システムは、摂動展開の最低次まで基本機能を実装している。将来の国際リニアコライダー加速器実験(ILC^{**})での素粒子反応では、より精度の良い理論計算が要求され高次補正からの寄与を欠かすことはできない。高次補正では、散乱振幅の計算のなかでファインマン・ループ積分の評価を行うが、一重ループ積分については解析的な取り扱いが可能であり、オランダで開発されたFFパッケージ²⁾がよく使われている。しかし、二重ループ積分を一般的に解析的に取り扱う方法はなく、世界で様々

[†] 高エネルギー加速器研究機構(KEK)
High Energy Accelerator Organization
^{††} (株)日立製作所 ソフトウェア事業部
Hitachi, Ltd., Software Division

^{*} 1989年8月より2000年11月まで行われた電子・陽電子衝突型加速器による4つの実験。素粒子物理学の標準模型の検証、新素粒子の探索などが行われた。

^{**} <http://www.linear-collider.org/>

な開発が進められているところである。

我々は、2002年よりファインマン・ループ積分を解析的な計算を用いずに直接数値計算を行うことを試みてきた。本稿ではこの方法を直接計算法と呼ぶが、この方法の利点は、被積分関数に手を加えずに直接数値計算するため、ループ積分を統一的に取り扱える可能性があり、自動計算システムとの調和がよいことである。

なお、直接計算というアプローチは1990年代から試みがあったが³⁾、当時は計算機の能力が発展途上であり、長大な計算時間という現実的な問題から十分に開発されない状態にあった。10年以上を経過した現在、計算機の能力は画期的に向上した。また並列計算環境も整備されてきた。このような状況を踏まえ新たに直接計算の可能性を深く探っている。

2. 直接計算法

場の理論の高次の摂動展開に現れるファインマン・ループ積分は多次元複素積分であり、

$$I_n(\epsilon) = \frac{(-1)^{-n} \Gamma(n-2L)}{(4\pi)^{2L}} \int_0^1 \prod_{i=1}^n dx_i \frac{\delta(1-x_1 \cdots -x_n)}{(D(\mathbf{x}) - i\epsilon)^{n-2L}} \quad (1)$$

で与えられる (L はループの多重度, n はループ内の素粒子の数)。式 (1) は、分母の $D(\mathbf{x})$ の振る舞いによっては数値的な不安定性を生み出し評価が困難になる。我々は、式 (1) の評価に直接計算法を用いることを提案している。

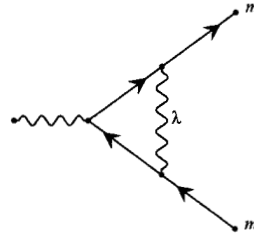
直接計算法は次の三つのステップからなる。

- (1) 多重ループ積分の被積分関数の分母の解析性を指定する微量 ϵ を有限化し発散を回避する。
- (2) ϵ を減少させていき (例えば $\epsilon_j = 1.2^{35-j}$, $j = 0, 1, 2, \dots, l$) , 対応する積分値の数値 $I_n(\epsilon_j)$ のそれぞれを数値積分法で求める。
- (3) 数値の加速法を用い $\epsilon \rightarrow 0$ の極限の値を得れば、それが目的とする積分値 I_n となる。

直接計算法では、多次元数値積分方法と加速法の選択に自由度がある。精度良く結果を得るには

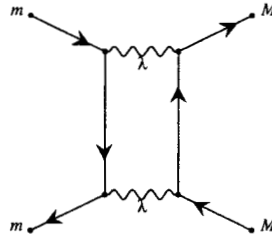
- 適切な数値積分法の選択,
- 適切な加速法の選択,
- 適切な初期値 ϵ の選択,

が重要になる。我々はこれまでループの数が一重の vertex 型 ($L = 1, n = 3$, 図 1) あるいは box 型 ($L = 1, n = 4$, 図 2) と二重の vertex 型のうち、特異性の度合いが比較的低い物理プロセスについて直接計算



produced by GRACEFIG

図 1 vertex 型一重ループの例



produced by GRACEFIG

図 2 box 型一重ループの例

法の有効性を検証してきた⁴⁾。そこでは、数値積分法は QUADPACK⁵⁾ の DQ ルーチン (以下、DQ と略す) を、加速法は Wynn の ϵ 算法⁶⁾ を用いてきた。

さらに幅広い範囲の物理プロセスへ直接計算法を適用するには、次のことからの検証が必要になる：

- 光子を含むことにより赤外発散が発生する場合にも有効か
 - box 型二重ループ積分にも有効か
 - 自動計算システム GRACE へ組み込み可能か
- このうち赤外発散 (Infrared divergence, 以下、IR と略す) をもつファインマン・ループ積分への直接計算法の有効については、すでに着手^{7),8)} しているが、
- 計算実行時間が長い
 - 計算実行時間の見積りが困難である

などの課題を抱えていた。本稿では、新たな数値積分法の選択および時間短縮のための並列化など、最近の進捗について報告する。

3. 二重指数関数型積分法の利用

第2節で述べたように、直接計算法では効率よく計算をすすめるには、適切な積分法を選択しなければならない。これまでは多次元数値積分方法として主としてDQルーチンを用いてきた。本稿では、DQと ϵ 算法による手法をDQ-直接計算法と呼ぶが、表1にこれまでに実施したDQ-直接計算法での計算事例を示した。この事例では、ループ内に質量の小さい光子を含み、赤外発散と呼ばれる特異性をもつ。光子の質量を λ で与えると、一重ループ $L=1, n=3$ のとき $D(\mathbf{x})=D(x,y)$ は

$$D(x,y) = -sxy + (x+y)^2 m^2 + (1-x-y)\lambda^2 (2)$$

となる。ここで m は光子以外のループの素粒子の質量を表し、事例では $m = \text{電子の質量}$ とした。将来の素粒子実験では、 λ を 10^{-15} 以下とすることが求められている。また積分の結果は、0.1%の精度を有することが求められている。表1では、これらの条件のもとに計算を遂行した時の実行時間を示した。計算精度は、倍精度では不足する場合もあるので、4倍精度や8倍精度を用いた。8倍精度には、高精度多倍長計算ライブラリであるHMLIB^{9)~11)}を使用した。

事例では、高エネルギー加速器研究機構に設置されているPCファーム(CPUはXeon^{*}とOpteron^{**})を用いた。

表1 DQ-直接計算法による実行時間 ($s \geq 0, s = 500^2$)

物理プロセス	時間(秒)	精度 $x,y,[z]$ 次元	CPU
IR-vertex ($\lambda = 10^{-30}$)	153046	8,8	Xeon 3.06GHz
IR-box ($\lambda = 10^{-15}$)	133364	4,4,2	Opteron 2.2GHz
IR-box ($\lambda = 10^{-30}$)	442446	4,4,2	Opteron 2.2GHz

DQ-直接計算法により物理学からの要求を満たすことに成功したが、表1に示したように計算時間が長大になった。DQ-直接計算法の並列化も試みたが、並列化が複雑で難があった。

そこで複数の積分方法について

- 実行時間の増大に対応できるよう並列化し実行時

^{*} Intel Xeon は、米国およびその他の国におけるインテルコーポレーションまたはその子会社の商標または登録商標です。

^{**} Opteron は、米国およびその他の国における Advanced Micro Devices, inc. またはその子会社の商標または登録商標です。

間の縮小をはかりたい。

- 得られる積分結果の精度を向上させたい時に、必要な実行時間の予測をしたい。
- 将来自動計算システム GRACE へ組み込むので、複雑な積分アルゴリズムは避けたい。

など現実的な観点から可能性を検討した。すでに濱口が報告したが⁸⁾、被積分関数の分母に現われる物理パラメータ s が、 $s \leq 0$ の場合については、二重指数関数型積分法¹³⁾が有効であることがわかった。ただし、素粒子物理学で求められている計算は、 $s \geq 0$ の場合で、このとき積分領域内部で被積分関数が特異性をもつため、これまでは二重指数関数型積分法を適用することができなかった。しかし、適切な変数変換を用いれば、特異性が積分領域の端に現われるように分割できることがわかったので、 $s \geq 0$ の場合にも二重指数関数型積分法で積分を実行できるようになった。本稿では、二重指数関数型積分法(以下、DEと略す)と ϵ 算法の組み合わせによる直接計算法を、DE-直接計算法と呼ぶ。表2にDE-直接計算法による実行時間を示した。

表2 DE-直接計算法による実行時間 ($s \geq 0, s = 500^2$)

物理プロセス	時間(秒)	精度 $x,y,[z]$ 次元	CPU
IR-vertex ($\lambda = 10^{-30}$)	1295	4,4	Xeon 3.06GHz
IR-box ($\lambda = 10^{-30}$)	122943	4,4,4	Opteron 2.2GHz

表1と表2を比較すると、DE-直接計算法では、DQ-直接計算法の場合に $\lambda = 10^{-15}$ を計算するのに必要だった実行時間より少ない時間で $\lambda = 10^{-30}$ まで計算できることがわかる。

4. DE-直接計算法の並列化コードの試験結果

被積分関数に現われる物理パラメータ λ や s を変化させていくと、その値によっては、計算時間が長大になる場合がある。これに対応するため、DE-直接計算法の並列化コードを作成した。多次元積分において最外側の積分でDEの「刻み」を分配するよう並列化している。並列ライブラリはMPIを利用した。並列化効率の測定は、高エネルギー加速器研究機構計算科学センターに設置されているCRAY XD1^{***}PCファーム

^{***} 6ノード×2SMP Opteronからなる。高性能インターコネクタ(6×RapidArray)を有する。CRAY XD1は、米国およびその他の国におけるCray Inc. またはその子会社の商標または登録商標です。

ムと IBM Blue Gene/L^{*}スーパーコンピュータを用いて並列化の効率を測定した。Blue Gene/L の概要については文献¹²⁾に詳しい説明がある。なお、すべての計算は 4 倍精度で行っている。

4.1 領域分割がない場合 ($s \leq 0$)

積分領域の分割がない $s \leq 0$ の時に、並列化された DE-直接計算法の用いた CPU 数による実行時間の推移を調べた。CRAY XD1 の結果を表 3 に、Blue Gene/L の場合を表 4 に示した。

表 3 並列化 DE-直接計算法の並列効果 (CRAY XD1 の場合, $s \leq 0, s = -500^2, \lambda = 10^{-5}$)

CPU 数	1	2	4	8	16
時間 (秒)	1090.28	546.65	275.05	137.89	69.39
効果	1.00	1.99	3.96	7.91	15.71

表 4 並列化 DE-直接計算法の並列効果 (Blue Gene/L の場合, $s \leq 0, s = -500^2, \lambda = 10^{-5}$)

CPU 数	1	2	4	8	16
時間 (秒)	672.98	336.51	168.43	84.22	42.11
効果	1.00	2.00	4.00	7.99	15.98
32	64	128	256	512	1024
21.06	10.53	5.27	2.63	1.32	0.66
31.96	63.91	127.70	255.89	509.83	1019.67

4.2 領域分割がある場合 ($s \geq 0$)

積分領域が分割される $s \geq 0$ の時に、並列化された DE-直接計算法の用いた CPU 数による実行時間の推移を調べた。CRAY XD1 の結果を表 5 に Blue Gene/L の場合を表 6 に示した。分割がある場合とない場合で並列効果には違いがあることがわかる。

表 5 並列化 DE-直接計算法の並列効果 (CRAY XD1 の場合, $s \geq 0, s = 500^2, \lambda = 10^{-30}$)

CPU 数	1	2	4	8	16
時間 (秒)	165492	88496	47108	24572	12266
効果	1.00	1.87	3.51	6.73	13.49

4.3 負荷バランス

負荷アンバランスにより並列効果が影響を受けてい

^{*} IBM Blue Gene は、米国およびその他の国における International Business Machines Corporation またはその子会社の商標または登録商標です。

表 6 並列化 DE-直接計算法の並列効果 (Blue Gene/L の場合, $s \geq 0, s = 500^2, \lambda = 10^{-30}$)

CPU 数	8	16	32	64
時間 (秒)	21860	10931	5468	2735
効果	1.00	2.00	4.00	8.00
128	256	320	640	1280
1368	684	548	274	137
16.00	31.96	39.89	79.78	159.56

ないかどうかを考察した。表 7 に、総実行時間と個々のプロセッサでの実行時間のうちの最大の実行時間の比を示した。CRAY XD1 を利用した場合、表 7 と表 5 を比較すると明らかだが、今回作成した並列化コードは負荷アンバランスによる影響を受けていないことがわかる。

表 7 並列化コードの負荷バランスの測定, box 型, $s \geq 0, s = 500^2, \lambda = 10^{-30}$

CPU 数	CRAY XD1	Blue Gene/L
1	1	1
2	1.88	1.89
4	3.50	3.57
8	6.73	6.88
16	13.42	13.75
32	26.74	27.50
64	53.30	54.97
128	106.28	109.88
256	210.86	219.62

本稿の最後の頁に、CRAY XD1 での並列効果を図 3 に、Blue Gene/L での並列効果を図 4 に示した。図 4 は、縦横軸を対数で示している。両図で、実線は $s \geq 0$ 、点線は $s \leq 0$ を場合を示している。積分領域の分割のありなしにより、並列の効果に影響がでていることがわかる。

5. まとめ

本稿では、二重指数関数型積分法を ϵ 算法と組み合わせさせて素粒子物理学におけるファインマン・ループ積分に適用しその有効性を調査し、調査結果を報告した。これまでガウス型積分法である QUADPACK ルーチンで行ってきた多次元複素積分を二重指数関数型積分法に置き換えたところ、実行時間を大幅に短縮できることがわかった。さらに二重指数関数型積分法による計算部分を並列化し、その効率について報告した。実行時間と並列化効率の観点から、二重指数関数型積分法は素粒子物理学における自動計算システムへの組み込みに大変有望であることがわかった。

謝辞 本研究は、文部科学省科学研究費補助金（基盤研究 (B) No.17340085）の助成を得て行われました。高エネルギー加速器研究機構の石川正博士、藤本順平博士に活発な議論をしていただきました。両氏に感謝します。二重指数関数型積分法について、東京電機大学の森正武先生に貴重なコメントをいただきました。感謝します。本研究の一部は、KEK の大型シミュレーション研究（課題番号：07-10）の支援を受けています。

参 考 文 献

- 1) F.Yuasa et.al.: Status of GRACE System, Prog.Theor.Phys.Suppl. 138: 18-23, 2000.
湯浅富久子：「高エネルギー加速器研究機構 自動計算システム開発グループ」, 応用数理 10 巻 4 号 pp. 84 - 87.
- 2) G.J.van Oldenborgh et.al.: New Algorithms for One-Loop Integrals, Z.Phys. C46, 425 (1990).
- 3) J.Fujimoto et.al.: Numerical approach to one-loop integrals, Prog.Theor.Phys. 87, 5 (1992) 1233-1247.
- 4) E. de Doncker et.al.: Computation of Loop Integrals using Extrapolation, Comput.Phys.Commun. 159 (2004), 145-156.
E. de Doncker et.al.: Loop Integration Results using Numerical Extrapolation for a Non-Scalar Integral, Nucl.Instrum.Meth. A534 (2004) 269-273.
- 5) R.Piessens et. al.: QUADPACK, A subroutine package for automatic integration, Springer Verlag, 1983.
- 6) P.Wynn: On a device for calculating the $e_m(S_m)$ transformations, Math. Tables Automat. Computing 10 (1956) 91-96.
P.Wynn: On the convergence and stability of the epsilon algorithm, SIAM J. Numer. Anal. 3 (1966) 91-122.
- 7) F. Yuasa et.al.: Precise Numerical Evaluation of the Scalar One-Loop Integrals with the Infrared Divergence, hep-ph arXiv:0709.0777v2.
- 8) 濱口信行: 理論物理学計算への多倍長ライブラリの適用, 情報処理学会研究報告 IPSJ SIG Technical Report, 2007-HPC-113 (4), 2007/12/7.
- 9) J.Fujimoto et.al.: Numerical Instruments and Methods in Physics Research A 559 (2006) pp.269 - 272.
- 10) 濱口信行: 多倍長ライブラリによる精度評価と改善に関する考察, 情報処理学会研究報告 IPSJ SIG Technical Report, 2007-HPC-109 (22), 2007/3/1.
- 11) 濱口信行: 配列整数演算の精度, 性能評価, 情報処理学会研究報告 IPSJ SIG Technical Report, 2007-HPC-109 (23), 2007/3/1.
- 12) 土井淳, 寒川光, 松古栄夫, 橋本省二: Blue Gene に適した格子 QCD プログラムの超並列化 Vol.47 No.SIG 7(ACS 14), May 2006.
- 13) 森正武: 共立数学講座 12 数値解析 第 2 版, 共立出版.
M.Mori: Discovery of the Double Exponential Transformation and Its Developments, Kokyuroku, RIMS, Vol.41 No.4, 2005.

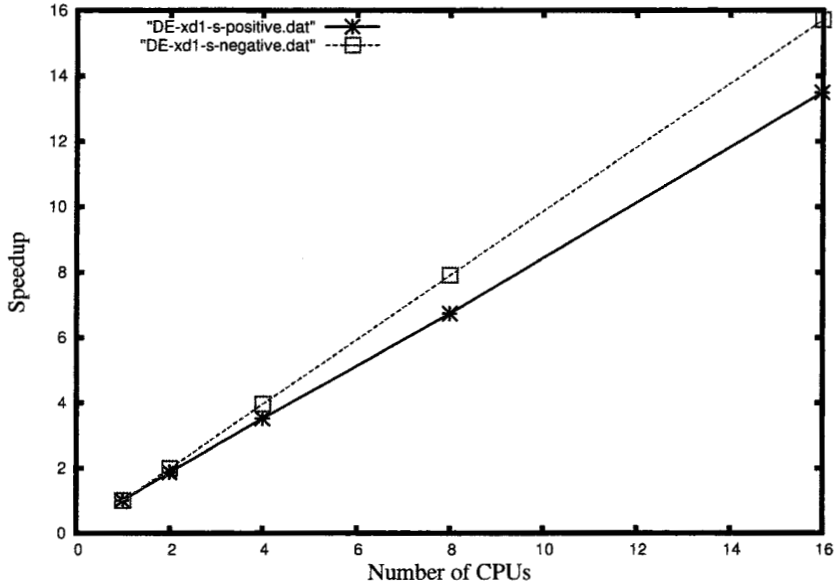


図 3 並列化の効果 (CRAY XD1 の場合)。実線は領域分割がある場合、点線は領域分割がない場合を示す。

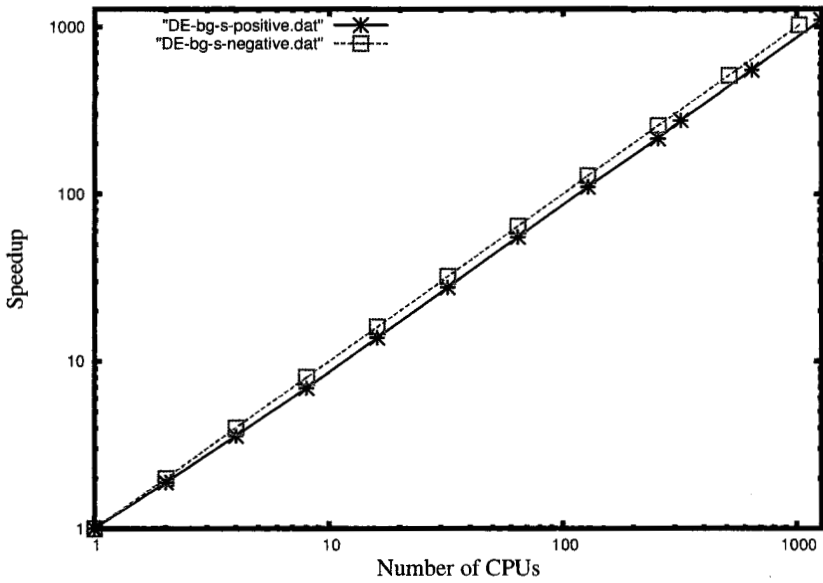


図 4 並列化の効果 (IBM Blue Gene/L の場合)。実線は領域分割がある場合、点線は領域分割がない場合を示す。