多倍長計算手法

平成24年度第3四半期

今回はパラメーターの設定と精度に関してまとめて記述しました.

ループ積分と呼ばれる数値積分計算では,質量0の光子や質量が非常に小さい事はわかっているが,その値は不明なニュートリノに対して赤外発散を防ぐため微小量を与えて計算しています.
この設定する微少量の値により,結果の精度及び反復に要する時間が大きく作用したり,誤った値を得る事があります.

ここでは典型的な3つのケースで説明します.

(1) Infra box
(2) W-vertex
(3) bsgamma planar

(1)Infra box

$$I=\int_0^1\int_0^{1-x}\int_0^{1-x-y}\frac{1}{D^2}dzdydx$$

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

解析近似解

$s<0,t<0,-s,-t>>m_e{}^2>>\lambda^2$の場合

$$I=\frac{1}{-s(-t+m_f{}^2)}\ln(\frac{-s}{\lambda^2})\ln\frac{(-t+m_f{}^2)^2}{m_e{}^2m_f{}^2}$$

最大相対誤差

$$\frac{\lambda}{\ln(\frac{-s}{\lambda^2})}\frac{\pi(-t+m_f{}^2)}{m_e\ln(\frac{(-t+m_f{}^2)^2}{m_e{}^2m_f{}^2})}$$

要求する精度の結果を得るのに必要な仮数部のビット数は以下の様にして推定できます。

$s<0$では$\inf\ ra \quad box \quad d$の最小値は,

$(x,y,z)=(1,0,0),(0,1,0)$でλ^2となります.

$x=1-\varepsilon, y=0, z$は$0<\delta<<\varepsilon<<1$とすると,

$d=\lambda^2+\varepsilon^2{m_e}^2$となります.いま要求される相対誤差を$10^{-n}$

とします.すると$\lambda^2+\varepsilon^2{m_e}^2=\lambda^2(1+\frac{10^{-n}}{2})$より$\varepsilon$が求まりますが,

これをε_0とします.$\int_{1-\varepsilon_0}^{1}\frac{1}{d^2}dx=\frac{\varepsilon_0}{d^2}$.

$D.E$では$x=1-\varepsilon$の場合かかる重みは,$\varepsilon((\ln\frac{1}{\varepsilon})^2+\pi^2)^{\frac{1}{2}}$となります.

また重みを$w(x)$としますと,$\varepsilon_0<\varepsilon$に対し$\int_{1-\varepsilon}^{1}w(x)dx=\frac{1}{2}\varepsilon^2(\ln\varepsilon-\frac{1}{2})<<\varepsilon_0$.

$1-\varepsilon_0\le x\le 1$では$d\le\lambda^2(1+\frac{10^{-n}}{2})$ですから.$\varepsilon((\ln\frac{1}{\varepsilon})^2+\pi^2)^{\frac{1}{2}}=\varepsilon_0$

となるεが表現できれば,$D.E.$で要求される精度の結果が得られる事になります.

これから$\lambda^2+\varepsilon^2((\ln(\frac{1}{\varepsilon}))^2+\pi^2){m_e}^2=\lambda^2(1+\frac{10^{-n}}{2})$を解けば良い事になります.

式を整理すると$\varepsilon^2((\ln(\frac{1}{\varepsilon}))^2+\pi^2)=\frac{\lambda^2}{2{m_e}^2 10^n}$.

$\lambda=10^{-30}, n=6, m_e=0.0005$とすると,$x=\ln(\varepsilon)$

$2x+\ln(x^2+\pi^2)+137.4619584=0$

$\varepsilon=1.93\times10^{-32}$.有効ビット106ビットとすると$2^{-106}=1.23\times10^{-32}$.

このことから桁落ち等を工夫すれば,DD形式４倍精度でぎりぎり要求される精度の結果が得られる事になります.

$s = 500^2, t = -150^2, m_f = 150, m_e = 0.0005, \lambda = 10^{-30}$の計算を行うとします.計算は$s->s+i\varepsilon$として複素数計算として実行します.
結果の精度は解析近似式を複素数計算して得られたものと比較します.式から虚数部分の値はλに依存しない事がわかります.
また一般に演算に必要な精度はλに依存します.
演算に必要な仮数部のビット数は$\log_2 \frac{1}{\lambda}$+要求精度の10進桁数.
例えば要求精度を10進6桁とすると,$\log_2 10^{30} + 6 = 106$となります.
実数部の計算には4倍精度演算が必要で,虚数部の計算はλに依存しないので倍精度演算でも可能です.また$D->D+i\varepsilon$で計算すると虚数部の値は非常に収束性の良い列がえられますが,εの初期値の取り方により3つの異なる値が得られます.

反復の最初の値をεとします.

$\varepsilon >> m_e{}^2$	ex : 25	0.142647572794761143D-09	0.137D-15
$\mathrm{m_e}{}^2 >> \varepsilon >> \lambda^2$	ex : 15	0.371536892867592250D-08	0.266D-25
$\lambda^2 >> \varepsilon$	ex : 15	0.743073784900021472D-08	0.841D-19

正しい値は$\lambda^2 >> \varepsilon$の場合ですが,結局4倍精度演算が必要という事になってしまいます.
$s->s-i\varepsilon$($-i\varepsilon$としたのは符号を合わせるため)としてλを10^{-5}程度にしますと,倍精度演算で十分な精度が得られます.
このように,計算の特徴に合わせて計算を行う必要があります.

(2)W-vertex

$$D = -xys + (x+y)(x+y-1)m^2 + (x+y){M_w}^2 + (1-x-y){m_a}^2$$

$M_w : W-boson \quad 80.3477^2, m : electron \quad 0.0005$

$m_a : neurino$

この様に$M_w >> m, m_a$の場合,$s<0$では

$\int_0^1 \int_0^{1-x} \frac{1}{D} dydx = \frac{1}{-s}(\ln(\frac{\sqrt{1-4{M_w}^2/s}+1}{\sqrt{1-4{M_w}^2/s}-1}))^2$と$m, m_a$の値に依存しない事

になります.

計算手法の検討のため,$s=0$の場合を考えます.

以降2ページにs<0,s=0の場合の実行結果を示し,
その後,s=0の解析式の導入方法を示します.

$s=0$の解析式の検討で数学公式に出てくる,式からは,

$\ln(\frac{1}{{m_a}^2})$の項がでて,発散するように見えるが,うまく切り抜けられる

事を示しています.$m_a=0$として計算すると演算量も削減され,

誤差も簡単に見積もれる事がわかります.

S<0の場合の結果

s= -250000.0000000000000000000000000000000
me2= 0.2611209999999999999999999999999999780E-006
mw2=   6455.752895290000000000000000000000004
size=   1024

kai=   0.549449295429470167Q-04
ma2:10^{-n}= 12.0 result=   0.549449295437675428Q-04
ma2:10^{-n}= 14.0 result=   0.549449295437683377Q-04
ma2:10^{-n}= 16.0 result=   0.549449295437683468Q-04
ma2:10^{-n}= 18.0 result=   0.549449295437683469Q-04
ma2:10^{-n}= 20.0 result=   0.549449295437683469Q-04
ma2:10^{-n}= 22.0 result=   0.549449295437683469Q-04
ma2:10^{-n}= 24.0 result=   0.549449295437683469Q-04
ma2:10^{-n}= 26.0 result=   0.549449295437683469Q-04
ma2:10^{-n}= 28.0 result=   0.549449295437683469Q-04
ma2:10^{-n}= 30.0 result=   0.549449295437683469Q-04
ma2:10^{-n}= 32.0 result=   0.549449295437683469Q-04
ma2:10^{-n}= 34.0 result=   0.549449295437683469Q-04
ma2:10^{-n}= 36.0 result=   0.549449295437683469Q-04
ma2:10^{-n}= 38.0 result=   0.549449295437683469Q-04
ma2:10^{-n}= 40.0 result=   0.549449295437683469Q-04

S=0の場合の結果

```
me2=  0.26112099999999999999999999999999780E-006
 mw2=   6455.752895290000000000000000000004
 size=        1024

   kai=   0.154900600478343235Q-03
  ma2:10^{-n}=  12.0  result=   0.154900600478342386Q-03
  ma2:10^{-n}=  14.0  result=   0.154900600478343226Q-03
  ma2:10^{-n}=  16.0  result=   0.154900600478343235Q-03
  ma2:10^{-n}=  18.0  result=   0.154900600478343235Q-03
  ma2:10^{-n}=  20.0  result=   0.154900600478343235Q-03
  ma2:10^{-n}=  22.0  result=   0.154900600478343235Q-03
  ma2:10^{-n}=  24.0  result=   0.154900600478343235Q-03
  ma2:10^{-n}=  26.0  result=   0.154900600478343235Q-03
  ma2:10^{-n}=  28.0  result=   0.154900600478343235Q-03
  ma2:10^{-n}=  30.0  result=   0.154900600478343235Q-03
  ma2:10^{-n}=  32.0  result=   0.154900600478343235Q-03
  ma2:10^{-n}=  34.0  result=   0.154900600478343235Q-03
  ma2:10^{-n}=  36.0  result=   0.154900600478343235Q-03
  ma2:10^{-n}=  38.0  result=   0.154900600478343235Q-03
  ma2:10^{-n}=  40.0  result=   0.154900600478343235Q-03
```

$$s=0$$

$$D=(x+y)(x+y-1)m^2+(x+y)M_W{}^2+(1-x-y)m_a{}^2$$

$$\int_0^1\int_0^{1-x}\frac{1}{D}dydx=\int_0^1\frac{x}{m^2x^2+(M_W{}^2-m^2-m_a{}^2)x+m_a{}^2}dx$$

$$a=m^2,b=M_w{}^2-m^2-m_a{}^2,c=m_a{}^2$$

$$\int\frac{x}{ax^2+bx+c}dx=\frac{1}{2a}\ln(|ax^2+bx+c|)-\frac{b}{2a}\frac{1}{\sqrt{b^2-4ac}}\ln\frac{(2ax+b-\sqrt{b^2-4ac})^2}{|ax^2+bx+c|}$$

$$\sqrt{b^2-4ac}=b-\frac{2ac}{b},\frac{b}{\sqrt{b^2-4ac}}=\frac{b}{b(1-\frac{2ac}{b^2})}=1+\frac{2ac}{b^2}$$

$$I=\int_0^1\frac{x}{ax^2+bx+c}dx=\frac{1}{2a}\ln(\frac{a+b+c}{c})-(\frac{1}{2a}+\frac{c}{b^2})\ln(\frac{(b+c)^2}{(a+b+c)c})$$

$$=\frac{1}{a}\ln(\frac{a+b+c}{b+c})-\frac{c}{b^2}\ln(\frac{(b+c)^2}{(a+b+c)c})$$

$$c\to 0,I\to\frac{1}{a}\ln(\frac{a+b}{b})$$

解析近似解$I\fallingdotseq\frac{1}{a}\ln(\frac{a+b}{b})\fallingdotseq\frac{1}{m^2}\ln(\frac{M_W{}^2}{M_W{}^2-m^2})$

誤差$=|\frac{c}{b^2}\ln(\frac{(b+c)^2}{(a+b+c)c})|=|\frac{2m_a{}^2}{(M_W{}^2-m^2-m_a{}^2)^2}\ln(\frac{M_W{}^2-m^2}{M_W{}^2m_a{}^2})|\fallingdotseq|\frac{2m_e{}^2}{M_W{}^4}\ln(\frac{1}{m_a{}^2})|$

$m^2>>m_a{}^2$なら

$$\int_0^1\int_0^{1-x}\frac{1}{D}dydx=\int_0^1\frac{x}{m^2x^2+(M_W{}^2-m^2)x}dx=\int_0^1\frac{dx}{m^2x+(M_W{}^2-m^2)}=\frac{1}{m^2}\ln(\frac{M_W{}^2}{M_W{}^2-m^2})$$

(3) *bsgamma* *planar*

$$D = c(x_1(p_1{}^2 - m_1{}^2) + x_2(p_2{}^2 - m_2{}^2) - x_3 m_3{}^2 - x_6 m_6{}^2)$$
$$- c_1(x_5{}^2 p_2{}^2 + x_4{}^2 p_1{}^2 + x_4 x_5(p_1{}^2 + p_2{}^2))$$
$$- c_2(x_2{}^2 p_2{}^2 + x_1{}^2 p_1{}^2 + x_1 x_2(p_1{}^2 + p_2{}^2))$$
$$- 2x_2 x_3 x_5 p_2{}^2 - 2x_1 x_3 x_4 p_1{}^2 - x_3(x_2 x_4 + x_1 x_5)(p_1{}^2 + p_2{}^2)$$

$$x_6 = 1 - x_1 - x_2 - x_3 - x_4 - x_5$$

$$c_1 = x_1 + x_2 + x_3$$

$$c_2 = 1 - x_1 - x_2$$

$$c = x_3(1 - x_1 - x_2 - x_3) + (x_1 + x_2)(1 - x_1 - x_2) = x_3(c_2 - x_3) + (1 - c_2)c_2$$

$$p_1{}^2 = m_b{}^2, p_2{}^2 = m_s{}^2, m_1 = m_2 = 1.5, m_3 = 80.3477, m_b = 4.7, m_s = 0.094$$

$$m_6 = \lambda$$

$$I = \int_0^1 \int_0^{1-x_1} \int_0^{1-x_1-x_2} \int_0^{1-x_1-x_2-x_3} \int_0^{1-x_1-x_2-x_3-x_4} \frac{1}{D^2} dx_5 dx_4 dx_3 dx_2 dx_1$$

1−xの形の計算があるため桁落ちに注意が必要になります.

式を整理すると下記の様になります.

$$D = x_6(x_3(x_1 p_1{}^2 + x_2 p_2{}^2) - c\lambda^2)$$
$$- (x_4 p_1{}^2 + x_5 p_2{}^2)[x_3(x_1 + x_2) + (x_1 + x_2 + x_3)(x_4 + x_5)]$$
$$- c(x_1 m_1{}^2 + x_2 m_2{}^2 + x_3 m_3{}^2)$$

$$D_0 = D + cx_6\lambda^2 = x_6(x_3(x_1 p_1{}^2 + x_2 p_2{}^2)$$
$$- (x_4 p_1{}^2 + x_5 p_2{}^2)[x_3(x_1 + x_2) + (x_1 + x_2 + x_3)(x_4 + x_5)]$$
$$- c(x_1 m_1{}^2 + x_2 m_2{}^2 + x_3 m_3{}^2)$$ とおくと,

$$D_0 = -x_3(x_4 + x_5)(x_1 p_1{}^2 + x_2 p_2{}^2) - (x_4 p_1{}^2 + x_5 p_2{}^2)$$
$$(x_3(x_1 + x_2) + (x_1 + x_2 + x_3)(x_4 + x_5))$$
$$- c(x_1 m_1{}^2 + x_2 m_2{}^2)$$
$$- x_3(cm_3{}^2 - (1 - x_1 - x_2 - x_3)(x_1 p_1{}^2 + x_2 p_2{}^2))$$

$$cm_3{}^2 \ge (x_1 + x_2)(1 - x_1 - x_2)m_3{}^2 \ge (x_1 + x_2)(1 - x_1 - x_2 - x_3)m_3{}^2$$

$$cm_3{}^2 - (1 - x_1 - x_2 - x_3)(x_1 p_1{}^2 + x_2 p_2{}^2) \ge (1 - x_1 - x_2 - x_3)$$
$$((x_1 + x_2)m_3{}^2 - x_1 p_1{}^2 - x_2 p_2{}^2)$$
$$= (1 - x_1 - x_2 - x_3)(x_1(m_3{}^2 - p_1{}^2) + x_2(m_3{}^2 - p_2{}^2)) \ge 0$$

以上から $D \le D_0 \le 0$.

よって $D = 0$ なら $D_0 = 0$. $D_0 = 0$ なら $c = 0$ より, $D = 0$

式の形から,定義式どうり計算するより,式を変形した形で計算した方が,精度,演算量からみて,良い事がわかります.

性能モニターでの演算量

bsgamma	planar	演算量	
	origin		
	n=128	14844GFLOP	
	n=256	475008GFLOP	
	n=512	15200TFLOP	
	n=1024	486PFLOP	
	tune		
	n=128	6489GFLOP	
	n=256	207648GFLOP	
	n=512	6645TFLOP	
	n=1024	213PFLOP	
	15200/6645=2.29		

演算量は式の変形のみで2倍以上の差があります.

計算する前に*bsgamma*　*planar*　でM_Wがない
場合で,λ発散は起きない事.誤差はλ^2になる事を確認しました.

bsgamma　*planar*　でM_Wがない場合の式は
以下の様に変わります.

$$D = -x(1-x-y)p_1{}^2 - y(1-x-y)p_2{}^2 + xm_1{}^2 + ym_2{}^2 + (1-x-y)\lambda^2$$

$$(m_1{}^2 = m_2{}^2 = m^2)$$

$I = \int_0^1 \int_0^{1-x} \frac{1}{D} dydx$となります.

$\lambda = 0$とすると,$I = \frac{1}{(p_1{}^2 - p_2{}^2)}(SP(\frac{p_1{}^2}{m^2}) - SP(\frac{p_2{}^2}{m^2}))$

この式から$I = 0.025931146377541851255919746347105666$

これを4倍精度DQでD->D+iεのε算法で計算した結果は
下記のとうりで,λ発散は起きていません.

```
eps =  0.13822538D-05
   0.2593108797935867D-01   0.240D-25      0       0       0
ex  0.2593114637772012D-01   0.841D-07   0.25931D-01
ex  0.2593114637754155D-01   0.361D-12   0.25931D-01
ex  0.2593114637754185D-01   0.642D-15   0.25931D-01
ex  0.2593114637754185D-01   0.221D-19   0.25931D-01
ex  0.2593114637754185D-01   0.145D-23   0.25931D-01
ex  0.2593114637754185D-01   0.128D-24   0.25931D-01
ex  0.2593114637754185D-01   0.128D-25   0.25931D-01
ex : 15   0.2593114637754185D-01   0.501D-27
```

λに値をいれると,誤差がλ^2になる事が以下の結果でわかりました.

$\lambda = 10^{-5}$ ex : 15 0.2593114641144115D - 01 0.116D - 11
$\lambda = 10^{-7}$ ex : 15 0.2593114637754597D - 01 0.493D - 16
$\lambda = 10^{-8}$ ex : 15 0.2593114637754185D - 01 0.177D - 16
$\lambda = 10^{-10}$ ex : 15 0.2593114637754185D - 01 0.255D - 20
$\lambda = 10^{-15}$ ex : 15 0.2593114637754185D - 01 0.495D - 27
$\lambda = 10^{-30}$ ex : 15 0.2593114637754185D - 01 0.501D - 27

(注)$\lambda = 10^{-15}, 10^{-30}$で誤差に変化がないのは,プログラムで相対誤差の許容値を10^{-24}に設定している事によります.

このあと,BG/Qで必要な分点数を定め,
計算はSR16000/M1で実行したものを採用しています.
これは,必要な分点数を求めるには演算量が多くなる事と,この計算は精度に鋭敏な事によります.

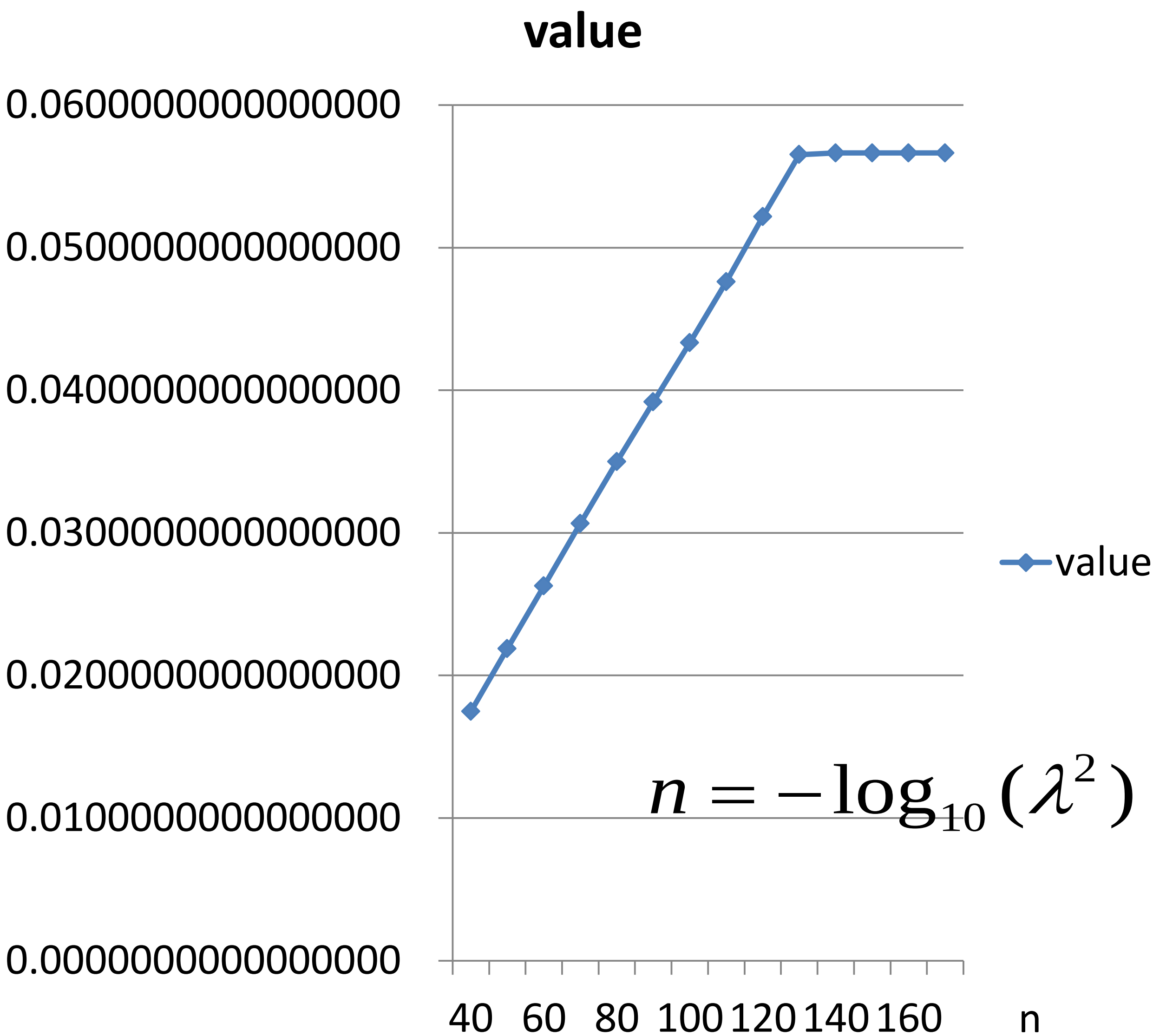
分点数N=1024 BG/Q 512ノード 28537秒
分点数N=512 SR16000/M1 8ノード 8486秒
演算量は分点数の5乗に比例.

積分計算は、二重指数関数型積分で行い,変数変換区間は $[10^{-150}, 1-10^{-150}]$ で実施しています.また,一般にこの種の積分は $1-x$ の形の式がでますので,桁落ちを考慮して DD 形式の4倍精度を使用する必要があります.

また区間幅が結果の精度に影響しますので,分点数を変化させ,必要な分点数をBG/Qでもとめました。(λ=0)

	結果	分点数
result=	.331405208498465261D-01	128
result=	.488169643516346941D-01	192
result=	.460458451277416842D-01	256
result=	.497962422755366272D-01	320
result=	.544217811073604471D-01	384
result=	.565118842794349136D-01	512
result=	.558519811521311674D-01	640
result=	.566275466678280369D-01	768
result=	.565795177564476502D-01	1024

SR16000/M1　8ノードでいくつかのλの値とλ=0の場合の値は以下の様になっています.



$$n = -\log_{10}(\lambda^2)$$

Result=0.0566344454366303263