

高エネルギー物理学のシミュレーションへの 数式処理ソフトウェアREDUCEの利用

東京経営短期大学 経営情報学科 助教授

神保 雅人

高エネルギー物理学のシミュレーションには、反応の確率振幅の絶対値二乗を計算することが不可欠である。この計算を行うに当たり、電子やクォーク等のフェルミ粒子が関与する場合には、ディラックのガンマ行列の、積のトレースを求める必要がある。ここでは、高エネルギー物理学パッケージを内包する数式処理ソフトウェアREDUCEを用いたトレース計算の仕方を、実例に即して論ずる。

1. はじめに

高エネルギー物理学という学問は、湯川・朝永等により創始され、その後様々な発展を遂げた素粒子論を検証する為に、高いエネルギーに加速された、電子と陽電子、電子と陽子、陽子と反陽子等の組み合わせで、衝突実験を行うものである。

これらの衝突は、ニュートン力学のような古典的な物理学ではなく、相対論的場の量子論という物理学で記述される。場の量子論では、粒子は生成・消滅することが可能である。また、相対論では、エネルギーと質量は等価である。

したがって、例えば電子と陽電子(電子の反粒子)を対消滅させて、高いエネルギーを集中させれば、質量の大きな粒子を生成することが可能になる。このことを利用して、未発見の大質量粒子を探索することが、高エネルギー物理学の重要な主題の一つとなっている。

筆者は、大学院生の頃には、理論物理学の研究室に属し、ゲージ原理に基づく標準模型、大統一理論、超重力理論等を学んだ。そして、博士課程後期課程の終わり頃から、これらの理論を検証する為の、高エネルギー物理学向けの理論計算とシミュレーションに取り組んでいる。

そういう経緯で、2年前の科学特集では、渡部勇氏に「ファインマン図形を綺麗に描く」という題名で執筆をお願いした。ファインマン図形とは、粒子

同士の散乱や、生成・消滅反応における時間発展を集約して視覚化したものである。

本来は、粒子間の相互作用ラグランジアンから導かれる、相互作用の時間順序積によって、反応の確率振幅が記述される。この手続きを簡約化する為に開発された手法が、ファインマン図形の描画と、それに対応させた、ファインマン規則と呼ばれる計算法の利用である。

本稿では、このファインマン図形から得られる確率振幅を、数式処理ソフトウェアREDUCE[文献1]の、高エネルギーパッケージの機能を用いて、実際に計算する方法について論ずる。

2. スエレクトロンL対生成過程

超対称標準模型から存在が予言される粒子群は、通常の粒子とスピン(固有磁気能率)が1/2だけ異なり、大きな質量を持つものである。

ここでは、それらの中で、左巻き電子のパートナー、スエレクトロンL \tilde{e}_L の対生成を考える。図1は、電子と陽電子を衝突させて、 \tilde{e}_L^- と \tilde{e}_L^+ とを対生成させる過程のファインマン図形である。これらはスピンの0で、スカラー粒子と呼ばれる。

なお、この図形の描画には、筆者の研究グループの一員である川端 節彌氏が開発した、ファインマン図形自動描画ソフトウェア、GRACEFIG[文献2]を用いている。

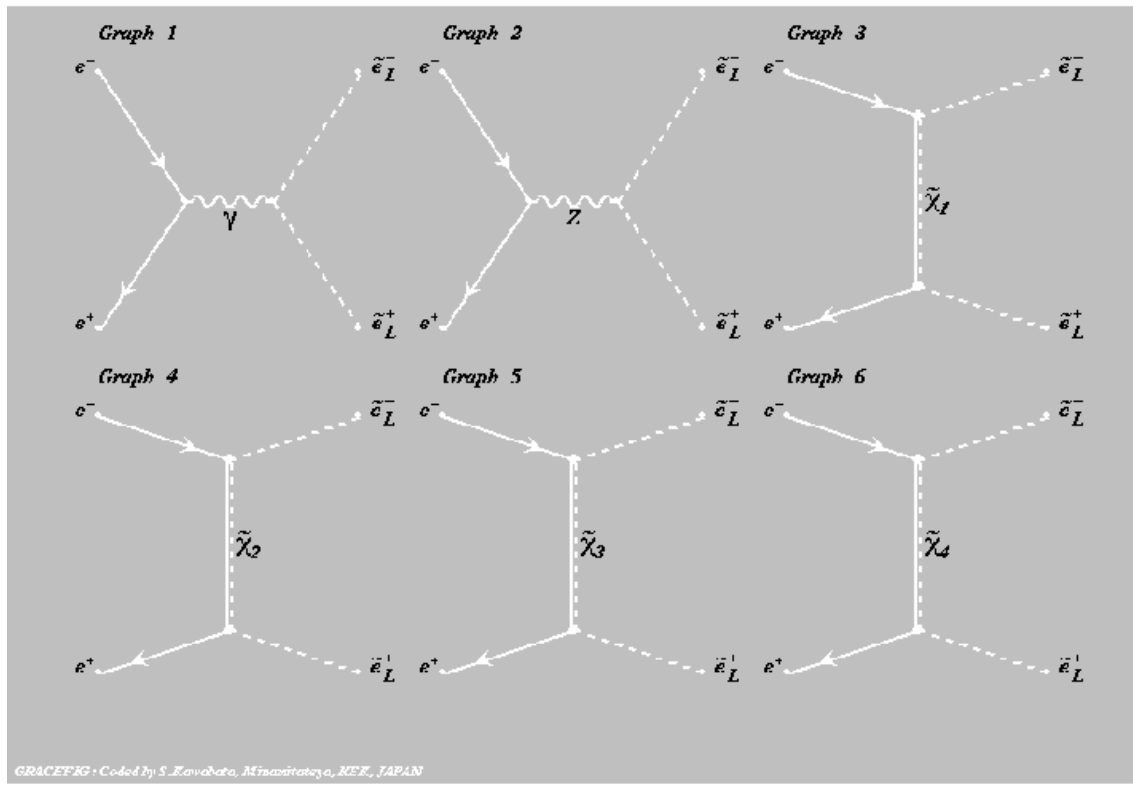


図1. 電子・陽電子衝突によるスエレクトロンLの対生成過程

この図形では、時間発展の方向が水平方向の左から右向きに設定されている。この点では、垂直方向の下から上向きに表す流儀もあるので、注意が必要である。

ファインマン図形では、外線の粒子は相対論の関係式 $p^2 = m^2$ を満たす“実”粒子である。ここでは、 p は4次元の運動量ベクトル、 m は質量であり、自然単位系 ($c = \hbar = 1$) を採用する。

それに対し、内線の粒子は中間状態としてのみ“存在”する“仮想”粒子であり、 $p^2 = m^2$ の関係は満たさない。確率振幅の計算の際には、内線粒子に対しては伝播関数を用いる。

場の量子論では、粒子は生成・消滅演算子として表される。最も簡単な例として、図1中の Graph 1 では、量子電磁力学という非常に良い精度で検証されている場の量子論に現れる相互作用

$$\int d^3x e \bar{\psi} \gamma^\mu \psi A_\mu \quad (1)$$

が含まれている。 ($\mu = 0, 1, 2, 3$)

これは、電子・陽電子・光子の3粒子が一点で相

互作用をすることを表す。ここで、 γ^μ は4行4列の複素行列で、表現の仕方は一通りではない。カイラル表示という表現を採用すれば、2行2列の単位行列 I と量子力学でお馴染みのパウリ行列 σ^i とを部分行列として、次のように表される。

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ -I & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

ただし、 $i = 1, 2, 3$ で、パウリ行列 σ^i は

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

である。 (σ^2 の要素 i は虚数単位)

確率振幅は、生成過程に関与する相互作用の時間順序積を、粒子が生成・消滅し得る“真空”で挟んで得られる期待値として求められる。生成・消滅演算子を“真空”で挟むと、粒子の伝播を表す波動関数の部分が残る。

スカラー粒子の場合には、波動関数は規格化可能

であるから、確率振幅を求める際には規格化因子のみ考えればよい。また、光子のようにスピン 1 のベクトル粒子の場合は、波動関数は偏極ベクトルとなる。

問題は、電子・陽電子のようなスピン 1/2 のフェルミ粒子の場合である。これらの波動関数は、ディラック方程式

$$\begin{aligned}(\not{p} - m)u^s(p) &= 0, & \bar{u}^s(p)(\not{p} - m) &= 0, \\(\not{p} + m)v^s(p) &= 0, & \bar{v}^s(p)(\not{p} + m) &= 0\end{aligned}\quad (4)$$

の解として表される。

ここでは、 $\not{p} = \gamma^\mu p_\mu$ という記法を用いている。なお、添え字 μ が上付きのものとは下付きのものとの積は、アインシュタインの規約という簡約記法で、4次元ベクトルの内積を表す。

図 1 中の Graph 1 では、確率振幅の絶対値二乗を求める際に、フェルミ粒子の波動関数からの寄与として、次の式を計算する必要が生ずる。

$$\sum_{s', s} [\bar{v}^{s'}(p') \gamma^\mu u^s(p)] [\bar{u}^s(p) \gamma^\nu v^{s'}(p')] \quad (5)$$

ここで、 s' や s はそれぞれスピンの 2 種類の状態を表す。また、角括弧 [] で囲まれた部分は、それぞれが 1 行 4 列 \times 4 行 4 列 \times 4 行 1 列で、

$$\begin{aligned}\sum_s u^s(p) \bar{u}^s(p) &= (\not{p} + m), \\ \sum_{s'} v^{s'}(p') \bar{v}^{s'}(p') &= (\not{p}' - m)\end{aligned}\quad (6)$$

が成り立つことから、結局 (5) 式は次式で表されるトレース (行列の対角成分の和) に帰着する。

$$\text{tr}[(\not{p}' - m) \gamma^\mu (\not{p} + m) \gamma^\nu] \quad (7)$$

3. REDUCE によるトレース計算

REDUCE で上述のトレース計算を行う場合には、ディラックのガンマ行列 γ^μ に関しては、上述のような特定の表現を用いるわけではない。2 個のガンマ行列の反交換関係が、計量テンソル $g^{\mu\nu}$ を用いて、

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} \quad (8)$$

と表されることから、代数のみでトレース計算が可能となるのである。

また、REDUCE には (7) 式のようなトレースを計算する為の、高エネルギーパッケージが内包されている。これを用いれば、次元は 4 次元として扱われ、外線粒子が満たすべき $p^2 = m^2$ という関係式も簡単に設定することができる。

以下に、上述の電子・陽電子衝突によるスエレクトロン L の対生成過程に対する、トレース計算の為のソースリストを抜粋する。

```
vector pm, pp, qm, qp;
mass pm=ame1, pp=ame1, qm=amsel, qp=amsel;
mshell pm, pp, qm, qp;
nospur l1;
  amp1 := (g(l1, qm)-g(l1, qp))*(-cscada)$
  aamp1 := (-cscada)*(g(l1, qm)-g(l1, qp))$
spur l1$
  tr11 := (g(l1, pp)-ame1)*amp1*(g(l1, pm)+ame1)
  *aamp1$
array trnn(6, 6);
  trnn(1, 1) := 4*tr11$
end$
(quit)
```

リスト 1. トレース計算のソースリスト (抜粋)

ここでは、図 1 中の Graph 1 からの寄与のみを抜き出してある。実際には、6 個の図形それぞれからの確率振幅への寄与がある。したがって、確率振幅の絶対値二乗には、2 1 種類のトレース計算を必要とする。

1 行目の vector は、4 次元運動量ベクトルを宣言する。ベクトルの名前 pm, pp, qm, qp はそれぞれ、電子、陽電子、スエレクトロン L、反スエレクトロン L の 4 次元運動量に対応させている。

2 行目の mass は、外線の粒子に対して 4 次元運動量の名前と、質量の変数名とを関連付けている。これと 3 行目の mshell とにより、 $p^2 = m^2$ の関係式を REDUCE に認識させることができるように、パッケージが設計されている。

ディラックのガンマ行列は、 $g(L, \mu)$ のように表す。ここで、 L はフェルミ粒子の線の識別子であり、 μ は γ^μ の添え字である。なお、 $\gamma^\mu p_\mu$ は簡約化して $g(L, p)$ のように記述される。

上のリスト1では、始状態の相互作用は(5)式で表されるが、終状態の相互作用を乗ずると、 $\gamma^\mu g_{\mu\lambda} \gamma^\lambda$ のような縮約が起こるので、その結果を用いている。

REDUCEでは、ガンマ行列が記述されると自動的にトレースを取る設定になっている。ただし、4行4列の単位行列が1に規格化されるので、実際のトレースはREDUCEの答えに4を乗じたものとなる。なお、リスト1中4行目のnospurは、

トレース計算を抑制する。これは、筆者の研究グループ代表者の清水 韶光氏が、[文献3]で解説している方法である。

ここで、amp1は図1中のGraph 1の確率振幅から、波動関数の部分を取り除いたものである。また、aamp1はamp1のエルミート共役である。

これらに、(6)式に相当するものに乗じた段階で、リスト1中7行目のspurでトレースを取るモードに戻す。こうしておくこと、Graph 1とGraph 2以降との積のトレースを計算する際に、系統的な扱いができて、便利である。

上のリスト1に相当する部分の計算結果を以下に示す。(リスト2)

```
ans=8. *cscada**2*(ame|2**2-2. *ame|2*ams|2+2. *ame|2*
. pp21-2. *ams|2*pp21+pp13*pp23-pp13*pp24-pp14*pp23+
. pp14*pp24+pp21**2)
trnn(1, 1) = ans
```

リスト2. トレース計算の結果 (抜粋; FORTRAN形式)

4. シミュレーションの実際

REDUCEでは、計算結果をFORTRANのソースプログラムの形式で出力するモードが選択できる。これとwrite命令を用いて、直接ソースプログラムを書き出させることができる。

シミュレーションの第一歩は、このプログラムを用いて数値計算を行うことが基本となる。上述のように、終状態が2体の場合には、計算は単純である。現実の実験では、電子・陽電子ビームから光子を放出する場合や、生成された粒子が素早く崩壊して、別の粒子に変わる場合もある。

したがって、一般に終状態は多体となる。その場合、実験条件として、観測する粒子の運動量やビーム軸からの角度等に制限が付く。その為、起こり得るすべての場合について積分を行えば簡単な結果となるときでも、実験条件による制限を反映させるには数値積分が必要となる。

筆者の研究グループではシミュレーションに、川端氏が開発したBASES/SPRING [文献4]と

いうソフトウェアを利用している。BASESは、最大50重積分までをサポートする、モンテカルロ積分ソフトウェアである。その特長として、積分の相空間中にピークが存在すると、グリッドを最適化してから点をばら撒くことが挙げられる。

SPRINGは、ランダムに発生させた終状態の粒子の4次元運動量を他のパッケージに渡して、粒子検出器上で飛跡がどのように見えるか、といったシミュレーションを行うために用いる。

この前段階として、BASESを起動して反応確率を計算しておく必要がある。その結果はファイルに出力され、SPRINGに受け継がれるように設計されている。

5. おわりに

本稿では、高エネルギー物理学のシミュレーションの基本となるトレース計算を、数式処理ソフトウェアREDUCEで行う場合について論じた。

本文中で取り上げた例は最も単純な場合であり、スエレクトロンLの対生成でも、残りの5個の図形

からの寄与を求めるには、リスト1よりも複雑な確率振幅となる。

それでも、これまで実験で観測されている粒子の相互作用を記述していると考えられている、標準模型の範囲であれば、終状態3体までは何とかトレース計算から全体の確率振幅の絶対値二乗を求めることは可能である。

ところが、多数の新粒子群の存在を予言する超対称標準模型の場合には、ファインマン図形の中の一部を取り出した場合でも、トレース計算の結果は数万行に及ぶことがある。

このような事態の回避策として、トレース計算を行わずに、確率振幅の絶対値二乗を求める方法の採用がある。

筆者の研究グループの一員である田中 秀和 氏は、確率振幅をヘリシティ振幅というものに分解して複素数のまま数値化し、その後を組み直して絶対値二乗を求めるソフトウェア CHANEL [文献5]を開発した。

このCHANELは、上述のGRACEFIG, BASES, SPRING と共に、筆者の研究グループの一員である金子 敏明 氏が開発した自動計算プログラムGRACE [文献6-9]に組み込まれている。

筆者らは近年、GRACEに、超対称標準模型の予言する粒子群と、それらの間の相互作用とを組み込む研究を続けてきた。[文献10]

そのシステムが、正しく出来上がっているかどうかの検査の一つとして、REDUCEによるトレース計算との比較がある。

最近、筆者が作成した検査用のソースでは、終状態3体でファインマン図形が48個という粒子生成反応に対して、確率振幅の記述だけで1,000行を超えている。

この場合には、コンパイラの限界により、図形のいくつかを一纏めにして、部分的に計算を行うことしかできない。

したがって、今後はREDUCEによるトレース計算は、自動計算ソフトウェアGRACEの補完的な意味でのみ、利用されることになる。

文 献

1) A.C. Hearn, *REDUCE User's Manual*

Version 3.6, RAND Publication CP78 (Rev.7/95), 1995 (邦訳: 株式会社フォーブス, 1995) .

- 2) T. Ishikawa, S. Kawabata and Y. Kurihara, in *New Computing Techniques in Physics Research IV - Proceedings of the Fourth International Workshop on Software Engineering, Artificial Intelligence and Expert Systems for High Energy and Nuclear Physics (AIHENP95)*, Pisa, Italy, April 3-8, 1995, edited by B. Denby and D. Perret-Gallix, (World Scientific, Singapore, 1995), p.211.
- 3) 清水 韶光, *How to use REDUCE* (邦題: REDUCEの練習), KEK Internal 90-35, 1991.
- 4) S. Kawabata, *Comput. Phys. Commun.* **41** (1986), 127; **88** (1995), 309.
- 5) H. Tanaka, *Comput. Phys. Commun.* **58** (1990), 153.
- 6) T. Kaneko, in *New Computing Techniques in Physics Research*, edited by D. Perret-Gallix and W. Wojcik, (Edition du CNRS, Paris, 1990), p.555.
- 7) T. Kaneko and H. Tanaka, in *Proceedings of the Second Workshop on Japan Linear Collider (JLC)*, KEK, November 6-8, 1990, edited by S. Kawabata, KEK Proceedings **91-10** (1991), p.250.
- 8) T. Kaneko, in *New Computing Techniques in Physics Research II*, edited by D. Perret-Gallix, (World Scientific, Singapore, 1992), p.659.
- 9) T. Ishikawa, T. Kaneko, K. Kato, S. Kawabata, Y. Shimizu and H. Tanaka (Minami-Tateya group), *GRACE manual Version 1.0*, KEK Report **92-19** (1993).
- 10) M. Jimbo, T. Kon, H. Tanaka, T. Kaneko and Minami-Tateya collaboration, in *New Computing Techniques in Physics Research IV - Proceedings of the Fourth International Workshop on Software Engineering, Artificial Intelligence and Expert Systems for High Energy and Nuclear Physics (AIHENP95)*, Pisa, Italy, April 3-8, 1995,

edited by B. Denby and D. Perret-Gallix,
(World Scientific, Singapore, 1995), p.149.