

GPU を用いた MMPA 法による燃焼計算の高速化に関する検討

Study on fast computation of burnup calculations using MMPA on GPUs

*原田 善成¹, 山口 響¹, 山本 章夫¹, 遠藤 知弘¹

¹名古屋大学

燃焼計算の数値解法の一つである Mini-max polynomial approximation(MMPA)法において、GPU の並列処理能力を利用した演算時間の短縮について検討を行った。

キーワード : GPU, 倍精度, 燃焼計算, MMPA

1. 緒言 燃焼計算の数値解法の一つである Mini-max polynomial approximation (MMPA)法[1]は、近似誤差の最大値が最小になるように有理式で行列指数を近似する手法である。MMPA 法の利点として、演算時間が比較的短いこと、任意の時間幅を自由に設定できることが挙げられる。本研究では、燃焼計算の演算時間を短縮するために GPU(Graphics Processing Unit)に着目した。GPU は並列処理能力に優れ、単精度浮動小数点数を用いると高速な演算が可能であるが、倍精度浮動小数点数の場合では演算性能が著しく低下するという特徴を有している。そこで本研究では、GPU を用いた MMPA 法による燃焼計算を実装した上で、その演算時間を計測し、単精度による MMPA 法の有効性について検証を行った。

2. 条件 MMPA 法により、燃焼方程式の解析解を以下のように近似することができる。

$$\mathbf{n}(t) = a_0 \mathbf{n}_0 + \sum_{i=0}^n a_i \{(\mathbf{A}t + \mathbf{cI})(\mathbf{A}t - \mathbf{cI})^{-1}\}^i \mathbf{n}_0$$

a_i は任意定数 c によって定まる係数、 t は燃焼時間、 \mathbf{n}_0 は初期原子数密度ベクトル、 \mathbf{A} は燃焼マトリックス、 \mathbf{I} は単位行列をそれぞれ表す。計算では、近似次数 n は32次、燃焼時間 t は 10^8 秒までをlogスケールで400分割とした。数値計算ではCPU Intel Core i9-10920X, GPU NVIDIA GeForce GTX 1650 SUPER を使用した。コード作成にあたってはPythonを用い、NumPy およびCuPy(NumPy と高い互換性を持つ GPU 向け汎用配列数値計算ライブラリ)をそれぞれ使用した。

3. 結果 221核種、単精度の条件では、CPUで12.7秒、GPUで1.97秒の演算時間であった。また、図1より倍精度による計算結果との相対誤差は概ね 10^{-6} 程度であることから、単精度でも十分な精度であることを確認した。次に1401核種、単精度の条件では、CPUで149秒、GPUで46.2秒の演算時間であった。しかし、図2より倍精度による計算結果との相対誤差が大きくなることを確認した。原因は和と乗算による丸め誤差であったため、単精度でもMMPA法が適用できるように、補助変数の導入や計算手法の改良をする必要があると考えられる。

参考文献 [1] Y. Kawamoto et al., *Ann. Nucl. Energy*, **80**, pp. 219–224 (2015).

謝辞 本研究に対してご助言頂いた、北海道大学 千葉 豪 准教授に感謝する。

*Yoshinari Harada¹, Hibiki Yamaguchi¹, Akio Yamamoto¹ and Tomohiro Endo¹

¹Nagoya Univ.

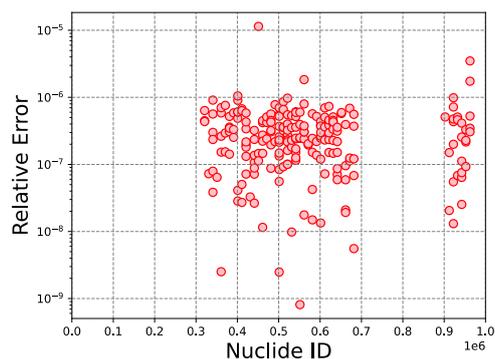


図1 倍精度計算との相対誤差(221核種)

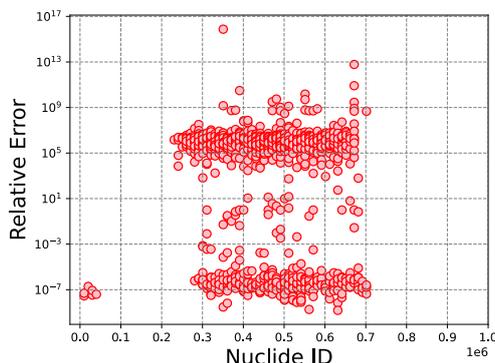


図2 倍精度計算との相対誤差(1401核種)