

GPUによる荷電粒子輸送計算

桶井一秀[†]、中塚隆郎[‡]

[†] 川崎医科大学

[‡] 岡山商科大学

GPU(Graphics Processing Unit)は3次元グラフィックスなどのデータ処理を行うためのLSIである。近年のGPUは、座標変換等の、あらかじめ用意された特定用途の計算だけでなく、自由にプログラムして利用することが可能となっており、また、その浮動小数点演算能力やメモリ帯域幅は、汎用のCPUを大きく凌駕する[1]ため、グラフィック計算だけでなく、天体物理学、流体力学、分子力学、気象シミュレーション、石油採掘現場での地震波解析、信号処理、金融工学など、さまざまな分野で応用され始めている(例えば、[2, 3]参照)。

物質中の荷電粒子輸送問題では、膨大な数の相互作用を考える必要があるため、GPUを用いることにより、計算を高速化することができれば有益である。そこで、クーロン散乱の散乱角をサンプリングするモンテカルロシミュレーションを、GPU,CPU双方で行い、GPU計算の有効性を検証した。(GPU計算にはNVIDIA社のCUDA技術を利用した[1]。)

一例として、散乱角 θ の微分断面積を、

$$f(\theta)d\theta \propto \left(1 - \sin^2 \frac{\theta}{2}\right) \frac{\sin \theta}{\left(\sin^2 \frac{\theta}{2} + \frac{\lambda_a^2}{2}\right)^2} d\theta \quad (1)$$

とし、1000回散乱した後の角度分布を求めた場合、GPUによる計算時間はCPUの約52分の1となった(表1)。

計算速度の違いは、GPUやCPUの種類やシミュレーションの性質、最適化の度合い等、さまざまな環境に依存するので、すべての場合に、これほどの速度改善が得られるとは限らないが、この結果は、荷電粒子輸送計算におけるGPUの有用性を期待させるものである。

表 1: 1000回のクーロン散乱シミュレーションに要した時間。

演算装置	イベント数	計算時間	計算時間/イベント数
GPU (GeForce 8800 GTX)	$2^{24} = 16777216$	94.3 秒	5.62×10^{-3} 秒
CPU (Core2Duo E6700 2.66GHz)	$2^{18} = 262144$	76.8 秒	2.93×10^{-1} 秒

参考文献

- [1] NVIDIA CUDA Compute Unified Device Architecture Programming Guide ver. 2.0 (2008)
- [2] <http://www.gpgpu.org/>
- [3] H. Nguyen, ed., *GPU Gems 3*, Addison-Wesley (2007)