

多重格子法による輸送方程式の定常問題に対する差分法の高速解法

Fast Numerical Computation for the Stationary Radiative Transport Equation using Multigrid Methods

藤原 宏志¹⁾

Hiroshi FUJIWARA

1) 京都大学大学院 情報学研究科 (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町, E-mail: fujiwara@acs.i.kyoto-u.ac.jp)

We develop a fast and direct numerical method for the Dirichlet boundary value problem of the stationary radiative transport equation for the sake of numerical simulation of light propagation in human tissue. Based on the dominance of the diagonal entries of a linear equation obtained by the finite difference method and the composite trapezoidal rule, fast computation is achieved by a parallel computation with a block Gauss-Seidel method and a multigrid method.

Key Words: Stationary Radiative Transport Equation, Block Gauss-Seidel Method, Multigrid Method

1. 輸送方程式

生体に照射された近赤外光は、生体組織内で散乱・吸収をともなって伝播し、その様子は光子の伝播として輸送方程式で記述される⁽²⁾。本研究はその数値シミュレーションのため、輸送方程式の数値計算の高速化について論じる。考える領域内での光の伝播は十分に速く、かつ散乱により光子のエネルギーは変化しないと考え、輸送方程式 (radiative transport equation) の定常問題、特に Dirichlet 問題を扱う。これに対して差分法と台形公式による離散化をおこない、得られる連立一次方程式の係数行列の対角優位性に基き、ブロック Gauss-Seidel 法による並列計算と多重格子法 (multigrid method) による高速化を実現する。簡単のため本論文では 2 次元の場合について述べるが、提案手法は 3 次元の場合にも適用可能である。

輸送方程式は、散乱体が存在する媒質中における粒子の散乱・吸収を伴う伝播の数値モデルとして現れる^(5, 9)。これまで、Monte Carlo 法⁽¹⁰⁾ や、球面調和関数展開に基く解の等方性 (P_1 近似)、内部粒子源の等方性 (P_0 近似)、および Fick の法則を仮定して得られる近似モデルの数値計算がおこなわれているが、生体組織における近赤外光の伝播は強い前方散乱をもつことが知られており、その精緻なシミュレーションには輸送方程式の直接計算が必要となる。

本研究で考える光子を対象とした 2 次元輸送方程式の Dirichlet 問題は、未知関数を $I = I(x, \xi), x \in \Omega \subset \mathbb{R}^2, \xi \in$

$S^1 = \{\xi \in \mathbb{R}^2; |\xi| = 1\}$ として

$$-\xi \cdot \nabla_x I - (\mu_s + \mu_a)I + \mu_s \int_{S^1} p(x; \xi, \xi') I(x, \xi') d\sigma_{\xi'} + q = 0, \quad \text{in } X = \Omega \times S^1, \quad (1a)$$

$$I(x, \xi) = I_1(x, \xi), \quad \text{on } \Gamma_- \quad (1b)$$

で与えられる。ただし $x = (x_1, x_2)$ として $\nabla_x = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2} \right)$, $n(x)$ を Ω の外向き単位法線として $\Gamma_- = \{(x, \xi); x \in \partial\Omega, n(x) \cdot \xi < 0\}$ とする。

輸送方程式 (1) において、 $I(x, \xi)$ は位置 $x \in \Omega$ において速度が $\xi \in S^1$ 方向の粒子 (光子) 密度を、 $q = q(x, \xi)$ は内部粒子源を表す。また、 $\mu_s = \mu_s(x)$ を散乱係数、 $\mu_a = \mu_a(x)$ を吸収係数、 $p(x; \xi, \xi')$ を散乱の位相関数という。位相関数は $x \in \Omega$ における散乱で、粒子の速度の方向が ξ' から ξ に変化する条件付き確率に対応する確率密度関数であり、

$$p(x; \xi, \xi') \geq 0 \quad \text{かつ} \quad \int_{S^1} p(x; \xi, \xi') d\sigma_{\xi'} = 1$$

を満たす。さらに、 p は ξ, ξ' のなす角度 τ に依存し、 ξ, ξ' の各々の方向には依存しないものとする。このとき $\tilde{p}(x; \tau) = p(x; \xi, \xi')$ と書く。

2. 上流差分と台形公式による離散化

本研究では $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ は矩形領域とする。また、 $\mu_s, \mu_a \in L^\infty(\Omega), q \in L^\infty(X), I_1 \in L^\infty(\Gamma_-)$ とし、正数 μ_s^+, μ_a^- が存在して $0 \leq \mu_s(x) \leq \mu_s^+, 0 < \mu_a^- \leq \mu_a(x)$ であるとする。

矩形領域を $\Omega = (x_1, \bar{x}_1) \times (x_2, \bar{x}_2)$ とし、正整数 N_1, N_2 に対して $\Delta x_i = (\bar{x}_i - x_i)/N_i$ とする。 M を正整数とし、

$\Delta\theta = 2\pi/M$ とする. $\bar{\Omega}$ に刻み幅 $\Delta x_1, \Delta x_2$ で配した格子点を $x_{ij} = (x_1 + i\Delta x_1, x_2 + j\Delta x_2)$ とし, $\xi_n = (\xi_{n,1}, \xi_{n,2}) = (\cos n\Delta\theta, \sin n\Delta\theta)$ とする. このとき, $I(x_{ij}, \xi_n)$ 相当値を $I_{i,j,n}$ と書く.

$X \cup \Gamma_-$ の格子点上で値をとる $I_\Delta = (I_{i,j,n})$ に対して, 以下の離散化を考える⁽¹¹⁾.

$$\begin{aligned} A_\Delta I_{i,j,n} &= -\xi_{n,1} \frac{I_{i+1,j,n} - I_{i-1,j,n}}{2\Delta x_1} \\ &\quad + |\xi_{n,1}| \frac{I_{i+1,j,n} - 2I_{i,j,n} + I_{i-1,j,n}}{2\Delta x_1} \\ &\quad - \xi_{n,2} \frac{I_{i,j+1,n} - I_{i,j-1,n}}{2\Delta x_2} \\ &\quad + |\xi_{n,2}| \frac{I_{i,j+1,n} - 2I_{i,j,n} + I_{i,j-1,n}}{2\Delta x_2}, \end{aligned}$$

$$\Sigma_\Delta I_{i,j,n} = (\mu_s(x_{ij}) + \mu_a(x_{ij}))I_{i,j,n},$$

$$K_\Delta I_{i,j,n} = \mu_s(x_{ij})\Delta\theta \sum_{m=0}^{M-1} p(x_{ij}; \xi_n, \xi_m) I_{i,j,m}.$$

ここで $A_\Delta I_{i,j,n}$ は, (1) に対応する初期値境界値問題⁽⁸⁾ に現れる輸送方程式の移流項の上流差分となっている. 実際, 例えば $\xi_{n,1}, \xi_{n,2}$ がともに正値であれば

$$A_\Delta I_{i,j,n} = -\xi_{n,1} \frac{I_{i,j,n} - I_{i-1,j,n}}{\Delta x_1} - \xi_{n,2} \frac{I_{i,j,n} - I_{i,j-1,n}}{\Delta x_2}$$

である.

以上の記号のもとで

$$T_\Delta = A_\Delta - \Sigma_\Delta + K_\Delta$$

と定め, (1) に対する次の離散問題を考える.

$$T_\Delta I_{i,j,n} = -q(x_{ij}, \xi_n), \quad \text{in } X, \quad (2a)$$

$$I_{i,j,n} = I_1(x_{ij}, \xi_n), \quad \text{on } \Gamma_-. \quad (2b)$$

3. 離散スキームに現れる係数行列の対角優位性

離散問題 (2) において, 未知数 $I_\Delta = (I_{i,j,n})$ を (i, j, n) について辞書順 (lexicographical order) で並べて得られる連立一次方程式を $T_N I_\Delta = \tilde{q}_N$ と書く. 本節では, $\Delta x_1, \Delta x_2$ に依らず, $\Delta\theta$ が充分に小さければ行列 T_N は狭義優対角行列 (strictly diagonally dominant) となることを示す.

まず $\tilde{p} \in C^2[0, 2\pi]$ ならば, 台形公式の誤差評価により

$$\int_{S^1} p(x; \xi, \xi') d\sigma_{\xi'} - \Delta\theta \sum_{m=0}^{M-1} p(x; \xi, \xi_m) = -\frac{\pi}{6} \Delta\theta^2 \tilde{p}''(\eta)$$

となる $\eta = \eta_{x,\xi} \in [0, 2\pi)$ が存在し⁽³⁾, さらに \tilde{p} が周期 2π の C^2 級関数ならば

$$\int_{S^1} p(x; \xi, \xi') d\sigma_{\xi'} - \Delta\theta \sum_{m=0}^{M-1} p(x; \xi, \xi_m) = -\frac{\pi}{12} \Delta\theta^2 \tilde{p}''(\eta)$$

となることに注意する⁽⁸⁾.

定理 1. \tilde{p} は周期 2π の C^2 級関数とする. ある $0 < \lambda < 1$ が存在して

$$\Delta\theta \|p\|_\infty \leq 1 \quad \text{かつ} \quad \|\tilde{p}''\|_\infty \Delta\theta^2 \leq \lambda \frac{12}{\pi} \frac{\mu_a^-}{\mu_s^+} \quad (3)$$

が成立するならば, 行列 T_N は狭義優対角である.

証明. 簡単のため, $p(\xi, \xi') = p(x_{ij}; \xi, \xi')$, $\mu_s = \mu_s(x_{ij})$, $\mu_a = \mu_a(x_{ij})$ と書く. 上の注意により,

$$\begin{aligned} 1 - \Delta\theta \sum_{m=0}^{M-1} p(\xi, \xi_m) &= \int_{S^1} p(x; \xi, \xi') d\sigma_{\xi'} - \Delta\theta \sum_{m=0}^{M-1} p(\xi, \xi_m) \\ &= -\frac{\pi}{12} \Delta\theta^2 \tilde{p}''(\eta) \end{aligned}$$

となる $\eta = \eta_{x,\xi} \in [0, 2\pi)$ が存在する. よって (3) より

$$\begin{aligned} \mu_s \Delta\theta \sum_{m=0}^{M-1} p(\xi, \xi_m) &\leq \mu_s \left(1 + \frac{\pi}{12} \Delta\theta^2 \|\tilde{p}''\|_\infty \right) \\ &\leq \mu_s \left(1 + \lambda \frac{\mu_a^-}{\mu_s^+} \right) \leq \mu_s + \lambda \mu_a^- \end{aligned}$$

を得る. $(x_{ij}, \xi_n) \in \Gamma_-$ に対応する方程式 (2b) は明らかに優対角である. $x_{ij} \in \Omega$ かつ $0 \leq n\Delta\theta < \pi/2$ の場合を考える. このとき $\xi_{n,1}, \xi_{n,2} > 0$ であり, (2a) は

$$\begin{aligned} &\left(\mu_s + \mu_a + \frac{\xi_{n,1}}{\Delta x_1} + \frac{\xi_{n,2}}{\Delta x_2} - \mu_s \Delta\theta p(\xi_n, \xi_n) \right) I_{i,j,n} \\ &\quad - \frac{\xi_{n,1}}{\Delta x_1} I_{i-1,j,n} - \frac{\xi_{n,2}}{\Delta x_2} I_{i,j-1,n} \\ &\quad - \mu_s \Delta\theta \sum_{\substack{0 \leq m < M \\ m \neq n}} p(\xi_n, \xi_m) I_{i,j,m} = q(x_{ij}, \xi_n) \end{aligned}$$

となる. p の正値性および条件 (3) より

$$\begin{aligned} &\left| \mu_s + \mu_a + \frac{\xi_{n,1}}{\Delta x_1} + \frac{\xi_{n,2}}{\Delta x_2} - \mu_s \Delta\theta p(\xi_n, \xi_n) \right| \\ &\quad - \left(\left| \frac{\xi_{n,1}}{\Delta x_1} \right| + \left| \frac{\xi_{n,2}}{\Delta x_2} \right| + \mu_s \Delta\theta \sum_{\substack{0 \leq m < M \\ m \neq n}} |p(\xi_n, \xi_m)| \right) \\ &= \mu_a + \mu_s \left(1 - \Delta\theta \sum_{m=0}^{M-1} p(\xi_n, \xi_m) \right) \\ &\geq \mu_a^- (1 - \lambda) > 0 \end{aligned}$$

が成立する. $\pi/2 \leq n\Delta\theta < 2\pi$ の場合にも同様の評価が成立するので, T_N は狭義優対角である. \square

狭義対角優位行列は正則であることから⁽¹²⁾, 定理 1 より, 離散問題 (2) の解 I_Δ が一意に存在することがわかる. また条件 (3) のもとで, $\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta\theta$ に依らない正数 C_1 が存在して

$$\|I_\Delta\|_\infty = \sup_{i,j,n} |I_{i,j,n}| \leq \|I_1\|_\infty + C_1 \|q\|_\infty$$

が成立する. さらに $I \in C^2(X \cup \Gamma_-)$ なる (1) の解が存在するとき, ある正数 C_2 が存在して

$$\|I - I_\Delta\|_\infty \leq C_2 (\Delta x_1 + \Delta x_2 + \Delta\theta^2)$$

の評価を得る⁽⁶⁾.

4. Jacobi 法および Gauss-Seidel 法による数値計算例

離散問題 (2) に現れる行列 T_N は疎行列であり, 反復解法による求解が有効である. 特に対角優位性により, Jacobi 法および Gauss-Seidel 法による反復法が収束する⁽¹²⁾. 本節ではそれらの適用例を示す.

計算例として、 $\Omega = (-0.6, 50.6) \times (-0.6, 50.6)$ とし、 $\mu_s \equiv 1.09$, $\mu_a \equiv 0.08$, $q \equiv 0$ とする。また、散乱核には Poisson 核

$$p(x; \xi, \xi') = \frac{1}{2\pi} \frac{1 - g^2}{1 - 2g \xi \cdot \xi' + g^2} \quad (4)$$

を $g = 0.9$ として利用する。領域 Ω が 3 次元の場合、特に光の伝播の扱いにおいて 3 次元 Poisson 核は Henyey-Greenstein 核とよばれる^(2, 7)。 $\xi' = (1, 0)$ とした場合の Poisson 核を ξ について極座標で表示したものを Fig. 1 に示す。実線は $g = 0.9$ の場合を表しており、これは生体内における近赤外光の伝播の特徴である前方散乱を念頭に置いたものである。また、全ての方向に等しい確率で散乱される等方散乱は Poisson 核では $g = 0$ に対応し、図中の破線で表される。

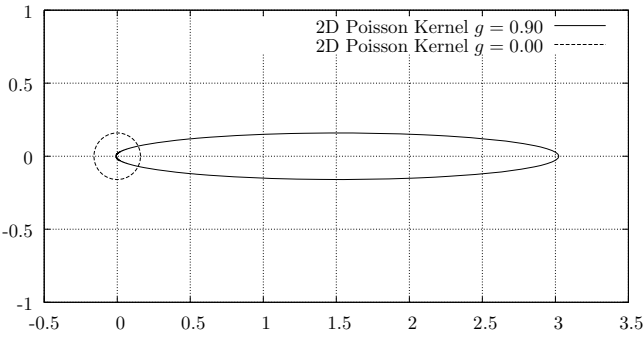


Fig. 1 Scattering Phase Functions (4) for $\xi' = (1, 0)$ in the Polar Coordinate with respect to ξ .

また境界条件は、 $(x, \xi) \in \Gamma_-$ に対して

$$I(x, \xi) = \begin{cases} \tilde{I}_1(\xi), & x_1 = -0.6, |x_2 - 25| \leq 0.1; \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

とした。ただし $\xi = (\cos \theta, \sin \theta)$ とするとき、

$$\tilde{I}_1(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{\theta^2}{2\sigma^2}\right), \quad \text{ただし } \sigma = 0.2$$

とした。 $\tilde{I}_1(\xi)$ を Fig. 2 および Fig. 3 に示す。Fig. 2 の横軸は $\xi = (\cos \theta, \sin \theta)$ とした場合の θ を表し、Fig. 3 は ξ についての極座標で表している。

Jacobi 法および Gauss-Seidel 法の反復の初期値を

$$I_{i,j,n}^0 = \begin{cases} I_1(x_{ij}, \xi_n), & (x_{ij}, \xi_n) \in \Gamma_-; \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases}$$

離散化パラメータを $\Delta x_1 = \Delta x_2 = 0.1$, $M = 60$ とするとき、反復回数と残差の最大値ノルムを Fig. 4 に示す。 k 回の反復で得られる近似解を $I_\Delta^k = (I_{i,j,n}^k)$ とすると、残差の最大値ノルムが $\|\tilde{q}_N - T_N I_\Delta^k\|_\infty \leq 10^{-12} \|\tilde{q}_N\|_\infty$ となるのに必要な反復回数は、Jacobi 法では 2324 回、Gauss-Seidel 法では 1277 回であった。また反復が停止した際、

$$\max_{x_{ij} \in \Omega} \left| \frac{I_{i,j,n}^k - I_{i,j,n}^{k-1}}{I_{i,j,n}^k} \right| \approx 10^{-7}$$

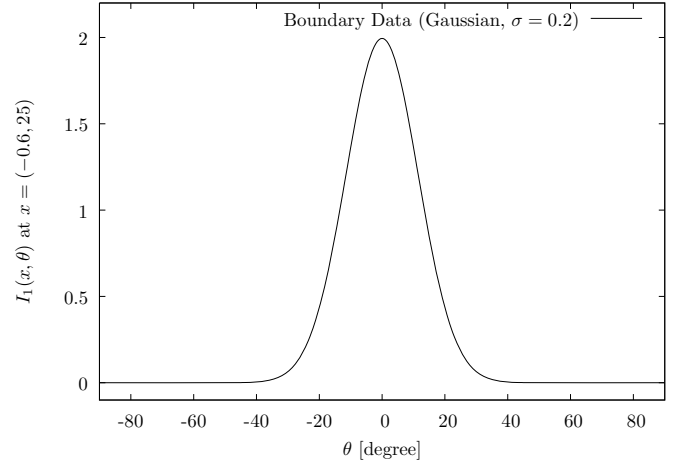


Fig. 2 Boundary Data $\tilde{I}_1(\xi)$, $\xi = (\cos \theta, \sin \theta)$.

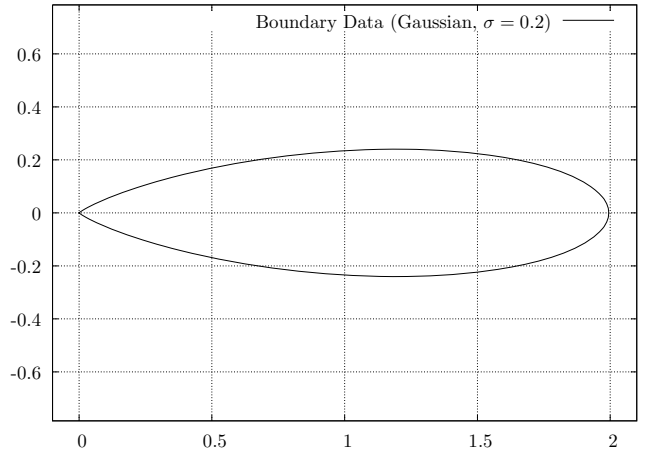


Fig. 3 Boundary Data $\tilde{I}_1(\xi)$ in the Polar Coordinate with respect to ξ .

であった。なお Xeon 5570 (2.93GHz) で、Gauss-Seidel 法の倍精度数値計算に要した時間は 1077 秒、メモリは 243 MB であった。

得られた数値解を Fig. 5 に示す。これは $I(x_{ij}, \xi_n)$ に相当する計算値を、+ で示す各点 x において ξ について極座標で示したものである。ただし極座標の動径方向に関して $I_{i,j,n}$ の値を 2500 倍にして表示している。本計算例では、輸送方程式の解は速度方向 ξ への依存が特徴的であることがわかる。

また、上述の例において幾つかの緩和パラメータで SOR 法を実行したところ、緩和パラメータを 1 の近傍に設定した場合を除いていずれも収束しなかった。

5. 数値積分の高速化とブロック Gauss-Seidel 法の並列計算

Gauss-Seidel 法は Jacobi 法に比して少ない反復回数で収束するものの、その並列化のアルゴリズムは自明ではない。本節では、並列計算をおこなうためのブロック Gauss-Seidel 法を導入する。ブロックは数値積分 K_Δ をもとに定め、その数値積分の高速化について述べる。

輸送方程式は微分積分方程式であり、その Jacobi 法および Gauss-Seidel 法による反復計算には数値積分 K_Δ が現れ

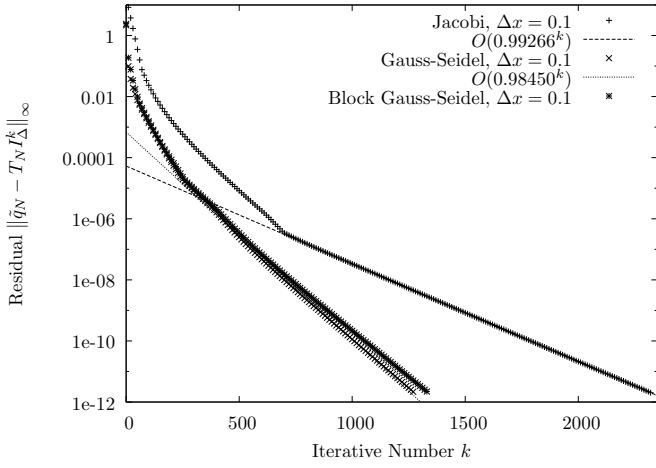


Fig. 4 Residual of Jacobi Method, Gauss-Seidel Method and Block Gauss-Seidel Method for $\Delta x_1 = \Delta x_2 = 0.1, \Delta \theta = 2\pi/60$.

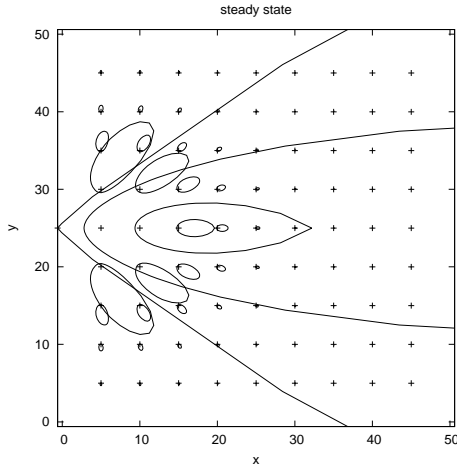


Fig. 5 Numerical Solution $I_{i,j,n}$ at x_{ij} Indicated by + Signs in the Polar Coordinate with respect to ξ .

る . Jacobi 法の場合 , 反復は

$$I_{i,j,n}^{k+1} = \left(\mu_s + \mu_a + \frac{\xi_{n,1}}{\Delta x_1} + \frac{\xi_{n,2}}{\Delta x_2} - \mu_s \Delta \theta p(x_{ij}; \xi_n, \xi_n) \right)^{-1} \cdot \left(q(x_{ij}, \xi_n) + \frac{\xi_{n,1}}{\Delta x_1} I_{i-1,j,n}^k + \frac{\xi_{n,2}}{\Delta x_2} I_{i,j-1,n}^k + \mu_s \Delta \theta \sum_{\substack{0 \leq m < M \\ m \neq n}} p(x_{ij}; \xi_n, \xi_m) I_{i,j,m}^k \right)$$

で与えられ , 数値積分

$$S_{i,j,n}^k = \Delta \theta \sum_{\substack{0 \leq m < M \\ m \neq n}} p(x_{ij}; \xi_n, \xi_m) I_{i,j,m}^k \quad (5)$$

が各 k, i, j, n に対して実行される . そのため , 最内ループである m についての加算 (5) が計算時間の大部分を占めることとなり , この高速化によって計算全体の高速化が達成される .

位相関数 p が x_2 に依らない場合を考える . $p_{nm} = p(x_{ij}; \xi_n, \xi_m)$

として

$$P^o = \begin{pmatrix} 0 & p_{01} & p_{02} & \cdots & p_{0,M-1} \\ p_{10} & 0 & p_{12} & \cdots & p_{1,M-1} \\ p_{20} & p_{21} & 0 & \cdots & p_{2,M-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{M-1,0} & p_{M-1,1} & p_{M-1,2} & \cdots & 0 \end{pmatrix},$$

$$I_i^k = \begin{pmatrix} I_{i,1,0}^k & I_{i,2,0}^k & I_{i,3,0}^k & \cdots & I_{i,N_2-1,0}^k \\ I_{i,1,1}^k & I_{i,2,1}^k & I_{i,3,1}^k & \cdots & I_{i,N_2-1,1}^k \\ I_{i,1,2}^k & I_{i,2,2}^k & I_{i,3,2}^k & \cdots & I_{i,N_2-1,2}^k \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ I_{i,1,M-1}^k & I_{i,2,M-1}^k & I_{i,3,M-1}^k & \cdots & I_{i,N_2-1,M-1}^k \end{pmatrix},$$

および

$$S_i^k = \begin{pmatrix} S_{i,1,0}^k & S_{i,2,0}^k & S_{i,3,0}^k & \cdots & S_{i,N_2-1,0}^k \\ S_{i,1,1}^k & S_{i,2,1}^k & S_{i,3,1}^k & \cdots & S_{i,N_2-1,1}^k \\ S_{i,1,2}^k & S_{i,2,2}^k & S_{i,3,2}^k & \cdots & S_{i,N_2-1,2}^k \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{i,1,M-1}^k & S_{i,2,M-1}^k & S_{i,3,M-1}^k & \cdots & S_{i,N_2-1,M-1}^k \end{pmatrix}$$

とすると , 数値積分 (5) は行列乗算によって $S_i^k = \Delta \theta P^o I_i^k$ と表される . 行列乗算はキャッシュの利用による高速化が可能であり , これにより最内ループの数値積分 (5) の高速化が実現される .

この行列乗算の利用を念頭に置き , $B_i = \{I_{i,j,n}; 0 \leq j \leq N_2, 0 \leq n < M\}$ をひとつのブロックとし , 以下のブロック Gauss-Seidel 法を導入する . いま , k 回の反復により (2) の近似解 I_{Δ}^k が得られているとする . このとき , $i = 1, 2, \dots, N_1-1$ の順に , $I_{i,j,n}^{k+1}$ の値を次の手順で求める . まず行列乗算により行列積 S_i^k を求める . 次に , 得られた S_i^k をもちいて , $0 < j < N_2, 0 \leq n < M$ について

$$I_{i,j,n}^{k+1} = \left(\mu_s + \mu_a + \frac{\xi_{n,1}}{\Delta x_1} + \frac{\xi_{n,2}}{\Delta x_2} - \mu_s \Delta \theta p(x_{ij}; \xi_n, \xi_n) \right)^{-1} \cdot \left(q(x_{ij}, \xi_n) + \frac{\xi_{n,1}}{\Delta x_1} I_{i-1,j,n}^{k+1} + \frac{\xi_{n,2}}{\Delta x_2} I_{i,j-1,n}^k + \mu_s S_{i,j,n}^k \right)$$

によって I_{Δ}^{k+1} を求め , $k+1$ 回目の反復を終了する .

提案したアルゴリズムによる反復回数と残差の最大値ノルムを Fig. 4 に示す . この場合 , $\|\tilde{q}_N - T_N I_{\Delta}^k\| \leq 10^{-12} \|\tilde{q}_N\|_{\infty}$ となるのに必要な反復回数は 1339 回であり , Gauss-Seidel 法に比して増加した反復回数は約 5% であった . また , Xeon 5570 (2.93GHz, 6 コア) を 2 プロセッサ有する計算機で ACML4.2.0⁽¹⁾ の行列乗算 DGEMM を用い , OpenMP による並列計算をおこなった場合の計算時間を Table 1 に示す . ただし行列乗算の並列計算はおこなわず , スレッド毎に i を割当てて行列乗算を実行した . その際 , スレッドへの計算 (i) の割当ては明示せず , C++ 言語の場合 , OpenMP の `omp parallel for` 節を利用した . そのため , 厳密に上述のスキームが実行されているわけではないことに注意する .

Table 1 より , 提案するブロック Gauss-Seidel 法では反復回数が増大するものの , 並列化およびキャッシュの利用の効

果に対してその影響は軽微であり、提案手法は数値計算の高速化に有効であることがわかる。また位相関数 p が x_1 について一定でない場合も、行列・ベクトル乗算によってキャッシュをもちいた高速化が可能である。

Table 1 Iteration of Gauss-Seidel Method and Block Gauss-Seidel Method, $\Delta x_1 = \Delta x_2 = 0.1, \Delta \theta = 2\pi/60$. Tolerance Is $\|\tilde{q}_N - T_N I_{\Delta}^k\|_{\infty} < 10^{-12} \|\tilde{q}_N\|_{\infty}$.

	Number of Iterations	Elapse Time (sec.)
1thread without DGEMM	1277	1077
1thread with DGEMM	1339	402
12threads with DGEMM	1339	50

また、この計算例における数値解は Fig. 5 に示すとおり方向 ξ への依存が強いことに注意し、提案するブロック Gauss-Seidel 法における i, j の反復の計算順の影響を調べる。まず j に関する反復を k の偶奇で変更する、すなわち k が偶数の場合は $j = 1, 2, \dots, N_2 - 1$ の順に、 k が奇数の場合は $j = N_2 - 1, \dots, 2, 1$ の順に計算をおこなうと、反復回数は 866 回に軽減され、この変更が極めて有効であることがわかる。次に、 j に関する反復は常に $j = 1, 2, \dots, N_2 - 1$ とし、

$$\tilde{I}'_1(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(\theta - \pi/2)^2}{2\sigma^2}\right), \quad \sigma = 0.2$$

として境界条件を、

$$I_1(x, \xi) = \begin{cases} \tilde{I}'_1(\xi), & |x_1 - 25| \leq 0.1, x_2 = -0.6; \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

とした場合、反復回数は 1334 回となり、反復回数は殆ど変化しない。さらに

$$\tilde{I}''_1(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(\theta - \pi)^2}{2\sigma^2}\right), \quad \sigma = 0.2$$

に対して境界条件を

$$I_1(x, \xi) = \begin{cases} \tilde{I}''_1(\xi), & x_1 = 50.6, |x_2 - 25| \leq 0.1; \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

とした場合、反復回数は 1583 回となり、約 18% の増大となる。以上により、本計算例のように解が ξ に顕著に依存する場合、その依存性を考慮した計算順の変更は反復回数の低減に有効であることがわかる。

6. 多重格子法による高速化

離散問題 (2) に現れる行列の対角優位性とスキームの収束性は、条件 (3) に示すとおり空間方向の離散化パラメータに依存せず、 $\Delta \theta$ のみに依存する。これに注目し、上述のブロック Gauss-Seidel 法に空間方向に疎な格子を利用する多重格子法⁽⁴⁾を導入することで数値計算の高速化を図る。

離散化パラメータ $\Delta x_1, \Delta x_2, \Delta \theta$ に対する離散問題 (2) に対し、まずこれらの離散化パラメータによる格子を fine grid とし、分割幅 $2\Delta x_1, 2\Delta x_2, \Delta \theta$ の格子を coarse grid と考える。以下、この格子層の構成を再帰的に繰り返す。格子層の数は、離散化パラメータ $\Delta x_1, \Delta x_2$ に対応する分割数 N_1, N_2 を 2 で割切る回数の小さいほうとした。また、fine grid 上の $\{I_{\Delta, i, j, n}\}$ から coarse grid 上の $\{I_{2\Delta, i, j, n}\}$ への制限は

$$I_{2\Delta, i, j, n} = \frac{1}{16} \left\{ I_{\Delta, 2i-1, 2j-1, n} + I_{\Delta, 2i-1, 2j+1, n} \right. \\ \left. + I_{\Delta, 2i+1, 2j-1, n} + I_{\Delta, 2i+1, 2j+1, n} \right. \\ \left. + 2(I_{\Delta, 2i, 2j-1, n} + I_{\Delta, 2i, 2j+1, n} \right. \\ \left. + I_{\Delta, 2i-1, 2j, n} + I_{\Delta, 2i+1, 2j, n}) \right. \\ \left. + 4I_{\Delta, 2i, 2j, n} \right\}$$

とし、coarse grid 上の値から fine grid 上の値への補間を

$$I_{\Delta, 2i, 2j, n} = I_{2\Delta, i, j, n} \\ I_{\Delta, 2i+1, 2j, n} = \frac{1}{2} (I_{2\Delta, i, j, n} + I_{2\Delta, i+1, j, n}) \\ I_{\Delta, 2i, 2j+1, n} = \frac{1}{2} (I_{2\Delta, i, j, n} + I_{2\Delta, i, j+1, n}) \\ I_{\Delta, 2i+1, 2j+1, n} = \frac{1}{4} (I_{2\Delta, i, j, n} + I_{2\Delta, i, j+1, n} \\ + I_{2\Delta, i+1, j, n} + I_{2\Delta, i+1, j+1, n})$$

とした⁽⁴⁾。数値計算は full multigrid から開始し、その後、残差が所期の条件を満たすまで V サイクルを繰り返す。各格子での離散問題に対するブロック Gauss-Seidel 法の反復回数は、最も粗い格子の層の場合に $\|\tilde{q}_N - T_N I_{\Delta}\| \leq 10^{-14}$ となるまで反復し、その他の層では 10 回の反復とした。各反復における j の計算順は、上述のとおり k の偶奇によって変更するものとする。

前述の計算例に対し、ブロック Gauss-Seidel 法と多重格子法による数値計算に要したメモリと計算時間を Table 2 に示す。領域は $\Omega = (-0.6, 50.6) \times (-0.6, 50.6)$ のため、例えば離散化パラメータが $\Delta x_1 = \Delta x_2 = 0.02, \Delta \theta = 2\pi/120$ の場合は $N_1 = N_2 = 2560$ であり、分割数が 2560, 1280, 640, 320, 160, 80, 40, 20, 10, 5 の 10 層による多重格子法となる。

離散化パラメータを $\Delta x = \Delta y = 0.1, \Delta \theta = 2\pi/60$ とするときのブロック Gauss-Seidel 法の反復回数と残差の最大値ノルムを Fig. 6 に、要したメモリを Table 3 に示す。ただし、反復回数 k の偶奇によって、 j の計算順序を変更した。多重格子法ではメモリを要するものの、高速計算が実現されることがわかる。さらに、OpenMP による並列計算の有効性を調べるため、 p スレッドでの計算時間を $T(p)$ として速度向上率 $S(p) = T(1)/T(p)$ および並列化効率 $E(p) = S(p)/p$ を Table 4 に示す。

Table 3, 4 により、1 スレッドでの Gauss-Seidel 法で 1077 秒を要した計算例に対し、対角優位性を考慮した多重格子法により計算時間は 109 秒に、さらに提案するブロック Gauss-Seidel 法で並列計算が実現されて 12 スレッドでの計算時間は 14 秒となり、本研究の提案手法は輸送方程式の離散問題 (2) の数値計算の高速化に有効であることがわかる。

Table 2 Required Memory and Elapse Time of Block Gauss-Seidel Method with Multigrid Method (12 Threads). Tolerance Is $\|\tilde{q}_N - T_N I_{\Delta}^k\|_{\infty} < 10^{-12} \|\tilde{q}_N\|_{\infty}$.

$\Delta x_1 (= \Delta x_2),$ $\Delta\theta$	Required Memory	Number of Iterations*	Elapse Time(sec.)
0.10, $2\pi/60$	445 MB	200	14
0.10, $2\pi/120$	888 MB	180	39
0.05, $2\pi/120$	3.5 GB	320	258
0.025, $2\pi/120$	14 GB	600	1936
0.02, $2\pi/120$	22 GB	740	3683

* : number of G-S iterations on the finest grid

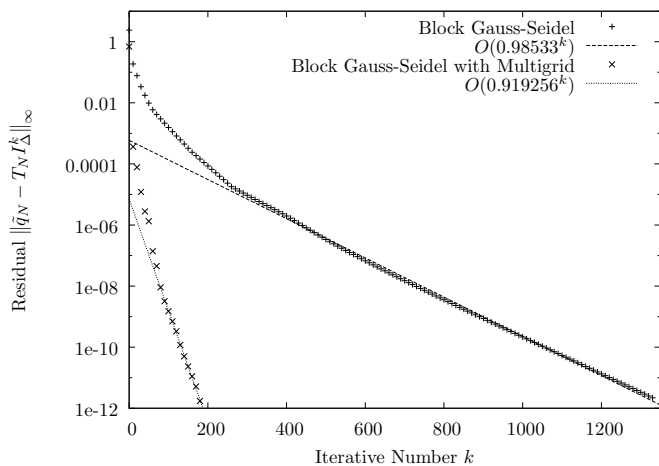


Fig. 6 Residual of Block Gauss-Seidel Method with Multigrid Method, $\Delta x_1 = \Delta x_2 = 0.1, \Delta\theta = 2\pi/60$.

謝辞 本研究の遂行にあたり，東森信就講師（一橋大学），磯祐介教授（京都大学），桂幸納氏（京都大学），および京都大学大学院医学研究科附属脳機能総合研究センターに有益なご助言を頂きました。本研究は科研費（若手研究(B) No. 23740075, 挑戦的萌芽研究 No. 23654034) の助成を受けました。

参考文献

- (1) AMD Core Math Library, <http://developer.amd.com/libraries/acml>
- (2) S. R. Arridge, Optical Tomography in Medical Imaging, *Inverse Problems* **15** (1999), R41–R93.
- (3) K. E. Atkinson, *An Introduction to Numerical Analysis*, Wiley, 1978.
- (4) S. F. McCormick (ed.), *Multigrid Methods*, SIAM, 1987.
- (5) R. Dautray, J.-L. Lions, *Mathematical Analysis and Numerical Methods for Science and Technology, Vol. 6, Evolution Problems II*. Springer-Verlag, 1988.

Table 3 Comparison of Gauss-Seidel Method and Block Gauss-Seidel Method with DGEMM (Single Thread), $\Delta x_1 = \Delta y_1 = 0.1, \Delta\theta = 2\pi/60$. Tolerance Is $\|\tilde{q}_N - T_N I_{\Delta}^k\|_{\infty} < 10^{-12} \|\tilde{q}_N\|_{\infty}$.

	Elapse Time (sec.)	Required Memory
Gauss-Seidel without DGEMM	1077	243 MB
Block G-S with DGEMM	402	244 MB
Block G-S with DGEMM, MG	109	445 MB

Table 4 Parallel Efficiency of Block Gauss-Seidel Method with Multigrid Method, $\Delta x_1 = \Delta x_2 = 0.1, \Delta\theta = 2\pi/60$. Tolerance Is $\|\tilde{q}_N - T_N I_{\Delta}^k\|_{\infty} < 10^{-12} \|\tilde{q}_N\|_{\infty}$.

# Threads	Elapse Time(sec.)	Speed-up Ratio	Parallel Efficiency
1	109	1.00	1.00
2	56	1.94	0.97
4	30	3.57	0.89
8	18	6.14	0.77
12	14	7.90	0.66

- (6) H. Fujiwara, Numerical Analysis of the Stationary Radiative Transport Equation by Finite Difference and Trapezoidal Rule, in preparation.
- (7) L. G. Henyey, J. L. Greenstein, Diffuse Radiation in the Galaxy, *Annales d'Astrophysique*, Vol. 3, 1940.
- (8) N. Higashimori, H. Fujiwara, Stability and Convergence of an Upwind Finite Difference Scheme for the Radiative Transport Equation, in preparation.
- (9) 石森富太郎（編），原子炉物理（原子炉工学講座 3）. 培風館, 1973.
- (10) 日本原子力研究所, モンテカルロ計算ガイドライン — モンテカルロ法による中性子・光子輸送シミュレーション, JAERI-Review 2002-004, 2002.
- (11) A. D. Klose, U. Netz, J. Beuthan and A. H. Hielscher, Optical Tomography Using the Time-Independent Equation of Radiative Transfer — Part 1 : Forward Model, *J. Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* **72** (2002) 691–713.
- (12) Y. Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems, 2nd ed.* SIAM, 2003.