

散乱位相函数の近似による 3 次元定常輻射輸送方程式の高速解法

A FAST ALGORITHM FOR THE THREE-DIMENSIONAL STATIONARY RADIATIVE TRANSPORT EQUATION BY APPROXIMATING THE SCATTERING PHASE FUNCTION

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 present a fast numerical algorithm for the three-dimensional stationary radiative transport equation. Our strategy is to use an expansion of the scattering phase function as a series in the Legendre polynomials and their addition theorem. The effective implementation and convergence of the proposed method are also discussed. Some numerical examples for the case of the Henyey-Greenstein phase function are shown.

Key Words: Stationary Radiative Transport Equation, Addition Theorem of the Legendre Polynomials, High Performance Computing, Numerical Analysis

1. 緒言

近年, 人体に安全な近赤外光をもちいて生体, 特に脳の活動を非侵襲に可視化する新たな手法が目ざされ, 開発が進められている⁽²⁾. そこでは生体内部の光の伝播を光子の立場からとらえる輻射輸送方程式 (Radiative Transport Equation; RTE) が扱われる. 本論文では, 生体内部の近赤外光伝播の数値シミュレーションのため, 3 次元 RTE の高速計算法を導出してその有効性を示す.

従来, 光伝播のシミュレーションでは拡散近似や Monte Carlo 法がもちいられてきたが⁽⁴⁾, 高精度・高信頼な計算の要求と計算機の高性能化に支えられて, RTE の直接的な離散問題が扱われつつある^(7, 11). 定常状態の RTE は位置と速度の方向を変数とする粒子密度についての微分積分方程式であり, 3 次元空間での RTE は本質的に 5 次元の問題となる. したがってその数値計算は大規模問題となり, 計算時間の削減が重要な課題である. 著者は先行研究において幾何多重格子法による反復解法の加速の有効性を示したが⁽⁶⁾, 領域の形状やその分割数によっては利用に困難を伴うものであった.

RTE では, ある位置におけるある速度方向の粒子密度は, その位置での全ての速度方向にわたる粒子密度の積分に依る. そのため速度方向に N 個の離散点を配して数値積分をおこなう場合, 空間の各点毎に計算量 N^2 のオーダーを要する. これに類似する計算は多体問題など種々の問題で現れ, 高速多重極法が効率的な方法として知られている⁽⁹⁾. 本論文は, いわゆるモーメントを介する高速計算法と, その収束評価を与える. これらは高速多重極法の考察において基礎と

なるものである.

すなわち本論文では, RTE に現れる散乱位相函数の多くが Legendre 多項式で展開されることに着目し⁽⁵⁾, それを有限項の打ち切りで近似して Legendre 多項式の加法定理で変数分離することで高速計算法を導出する. これは領域の形状や分割数に依存せず利用可能であり, 定量的な高速化が達成されるという利点を有する. 本手法の妥当性については理論面から第 6 節で論じる. また第 7 節では生体光学で広く利用される Henyey-Greenstein 核をもちいる数値計算例によって速度向上比と精度を確かめ, 本手法の実効性を示す.

2. 定常輻射輸送方程式

本論文で扱う 3 次元 RTE の Dirichlet 境界値問題は, 粒子密度 $I = I(x, \xi)$, $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^3$, $\xi \in S^2 = \{\xi \in \mathbb{R}^3; |\xi| = 1\}$ を未知函数として

$$-\xi \cdot \nabla_x I - (\mu_s + \mu_a)I + \mu_s \int_{S^2} p(x; \xi, \xi') I(x, \xi') d\sigma_{\xi'} + q = 0, \quad \text{in } X = \Omega \times S^2, \quad (1a)$$

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

である. ここで $\nabla_x I = (\partial I / \partial x_1, \partial I / \partial x_2, \partial I / \partial x_3)$, $d\sigma_{\xi'}$ は S^2 の面積要素, $n(x)$ を $\partial\Omega$ の外向き単位法線として $\Gamma_- = \{(x, \xi); x \in \partial\Omega, n(x) \cdot \xi < 0\}$ である. また μ_s, μ_a, q はそれぞれ散乱係数, 吸収係数, 内部粒子源であり, $0 < \mu_a^- \leq \mu_a(x)$, $0 \leq \mu_s(x)$ とする. 積分核 $p(x; \xi, \xi')$ を散乱位相函数といい, x での散乱において粒子の速度が ξ' から ξ に変化する条件付き確率を表す確率密度函数であって, 次を満たす.

$$p(x; \xi, \xi') > 0 \quad \text{and} \quad \int_{S^2} p(x; \xi, \xi') d\sigma_{\xi'} = 1.$$

3. 離散問題

RTE (1) の数値計算のひとつに、上流差分と台形則による離散化が提案されている (7, 11). 簡単のため、領域 Ω を \mathbb{R}^3 の直方体 $(0, L_1) \times (0, L_2) \times (0, L_3)$, N_1, N_2, N_3 を正整数とし、 $\Delta x_i = L_i/N_i$, $x_{ijl} = (i\Delta x_1, j\Delta x_2, l\Delta x_3)$ とする. また N_θ, N_ϕ をそれぞれ S^2 の緯度方向、経度報告の分割数として $\Delta\theta = \pi/N_\theta, \Delta\phi = 2\pi/N_\phi$, $\theta_m = m\Delta\theta, \phi_n = n\Delta\phi$, $\xi_{mn} = (\sin\theta_m \cos\phi_n, \sin\theta_m \sin\phi_n, \cos\theta_m)$ とする. この分割で得られる S^2 上の点 $\{\xi_{mn}\}$ の個数を N とし、これらを適当に並び換えて $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$ とする.

$I(x_{ijl}, \xi_n)$ の相当値を $I_{ijl,n}$ とし、 $I_\Delta = (I_{ijl,n})$ に対する次の作用素を考える.

$$\begin{aligned} A_\Delta I_{ijl,n} &= -\xi_{n,1} \frac{I_{i+1,j,l,n} - I_{i-1,j,l,n}}{2\Delta x_1} \\ &\quad + |\xi_{n,1}| \frac{I_{i+1,j,l,n} - 2I_{i,j,l,n} + I_{i-1,j,l,n}}{2\Delta x_1} \\ &\quad - \xi_{n,2} \frac{I_{i,j+1,l,n} - I_{i,j-1,l,n}}{2\Delta x_2} \\ &\quad + |\xi_{n,2}| \frac{I_{i,j+1,l,n} - 2I_{i,j,l,n} + I_{i,j-1,l,n}}{2\Delta x_2} \\ &\quad - \xi_{n,3} \frac{I_{i,j,l+1,n} - I_{i,j,l-1,n}}{2\Delta x_3} \\ &\quad + |\xi_{n,3}| \frac{I_{i,j,l+1,n} - 2I_{i,j,l,n} + I_{i,j,l-1,n}}{2\Delta x_3}, \end{aligned}$$

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

$$K_\Delta I_{ijl,n} = \mu_s(x_{ijl}) \sum_{\nu=1}^N w_\nu p(x_{ijl}; \xi_n, \xi_\nu) I_{ijl,\nu}.$$

$A_\Delta I_{ijl,n}$ では $\xi_n = (\xi_{n,1}, \xi_{n,2}, \xi_{n,3})$ であり、これは対応する時間発展の RTE で $-\xi \cdot \nabla_x I$ の (x_{ijl}, ξ_n) における上流差分を与える (6, 10). また $K_\Delta I_{ijl,n}$ は散乱積分

$$\begin{aligned} &\mu_s(x) \int_{S^2} p(x; \xi, \xi') I(x, \xi') d\sigma_{\xi'} \\ &= \mu_s(x) \int_0^{2\pi} d\phi' \int_0^\pi d\theta' p(x; \xi, \xi'(\theta', \phi')) I(x, \xi'(\theta', \phi')) \sin\theta' \end{aligned}$$

の θ', ϕ' 方向に台形則を適用することで得られ、重みは $w_\nu = \Delta\theta\Delta\phi\sqrt{1-\xi_\nu^2}$ である. 以下 x_{ijl} を固定して考えるときは $\mu_s = \mu_s(x_{ijl})$, $p_{n\nu} = p(x_{ijl}; \xi_n, \xi_\nu)$ などと書く.

以上の記号のもとで $T_\Delta = A_\Delta - \Sigma_\Delta + K_\Delta$ とし、(1) の離散問題として I_Δ についての次の連立方程式を考える.

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

$$I_{ijl,n} = I_1(x_{ijl}, \xi_n), \quad (x_{ijl}, \xi_n) \in \Gamma_-. \quad (2b)$$

これに対し、 $\Delta\theta$ および $\Delta\phi$ が十分小ならば T_Δ は狭義優対角行列であることが示される (6, 8). ただし T_Δ を行列と見るときは、未知数 $I_\Delta = (I_{ijl,n})$ を (ijl, n) について辞書式順序 (lexicographical order) で並べた連立一次方程式 (2) の係数行列とする. これより直ちに (2) の解の一意存在、および Jacobi 法や Gauss-Seidel 法がそれに収束する列を与えることがわかる (13). また適当な仮定のもとで、 $I, I_1, q, \Delta x_i, \Delta\theta, \Delta\phi$ に依存しない正数 C_Ω が存在して離散最大値原理

$$\|I_\Delta\|_\infty \leq \|I_1\|_\infty + C_\Omega \|q\|_\infty$$

および $\Delta x_i, \Delta\theta, \Delta\phi$ に依存しない正数 C が存在して

$$\begin{aligned} \max_{ijl,n} |I_{ijl,n} - I(x_{ijl}, \xi_n)| \\ \leq C(\Delta x_1 + \Delta x_2 + \Delta x_3 + \Delta\theta^2 + \Delta\phi^2) \end{aligned}$$

の評価が成立する (8).

4. 散乱位相函数の Legendre 多項式展開による高速計算法
離散問題 (2) の反復解法では、散乱積分の離散化 $K_\Delta I_{ijl,n}$ の処理が計算時間の大部分を占める. これに対して本論文では散乱位相函数 p を Legendre 多項式による級数に展開し、その加法定理をもちいた高速計算法を導出する.

典型的な定常反復法である Jacobi 法を例に説明する. $\xi_{n,1}, \xi_{n,2}, \xi_{n,3} > 0$ の場合に (2a) を書き下すと

$$\begin{aligned} &-\xi_{n,1} \frac{I_{i,j,l,n} - I_{i-1,j,l,n}}{\Delta x_1} - \xi_{n,2} \frac{I_{i,j,l,n} - I_{i,j-1,l,n}}{\Delta x_2} \\ &-\xi_{n,3} \frac{I_{i,j,l,n} - I_{i,j,l-1,n}}{\Delta x_3} \\ &-(\mu_s + \mu_a) I_{ijl,n} + \mu_s \sum_{\nu=1}^N w_\nu p_{n\nu} I_{ijl,n} = -q(x_{ijl}, \xi_n) \end{aligned}$$

であり、 k 回の反復で得られる $I_\Delta^{(k)}$ をもちいて $I_{ijl,n}^{(k+1)}$ は

$$\begin{aligned} I_{ijl,n}^{(k+1)} &= \left(-\frac{\xi_{n,1}}{\Delta x_1} - \frac{\xi_{n,2}}{\Delta x_2} - \frac{\xi_{n,3}}{\Delta x_3} - (\mu_s + \mu_a) + \mu_s w_n p_{nn} \right)^{-1} \\ &\quad \times \left(-q(x_{ijl}, \xi_n) - \frac{\xi_{n,1}}{\Delta x_1} I_{i-1,j,l,n}^{(k)} - \frac{\xi_{n,2}}{\Delta x_2} I_{i,j-1,l,n}^{(k)} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\xi_{n,3}}{\Delta x_3} I_{i,j,l-1,n}^{(k)} - \mu_s \sum_{\substack{1 \leq \nu \leq N \\ \nu \neq n}} w_\nu p_{n\nu} I_{ijl,\nu}^{(k)} \right) \end{aligned}$$

と計算される. したがって N が大きい場合には

$$\tilde{K}_\Delta I_{ijl,n} = \mu_s \sum_{\nu \neq n} w_\nu p_{n\nu} I_{ijl,\nu} \quad (3)$$

が計算時間の大部分を占めることがわかる.

高速計算法を導出するために、まず多くの場合、輻射輸送現象で扱われる散乱位相函数 p が ξ と ξ' のなす角に依存し、 α 次の Legendre 多項式 $P_\alpha(t)$ によって

$$p(x; \xi \cdot \xi') = \sum_{\alpha=0}^{\infty} \omega_\alpha(x) P_\alpha(\xi \cdot \xi')$$

と表されることに着目する (5). 詳しくは後述するが、生体内の光伝播においてもこの仮定のもとで Henyey-Greenstein 核が広く利用されている. 本論文でも p はこの仮定を満たすものとし、 $p_{n\nu} = p(x_{ijl}; \xi_n \cdot \xi_\nu)$ などと記す. そこで M を正整数として p の展開の M 項での打ち切り

$$p^M(x; \xi \cdot \xi') = \sum_{\alpha=0}^{M-1} \omega_\alpha(x) P_\alpha(\xi \cdot \xi')$$

により、散乱積分の近似として $K_\Delta I_{ijl,n}$ に代えて

$$K_\Delta^M I_{ijl,n} = \mu_s \sum_{\nu=1}^N w_\nu p_{n\nu}^M I_{ijl,\nu}$$

を導入し、 $T_{\Delta}^M = A_{\Delta} - \Sigma_{\Delta} + K_{\Delta}^M$ として連立方程式

$$T_{\Delta}^M I_{ijl,n}^M = -q(x_{ijl}, \xi_n), \quad (x_{ijl}, \xi_n) \in X, \quad (4a)$$

$$I_{ijl,n}^M = I_1(x_{ijl}, \xi_n), \quad (x_{ijl}, \xi_n) \in \Gamma_- \quad (4b)$$

を考える。これに反復法を適用すると、(3) に対応して

$$\begin{aligned} \tilde{K}_{\Delta}^M I_{ijl,n}^M &= \mu_s \sum_{1 \leq \nu \leq N} w_{\nu} p_{n\nu}^M I_{ijl,\nu}^M - \mu_s w_n p_{nn}^M I_{ijl,n}^M \\ &= \mu_s \sum_{1 \leq \nu \leq N} w_{\nu} \left\{ \sum_{\alpha=0}^{M-1} \omega_{\alpha} P_{\alpha}(\xi_n \cdot \xi_{\nu}) \right\} I_{ijl,\nu}^M \\ &\quad - \mu_s w_n p_{nn}^M I_{ijl,n}^M \end{aligned} \quad (5)$$

の計算が現れる。

次に ξ, ξ' の緯度、経度方向の角度をそれぞれ $(\theta, \phi), (\theta', \phi')$ とすると Legendre 多項式の加法定理

$$\begin{aligned} P_{\alpha}(\xi \cdot \xi') &= P_{\alpha}(\cos \theta) P_{\alpha}(\cos \theta') \\ &\quad + 2 \sum_{\beta=1}^{\alpha} \frac{(\alpha - \beta)!}{(\alpha + \beta)!} P_{\alpha}^{\beta}(\cos \theta) P_{\alpha}^{\beta}(\cos \theta') \cos \beta(\phi - \phi') \end{aligned}$$

が成立する⁽¹⁾。このとき右辺の第 2 項の和は

$$\begin{aligned} P_{\alpha}(\xi \cdot \xi') &= P_{\alpha}(\cos \theta) P_{\alpha}(\cos \theta') \\ &\quad + 2 \sum_{\beta=1}^{\alpha} (-1)^{\beta} P_{\alpha}^{\beta}(\cos \theta) \cos \beta\phi \cdot P_{\alpha}^{-\beta}(\cos \theta') \cos \beta\phi' \\ &\quad + 2 \sum_{\beta=-\alpha}^{-1} (-1)^{\beta} P_{\alpha}^{-\beta}(\cos \theta) \sin \beta\phi \cdot P_{\alpha}^{\beta}(\cos \theta') \sin \beta\phi' \end{aligned}$$

となる。ここで陪 Legendre 関数 $P_{\alpha}^{\beta}(t)$ が

$$P_{\alpha}^{-\beta}(t) = (-1)^{\beta} \frac{(\alpha - \beta)!}{(\alpha + \beta)!} P_{\alpha}^{\beta}(t)$$

を満たすことをもちいた。そこで

$$\mathcal{Y}_{\alpha\beta}^{+}(\xi) = \begin{cases} P_{\alpha}(\cos \theta), & \beta = 0; \\ 2P_{\alpha}^{\beta}(\cos \theta) \cos \beta\phi, & 1 \leq \beta \leq \alpha; \\ 2P_{\alpha}^{\beta}(\cos \theta) \sin \beta\phi, & -\alpha \leq \beta \leq -1, \end{cases}$$

$$\mathcal{Y}_{\alpha\beta}^{-}(\xi) = \begin{cases} P_{\alpha}(\cos \theta), & \beta = 0; \\ (-1)^{\beta} P_{\alpha}^{-\beta}(\cos \theta) \cos \beta\phi, & 1 \leq \beta \leq \alpha; \\ (-1)^{\beta} P_{\alpha}^{-\beta}(\cos \theta) \sin \beta\phi, & -\alpha \leq \beta \leq -1 \end{cases}$$

と定めると、加法定理は

$$P_{\alpha}(\xi \cdot \xi') = \sum_{|\beta| \leq \alpha} \mathcal{Y}_{\alpha\beta}^{+}(\xi) \mathcal{Y}_{\alpha\beta}^{-}(\xi')$$

と表される。これを (5) に適用することで、

$$\begin{aligned} \tilde{K}_{\Delta}^M I_{ijl,n}^M &= \mu_s \sum_{1 \leq \nu \leq N} w_{\nu} \left\{ \sum_{\alpha < M} \omega_{\alpha} \sum_{|\beta| \leq \alpha} \mathcal{Y}_{\alpha\beta}^{+}(\xi_n) \mathcal{Y}_{\alpha\beta}^{-}(\xi_{\nu}) \right\} I_{ijl,\nu}^M \\ &\quad - \mu_s w_n p_{nn}^M I_{ijl,n}^M \\ &= \mu_s \sum_{|\beta| \leq \alpha < M} \omega_{\alpha} \mathcal{Y}_{\alpha\beta}^{+}(\xi_n) \left\{ \sum_{1 \leq \nu \leq N} w_{\nu} \mathcal{Y}_{\alpha\beta}^{-}(\xi_{\nu}) I_{ijl,\nu}^M \right\} \\ &\quad - \mu_s w_n p_{nn}^M I_{ijl,n}^M \end{aligned} \quad (6)$$

を得る。すなわち提案法は、離散問題 (2) の K_{Δ} を K_{Δ}^M で近似した (4) を考え、その反復法の計算で (6) をもちいて高速化を図るものである。

台形則による離散化で現れる (3) と提案する手法 (6) の計算時間を考える。(3) を直接計算する場合、 x_{ijl} をひとつ決めると、 $1 \leq n \leq N$ について $1 \leq \nu \leq N, \nu \neq n$ で和をとるので乗加算の演算回数はおよそ N^2 と見積られる。一方 (6) において $|\beta| \leq \alpha < M$ となる整数の組 (α, β) の個数は M^2 である。したがって (6) の最右辺に現れる

$$\mathcal{M}_{ijl,\alpha\beta} = \sum_{1 \leq \nu \leq N} w_{\nu} \mathcal{Y}_{\alpha\beta}^{-}(\xi_{\nu}) I_{ijl,\nu}^M \quad (7a)$$

を $|\beta| \leq \alpha < M$ で求める乗加算数は $M^2 N$ 回、続けて

$$\sum_{|\beta| \leq \alpha < M} \omega_{\alpha} \mathcal{Y}_{\alpha\beta}^{+}(\xi_n) \mathcal{M}_{ijl,\alpha\beta} \quad (7b)$$

を $1 \leq n \leq N$ について求めるための乗加算数は $M^2 N$ 回であり、あわせて (6) の最右辺の計算には $2M^2 N$ 回の乗加算が必要となる。

以上から提案法では、直接計算に比して、演算回数はおおよそ $2M^2 N / N^2 = 2M^2 / N$ に削減される。例えば $N_{\phi} = 2N_{\theta}$ (すなわち $\Delta\theta = \Delta\phi$), $M = N_{\theta}/2$ とした場合、

$$\frac{2M^2}{N} \approx \frac{2(N_{\theta}/2)^2}{N_{\theta} \cdot 2N_{\theta}} = \frac{1}{4}$$

の演算回数と計算時間で済み、散乱積分の近似計算は理論的には約 4 倍の高速化が達成され、RTE の反復解法の高速度に大きく寄与する。またこれは幾何多重格子法と異なり、領域 Ω の形状等に依存せず高速化されることもわかる。

5. 実装における注意

実装においては、提案法 (6) の最右辺を幾つかの ijl についてまとめて行列乗算として計算することで、キャッシュメモリを活かした高速計算が可能となる⁽⁶⁾。具体的には、 $(a_{ij})_{i\downarrow, j\rightarrow}$ を、 a_{ij} を i, j について行、列方向に並べた行列とすると、(7a) を

$$\left(\mathcal{M}_{ijl,\alpha\beta} \right)_{\alpha\beta\downarrow, ijl\rightarrow} = \left(w_{\nu} \mathcal{Y}_{\alpha\beta}^{-}(\xi_{\nu}) \right)_{\alpha\beta\downarrow, \nu\rightarrow} \left(I_{ijl,\nu}^M \right)_{\nu\downarrow, ijl\rightarrow},$$

また (7b) を

$$\left(\omega_{\alpha} \mathcal{Y}_{\alpha\beta}^{+}(\xi_n) \right)_{n\downarrow, \alpha\beta\rightarrow} \left(\mathcal{M}_{ijl,\alpha\beta} \right)_{\alpha\beta\downarrow, ijl\rightarrow}$$

と行列の乗算で表して計算するとよい。ただし添字 $ijl, \alpha\beta$ については、それぞれ並べ方をひとつ決めておくものとする。

また陪 Legendre 関数は $|m| \leq n$ において

$$P_n^m(t) = \frac{1}{2^n n!} (1-t^2)^{m/2} \left(\frac{d}{dt} \right)^{n+m} (t^2-1)^n$$

であるが、例えば次の漸化式で計算することが簡便である。ただし以下では $|t| \leq 1$ かつ $0 \leq m \leq n$ は非負整数とする。

$$(i) P_0^0(t) = 1$$

$$(ii) P_{m+1}^{m+1}(t) = (2m+1) \sqrt{1-t^2} P_m^m(t)$$

- (iii) $P_{m+1}^m(t) = (2m+1)tP_m^m(t)$
- (iv) $(n-m)P_n^m(t) = (2n-1)tP_{n-1}^m(t) - (n+m-1)P_{n-2}^m(t)$
- (ii') $P_{m+1}^{-m}(t) = -\frac{\sqrt{1-t^2}}{2(m+1)}P_m^{-m}(t)$
- (iii') $P_{m+1}^{-m}(t) = tP_m^{-m}(t)$

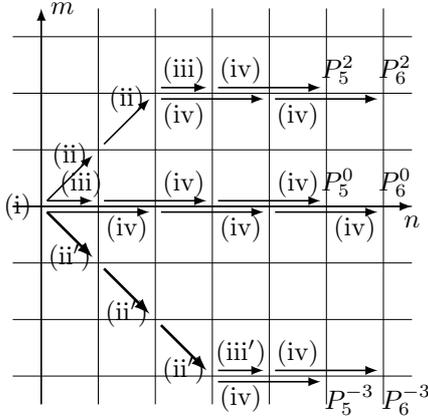


Fig.1 Recurrence Computing Flows of the Associated Legendre Functions $P_n^m(t)$

これに従うと $P_n^m(t)$ は、まず (i),(ii) をもちいて $P_m^m(t)$ を求め、次に (iii),(iv) から求まる (Fig. 1) . 同様に P_n^{-m} は (i),(ii') から $P_m^{-m}(t)$ を求め、(iii'), (iv) によって求める .

6. 収束性

提案法 (6) では方程式 (4) を満たす $I_\Delta^M = (I_{ijl,n}^M)$ を求めることになる . 本節ではその一意存在および元の離散問題 (2) の解 $I_\Delta = (I_{ijl,n})$ への収束性を示す .

定理 1. $\Delta\theta, \Delta\phi, p^M$ が

$$p^M(x; \xi \cdot \xi') > 0, \quad \Delta\theta\Delta\phi \|p^M\|_\infty \leq 1, \quad (8)$$

および

$$\begin{aligned} & \frac{\pi^2}{12}\Delta\phi^2 \left\| \frac{\partial^2(p \sin \theta)}{\partial \phi^2} \right\|_\infty + \frac{\pi^2}{6}\Delta\theta^2 \left\| \frac{\partial^2(p \sin \theta)}{\partial \theta^2} \right\|_\infty \\ & + 4\pi \|p - p^M\|_\infty \leq \inf_{\mu_s \neq 0} \frac{\mu_a(x)}{\mu_s(x)} \end{aligned} \quad (9)$$

を満たすならば T_Δ^M は狭義優対角である . ただし $\|p\|_\infty = \sup_{x, \xi, \xi'} |p(x; \xi \cdot \xi')|$ である .

証明. まず w_ν が極座標の緯度方向の角度のみに依存することから ,

$$\begin{aligned} \sum_{\nu=1}^N w_\nu &= \Delta\theta\Delta\phi \cdot N_\phi \sum_{m=1}^{N_\theta-1} \sin(m\Delta\theta) \\ &= 4\pi \frac{\Delta\theta}{2} \cot \frac{\Delta\theta}{2} < 4\pi, \quad 0 < \frac{\Delta\theta}{2} \leq \frac{\pi}{2} \end{aligned}$$

である . また , 十分に滑らかな S^2 上の関数 g に対する台形則の誤差評価⁽¹⁰⁾

$$\begin{aligned} & \int_{S^2} g(\xi) d\sigma_{\xi'} - \sum_{\nu=1}^N w_\nu g(\xi_\nu) \\ &= \frac{\pi^2}{12}\Delta\phi^2 \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} g(\theta', \phi') \sin \theta' - \frac{\pi^2}{6}\Delta\theta^2 \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} g(\theta'', \phi'') \sin \theta'' \end{aligned}$$

および $\int_{S^2} p(x; \xi \cdot \xi') d\sigma_{\xi'} = 1$ と条件 (9) より

$$\begin{aligned} & \mu_s \sum_{\nu=1}^N w_\nu p_{n\nu}^M \\ &= \mu_s \left(\sum_{\nu=1}^N w_\nu p_{n\nu} + \sum_{\nu=1}^N w_\nu (p_{n\nu}^M - p_{n\nu}) \right) \\ &\leq \mu_s \left(\int_{S^2} p(x; \xi \cdot \xi') d\sigma_{\xi'} + \frac{\pi^2}{12}\Delta\phi^2 \left\| \frac{\partial^2 p}{\partial \phi^2} \sin \theta \right\|_\infty \right. \\ &\quad \left. + \frac{\pi^2}{6}\Delta\theta^2 \left\| \frac{\partial^2(p \sin \theta)}{\partial \theta^2} \right\|_\infty + \left(\sum_{\nu=1}^N w_\nu \right) \|p^M - p\|_\infty \right) \\ &< \mu_s \left(1 + \frac{\mu_a}{\mu_s} \right) = \mu_s + \mu_a \end{aligned} \quad (10)$$

である . $\xi_{n,1}, \xi_{n,2}, \xi_{n,3} > 0$ の場合に T_Δ^M を考えると , 対角成分の絶対値は (8) より

$$\begin{aligned} & \left| \frac{\xi_{n,1}}{\Delta x_1} - \frac{\xi_{n,2}}{\Delta x_2} - \frac{\xi_{n,3}}{\Delta x_3} - (\mu_s + \mu_a) + \mu_s w_n p_{nn}^M \right| \\ &= \frac{\xi_{n,1}}{\Delta x_1} + \frac{\xi_{n,2}}{\Delta x_2} + \frac{\xi_{n,3}}{\Delta x_3} + (\mu_s + \mu_a) - \mu_s w_n p_{nn}^M \end{aligned}$$

となる . 一方 , T_Δ^M の非対角成分の絶対値の和は ,

$$\frac{\xi_{n,1}}{\Delta x_1} + \frac{\xi_{n,2}}{\Delta x_2} + \frac{\xi_{n,3}}{\Delta x_3} + \mu_s \sum_{\nu \neq n} w_\nu p_{n\nu}^M$$

であり , それらの差は (10) より

$$\mu_s + \mu_a - \mu_s \sum_{\nu=1}^N w_\nu p_{n\nu}^M > 0$$

を満たす . 他の ξ についても同様であり , T_Δ^K は狭義優対角であることが示された . \square

これより連立方程式 (6) の解 I_Δ^M が一意に存在する . また T_Δ と同様に離散最大値の原理

$$\|I_\Delta^M\|_\infty \leq \|I_1\|_\infty + C_\Omega \|q\|_\infty$$

も成立する . ただし $\|I_\Delta^M\|_\infty = \max_{i,j,l,n} |I_{ijl,n}^M|$ である . I_Δ^M の I_Δ への収束については次が成立する .

定理 2. 定理 1 の仮定のもとで , $\Delta x_i, \Delta\theta, \Delta\phi, p, M$ に依存しない正数 C が存在して , 次が成立する .

$$\|I_\Delta^M - I_\Delta\|_\infty \leq C \|p^M - p\|_\infty .$$

証明. (4a) から (2a) を減じて

$$\begin{aligned} & A_\Delta(I_{ijl,n}^M - I_{ijl,n}) - \Sigma_\Delta(I_{ijl,n}^M - I_{ijl,n}) \\ & \quad + K_\Delta^M I_{ijl,n}^M - K_\Delta I_{ijl,n} = 0. \end{aligned}$$

これより

$$\begin{aligned} & A_\Delta(I_{ijl,n}^M - I_{ijl,n}) - \Sigma_\Delta(I_{ijl,n}^M - I_{ijl,n}) \\ & \quad + K_\Delta I_{ijl,n}^M - K_\Delta I_{ijl,n} = -K_\Delta^M I_{ijl,n}^M + K_\Delta I_{ijl,n}^M, \end{aligned}$$

すなわち

$$T_\Delta(I_{ijl,n}^M - I_{ijl,n}) = -\mu_s \sum_{\nu=1}^N w_\nu (p_{n\nu}^M - p_{n\nu}) I_{ijl,\nu}^M .$$

境界値は (2b), (4b) より $I_{ijl,n}^M - I_{ijl,n} \Big|_{\Gamma_-} = 0$ であるから, T_Δ についての離散最大値原理により

$$\begin{aligned} \|I_\Delta^M - I_\Delta\|_\infty &\leq C_\Omega \max_{ijl,n} \left| \mu_s \sum_{\nu=1}^N w_\nu (p_{n\nu}^M - p_{n\nu}) I_{ijl,\nu}^M \right| \\ &\leq C' \max_{ijl,n} \left| \sum_{\nu=1}^N w_\nu (p_{n\nu}^M - p_{n\nu}) \right| \|I_\Delta^M\|_\infty \\ &\leq C'' (\|I_1\|_\infty + C_\Omega \|q\|_\infty) \|p^M - p\|_\infty \end{aligned}$$

を得る. C'' は Ω と μ_s に依存する. \square

すなわち M が充分大きければ, I_Δ^M は I_Δ を近似する. しかし計算時間の削減のためには M を小さくすることが望ましく, 実際の計算では精度と計算時間を考慮して適切な M を選択する必要がある.

7. Henyey-Greestein 核への適用例

本節では, 数値実験により提案法 (6) の有効性, 特に速度向上率と精度を確かめる.

生体内の光伝播の解析では散乱位相関数として Henyey-Greenstein 核

$$p_{\text{HG}}(\xi \cdot \xi') = \frac{1}{4\pi} \frac{1 - g^2}{(1 - 2g\xi \cdot \xi' + g^2)^{3/2}}, \quad 0 \leq g < 1,$$

が広く利用されており (2, 4, 12), これは

$$p_{\text{HG}}(\xi \cdot \xi') = \sum_{\alpha=0}^{\infty} \frac{(2\alpha+1)g^\alpha}{4\pi} P_\alpha(\xi \cdot \xi')$$

と展開される (1). ここで $|P_\alpha(t)| \leq 1$ より,

$$\begin{aligned} \left| p_{\text{HG}}^M(\xi \cdot \xi') - p_{\text{HG}}(\xi \cdot \xi') \right| &= \left| \sum_{\alpha=M}^{\infty} \frac{(2\alpha+1)g^\alpha}{4\pi} P_\alpha(\xi \cdot \xi') \right| \\ &\leq \frac{1}{4\pi} \sum_{\alpha=M}^{\infty} (2\alpha+1)g^\alpha \end{aligned}$$

であり, 階差数列により得られる

$$\sum_{\alpha=M}^{\infty} (2\alpha+1)g^\alpha = \left\{ \frac{2M+1}{1-g} + \frac{2g}{(1-g)^2} \right\} g^M$$

に注意すると, M 項での打ち切り誤差は

$$\left| p_{\text{HG}}^M(\xi \cdot \xi') - p_{\text{HG}}(\xi \cdot \xi') \right| \leq \frac{1}{4\pi} \left\{ \frac{2M+1}{1-g} + \frac{2g}{(1-g)^2} \right\} g^M$$

と評価できる. これより $M \rightarrow \infty$ のとき p_{HG}^M は $\xi \cdot \xi'$ について一様に p_{HG} に収束する.

提案する手法の有効性を確かめるため, 以下の設定で数値実験をおこなった. 領域を $\Omega = (0, 12.8)^3$, $\mu_a = 0.001$, $\mu_s = 1$, $q = 0$ の立方体とし, 散乱位相関数を $g = 0.9$ の Henyey-Greenstein 核とした. 分割数を $N_1 = N_2 = N_3 = 128$, $N_\theta = 60$, $N_\phi = 120$ ($\Delta\theta = \Delta\phi = 3[\text{deg}]$) とすると $N = 7082$ で, Ω の内部の未知数は約 145 億個であった. これは倍精度数で 108GB に相当する. このとき T_Δ は狭義優対角であり, T_Δ^M も $1 \leq M \leq N_\theta$ で狭義優対角であった. 数値計算は Opteron 6238 (2.50GHz) の倍精度演算でおこない, MPI による 1024 プロセスでの並列計算にてブロック Gauss-Seidel 法を利用

した. ただし (3), (6) の計算には BLAS (3) の DGEMM をもちい, これをもとにブロックを定めた.

直接的な手法 (3) による Gauss-Seidel 法の 100 回の反復に要する時間は 3069 秒であり, このうち (3) の処理に要したのは 2503 秒 (全体の 82%), 他の計算や並列計算のデータ交換等の処理に要したのは 566 秒であった. これより \tilde{K}_Δ の処理が計算の大部分を占めることがわかる. ここで 3 節で考察したように $M = N_\theta/2$ として提案法 (6) をもちいると, 100 回の反復に要する時間は

$$566 + \frac{2503}{4} \approx 1192 \text{ 秒}$$

になると予測される. 実際に計測したところ 1215 秒であり, 考察どおりに計算時間が削減されていることがわかる. 以上の計算時間を横軸にとって図示すると Fig. 2 のようになる.

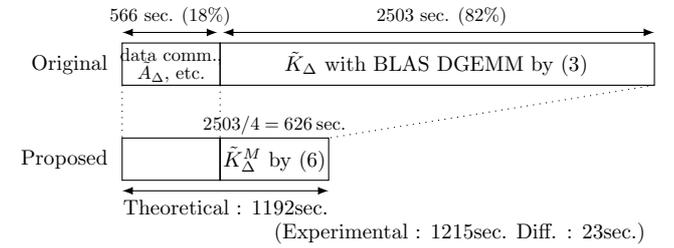


Fig. 2 Comparison of Computational Times for 100 Iterations with $M = N_\theta/2$

次に, 前述と同じ領域と分割数で, 境界値を

$$I(x, \xi) = \begin{cases} \tilde{I}_1(\xi), & |x_1 - 12.8| \leq 0.1, |x_2 - 12.8| \leq 0.1, \\ & x_3 = 0; \\ 0, & \text{otherwise,} \end{cases}$$

ただし ξ と $(0, 0, 1)$ のなす角 θ によって

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

とする. 反復の初期値を 0 とし, 最大値ノルムでの残差が 10^{-12} 以下となったときに Gauss-Seidel 法の反復を停止すると, 元の (2) の場合も, 提案する (4) で $M = N_\theta/2 = 30$ とした場合も, 反復回数は約 680 回で殆ど同じであった. 一方, 計算時間は前者が 348 分, 後者が 145 分で, 約 2.4 倍の高速化を達成した. またこのとき, $\|I_\Delta^M - I_\Delta\|_\infty \approx 1.8 \times 10^{-3}$ であった. Table 1 および Fig. 3 に打ち切り項数 M , 誤差 $\|I_\Delta^M - I_\Delta\|_\infty$ と計算時間を示す. 表より本手法は計算時間の削減とともに, 精度よい数値解を与えることがわかる.

またこの領域と境界値では幾何多重格子法の有効性が先行研究で示されている (6). 実際, この設定において多重格子法の計算時間は 116 分であった. さらに本提案の散乱積分の計算を $M = N_\theta/2 = 30$ として適用すると計算時間は 47 分となり, 幾何多重格子法からは 2.5 倍, 直接的な計算時間の 348 分から約 7.4 倍の高速化が達成された. 多重格子法と本提案を併用する場合の計算時間を Table 2 に示す. これよ

Table 1 Errors and Computational Times of the Proposed Method (6) with $N_i = 128$ and $N = 7082$

M	Maxium Error $\ I_{\Delta}^M - I_{\Delta}\ _{\infty}$	Computational Time [min.]
K_{Δ} by (3)	—	348
10	8.3×10^{-2}	75
20	8.9×10^{-3}	101
30	1.8×10^{-3}	145
40	4.9×10^{-4}	202
50	1.7×10^{-4}	278

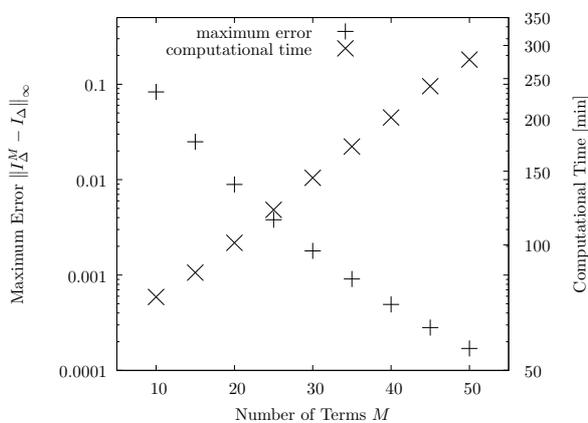


Fig. 3 Errors (+, Left Axis) and Computational Times (\times , Right Axis) of the Proposed Method (6) with $N_i = 128$ and $N = 7082$

り、本手法は多重格子法との併用においても高速化に有効であることがわかる。

8. 結言

本論文では、3次元定常輻射輸送方程式の境界値問題の高速解法のため、散乱積分の計算(3)に対して散乱位相関数のLegendre多項式展開に基づく高速計算法(6)を導出し、その高速化ならびに近似の妥当性を理論と数値計算例の両面から示した。本手法は領域の形状や分割数に依存せず利用可能であり、多重格子法との併用においても有用である。さらに時間発展の3次元RTEにも同様の散乱積分の扱いが現れることから、その高速化にも有効であると考えられる。

謝辞 本研究は科研費(若手研究(B) No. 23740075, 基盤研究(B) No. 25287028)の助成を受けました。

参考文献

(1) G. B. Arfken, *Mathematical Methods for Physicists*, (1966), Academic Press.

Table 2 Computational Times of the Proposed Method (6) with the Multigrid Method

Algorithm	Computational Time [min.]
Gauss-Seidel Method with K_{Δ} by (3)	348
Multigrid with K_{Δ} by (3)	116
MG with K_{Δ}^M by (6) ($M = N_{\theta}/2 = 30$)	47

(2) S. R. Arridge, *Optical Tomography in Medical Imaging, Inverse Problems*, **15** (1999), R41–R93.

(3) Basic Linear Algebra Subprograms, <http://www.netlib.org/blas>.

(4) D. A. Boas, J. P. Culver, J. J. Stott, and A. K. Dunn, Three Dimensional Monte Carlo Code for Photon Migration through Complex Heterogeneous Media Including the Adult Human Head, *Optics Express* **10** (2002), pp. 159–170.

(5) S. Chandrasekhar, *Radiative Transfer* (1960), Dover.

(6) 藤原宏志, 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的高速解法, *計算数理工学論文集*, **11** (2011), pp. 13–18.

(7) 藤原宏志, 3次元輻射輸送方程式の境界値問題の数値計算とその応用, *計算数理工学論文集*, **12** (2012), pp. 43–48.

(8) H. Fujiwara, Numerical Analysis of the Stationary Radiative Transport Equation by Finite Difference and Trapezoidal Rule, in preparation.

(9) L. Greengard, Fast Algorithms for Classical Physics, *Science*, **265** (1994), pp. 909–914.

(10) N. Higashimori and H. Fujiwara, Stability and Convergence of an Upwind Finite Difference Scheme for the Radiative Transport Equation without Symmetry Assumptions, submitted.

(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), pp. 691–713.

(12) E. Okada and D. T. Delpy, Near-Infrared Light Propagation in an Adult Head Model. II. Effect of Superficial Tissue Thickness on the Sensitivity of the Near-Infrared Spectroscopy Signal, *Applied Optics*, **42** (2003), pp. 2915–2922.

(13) Y. Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, 2nd ed. (2003), SIAM.