

# 定常輻射輸送方程式の速度方向区分定数近似の数値解析

## PIECEWISE CONSTANT APPROXIMATION WITH RESPECT TO VELOCITY OF THE STATIONARY RADIATIVE TRANSPORT EQUATION

藤原宏志<sup>1)</sup>

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)

In the present paper, efficiency of piecewise constant approximation with respect to velocity direction is shown in discretization of the stationary radiative transport equation (RTE). Theoretically both the proposed method and accurate cubature rules give the strictly diagonally dominance of the discrete problem under some conditions. However, from practical viewpoints, the former is superior to reduce the number of unknowns. Validity in accuracy of the proposed method is also discussed in practical examples with bio-optical parameters.

**Key Words:** Stationary Radiative Transport Equation, Piecewise Constant Approximation, Discrete Ordinate Method, Diagonally Dominance.

### 1. 緒言

本論文では, 生体中での近赤外光の伝播の解析を目的とする輻射輸送方程式 (Radiative Transport Equation; RTE) の数値計算法を論じる. 特に速度方向に区分定数近似を適用することで, 従来法に比して未知数を大幅に削減するスキームを提案する. また数値解析の立場から, 解が一意に存在するという意味での提案スキームの信頼性を示す.

近年, 近赤外光をもちいた生体や脳活動のモニタリング手法の開発が進められている. ここでは生体中の近赤外光の伝播の数値モデルとして RTE がもちいられる<sup>(1, 2)</sup>. 生体の大きさに比して光が充分高速であるとして定常状態を考えると, その 3 次元 RTE の境界値問題は, 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

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

$$I(x, \xi) = I_1(x, \xi), \quad \text{on } \Gamma_- \quad (2)$$

で与えられる. 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  $\Gamma_- = \{(x, \xi); x \in \partial\Omega, n(x) \cdot \xi < 0\}$  であり,  $q \in L^2(X)$  は  $\Omega$  内部の粒子源を,  $I_1 \in L^2(\Gamma_-)$  は境界からの流入を表す. RTE は  $\Omega$  内での粒子の吸収と散乱のふたつの現象に注目する数値モデルであり, 吸収の強さは  $\mu_a$  で, 散乱は  $\mu_s$  と  $p$  で表される. このうち  $\mu_a, \mu_s \in L^\infty(\Omega)$  はそれぞれ吸収

係数, 散乱係数とよばれる非負値函数である. また積分核  $p(\xi, \xi') \in L^\infty(S^2 \times S^2)$  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  $\xi'$  から  $\xi$  に変化する条件付き確率を表す確率密度函数であって

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

を満たす.

空間 3 次元の RTE の離散問題は, 速度方向とあわせて本質的に 5 次元の大規模問題であり, 効率的な計算手法の開発が囑望されている. これまでは数値積分則の高精度化による標本点数の削減が試みられており, 例えば近年実現された  $S^2$  上の高精度数値積分則<sup>(3, 4)</sup>は, RTE の数値計算における未知数の削減に大きく寄与した<sup>(5, 6)</sup>. しかし依然として, 離散問題に対する反復解法の収束性のために限っても  $S^2$  上に数千個の標本点を必要とし, 実用的な数値計算のために更なる効率化が要求されている.

これに対し本研究では,  $S^2$  上の函数の区分定数近似にもとづく必ずしも高精度ではない積分則をもちいる場合にも狭義優対角性と未知数の個数の削減が両立することを示す. 次節で上流差分近似と数値積分則で得られる RTE の離散問題の係数行列の性質を述べ, Sobolev の高精度数値積分則をもちいる場合の離散化数の選択例を 3 節で精密に検討する. 4 節で速度方向に区分定数近似のスキームを提案して数値解析を示し, その実現について 5 節で注意を与える. 6 節では提案手法を生体光学データをもちいる数値計算に適用して精度を検証し, その妥当性を示す.

## 2. 上流差分近似と数値積分則による RTE の離散化

RTE の速度方向の離散化では、 $S^2$  上の数値積分則をひとつ定め、散乱積分項をその数値積分則で近似し、標本点  $\{\xi_n\}$  を選点として (1) を考える手法が主として利用されている<sup>(5, 6, 7)</sup>。本節ではさらに空間方向に上流差分近似を適用して得られる離散問題の係数行列の性質を論じる。

領域  $\Omega$  を直方体  $(0, L_1) \times (0, L_2) \times (0, L_3)$  とする。  $N_1, N_2, N_3$  を正整数として  $x_i = L_i/N_i$ ,  $x_{ijl} = (i\Delta x_1, j\Delta x_2, l\Delta x_3)$  とする。  $S^2$  上に配した  $\{\xi_n\}$  に対し、  $I(x_{ijl}, \xi_n)$  に対応する値を  $I_{ijl;n}$  とするとき、移流項の上流差分近似および減衰項を

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

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

とする。以下では明らかな場合、  $\mu_s(x_{ijl})$ ,  $\mu_a(x_{ijl})$  をそれぞれ  $\mu_s, \mu_a$  と記す。

さて正数  $w_n, 1 \leq n \leq N$  と  $S^2$  上の点  $\{\xi_n; 1 \leq n \leq N\}$  を決めて数値積分則

$$\int_{S^2} f(\xi) d\sigma_{\xi} \approx \sum_{n=1}^N w_n f(\xi_n), \quad f \in C(S^2)$$

を考え、その差を

$$E[f] = \sum_{n=1}^N w_n f(\xi_n) - \int_{S^2} f(\xi) d\sigma_{\xi}$$

とする。  $p_{n\nu} = p(\xi_n, \xi_{\nu})$  とすると、この数値積分則による散乱積分項の近似として

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

を得る。以上の離散化を合わせて (1), (2) の近似として次の連立一次方程式を得る。

$$\begin{aligned} (A_{\Delta} - \Sigma_{\Delta} + K_{\Delta}) I_{ijl;n} &= -q(x_{ijl}, \xi_n), \quad (x_{ijl}, \xi_n) \in X, \quad (3) \\ I_{ijl;n} &= I_1(x_{ijl}; \xi_n), \quad (x_{ijl}, \xi_n) \in \Gamma_-. \end{aligned}$$

この離散問題の係数行列について次が成立する<sup>(8)</sup>。

定理 1. ある正数  $\mu_a^-$  が存在して  $\mu_a \geq \mu_a^-$  とする。重みと標本点が  $\{(w_n, \xi_n); 1 \leq n \leq N\}$  で与えられる数値積分則が

$$\left( \max_{1 \leq n \leq N} w_n \right) \|p\|_{\infty} \leq 1 \quad (4)$$

かつ

$$\max_{1 \leq n \leq N} E[p(\xi_n, \cdot)] < \inf_{\mu_s(x) \neq 0} \frac{\mu_a(x)}{\mu_s(x)} \quad (5)$$

を満たすならば、  $A_{\Delta} - \Sigma_{\Delta} + K_{\Delta}$  は狭義優対角である。すなわち、  $P(A_{\Delta} - \Sigma_{\Delta} + K_{\Delta})$  を狭義優対角とする置換行列  $P$  が存在する。

*Proof.* 散乱位相関数  $p$  の性質と条件 (5) より、  $\mu_s \neq 0$  のとき、任意の  $n$  で

$$1 - \sum_{\nu=1}^N w_{\nu} p_{n\nu} = \int_{S^2} p(\xi_n, \xi') d\sigma_{\xi'} - \sum_{\nu=1}^N w_{\nu} p_{n\nu} > -\frac{\mu_a}{\mu_s}$$

であるから

$$\mu_a + \mu_s \left( 1 - \sum_{\nu=1}^N w_{\nu} p_{n\nu} \right) > 0$$

を得る。またこれは、  $\mu_a$  の正値性より、  $\mu_s = 0$  の場合にも成立する。

さて  $\xi_{n,1}, \xi_{n,2}, \xi_{n,3} > 0$  の場合を考える。この場合、方程式 (3) は

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

である。ここで  $A_{\Delta} - \Sigma_{\Delta} + K_{\Delta}$  の対角成分は  $I_{ijl;n}$  の係数であり、その絶対値は条件 (4) より

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

となる。これから非対角成分の絶対値の和を減ざると、

$$\begin{aligned} \frac{\xi_{n,1}}{\Delta x_1} + \frac{\xi_{n,2}}{\Delta x_2} + \frac{\xi_{n,3}}{\Delta x_3} + (1 - w_n p_{nn}) \mu_s + \mu_a \\ - \left( \left| \frac{\xi_{n,1}}{\Delta x_1} \right| + \left| \frac{\xi_{n,2}}{\Delta x_2} \right| + \left| \frac{\xi_{n,3}}{\Delta x_3} \right| + \sum_{\nu \neq n} |\mu_s w_{\nu} p_{n\nu}| \right) \\ = \mu_a + \mu_s \left( 1 - \sum_{\nu=1}^N w_{\nu} p_{n\nu} \right) > 0 \end{aligned}$$

となる。他の  $\xi_n$  でも同様であり、結論を得る。  $\square$

これより直ちに離散問題の解の一意存在、および Jacobi 法や Gauss-Seidel 法の収束性が従う<sup>(9)</sup>。

なお  $p$  の性質により条件 (5) は、

$$\max_{1 \leq n \leq N} \sum_{\nu=1}^N w_{\nu} p_{n\nu} \leq 1 + \inf_{\mu_s \neq 0} \frac{\mu_a}{\mu_s}$$

であることと同値であり、(4) とともに、計算に先立ち検証可能である。

## 3. Sobolev の高精度数値積分則における例

本節では、生体光学で利用される散乱核に Sobolev による高精度積分則を適用して、定理 1 の条件 (4), (5) を満たす離散化数について述べる。

Table 1: Validation of Conditions (4) and (5) for Henyey-Greenstein Kernel ( $g = 0.9$ ) with Sobolev's Cubature

$N$	Degree	LHS of (4)	LHS of (5)
1260	60	0.161	$6.54 \times 10^{-3}$
1452	65	0.148	$4.89 \times 10^{-3}$
1692	70	0.122	$2.28 \times 10^{-3}$
1932	75	0.106	$1.29 \times 10^{-3}$
2192	80	0.091	$6.81 \times 10^{-4}$

生体中の光伝播の特徴のひとつに強い前方散乱が知られている。生体光学では、散乱位相函数として Henyey-Greenstein 核

$$p(\xi, \xi') = \frac{1}{4\pi} \frac{1-g^2}{(1-2g\xi \cdot \xi' + g^2)^{3/2}}, \quad g = 0.9$$

が広くもちいられる<sup>(1, 2, 10)</sup>。これは、 $g = 0$  のときは速度の方向  $\xi, \xi'$  に依存しない等方的散乱を表し、 $g$  が 1 に近い場合に  $p(\xi, \xi')$  が大きくなり、強い前方散乱に相当する。生体光学では標準的に  $g = 0.9$  がもちいられる。

定理 1 の十分条件は、空間方向の離散化によらず、速度方向の離散化のみに依存することに注意する。特に条件 (5) では  $S^2$  上の数値積分則の誤差を小さくする必要があり、 $p$  が強い異方性をもつ場合、その高精度数値積分のために離散化数を大きく設定する必要がある。

具体的に調べるため、球面上の高精度な数値積分則として知られる Sobolev の方法をもちいる場合の条件 (4), (5) の左辺の値を Table 1 に示す。なおこの数値積分則ではある次数以下の球面調和函数を厳密に積分可能で、表中、この次数を degree の列に示した。条件 (4) は表に挙げた  $N$  ではいずれも満たされている。一方、条件 (5) について、ヒト脳について実験的に求められた生体光学値の例<sup>(10)</sup> では  $\inf(\mu_a/\mu_s) \approx 1.58 \times 10^{-3}$  であり、(5) を満たすには  $N$  を 1932 以上としなければならないことがわかる。

一方、行列の狭義優対角性は解の一意存在および Gauss-Seidel 法などの反復解法が解への収束列を与えるための十分条件であることに注意する。そこで、後述の 6 節の設定下において、倍精度をもちいて Gauss-Seidel 法を実行したときの残差を Fig. 1, 2 に示す。図中、横軸は反復の回数を、縦軸は最大値ノルムでの残差を対数軸で示している。次数が 65 次以下の場合には Gauss-Seidel 法の残差が増大に転じて収束列が得られず (Fig. 1)、また 70 次の場合にも反復回数が多くなると残差の減衰が見られなくなり、倍精度の範囲で十分な精度が得られなかった (Fig. 2)。これより定理 1 は Gauss-Seidel 法の収束に対する良い十分条件を与えているとともに、従来法ではこれ以上の未知数の削減は達成し得ないことがわかる。

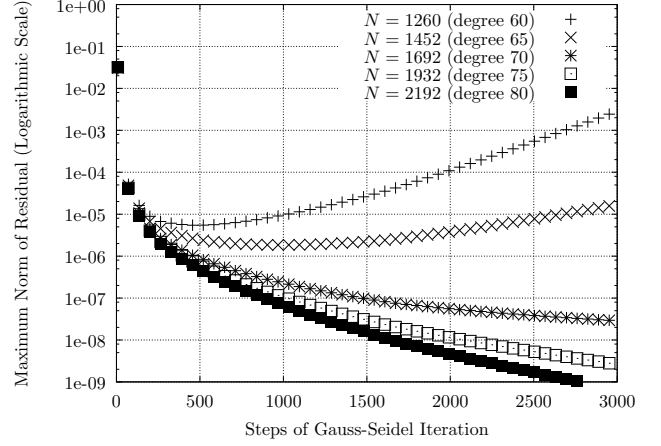


Fig. 1: Convergence of Gauss-Seidel Iteration

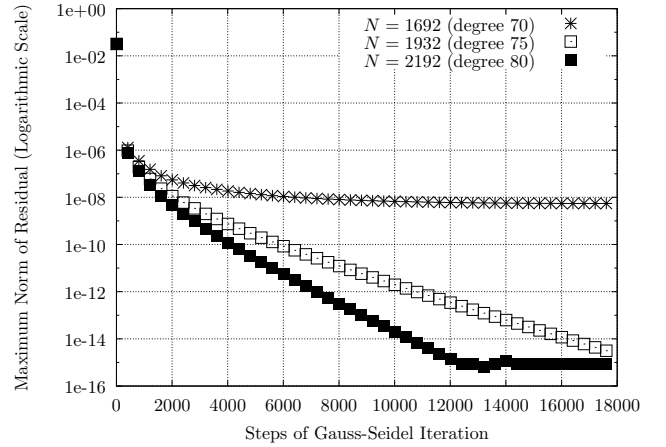


Fig. 2: Residuals of Gauss-Seidel Iteration in Degrees 70, 75, and 80

#### 4. 速度方向の区分定数近似

本節では、未知函数  $I$  を速度方向に区分定数で近似するスキームを提案し、その係数行列の狭義優対角性を示す。

まず  $S^2$  に対して、有限個の空でない連結部分集合  $s_n$  による分割

$$S^2 = \bigcup_{n=1}^N s_n, \quad s_n \cap s_m = \emptyset, \quad n \neq m$$

をとる。ここで  $\bar{s}$  は集合  $s$  の閉包を表す。各  $s_n$  上に  $\xi_n$  をひとつ選び、 $\{x_{ijl}\} \times s_n$  上で  $I(x_{ijl}, \xi) \approx I_{ijl;n}$  と近似すると、 $x = x_{ijl}$  において散乱積分項は

$$\begin{aligned} \mu_s(x_{ijl}) \int_{S^2} p(\xi_n, \xi') I(x_{ijl}, \xi') d\sigma_{\xi'} \\ \approx \mu_s(x_{ijl}) \sum_{\nu=1}^N \left( \int_{s_\nu} p(\xi_n, \xi') d\sigma_{\xi'} \right) I_{ijl;\nu} \end{aligned}$$

と近似される。各  $s_\nu$  上での散乱位相函数の積分値

$$\phi_{n\nu} = \int_{s_\nu} p(\xi_n, \xi') d\sigma_{\xi'}, \quad 1 \leq n, \nu \leq N$$

の厳密値を求めることは一般には困難であり、実際の数値計算では近似値をもちいることになる。その近似値を  $\tilde{\phi}_{n\nu}$  と

すると，上の散乱積分項の近似は

$$\tilde{K}_\Delta^{\text{pc}} I_{ijl;n} = \mu_s \sum_{\nu=1}^N \tilde{\phi}_{n\nu} I_{ijl;\nu}$$

と表され，本研究で提案するスキームは次で与えられる．

$$(A_\Delta - \Sigma_\Delta + \tilde{K}_\Delta^{\text{pc}}) I_{ijl;n} = -q(x_{ijl}, \xi_n), \quad (x_{ijl}, \xi_n) \in X,$$

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

提案スキームにおける係数  $\phi_{n\nu}$  の近似の影響を調べるため，その差を

$$e_N = \max_{1 \leq n, \nu \leq N} (\tilde{\phi}_{n\nu} - \phi_{n\nu})$$

とするとき，次が成立する．

定理 2. ある正数  $\mu_a^-$  が存在して  $\mu_a \geq \mu_a^-$  とし，上述のとおり  $S^2$  の分割  $\{s_n; 1 \leq n \leq N\}$  をとる．各  $s_n$  の曲面積を  $|s_n|$  とするとき，

$$\left( \max_{1 \leq n \leq N} |s_n| \right) \|p\|_\infty \leq 1 \quad (6)$$

かつ

$$e_N < \frac{1}{N} \inf_{\mu_s(x) \neq 0} \frac{\mu_a(x)}{\mu_s(x)} \quad (7)$$

ならば， $A_\Delta - \Sigma_\Delta + \tilde{K}_\Delta^{\text{pc}}$  は狭義優対角である．

これより定理 1 と同様に，直ちに提案スキームの解の一意存在と反復解法の収束性が従う．

*Proof.* 条件 (6) より，全ての  $n$  で

$$\phi_{nn} \leq \|p\|_\infty \int_{s_n} d\sigma_{\xi'} \leq 1$$

であるから，条件 (7) と合わせると

$$\tilde{\phi}_{nn} \leq \phi_{nn} + e_N \leq 1 + e_N \leq 1 + \frac{\mu_a}{\mu_s}$$

となり，

$$\mu_a + \mu_s(1 - \tilde{\phi}_{nn}) \geq 0$$

を得る．また，厳密な係数  $\phi_{n\nu}$  については任意の  $n$  で

$$\sum_{\nu=1}^N \phi_{n\nu} = \sum_{\nu=1}^N \int_{s_\nu} p(\xi_n, \xi') d\sigma_{\xi'} = 1$$

に注意すると，次が成立する．

$$1 - \sum_{\nu=1}^N \tilde{\phi}_{n\nu} = \sum_{\nu=1}^N (\phi_{n\nu} - \tilde{\phi}_{n\nu}) \geq -Ne_N.$$

さて  $\xi_{n,1}, \xi_{n,2}, \xi_{n,3} > 0$  の場合を考える．定理 1 と同様に，離散問題の係数行列の対角成分は

$$\left| -\frac{\xi_{n,1}}{\Delta x_1} - \frac{\xi_{n,2}}{\Delta x_2} - \frac{\xi_{n,3}}{\Delta x_3} - (\mu_s + \mu_a) + \mu_s \tilde{\phi}_{nn} \right|$$

$$= \frac{\xi_{n,1}}{\Delta x_1} + \frac{\xi_{n,2}}{\Delta x_2} + \frac{\xi_{n,3}}{\Delta x_3} + \mu_a + \mu_s(1 - \tilde{\phi}_{nn})$$

である．これより非対角成分の絶対値の和を減ずると

$$\frac{\xi_{n,1}}{\Delta x_1} + \frac{\xi_{n,2}}{\Delta x_2} + \frac{\xi_{n,3}}{\Delta x_3} + \mu_a + \mu_s(1 - \tilde{\phi}_{nn})$$

$$- \left( \left| \frac{\xi_{n,1}}{\Delta x_1} \right| + \left| \frac{\xi_{n,2}}{\Delta x_2} \right| + \left| \frac{\xi_{n,3}}{\Delta x_3} \right| + \sum_{n \neq \nu} |\mu_s \tilde{\phi}_{n\nu}| \right)$$

$$= \mu_a + \mu_s \left( 1 - \sum_{\nu=1}^N \tilde{\phi}_{n\nu} \right) \geq \mu_a - \mu_s Ne_N > 0$$

となる．ここで再び条件 (7) をもちいた．他の  $n$  でも同様であり，結論を得る．  $\square$

2 節で述べた一般的な数値積分則をもちいる場合は狭義優対角性のために  $S^2$  全体での積分則の精度に条件 (5) を課し，速度方向の離散化数  $N$  が決まる．一方提案スキームでは， $N$  の範囲は本質的に (6) で決まり， $\mu_a, \mu_s$  に依存しないことに注意する．もうひとつの条件 (7) は，(6) で決まる  $N$  に対して各曲面  $s_n$  上での積分を充分高精度に求めればよく， $N$  の選択には影響しない．例えばすべての  $n$  で  $|s_n|$  がほとんど等しいとすると  $|s_n| \approx 4\pi/N$  と見積られ，Henyey-Greenstein 核では  $\|p\|_\infty = p(\xi, \xi) = (1+g)/(4\pi(1-g)^2)$  であることに注意すると，(6) より

$$N \geq 4\pi \frac{1+g}{4\pi(1-g)^2} = 190, \quad g = 0.9$$

である．

## 5. 球面の分割と係数の高精度計算の例

本節では具体的な球面の分割と係数の数値積分の例を示して定理 2 の条件を数値的に検証し，提案手法により未知数の個数を大幅に削減可能であることを示す．

$S^2$  上での  $\{\xi_n\}$  の局在を避けるため，次のとおり  $\{(s_n, \xi_n)\}$  をとる．まず  $S^2$  に内接する正 20 面体をひとつ決め，2 以上の正整数  $M$  をとる．正 20 面体の各辺を  $M$  等分する点を通り各辺に平行な直線により，正 20 面体の表面は  $20M^2$  個の合同な正三角形に分割される．この分割で得られた小三角形  $\tau_n$  の内部とその重心の，原点から  $S^2$  への射影をそれぞれ  $s_n, \xi_n$  とする．次に係数  $\tilde{\phi}_{n\nu}$  を求めるために，各小三角形  $\tau_\nu$  上での曲面積分を  $(-1, 1)^2$  上の重積分で表し，Gauss-Legendre 則をもちいる．

この分割で得られる  $|s_n|$  の最小値，最大値および (6) の左辺の値を Henyey-Greenstein 核 ( $g = 0.9$ ) の場合に Table 2 に示す．表より  $M$  が 4 以上であれば，条件 (6) は満たされていることがわかる．

次に上述の  $\phi_{n\nu}$  の計算法の精度を確認するため，倍精度で  $k$  次の Gauss-Legendre 則をもちいて求めた  $\tilde{\phi}_{n\nu}^k$  と，真値との差

$$\max_{1 \leq n, \nu \leq N} (\tilde{\phi}_{n\nu}^k - \phi_{n\nu}) \quad (8)$$

を Fig. 3 に，その相対誤差

$$\max_{1 \leq n, \nu \leq N} \left| \frac{\tilde{\phi}_{n\nu}^k - \phi_{n\nu}}{\phi_{n\nu}} \right| \quad (9)$$

を Fig. 4 に示す．ただし  $\phi_{n\nu}$  としては，10 進 50 桁の精度で 48 次の Gauss-Legendre 則で求めた値をもちいた．前述

Table 2: Validation of the Condition on Surface Areas (6) in the Proposed Method

$M$	$N$	$\min  s_n $	$\max  s_n $	LHS of (6)
4	320	0.0308	0.0467	0.707
6	720	0.0126	0.0204	0.309
8	1280	0.00680	0.0118	0.178

の  $\inf(\mu_a/\mu_s) = 1.58 \times 10^{-3}$  の場合には,  $N$  が  $10^3$  以下の場合には  $e_N \leq 10^{-6}$  であればよく, 条件 (7) を満たすためには 10 次の Gauss-Legendre 則で  $\tilde{\phi}_{n\nu}$  を求めればよいことがわかる. また 22 次以上の Gauss-Legendre 則をもちいることで, 何れの  $M$  でも丸め誤差と同程度の誤差で  $\tilde{\phi}_{n\nu}$  が求まることがわかる.

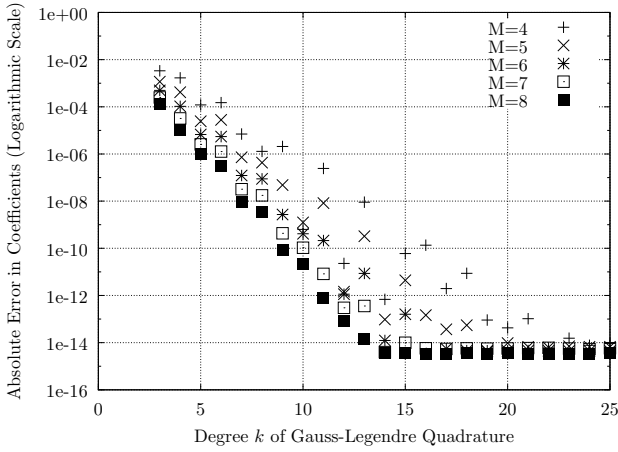


Fig. 3: Accuracy of  $\tilde{\phi}_{n\nu}$  (8) by Gauss-Legendre Quadrature

## 6. 速度方向定数近似による輻射輸送方程式の計算例

以上の提案手法を生体光学データをもちいる RTE の数値計算に適用し, 離散化数, 計算時間, および計算結果の精度においてその妥当性と実用性を示す.

領域  $\Omega$  として先行研究<sup>(6)</sup> のヒト頭部の MRI データをもちい, 分割数を  $N_1 = 181, N_2 = 217, N_3 = 181$  とする. ここで  $\Delta x_i = 1$  [mm] である. 上述の生体光学パラメータ<sup>(10)</sup> と  $g = 0.9$  での Henyey-Greenstein 核をもちい, ブロック Gauss-Seidel 法 (3,000 回反復) で得られる近似解を数値解とする. この反復における残差の減衰を Fig. 5 に示す. 定理 2 のとおり, いずれの場合も反復法の残差は十分に減衰している.

次に Table 3 に挙げる計算機を 8 台もちいた並列計算での計算時間を,  $S^2$  上の標本点数, 全体の未知数の個数とともに Table 4 に示す. なお  $\{\tilde{\phi}_{n\nu}; 1 \leq n, \nu \leq N\}$  の数値計算に要する時間は,  $N = 1280$  で 20 次の Gauss-Legendre 則をもちいる場合で 18 秒であり, RTE の計算時間全体に比して

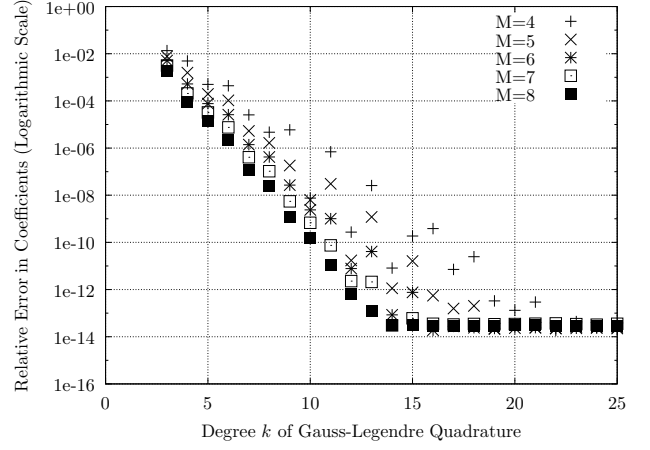


Fig. 4: Relative Errors of  $\tilde{\phi}_{n\nu}$  (9) by Gauss-Legendre Quadrature

Table 3: Hardware Specifications in Numerical Experiments.

CPU	Core i7-6700K (4.0GHz, 4 Cores)
Main Memory	32GB DDR4 (PC4-17000)
NIC	Intel X550-T1
Operating System	Linux CenOS 6.8
C/C++	gcc-4.4.7-17.el6.x86_64
MPI	mpich2-1.2.1-2.3.el6.x86_64
GPU	NVIDIA GTX TITAN (GK110, 2688 Cores, 837MHz)
GPU Memory	6GB GDDR5
CUDA	5.5.22
HUB	NETGEAR XS716T

充分小さいものであった. 一方, Sobolev の高精度数値積分則で定理 1 の条件を満たす  $N = 1932$  とした場合, 空間方向も合わせた未知数の個数は約 78.4 億個 (倍精度で 58.4 GB) であり, 計算時間は 6.1 時間であった. これより提案手法では未知数の大幅な削減とともに計算の高速化が達成されている.

数値解の精度を検証するため, 各点  $x \in \Omega$  での光積分強度

$$\Phi(x_{ijl}) = \int_{S^2} I(x_{ijl}, \xi) d\sigma_\xi \approx \sum_{n=1}^N w_n I_{ijl;n}$$

を考える. これは提案する区分定数近似では

$$\Phi^{\text{PC}}(x_{ijl}) = \int_{S^2} I(x_{ijl}, \xi) d\sigma_\xi \approx \sum_{n=1}^N |s_n| I_{ijl;n}$$

となる. これらの差を, 光強度がデシベル値で測定されるこ

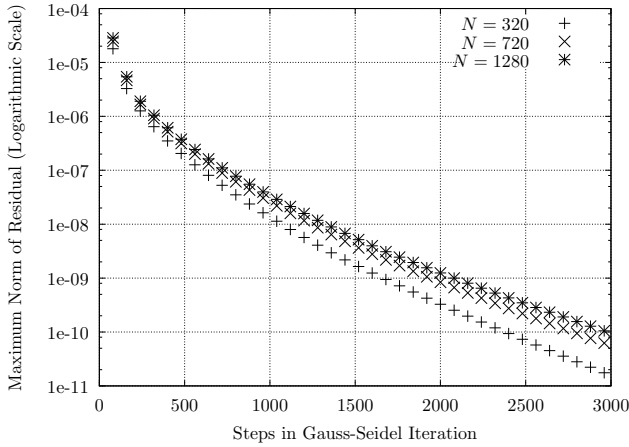


Fig. 5: Convergence of Block Gauss-Seidel Iteration in Piecewise Constant Approximation w.r.t. Verocity Direction

Table 4: Computational Times of RTE by Piecewise Constant Approximation w.r.t. Verocity Direction (3,000 Steps in Block Gauss-Seidel Iteration)

$\#\{\xi_n\}$	Total Unknowns [bln.]	Memory [GB]	Time [hour]
320	1.30	9.7	1.1
720	2.92	21.8	2.3
1280	5.19	38.7	4.0

とを念頭において

$$\max_{x_{ijl} \in \Omega} \left| \frac{\log \Phi(x_{ijl}) - \log \Phi^{PC}(x_{ijl})}{\log \Phi(x_{ijl})} \right|$$

で求めたところ,  $N = 320, 720, 1280$  の場合で約 0.16 であり, 離散化数の削減に応じた妥当な精度となった.

## 7. 結言

本論文では, 散乱積分項の近似に未知函数の区分定数近似を提案し, 移流項の近似に上流差分近似をもちいる場合に離散問題の解が一意的に存在し, Gauss-Seidel 法が収束することを示した. 提案するスキームでは, 高精度数値積分法をもちいる従来法に比して標本点数の個数の大幅な削減と計算の高速化が実現された. また, 生体光学値をもちいる数値計算例によって, 高精度数値積分法をもちいる場合と比して妥当な精度が得られた. これより, 標本点数の少ない本提案手法と従来の高精度手法とで多重格子法を構成することで, 従来法の収束の改善と計算の高速化が期待される.

計算結果の高精度化のためには高精度数値積分をもちいることが望ましいと考えられるが, 一方で, RTE では速度方向

のみならず空間方向の離散化も合わせて考える必要がある. これら両者の離散化の関係, 特に離散スキームの収束評価については, 理論的な視点から更に精密な検討が望まれる.

謝辞 本研究は科研費(基盤研究(C) No. 26400198, 基盤研究(C) No. 15K09920, 基盤研究(A) No. 16H02155)の助成を受けました. 7章でもちいた生体の領域データは, 大石直也先生(京都大学)からご提供いただきました.

## 参考文献

- (1) S. R. Arridge : Optical Tomography in Medical Imaging, *Inverse Problems*, **15** (1999), R41–R93.
- (2) Y. Yamada and S. Okawa : Diffuse Optical Tomography: Present Status and its Future, *Optical Review*, **21** (2014), pp. 185–205.
- (3) S. L. Sobolev : Cubature Formulas on the Sphere Invariant under Finite Groups of Rotations, *Sov. Math.*, **3** (1962), pp. 1307–1310.
- (4) C. Ahrens and G. Beylkin : Rotationally Invariant Quadratures for the Sphere, *Proc. Roy. Soc. A*, **465** (2009), pp. 3103–3125.
- (5) C. Ahrens : Highly Efficient, Exact Quadratures for Three-Dimensional Discrete Ordinates Transport Calculations, *Nuclear Science and Engineering*, **170** (2012), pp. 98–101.
- (6) 藤原宏志, 大石直也 : 高精度積分則と GPU による 3 次元輻射輸送方程式の大規模計算の高速化, *数理解析研究所講究録*, **1957** (2015), pp. 68–80.
- (7) 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.
- (8) 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の高速解法, *計算数理工学論文集*, **11** (2011), pp. 13–18.
- (9) Y. Saad : Iterative Methods for Sparse Linear Systems, 2nd ed., SIAM, 2003.
- (10) G. Strangman, M. A. Franceshini, and D. A. Boas : Factors Affecting the Accuracy of Near-Infrared Spectroscopy Concentration Calculations for Focal Changes in Oxygenation Parameters, *NeuroImage*, **18** (2003), pp. 865–879.