

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

京都大学大学院・情報学研究科 藤原宏志
京都大学大学院・医学研究科 大石直也

Hiroshi Fujiwara

Graduate School of Informatics, Kyoto University

Naoya Oishi

Graduate School of Medicine, Kyoto University

1 生体内の光伝播と輻射輸送方程式

本研究では生体内の光伝播の数理解析モデルのひとつである輻射輸送方程式 (Radiative Transport Equation) に対し, 数値解析理論と計算機アーキテクチャの両面から高速計算法を構築する. 数値解析からは, RTE に現れる散乱積分の高精度積分則を適用して未知数を削減し, 計算機アーキテクチャからは画像描画用の GPU (Graphics Processing Unit) を利用して高速化を図る.

近年脳科学の分野において, 近赤外光を利用して, 酸素消費をとまなう脳活動の非侵襲モニタリング手法の開発が進められている. そこでは近赤外光を光子として扱い, その吸収と散乱とに注目して RTE が数理解析モデルとされる [1]. 光子の速度が生体の大きさに比して充分高速であるとして, 本研究では定常状態に対応する RTE の境界値問題を扱う.

Ω を \mathbb{R}^3 の領域とする. 位置 $x \in \bar{\Omega}$ で $\xi \in S^2 = \{\xi \in \mathbb{R}^3; |\xi| = 1\}$ の方向の速度をもつ粒子密度を $I(x, \xi)$ とするとき, RTE の境界値問題は

$$-\xi \cdot \nabla_x I - (\mu_s + \mu_a)I + \mu_s \int_{S^2} p(x; \xi, \xi') I(x, \xi') d\sigma_{\xi'} + q = 0, \quad \text{in } X = \Omega \times S^2, \quad (1.1a)$$

$$I(x, \xi) = I_1(x, \xi), \quad \text{on } \Gamma_- \quad (1.1b)$$

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 $\mu_s = \mu_s(x)$, $\mu_a = \mu_a(x)$, $q = q(x, \xi)$ 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 $p(x; \xi, \xi')$ を散乱位相関数といい, 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関数であって, 次を満たす.

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

適当な差分と数値積分則による離散化で得られる (1.1) の離散問題 [13] は, 適当な条件下でただひとつの解をもつ [10]. しかしながら, 空間 3次元の RTE の離散問題は, 速度の方向 S^2 も合わせて本質的に 5次元の大規模問題となり, 数値計算資源 (時間とメモリ) が問題となる. そこで従来は RTE の拡散近似 [1] や Monte Carlo 法 [6] がおこなわれてきたが, これらでは高信頼・高精度計算は達成され得ず, 新たな技法の開発が望まれている.

2 輻射輸送方程式の離散化

本研究では RTE の離散化に対し、移流項を上流差分で、積分項を数値積分則で離散化する。すなわち、矩形領域 Ω に格子点 $x_{ijl} = (i\Delta x_1, j\Delta x_2, l\Delta x_3)$ を配し、 S^2 に分点 (標本点) $\{\xi_\nu\}_{\nu=1}^K$ をとる。そのもとで $I(x_{ijl}, \xi_\nu)$ 相当値を $I_{ijl,\nu}$ として次を考える [13].

$$\begin{aligned} A_\Delta I_{ijl,\nu} &= -\xi_{\nu,1} \frac{I_{i+1,j,l,\nu} - I_{i-1,j,l,\nu}}{2\Delta x_1} + |\xi_{\nu,1}| \frac{I_{i+1,j,l,\nu} - 2I_{i,j,l,\nu} + I_{i-1,j,l,\nu}}{2\Delta x_1} \\ &\quad - \xi_{\nu,2} \frac{I_{i,j+1,l,\nu} - I_{i,j-1,l,\nu}}{2\Delta x_2} + |\xi_{\nu,2}| \frac{I_{i,j+1,l,\nu} - 2I_{i,j,l,\nu} + I_{i,j-1,l,\nu}}{2\Delta x_2} \\ &\quad - \xi_{\nu,3} \frac{I_{i,j,l+1,\nu} - I_{i,j,l-1,\nu}}{2\Delta x_3} + |\xi_{\nu,3}| \frac{I_{i,j,l+1,\nu} - 2I_{i,j,l,\nu} + I_{i,j,l-1,\nu}}{2\Delta x_3}, \\ \Sigma_\Delta I_{ijl,\nu} &= (\mu_s(x_{ijl}) + \mu_a(x_{ijl})) I_{ijl,\nu}, \\ K_\Delta I_{ijl,\nu} &= \mu_s(x_{ijl}) \sum_{k=1}^K w_k p(\xi_\nu, \xi_k) I_{ijl,k}. \end{aligned}$$

$A_\Delta I_{ijl,\nu}$ では $\xi_\nu = (\xi_{\nu,1}, \xi_{\nu,2}, \xi_{\nu,3})$ であり、これは $-\xi \cdot \nabla_x I$ の (x_{ijl}, ξ_ν) での差分近似を与える。また $K_\Delta I_{ijl,\nu}$ は散乱積分の離散化である。これらの記号のもとで、(1.1) の離散問題として $\{I_{ijl,\nu}\}$ を未知数とする次の連立方程式を得る。

$$\begin{aligned} (A_\Delta - \Sigma_\Delta + K_\Delta) I_{ijl,\nu} &= -q_\Delta, & (x_{ijl}, \xi_\nu) \in X, \\ I_{ijl,\nu} &= I_1(x_{ijl}, \xi_\nu), & (x_{ijl}, \xi_\nu) \in \Gamma_-. \end{aligned}$$

この係数行列は適当な条件下で優対角行列となるため Gauss-Seidel 法が有効である [10].

3 球面上の高精度数値積分則

RTE の数値計算では散乱積分 K_Δ の取り扱いが計算時間の大部分を占め、その離散化を改善することで全体の計算時間とメモリが大幅に削減される。本研究では未知数を削減するため、球面上の積分則

$$Q(f) = \int_{S^2} f(\xi) d\sigma_\xi \approx Q_K(f) = \sum_{k=1}^K w_k f(\xi_k), \quad f \in C(S^2), \xi_k \in S^2$$

で標本点が局在せず、かつ滑らかな函数に対して高精度なものを構築する。これまでも球面上の積分則は幾つか提案されているが [4, 8, 9], ここでは Sobolev [15] による次のふたつをみだす積分則を数値的に実現する。

定義 1. 部分空間 $V \subset C(S^2)$ の任意の元 $f \in V$ に対して $Q_K(f) = Q(f)$ であるとき、積分則 Q_K は V で *exact* であるという。

定義 2. $G \subset SO(3)$ を有限回転群とする。積分則 Q_K が次をともに満たすとき、 Q_K は G -不変であるという。

- (1) 標本点 $\{\xi_k\}$ が G -orbit の *disjoint* な和集合である。
- (2) 同一の G -orbit に属する点に対する重みは等しい。すなわち、ある $g \in G$ が存在して $\xi_i = g\xi_j$ ならば $w_i = w_j$.

さて $G \subset SO(3)$ を有限回転群として $|G|$ をその位数とする. $f \in C(S^2)$, $V \subset C(S^2)$ に対して

$$f_G(\xi) = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} f(g\xi), \quad V_G = \{f \in V; \text{任意の } g \in G \text{ に対して } f \circ g = f\}$$

とすると, $f \in V$ ならば $f_G \in V_G$ である. このとき次が成立する.

命題 3. $V = \text{span}\{f_1, \dots, f_n\}$ ならば $V_G \subset \text{span}\{f_{1,G}, \dots, f_{n,G}\}$.

定理 4 ([17]). $V \subset C(S^2)$ を部分空間, Q_K を G -不変な積分則とする. このとき, Q_K が V で *exact* であることと, Q_K が V_G で *exact* であることは同値である.

以下, 球面 S^2 に標準的な極座標を導入して $\xi = (\theta, \phi)$ とし, 標準的な球面調和函数

$$Y_n^m(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi} \frac{(n-m)!}{(n+m)!}} P_n^m(\cos\theta) e^{im\phi}, \quad |m| \leq n,$$

をもちいる. ただし P_n を n 次の Legendre 多項式として, P_n^m は

$$\begin{aligned} P_n^m(x) &= (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m P_n}{dx^m}(x), \quad -1 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq m \leq n, \\ P_n^{-m}(x) &= (-1)^m \frac{(n-m)!}{(n+m)!} P_n^m(x), \quad |m| \leq n \end{aligned} \quad (3.1)$$

である.

区間上の代表的な高精度積分則である Gauss 型積分則は, ある次数以下の多項式に対して *exact* な積分則となっている. これに倣い, 球面上では $\{Y_n^m; |m| \leq n\}$ が $L^2(S^2)$ の直交基であることから, Q_K が N 次以下の球面調和函数の全体

$$\Pi^N = \text{span}\{Y_n^m; |m| \leq n \leq N\}$$

で *exact* であること, すなわち

$$Q_K(Y_n^m) = \sum_{k=1}^K w_k Y_n^m(\xi_k) = \int_{S^2} Y_n^m(\xi) d\sigma = \sqrt{4\pi} \delta_{n0} \delta_{m0}, \quad \text{for any } |m| \leq n \leq N \quad (3.2)$$

を要請する. このとき Q_K は S^2 上の滑らかな函数に対する高精度積分則であることが期待される. 実際, S^2 上の解析函数 f については, 球面調和函数展開

$$f(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{|m| \leq n} a_{nm} Y_n^m(\xi)$$

の係数 $|a_{nm}|$ が n に対して指数的に減衰するため, 上述のもとで Q_K の誤差 $|Q_K(f) - Q(f)|$ は N について指数的に減衰する [4, 16].

さらに標本点の分布に極端な偏りが生じないように G として正 20 面体回転群をとり, Q_K が G -不変であることを要請する. このとき標本点の集合を

$$\{\xi_k\} = G\eta_1 \cup G\eta_2 \cup \dots \cup G\eta_J, \quad \text{ただし } i \neq j \text{ ならば } G\eta_i \cap G\eta_j = \emptyset$$

と表し, 軌道 $G\eta_j$ に対応する重みを改めて w_j とすると, 積分則は

$$Q_K(f) = \sum_{k=1}^K w_k f(\xi_k) = \sum_{j=1}^J w_j \sum_{g \in G} f(g\eta_j) = |G| \sum_{j=1}^J w_j f_G(\eta_j)$$

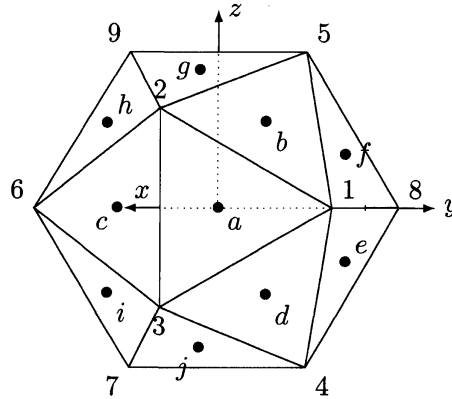


図 1: Icosahedron and labels (used in Tables 3-7)

と表され, (3.2) は次のようになる.

$$\sum_{j=1}^J w_j Y_{n,G}^m(\eta_j) = \frac{\sqrt{4\pi}}{|G|} \delta_{n0} \delta_{m0}, \quad \text{for any } |m| \leq n \leq N. \quad (3.3)$$

定理 4 より, G -不変な積分則が Π^N で exact であるためには Π_G^N で exact であればよく, それには命題 3 より $Y_{n,G}^m$ が線型独立となる (n, m) に対して (3.3) を満たす $\{(w_j, \eta_j)\}_{j=1}^J$ を求めることになる. $Y_{n,G}^m, Y_{\nu,G}^\mu$ は, $n \neq \nu$ かつ, ともに 0 でなければ互いに直交する. 従って, 各 n 毎に $\{Y_n^m; |m| \leq n\}$ で $Y_{n,G}^m$ が線型独立となるものを考えればよく, その個数は次で与えられる.

定理 5 (Sobolev [15, 17]). G を正 p 面体回転群とする. G -不変な n 次球面調和関数で線型独立なもの個数は次で与えられる.

$$S(n) = \left[\frac{n}{q_1} \right] + \left[\frac{n}{q_2} \right] + \left[\frac{n}{q_3} \right] - n + 1.$$

ただし $[x]$ は $x \in \mathbb{R}$ の整数部分, q_1, q_2, q_3 はそれぞれ正 p 面体の 1 つの頂点を共有する辺の数, 1 つの面を構成する辺の数, 辺の中点における対称次数である.

注意. 正 20 面体回転群では $q_1 = 5, q_2 = 3, q_3 = 2$ である.

球面調和関数 Y_n^m は複素数値関数なので, (3.3) は各 n に対して形式的に $4n+2$ 個の実数の方程式からなっており, 上の定理を考えると明らかに冗長である. そこで Y_n^m の対称性をもちいて幾つかの方程式を消去するため, G として

$$(\pm 1, 0, \pm \alpha), (\pm \alpha, \pm 1, 0), (0, \pm \alpha, \pm 1), \quad \alpha = \frac{1 - \sqrt{5}}{2}$$

を頂点とする正 20 面体 (図 1) を不変とする回転群をもちいる. G の各元を具体的に列挙すると Appendix の表 3-7 となる. このとき次が成立する.

命題 6. 図 1 の定める正 20 面体回転群 G に対し, 次が成立する.

(1) m が奇数ならば $Y_{n,G}^m(\xi) \equiv 0$.

(2) n が奇数ならば $Y_{n,G}^0(\xi) \equiv 0$.

(3) n が偶数ならば $\text{Im} Y_{n,G}^m(\xi) \equiv 0$.

(4) n が奇数ならば $\text{Re} Y_{n,G}^m(\xi) \equiv 0$.

(5) $Y_{n,G}^{-m} = (-1)^{n+m} Y_{n,G}^m$.

Proof. g を G の任意の元とし, $\xi = (x, y, z)$ を (x', y', z') にうつすとする. このとき (x, y, z) を $(-x', -y', z')$ にうつす $g^* \in G$ がただひとつ存在することが, 直接的な計算でわかる (表 3-7). このとき $g\xi = (x', y', z') \in S^2$ の極座標を (θ', ϕ') とすると, $g^*\xi = (-x', -y', z')$ の極座標は $(\theta', \phi' + \pi)$ であり,

$$\begin{aligned} Y_n^m(g^*\xi) &= Y_n^m(\theta', \phi' + \pi) = c_{nm} P_n^m(\cos \theta') e^{im(\pi + \phi')} = (-1)^m c_{nm} P_n^m(\cos \theta') e^{im\phi'} \\ &= (-1)^m Y_n^m(\theta', \phi') = (-1)^m Y_n^m(g\xi) \end{aligned}$$

を得る. したがって m が奇数ならば

$$Y_n^m(g\xi) + Y_n^m(g^*\xi) = 0, \quad \text{for any } \xi \in S^2$$

となる. 同様に (x, y, z) を $(x', -y', -z')$ を対応させる $g^\dagger \in G$ がただひとつ存在する. 極座標では $g^\dagger\xi$ は $(\theta' + \pi, \pi - \phi')$ ゆえ

$$\begin{aligned} Y_n^m(g^\dagger\xi) &= Y_n^m(\theta' + \pi, \pi - \phi') = c_{nm} P_n^m(\cos(\theta' + \pi)) e^{im(\pi - \phi')} \\ &= (-1)^m c_{nm} P_n^m(-\cos \theta') e^{im\phi'} \\ &= (-1)^n c_{nm} P_n^m(\cos \theta') e^{im\phi'} \\ &= (-1)^n \overline{Y_n^m(\theta', \phi')} = (-1)^n \overline{Y_n^m(g\xi)}. \end{aligned}$$

ここで $P_n^m(-t) = (-1)^{n+m} P_n^m(t)$ をもちいた. したがって n が奇数ならば

$$Y_n^0(g\xi) + Y_n^0(g^\dagger\xi) = Y_n^0(\theta', \phi') - \overline{Y_n^0(\theta', \phi')} = Y_n^0(\theta', \phi') - Y_n^0(\theta', \phi') = 0$$

である. また n が偶数ならば

$$\text{Im} \left\{ Y_n^m(g\xi) + Y_n^m(g^\dagger\xi) \right\} = \text{Im} \left\{ Y_n^m(\theta', \phi') + \overline{Y_n^m(\theta', \phi')} \right\} = 0,$$

同様に n が奇数ならば

$$\text{Re} \left\{ Y_n^m(g\xi) + Y_n^m(g^\dagger\xi) \right\} = \text{Re} \left\{ Y_n^m(\theta', \phi') - \overline{Y_n^m(\theta', \phi')} \right\} = 0,$$

さらに

$$\begin{aligned} Y_n^{-m}(g^\dagger\xi) &= Y_n^{-m}(\theta' + \pi, \pi - \phi') \\ &= (-1)^m \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi} \frac{(n+m)!}{(n-m)!}} P_n^{-m}(\cos(\theta' + \pi)) e^{i(-m)(\pi - \phi')} \\ &= \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi} \frac{(n-m)!}{(n+m)!}} P_n^m(-\cos \theta') (-1)^m e^{im\phi'} \\ &= (-1)^{n+m} Y_n^m(\theta', \phi') = (-1)^{n+m} Y_n^m(g\xi) \end{aligned}$$

が成立する. ここで (3.1) をもちいた. □

表 1: 図 1 の正 20 面体を不変とする回転群 G での $Y_{n,G}^m$ の実部と虚部

n	m	実部	虚部
偶数	偶数	*	0
	奇数	0	0
奇数	0でない偶数	0	*
	奇数, 0	0	0

これより $Y_{n,G}^m$ の実部・虚部は表 1 に示すとおりである。表中, 0 は恒等的に 0 であることを, * はそうでないことを示す。したがって G を上述のように選ぶと, (3.2) は, $(n, m) = (\text{even}, \text{even})$ の場合の実部と, $(n, m) = (\text{odd}, \text{even})$ (ただし $m \neq 0$) の場合の虚部が 0 とならず残る。また命題 6(5) より $Y_{n,G}^m$ と $Y_{n,G}^{-m}$ は線型従属であり, $m \geq 0$ の場合のみを考えればよい。さらに, n が偶数のときは $Y_{n,G}^0, Y_{n,G}^2, \dots, Y_{n,G}^{2S(n)-2}$ の任意の $S(n)$ 個が, n が奇数のときは $Y_{n,G}^2, Y_{n,G}^4, \dots, Y_{n,G}^{2S(n)}$ の任意の $S(n)$ 個が線型独立であることが数値的に示唆される。そこで

$$0 \leq n \leq N, \quad S(n) \neq 0, \quad m = \begin{cases} 0, 2, 4, \dots, 2S(n) - 2, & n: \text{even}; \\ 2, 4, 6, \dots, 2S(n), & n: \text{odd} \end{cases}$$

を満たす (m, n) の全体を Λ_N とし, $(m, n) \in \Lambda_N$ について (3.3) を考える。

以上をまとめて, N 次以下の球面調和函数全体 Π^N で厳密かつ正 20 面体回転群 G について不変な積分則 Q_K を構築するには,

$$\sum_{j=1}^J w_j \sum_{g \in G} Y_n^m(g(\theta_j, \phi_j)) = \sqrt{4\pi} \delta_{n0} \delta_{m0}, \quad \text{for any } (m, n) \in \Lambda_N \quad (3.4)$$

(ただし n が偶数のときは実部, n が奇数のときは虚部) を解き, $\{(w_j, \theta_j, \phi_j)\}_{j=1}^J$ を決めればよい。これを N 次の Rotationally Invariant Quadrature Rule on the Sphere under the Icosahedral Group (RIQS20) という。

式 (3.4) は形式的には $3J$ 個の実数の未知数を含む $|\Lambda_N| = \dim \Pi_G^N = \sum_{n=0}^N S(n)$ 個の実数の連立非線型方程式である。これら未知数と方程式の個数を一致させるのが自然であるが, $|\Lambda_N|$ は必ずしも 3 の倍数とは限らない。ここで, 正 20 面体の頂点 $V = \{V_i\}_{i=1}^{12}$, 各面の重心 $F = \{F_i\}_{i=1}^{20}$, 辺の中点 $E = \{E_i\}_{i=1}^{30}$ はそれぞれひとつの G -orbit をなしており, G -不変な積分則の標本点となり得ることに着目する。例えば $|\Lambda_N| \equiv 1 \pmod{3}$ のとき, 標本点に V を含めることで未知数がふたつ削減され, 方程式の個数 $|\Lambda_N|$ と一致させることができる。同様に $|\Lambda_N| \equiv 2 \pmod{3}$ であれば, 標本点として例えば V と F を含めることで未知数を 4 つ削減すればよい。

この積分則は Ahrens らによっても計算され [2], 中性子輸送の数値計算で利用されたが [3], $|\Lambda_N| \equiv 0 \pmod{3}$ の場合に V, F, E を含まないものについて言及されていない。一方, 本研究では $N = 36, 45, 47, 49, 52, 54, 60$ の場合に V, F, E をいずれも含まないもの (図 2), いずれも含むもの (図 3) の双方が求まった。前者は, Ahrens らが論じた後者に比して, 同じ次数でも標本点数が少なく, McLaren の意味 [14] でより optimal となっている。

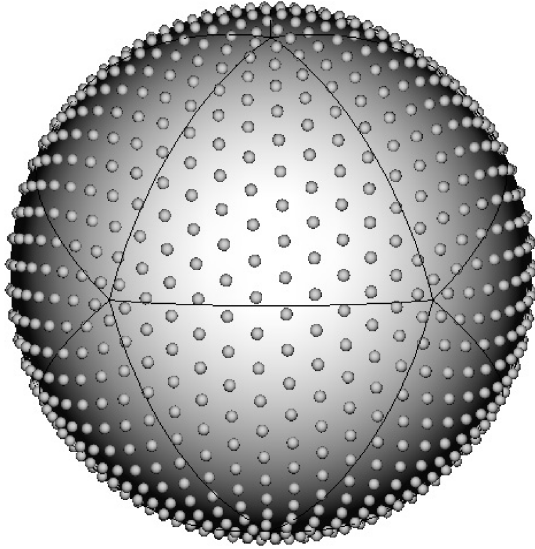


図 2: 提案手法 RIQS20 (60 次) の標本点, 標本点に V, F, E を含まず, 標本点数は 1260

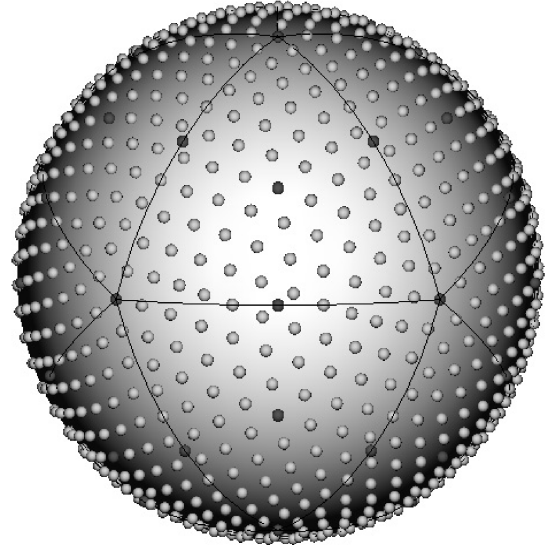


図 3: 提案手法 RIQS20 (60 次) の標本点, 標本点に V, F, E (黒色) を含み, 標本点数は 1262

4 数値例

提案手法の RIQS20 で 60 次 ($N = 60$) の場合の標本点 $\{\xi_k\}$ の分布の例を図 2, 3 に示す. まず $\dim \Pi_G^{60} = 63$ であることに注意する. 図 2 は軌道に V, F, E を含めておらず, Q_K に現れる $J = 21$ 個の G -orbit の重み w_j と生成元 (θ_j, ϕ_j) の全てを未知数として方程式 (3.4) を数値的に解いた. 一方, 図 3 では G -orbit は 23 個である. そのうち 3 つの軌道 (図中の黒点) は V, F, E であり, それぞれに対応する重みが未知数となる. 残りの 20 個の軌道については重みと生成元を未知数することで, 未知数の個数を 63 個として方程式 (3.4) を解いた.

得られた積分則を

$$\int_{S^2} \frac{1}{4\pi} \frac{1-g^2}{(1-2g\xi \cdot \xi' + g^2)^{3/2}} d\sigma = 1, \quad \xi' = \left(\frac{1}{9}, \frac{4}{9}, \frac{8}{9} \right), \quad g = \frac{1}{2}.$$

に適用したときの誤差を図 4 の + に示す. 図中, 横軸は標本点の個数 K を, 縦軸は誤差を対数スケールで示している. この面積分を極座標により重積分で表して台形則を適用する場合の誤差 (\times), および Gauss-Legendre 則と台形則を組み合わせた場合の結果 ($*$) も併せて示しているが, これらの中では提案する積分則が最も高精度であることがわかる. また, 図 5, 図 6 はそれぞれ, これらの積分則の標本点を表しており, いずれも極の近くに密集している. 一方, 提案する積分則では正 20 面体群での回転不変性により, このような局在化は見られない.

求めた値のいくつかは [12] で公開している.

5 GPU によるハイブリッド並列計算

RTE の数値計算において計算時間の大部分を占めるのは散乱積分の計算であるが, これを行列乗算として GPU で処理することで扱うことで高速化が実現される. 一方, RTE の計算に現れる差分の計算は, メモリ上は大域的なアクセスとなるため GPU での計算よりも CPU での計算が有

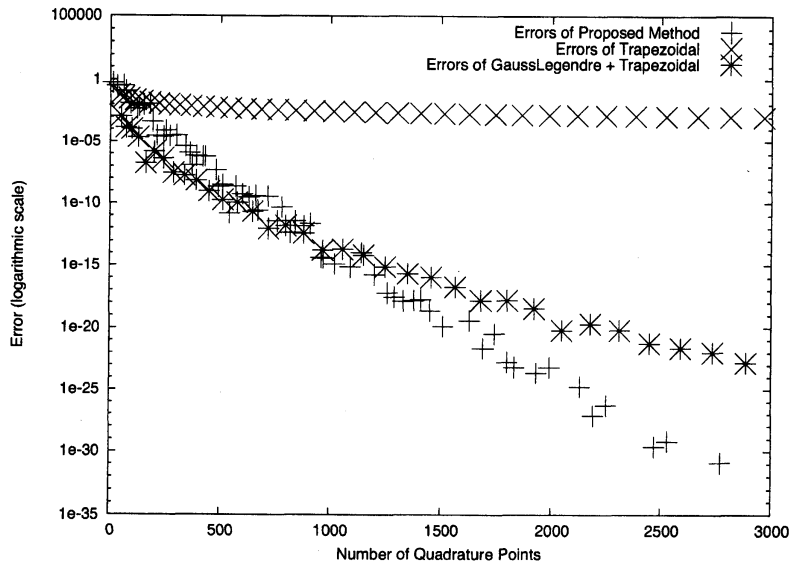


図 4: 球面上の積分則の節点数と誤差

利である。このような計算においてはホストメモリと GPU のデバイスメモリとの間の転送時間が問題となる。

現在、大規模な計算を実行する計算環境として複数台の計算ノードを接続するクラスタが一般的であり、データ交換などのノード間通信は MPI (Message Passing Interface) がもちいられる。このとき RTE の計算における Gauss-Seidel 法の主要部は

- ホストメモリから GPU メモリへのデータ転送
- GPU での散乱積分の計算 (行列乗算)
- GPU メモリ からホストメモリへの結果の転送
- CPU での差分の計算および Gauss-Seidel 法の値の更新
- ノード間での MPI によるデータ交換

の 5 つのステージで構成される。GPU として NVIDIA 社のデバイスおよび cuBLAS をもちいると、行列乗算命令の `cublasDgemm()` が非同期 API であるため、これら 5 つの処理を CPU の 4 つのコアと 1 つの GPU で並列に実行可能である。そこで各ノード上で OpenMP で 4 つのスレッドを生成し、ソフトウェア・パイプラインでこれらのステージを同時に実行した。さらに差分の計算に Intel 社の AVX2 (Advanced Vector eXtensions 2) をもちいて高速化を図った。

6 応用例

以上の手法をもちい、図 7 に示す MR 画像を領域 Ω として [7] で報告された生体光学特性値を利用する数値計算をおこなった。MR 画像は $181 \times 217 \times 181$ 個の 1mm 立方のボクセルからなり、頭部に含まれる空間方向の格子点数は約 406 万個であった。

従来法 [11] と提案法の計算時間の比較と計算環境を表 2 に示す。従来法では散乱積分の離散化に台形則をもちいて CPU のみで計算をおこなっており、角度方向の刻み幅を 3 [deg] とした場合、

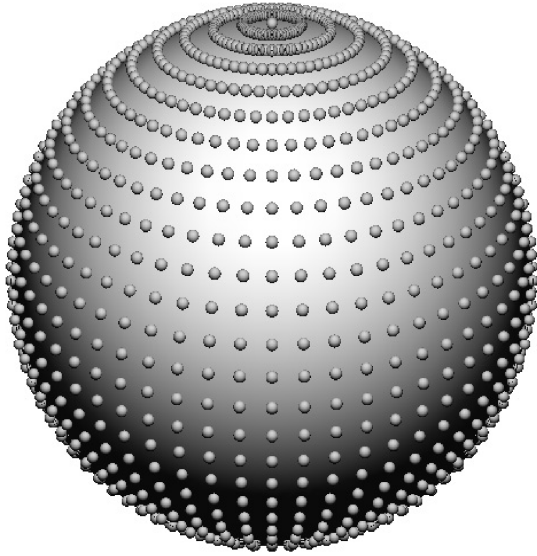


図 5: 台形則の標本点 ($\Delta\theta = 6[\text{deg}]$), 標本点数は 1742

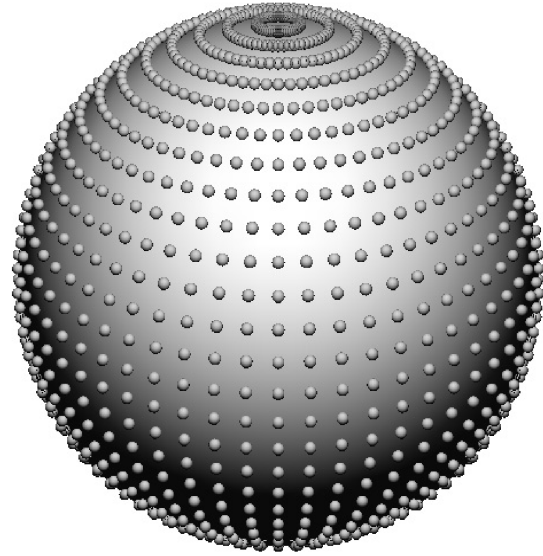


図 6: 緯度方向に 30 点の Gauss-Legendre 則, 経度方向に台形則の場合の標本点, 点数は 1800

未知数は約 287 億個 (倍精度で約 214GB) で Opteron6238 で 1024 プロセスでの計算に約 87 時間を要した [11]. この計算環境で GPU をもちいず, 提案する積分則 RIQS20 で $N = 75$ とすると, 未知数は約 79.2 億個 (倍精度で約 58GB) で計算時間は約 6.3 時間となり, 13.7 倍の大幅な高速化を達成した. さらに GPU をもちいて PC 4 台で計算したところ, 計算時間は約 13.8 時間となり, 提案法による大幅な計算資源の削減が達成された.

Appendix 正 20 面体回転群の表現

図 1 の正 20 面体の頂点を不変とする正 20 面体回転群 G の元を共役類ごとに表 3-7 に列挙する. 表中, 左列から G の元, その元による (x, y, z) の像, 命題 6 でもちいた g^\dagger, g^* の元を示す. また

$$\beta = \frac{1 + \sqrt{5}}{4}, \quad \gamma = \frac{1 - \sqrt{5}}{4}$$

である. 類 $12C_5$ の元 $C_{5,i}^\pm$ は頂点 i と正 20 面体の中心 O を通る直線を回転軸とする $\pm 2\pi/5$ の回転であり, 各元の位数は定理 5 の $q_1 = 5$ に対応する. 類 $12C_5^2$ では同様に $\pm 4\pi/5$ 回転することを意味する. 類 $20C_3$ の元 $C_{3,x}^\pm$ は, 面 x の中心と O を通る直線を回転軸として $\pm 2\pi/3$ 回転するもので元の位数は $q_2 = 3$ に対応する. また, 類 $15C_2$ の元 $C_{2,ij}$ は頂点 i, j を結ぶ辺の midpoint と O を通る直線を回転軸として π だけ回転する作用で, 位数は $q_3 = 2$ に対応する.

謝辞 球面上の積分則に関する重要な文献を, 坂上貴之教授 (京都大学), 三井斌友教授 (名古屋大学・名誉教授), 杉原正顯教授 (青山学院大学) からご教授いただきました. また研究遂行にあたり, 日本学術振興会科学研究費 (C) 26400198, (B) 25287028 の助成を頂きました.

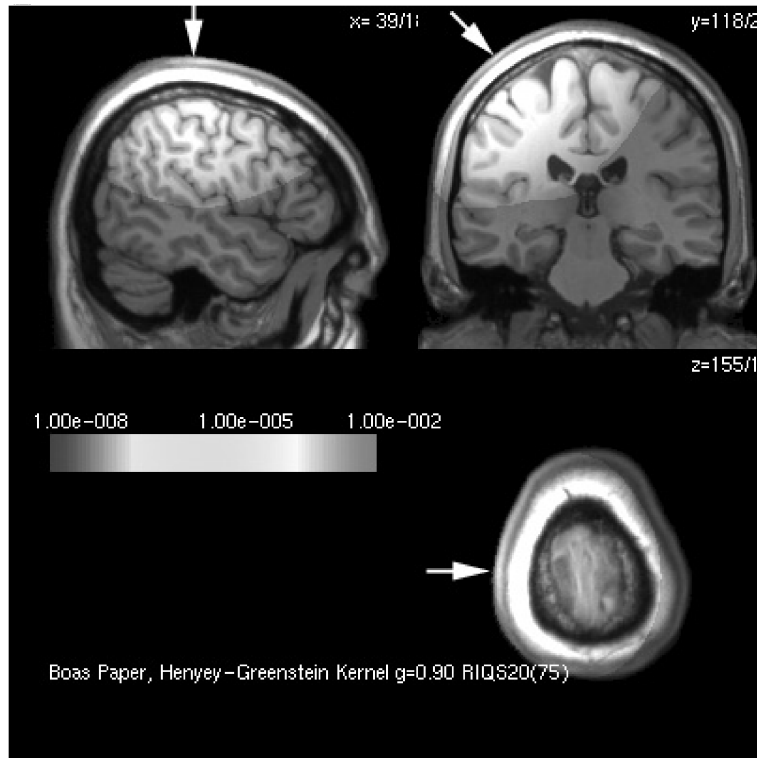


図 7: もちいた MRI と計算結果

参考文献

- [1] S. R. Arridge, *Optical Tomography in Medical Imaging*, Inverse Problems, **15** (1999), R41–R93.
- [2] C. Ahrens and G. Beylkin, *Rotationally Invariant Quadratures for the Sphere*, Proc. Roy. Soc. A **465** (2009) pp. 3103–3125.
- [3] C. Ahrens, *Highly Efficient, Exact Quadratures for Three-Dimensional Discrete Ordinates Transport Calculations*, Nuclear Science and Engineering, **170** (2012) pp. 98–101.
- [4] K. Atkinson and W. Han, *Spherical Harmonics and Approximations on the Unit Sphere: An Introduction*, Lecture Notes in Mathematics 2044, Springer (2010).
- [5] 坂内英一, 坂内悦子, 球面上の代数的組み合わせ理論, シュプリンガー・フェアラーク東京 (1999)
- [6] 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.
- [7] 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.

表 2: 計算時間の比較と計算環境

離散化	従来法 [11]	提案法 (75 次の RIQS20)	
未知数	287 億個	79.2 億個	
倍精度での容量	214GB	58 GB	
S^2 上の分点	7082	1932	
計算時間	87 時間	6.3 時間	13.8 時間
CPU	Opteron6238 (2.5GHz)		Core i7-4770 (3.4GHz)
GPU			GTX TITAN (GK110)
並列化	MPI 1024 プロセス		MPI 4 プロセスおよび OpenMP 4 スレッド
ノード数	32		4
主メモリ	2GB / 1 プロセス		32GB / 1 ノード
Network	InfiniBand		オンボード GbE I217-V

- [8] R. Cools, *Constructing Cubature Formulae: the Science behind the Art*, Acta Numer. **6** (1997), pp. 1–54.
- [9] R. Cools, I. P. Mysovskikh, and H. J. Schmid, *Cubature Formulae and Orthogonal Polynomials*, J. Comput. Appl. Math. **127** (2001), pp. 121–152.
- [10] 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.
- [11] 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.
- [12] H. Fujiwara, <http://www-an.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~fujiwara/riqs20>
- [13] 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.
- [14] A. McLaren, *Optimal Integration on a Sphere*, Math. Comput. **17** (1963) pp. 361–383.
- [15] S. L. Sobolev, *Cubature Formulas on the Sphere Invariant under Finite Groups of Rotations*, Sov. Math. **3** (1962), pp. 1307–1310.
- [16] S. L. Sobolev, *Cubature Formulas and Modern Analysis*, Gordon and Breach Science Publishers (1992).
- [17] S. L. Sobolev and V. L. Vaskevich, *The Theory of Cubature Formulas*, Kluwer Academic Publishers, 1997.

表 3: Icosahedral Group, Trivial Class, $\chi = 3$

g	image (x', y', z')	$(x', -y', -z')$	$(-x', -y', z')$
Identity	(x, y, z)	$C_{2,23}$	$C_{2,59}$

表 4: Icosahedral Group, Class $12C_5$, $\chi = (1 + \sqrt{5})/2$

g	image $(x', y', z') = g(x, y, z)$	$(x', -y', -z')$	$(-x', -y', z')$
$C_{5,1}^+$	$(\frac{1}{2}x - \gamma y + \beta z, -\gamma x + \beta y - \frac{1}{2}z, -\beta x + \frac{1}{2}y - \gamma z)$	$C_{5,2}^{2-}$	$C_{2,37}$
$C_{5,1}^-$	$(\frac{1}{2}x - \gamma y - \beta z, -\gamma x + \beta y + \frac{1}{2}z, \beta x - \frac{1}{2}y - \gamma z)$	$C_{5,3}^{2+}$	$C_{2,29}$
$C_{5,2}^+$	$(\beta x - \frac{1}{2}y - \gamma z, \frac{1}{2}x - \gamma y - \beta z, -\gamma x + \beta y + \frac{1}{2}z)$	$C_{3,c}^-$	$C_{5,5}^{2-}$
$C_{5,2}^-$	$(\beta x + \frac{1}{2}y - \gamma z, -\frac{1}{2}x - \gamma y + \beta z, -\gamma x - \beta y + \frac{1}{2}z)$	$C_{3,a}^+$	$C_{5,4}^{2-}$
$C_{5,3}^+$	$(\beta x + \frac{1}{2}y + \gamma z, -\frac{1}{2}x - \gamma y - \beta z, \gamma x + \beta y + \frac{1}{2}z)$	$C_{3,a}^-$	$C_{5,5}^{2+}$
$C_{5,3}^-$	$(\beta x - \frac{1}{2}y + \gamma z, \frac{1}{2}x - \gamma y + \beta z, \gamma x - \beta y + \frac{1}{2}z)$	$C_{3,c}^+$	$C_{5,4}^{2+}$
$C_{5,4}^+$	$(-\gamma x + \beta y + \frac{1}{2}z, -\beta x + \frac{1}{2}y + \gamma z, -\frac{1}{2}x + \gamma y + \beta z)$	$C_{2,12}$	$C_{3,j}^-$
$C_{5,4}^-$	$(-\gamma x - \beta y - \frac{1}{2}z, \beta x + \frac{1}{2}y + \gamma z, \frac{1}{2}x + \gamma y + \beta z)$	$C_{2,36}$	$C_{3,g}^-$
$C_{5,5}^+$	$(-\gamma x - \beta y + \frac{1}{2}z, \beta x + \frac{1}{2}y - \gamma z, -\frac{1}{2}x - \gamma y + \beta z)$	$C_{2,26}$	$C_{3,j}^+$
$C_{5,5}^-$	$(-\gamma x + \beta y - \frac{1}{2}z, -\beta x + \frac{1}{2}y - \gamma z, \frac{1}{2}x - \gamma y + \beta z)$	$C_{2,13}$	$C_{3,g}^+$
$C_{5,6}^+$	$(\frac{1}{2}x + \gamma y - \beta z, \gamma x + \beta y - \frac{1}{2}z, \beta x + \frac{1}{2}y - \gamma z)$	$C_{5,3}^{2-}$	$C_{2,25}$
$C_{5,6}^-$	$(\frac{1}{2}x + \gamma y + \beta z, \gamma x + \beta y + \frac{1}{2}z, -\beta x - \frac{1}{2}y - \gamma z)$	$C_{5,2}^{2+}$	$C_{2,34}$

表 5: Icosahedral Group, Class $12C_5^2$, $\chi = (1 - \sqrt{5})/2$

g	image (x', y', z')	$(x', -y', -z')$	$(-x', -y', z')$
$C_{5,1}^{2+}$	$(\gamma x + \beta y + \frac{1}{2}z, \beta x + \frac{1}{2}y + \gamma z, -\frac{1}{2}x - \gamma y - \beta z)$	$C_{3,g}^-$	$C_{2,36}$
$C_{5,1}^{2-}$	$(\gamma x + \beta y - \frac{1}{2}z, \beta x + \frac{1}{2}y - \gamma z, \frac{1}{2}x + \gamma y - \beta z)$	$C_{3,j}^+$	$C_{2,26}$
$C_{5,2}^{2+}$	$(\frac{1}{2}x + \gamma y + \beta z, -\gamma x - \beta y - \frac{1}{2}z, \beta x + \frac{1}{2}y + \gamma z)$	$C_{5,6}^-$	$C_{3,f}^-$
$C_{5,2}^{2-}$	$(\frac{1}{2}x - \gamma y + \beta z, \gamma x - \beta y + \frac{1}{2}z, \beta x - \frac{1}{2}y + \gamma z)$	$C_{5,1}^+$	$C_{3,e}^-$
$C_{5,3}^{2+}$	$(\frac{1}{2}x - \gamma y - \beta z, \gamma x - \beta y - \frac{1}{2}z, -\beta x + \frac{1}{2}y + \gamma z)$	$C_{5,1}^-$	$C_{3,f}^+$
$C_{5,3}^{2-}$	$(\frac{1}{2}x + \gamma y - \beta z, -\gamma x - \beta y + \frac{1}{2}z, -\beta x - \frac{1}{2}y + \gamma z)$	$C_{5,6}^+$	$C_{3,e}^+$
$C_{5,4}^{2+}$	$(-\beta x + \frac{1}{2}y - \gamma z, -\frac{1}{2}x + \gamma y - \beta z, \gamma x - \beta y + \frac{1}{2}z)$	$C_{2,15}$	$C_{5,3}^-$
$C_{5,4}^{2-}$	$(-\beta x - \frac{1}{2}y + \gamma z, \frac{1}{2}x + \gamma y - \beta z, -\gamma x - \beta y + \frac{1}{2}z)$	$C_{2,67}$	$C_{5,2}^-$
$C_{5,5}^{2+}$	$(-\beta x - \frac{1}{2}y - \gamma z, \frac{1}{2}x + \gamma y + \beta z, \gamma x + \beta y + \frac{1}{2}z)$	$C_{2,69}$	$C_{5,3}^+$
$C_{5,5}^{2-}$	$(-\beta x + \frac{1}{2}y + \gamma z, -\frac{1}{2}x + \gamma y + \beta z, -\gamma x + \beta y + \frac{1}{2}z)$	$C_{2,14}$	$C_{5,2}^+$
$C_{5,6}^{2+}$	$(\gamma x - \beta y - \frac{1}{2}z, -\beta x + \frac{1}{2}y + \gamma z, \frac{1}{2}x - \gamma y - \beta z)$	$C_{3,j}^-$	$C_{2,12}$
$C_{5,6}^{2-}$	$(\gamma x - \beta y + \frac{1}{2}z, -\beta x + \frac{1}{2}y - \gamma z, -\frac{1}{2}x + \gamma y - \beta z)$	$C_{3,g}^+$	$C_{2,13}$

表 6: Icosahedral Group, Class $20C_3$, $\chi = 0$

g	image (x', y', z')	$(x', -y', -z')$	$(-x', -y', z')$
$C_{3,a}^+$	$(\beta x + \frac{1}{2}y - \gamma z, \frac{1}{2}x + \gamma y - \beta z, \gamma x + \beta y - \frac{1}{2}z)$	$C_{5,2}^-$	$C_{2,67}$
$C_{3,a}^-$	$(\beta x + \frac{1}{2}y + \gamma z, \frac{1}{2}x + \gamma y + \beta z, -\gamma x - \beta y - \frac{1}{2}z)$	$C_{5,3}^+$	$C_{2,69}$
$C_{3,b}^+$	(z, x, y)	$C_{3,h}^-$	$C_{3,i}^+$
$C_{3,b}^-$	(y, z, x)	$C_{3,d}^+$	$C_{3,h}^+$
$C_{3,c}^+$	$(\beta x - \frac{1}{2}y + \gamma z, -\frac{1}{2}x + \gamma y - \beta z, -\gamma x + \beta y - \frac{1}{2}z)$	$C_{5,3}^-$	$C_{2,15}$
$C_{3,c}^-$	$(\beta x - \frac{1}{2}y - \gamma z, -\frac{1}{2}x + \gamma y + \beta z, \gamma x - \beta y - \frac{1}{2}z)$	$C_{5,2}^+$	$C_{2,14}$
$C_{3,d}^+$	$(y, -z, -x)$	$C_{3,b}^-$	$C_{3,i}^-$
$C_{3,d}^-$	$(-z, x, -y)$	$C_{3,i}^+$	$C_{3,h}^-$
$C_{3,e}^+$	$(-\frac{1}{2}x - \gamma y + \beta z, \gamma x + \beta y - \frac{1}{2}z, -\beta x - \frac{1}{2}y + \gamma z)$	$C_{2,25}$	$C_{5,3}^{2-}$
$C_{3,e}^-$	$(-\frac{1}{2}x + \gamma y - \beta z, -\gamma x + \beta y - \frac{1}{2}z, \beta x - \frac{1}{2}y + \gamma z)$	$C_{2,37}$	$C_{5,2}^{2-}$
$C_{3,f}^+$	$(-\frac{1}{2}x + \gamma y + \beta z, -\gamma x + \beta y + \frac{1}{2}z, -\beta x + \frac{1}{2}y + \gamma z)$	$C_{2,29}$	$C_{5,3}^{2+}$
$C_{3,f}^-$	$(-\frac{1}{2}x - \gamma y - \beta z, \gamma x + \beta y + \frac{1}{2}z, \beta x + \frac{1}{2}y + \gamma z)$	$C_{2,34}$	$C_{5,2}^{2+}$
$C_{3,g}^+$	$(\gamma x - \beta y + \frac{1}{2}z, \beta x - \frac{1}{2}y + \gamma z, \frac{1}{2}x - \gamma y + \beta z)$	$C_{5,6}^{2-}$	$C_{5,5}^-$
$C_{3,g}^-$	$(\gamma x + \beta y + \frac{1}{2}z, -\beta x - \frac{1}{2}y - \gamma z, \frac{1}{2}x + \gamma y + \beta z)$	$C_{5,1}^{2+}$	$C_{5,4}^-$
$C_{3,h}^+$	$(-y, -z, x)$	$C_{3,i}^-$	$C_{3,b}^-$
$C_{3,h}^-$	$(z, -x, -y)$	$C_{3,b}^+$	$C_{3,d}^-$
$C_{3,i}^+$	$(-z, -x, y)$	$C_{3,d}^-$	$C_{3,b}^+$
$C_{3,i}^-$	$(-y, z, -x)$	$C_{3,h}^+$	$C_{3,d}^+$
$C_{3,j}^+$	$(\gamma x + \beta y - \frac{1}{2}z, -\beta x - \frac{1}{2}y + \gamma z, -\frac{1}{2}x - \gamma y + \beta z)$	$C_{5,1}^{2-}$	$C_{5,5}^+$
$C_{3,j}^-$	$(\gamma x - \beta y - \frac{1}{2}z, \beta x - \frac{1}{2}y - \gamma z, -\frac{1}{2}x + \gamma y + \beta z)$	$C_{5,6}^{2+}$	$C_{5,4}^+$

表 7: Icosahedral Group, Class $15C_2$, $\chi = -1$

g	image (x', y', z')	$(x', -y', -z')$	$(-x', -y', z')$
$C_{2,12}$	$(-\gamma x + \beta y + \frac{1}{2}z, \beta x - \frac{1}{2}y - \gamma z, \frac{1}{2}x - \gamma y - \beta z)$	$C_{5,4}^+$	$C_{5,6}^{2+}$
$C_{2,13}$	$(-\gamma x + \beta y - \frac{1}{2}z, \beta x - \frac{1}{2}y + \gamma z, -\frac{1}{2}x + \gamma y - \beta z)$	$C_{5,5}^-$	$C_{5,6}^{2-}$
$C_{2,14}$	$(-\beta x + \frac{1}{2}y + \gamma z, \frac{1}{2}x - \gamma y - \beta z, \gamma x - \beta y - \frac{1}{2}z)$	$C_{5,5}^{2-}$	$C_{3,c}^-$
$C_{2,15}$	$(-\beta x + \frac{1}{2}y - \gamma z, \frac{1}{2}x - \gamma y + \beta z, -\gamma x + \beta y - \frac{1}{2}z)$	$C_{5,4}^{2+}$	$C_{3,c}^+$
$C_{2,18}$	$(-x, y, -z)$	$C_{2,59}$	$C_{2,23}$
$C_{2,23}$	$(x, -y, -z)$	Identity	$C_{2,18}$
$C_{2,25}$	$(-\frac{1}{2}x - \gamma y + \beta z, -\gamma x - \beta y + \frac{1}{2}z, \beta x + \frac{1}{2}y - \gamma z)$	$C_{3,e}^+$	$C_{5,6}^+$
$C_{2,26}$	$(-\gamma x - \beta y + \frac{1}{2}z, -\beta x - \frac{1}{2}y + \gamma z, \frac{1}{2}x + \gamma y - \beta z)$	$C_{5,5}^+$	$C_{5,1}^{2-}$
$C_{2,29}$	$(-\frac{1}{2}x + \gamma y + \beta z, \gamma x - \beta y - \frac{1}{2}z, \beta x - \frac{1}{2}y - \gamma z)$	$C_{3,f}^+$	$C_{5,1}^-$
$C_{2,34}$	$(-\frac{1}{2}x - \gamma y - \beta z, -\gamma x - \beta y - \frac{1}{2}z, -\beta x - \frac{1}{2}y - \gamma z)$	$C_{3,f}^-$	$C_{5,6}^-$
$C_{2,36}$	$(-\gamma x - \beta y - \frac{1}{2}z, -\beta x - \frac{1}{2}y - \gamma z, -\frac{1}{2}x - \gamma y - \beta z)$	$C_{5,4}^-$	$C_{5,1}^{2+}$
$C_{2,37}$	$(-\frac{1}{2}x + \gamma y - \beta z, \gamma x - \beta y + \frac{1}{2}z, -\beta x + \frac{1}{2}y - \gamma z)$	$C_{3,e}^-$	$C_{5,1}^+$
$C_{2,59}$	$(-x, -y, z)$	$C_{2,18}$	Identity
$C_{2,67}$	$(-\beta x - \frac{1}{2}y + \gamma z, -\frac{1}{2}x - \gamma y + \beta z, \gamma x + \beta y - \frac{1}{2}z)$	$C_{5,4}^{2-}$	$C_{3,a}^+$
$C_{2,69}$	$(-\beta x - \frac{1}{2}y - \gamma z, -\frac{1}{2}x - \gamma y - \beta z, -\gamma x - \beta y - \frac{1}{2}z)$	$C_{5,5}^{2+}$	$C_{3,a}^-$