

修士論文

反射屈折を考慮した光輸送計算に対する
中性子輸送計算手法の応用

名古屋大学大学院
工学研究科博士前期課程
総合エネルギー工学専攻
山本章夫研究室
天野虎之介
令和5年2月

反射屈折現象を考慮した光輸送計算に対する中性子輸送計算手法の応用 23

原子核エネルギー制御工学グループ 山本章夫研究室 天野虎之介

1. 緒言 医用工学分野において、近赤外線を用いた生体イメージング技術の一種である拡散光トモグラフィの実用化が待ち望まれている。光輸送と中性子輸送の支配方程式が類似していることから、中性子輸送計算手法を応用した効率的な光輸送計算を行うことで、拡散光トモグラフィの開発に貢献できる可能性がある。ただし、光輸送計算では、屈折率の異なる物質境界面における光の反射屈折現象を考慮する必要がある。そこで本研究では、①反射屈折現象を考慮した厳密な光輸送計算コードの開発、②拡散加速法を用いた光輸送計算の高速化について検討を実施した。さらに、高速な光輸送計算を実施するための近似解法として、③反射屈折現象を考慮した拡散計算による光輸送計算の効率化について検討を実施した。本予稿では、③について、異なった物質間の反射屈折現象を実効的な光反射率で考慮する光拡散計算コードの計算結果を示す。なお、本計算で使用した実効的な光反射率については、フレネルの法則を用いて全光子束と正味光子流から計算するアルゴリズムを新たに開発した。

2. 計算条件 自作拡散計算コードの妥当性を確認するために、光輸送分野で使用されているモンテカルロ光輸送計算コード MCML の計算結果を参照解として検証作業を実施した。生体内光輸送計算において、隣接する屈折率の差が最大となるのは、生体組織と空気領域の境界面である。そこで、光源領域、空気領域、生体組織を模擬した3領域の計算体系を図1のように設定した。両端は真空境界条件、各領域の光学特性値は、光源領域及び生体組織領域で散乱係数 90 [1/cm]、吸収係数 0.15 [1/cm]、屈折率 1.4、空気領域で散乱係数 0.0001 [1/cm]、吸収係数 0.0001 [1/cm]、屈折率 1.0 とした [1]。自作拡散計算コードの条件は、空間メッシュ分割数 300 とした。また、光拡散計算で求めた全光子束と正味光子流に基づいて光反射率を推定し、解が収束するまで反復計算を行うことで実効的な光反射率を求めた。自作拡散計算コードに実装した反射屈折処理の精度を確かめるために、①反射屈折を考慮しない条件、②反射屈折を考慮する条件でそれぞれ計算を行った。MCML の計算条件は、空間メッシュ分割数 300、ヒストリー数 100 億とした。

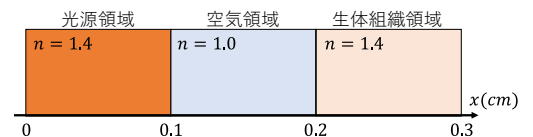


図1 検証体系

3. 計算結果 自作拡散計算コードを用いて各条件で計算された結果と MCML による参照解を図2に示す。反射屈折を考慮しない条件では、物質境界面における光子束が連続であるのに対し、反射屈折を考慮する条件と参照解は、反射屈折によって、物質境界面における光子束が不連続となる様子が確認できる。参照解に対する自作拡散計算コードの相対誤差分布を図3に示す。反射屈折を考慮しない条件では、空気領域(0.1 ≤ x ≤ 0.2 [cm])で約 65%、外部境界面で約 -65%の相対誤差が観察され、平均二乗誤差は約 44%となった。対して、反射屈折を考慮する条件では、空気領域で約 4.5%、外部境界面付近で約 9.5%の誤差が生じているものの、平均二乗誤差は約 1.8%にとどまっている。以上の結果から、①拡散計算において異なる物質間の反射屈折を考慮することが精度の観点から重要、②反射屈折を考慮した自作拡散計算コードを用いて現実的な精度で計算を実施可能、との知見を得た。

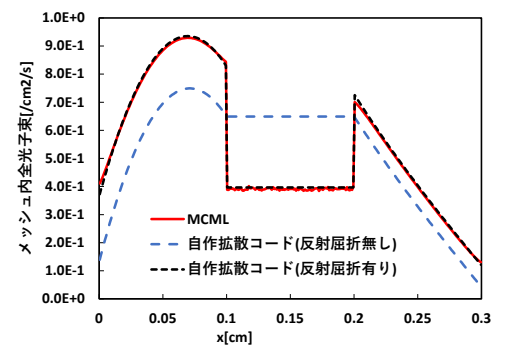


図2 全光子束の空間分布

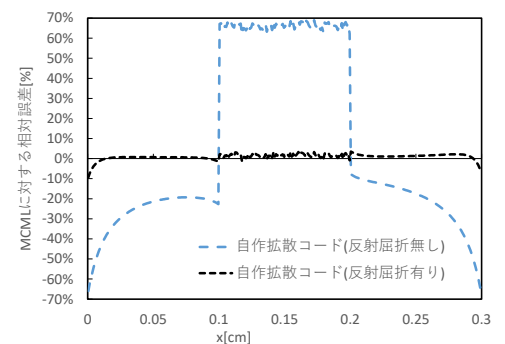


図3 参照解との相対誤差分布

参考文献：[1] H. Fujii et al., Int. J. Numer. Meth. Biomed. Eng., 33(5), e2826 (2017).

口頭発表

[1] 天野虎之介, 遠藤知弘, 山本章夫, 日本原子力学会 2022 年秋の大会, 1G12, 9月7日-9日 (2022).

目次

第1章	序論	5
1.1	背景	5
1.1.1	拡散光トモグラフィの概要	5
1.1.2	拡散光トモグラフィ実現への課題	7
1.1.3	中性子輸送計算手法の光輸送解析への適用	7
1.2	本研究の目的	8
1.3	本論文の構成	8
1.4	参考文献	9
第2章	光輸送計算における中性子輸送計算手法	11
2.1	本章の概要	11
2.2	中性子輸送計算手法の光輸送計算への適用	12
2.2.1	中性子輸送方程式	12
2.2.2	光輸送方程式	13
2.2.3	光輸送を模擬した中性子輸送方程式	14
2.3	中性子輸送計算手法	17
2.3.1	Method of Characteristics(MOC)法	17
2.3.2	角度方向の取り扱い	21
2.4	拡散加速法	25
2.4.1	拡散加速法の概要	25
2.4.2	拡散加速法の計算理論	26
2.5	本章のまとめ	31
2.6	参考文献	32
第3章	反射屈折を考慮した MOC に基づく光輸送計算コードの開発および検証	34
3.1	本章の概要	34
3.2	輸送計算における反射屈折現象	35
3.2.1	反射屈折現象	35
3.2.2	反射境界条件	35
3.2.3	屈折境界条件	39
3.3	反射屈折を考慮した MOC 光輸送計算コードの開発	43
3.3.1	MOC への反射屈折境界条件の実装	43
3.3.2	反射屈折境界条件の実装による従来 MOC との差異	51
3.3.3	全体の計算フロー	54
3.3.4	計算フローの詳細	55

3.4	自作輸送計算コードを用いた検討.....	57
3.4.1	計算体系・計算条件.....	57
3.4.2	参照解の計算方法.....	60
3.4.3	自作輸送計算コードの妥当性に関する検証.....	61
3.4.4	反射屈折現象を考慮する必要性に関する検証.....	62
3.5	本章のまとめ.....	64
3.6	参考文献.....	65
第4章	拡散加速法による反射屈折を考慮した光輸送解析の高速化.....	67
4.1	本章の概要.....	67
4.2	反射屈折を考慮した光輸送計算における拡散加速法.....	68
4.2.1	計算理論.....	68
4.2.2	計算フローと詳細設計.....	71
4.3	拡散加速法の光輸送計算への適用性に関する検討.....	74
4.3.1	反射屈折現象の生じない条件における検討.....	74
4.3.2	反射屈折現象の生じる条件における検討.....	78
4.3.3	拡散加速法の加速性能に関する検討.....	82
4.4	本章のまとめ.....	92
4.5	参考文献.....	93
第5章	反射屈折を考慮した拡散計算による光輸送計算の効率化.....	95
5.1	本章の概要.....	95
5.2	反射屈折を考慮した拡散計算.....	96
5.2.1	反射屈折を考慮した拡散計算の概要.....	96
5.2.2	反射屈折を考慮した拡散計算の理論.....	98
5.2.3	計算フローと詳細設計.....	107
5.3	反射屈折を考慮した拡散計算の妥当性に関する検討.....	108
5.3.1	反射屈折現象の生じない条件における検討.....	108
5.3.2	反射屈折現象の生じる条件における検討.....	111
5.3.3	反射屈折現象を考慮する必要性に関する検証.....	117
5.4	本章のまとめ.....	119
5.5	参考文献.....	120
第6章	結論.....	121
6.1	本論文のまとめ.....	121
6.2	今後の検討内容.....	123

第1章 序論

1.1 背景

1.1.1 拡散光トモグラフィの概要

医学工学分野では、X線CT(computed tomography)や核磁気共鳴画像法(magnetic resonance imaging, MRI)といった生体イメージング技術が日常的に診察に用いられており、現在の医療において非常に重要な役割を果たしている[1]。生体イメージング技術はその手法ごとに特徴を有する。X線CTは比較的検査時間が短いことに加え1mm以下の細かい病変を映し出すことが可能であるが、X線による被曝は避けられず、X線CT検査を受けることによる健康上のリスクが発生する[2]。また測定部位によっては造影剤の投与が必要であり、妊婦や新生児、アレルギーを持つ患者は検査を受けられない場合がある。MRIは磁場中に存在する生体に電磁波を照射して水素原子を磁気共鳴(励起)させ、緩和状態に戻るまでの速度差を白黒の濃淡差で描画している。MRIは組織分解能が高いため病変と正常組織の濃淡差が分かりやすいが、検査時間が長い。また体内金属がある場合は検査が行えない場合がある。このように、すべての患者・病変に対して有効な生体イメージング手法は存在せず、未だ改善の余地があり、新手法の開発も待ち望まれている。本研究では、現在開発中である新たな生体イメージング技術のうち、拡散光トモグラフィ(diffuse optical tomography, DOT)[3]に注目した。

DOTは近赤外線(波長領域：700 nm~2500 nm)を用いた生体イメージング技術であり、根本的な原理はX線CT等と似ている。生体内に入射した光は組織によって吸収または散乱されるが、生体組織ごとに近赤外線に対する吸収のしやすさ(吸収係数 μ_a)、散乱のしやすさ(散乱係数 μ_s)は異なる。この差異を利用し、 μ_a, μ_s の空間分布を特定することで生体断層像を描画する。DOTの利点として、光を用いているために患者の身体的及び精神的な負担が小さいこと、装置が比較的小型であること、従来手法では計測が困難な対象に有効なことなどが挙げられる。また酸素化状態のヘモグロビンと非酸素化状態のヘモグロビンは近赤外線に対する吸収係数が異なるため、それぞれ個別に検出することが可能である。

測定結果から画像を作成するために、X線CTやDOTでは、輸送モデルを用いた逆問題解析を行っている。以下、DOTを例に逆問題解析の手順を説明する。Fig. 1.1にDOTのフローチャートを示す。まず生体表面のある点から入射させた光を別の生体表面点から実際に計測する。入射点や検出点を変えながら測定を繰り返し、生体表面での光強度分布を得る。一方で生体内の光学特性値分布 μ_a, μ_s を仮定した状態で順問題解析を行い、各生体表面点での光強度分布を推定する。実際に測定した光強度分布と順問題解析による光強度分布を比較し、一致すれば仮定した光学特性値分布 μ_a, μ_s が正しい解として求まり、生体断層像が得られる。一致しない場合は検出した光強度分布と順問題解析による光強度分布の誤差に基づいて光学特性値 μ_a, μ_s を再仮定し、順問題解析を行う。このプロセスを繰り返し、誤差が許容値を下回れば、そのときの光学特性値 μ_a, μ_s が正しい解として求まり、Fig. 1.2のような

生体断層像を作成することができる。

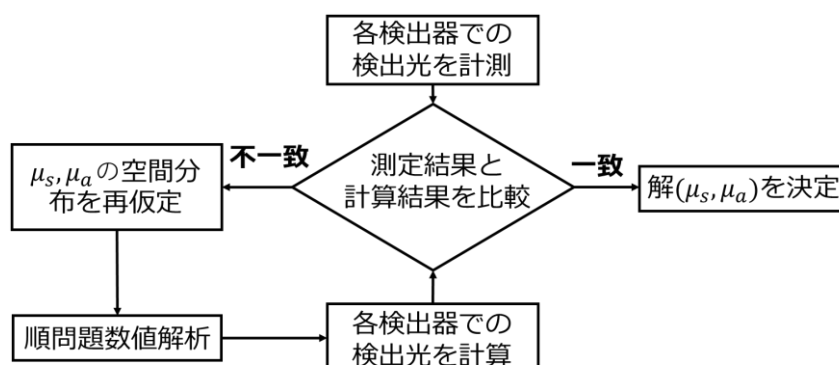


Fig 1.1 DOT のフローチャート

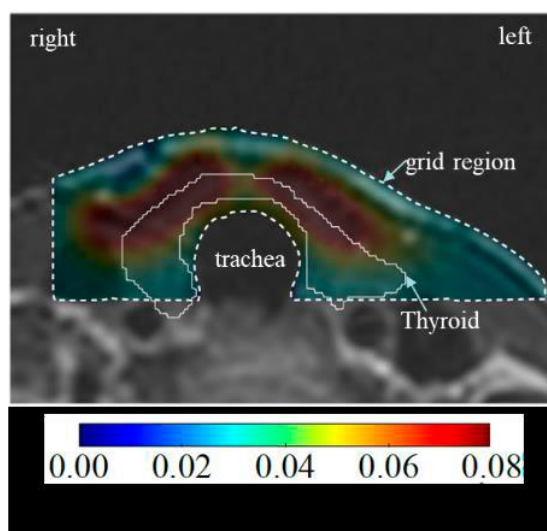


Fig 1.2 甲状腺の拡散光トモグラフィ画像[4]

ここで、X線は生体組織を直進するため、検出されたX線の経路を容易に特定することができる。対して、近赤外線は生体組織に吸収されやすく、散乱されやすい性質を有しているため、生体に入射した近赤外線は、散乱を繰り返しながら(多重散乱)生体深部を透過し、表面の多くの点から検出される。したがって、多重散乱した光に対して、X線CTの画像作成アルゴリズムを用いて画像を描画しても、診察に利用可能なレベルの解像度は得られない。このような散乱光を用いて高解像度な生体断層を描画するために、DOTでは複雑な光輸送モデルを用いた逆問題解析を行っている。

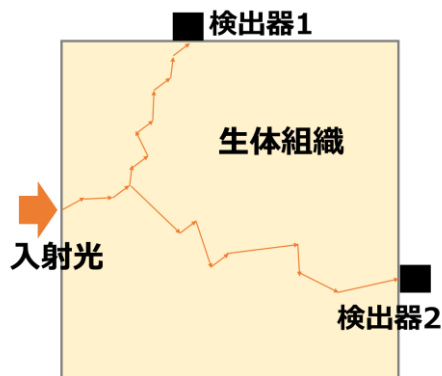


Fig 1.3 生体内を伝搬する光

1.1.2 拡散光トモグラフィ実現への課題

DOT 実用化への課題は、光ファイバー検出器の精度向上及び設置位置の最適化、計測技術の進歩による計測時間の短縮、逆問題解析アルゴリズムの改良、順問題解析アルゴリズムの改良、解剖学的情報の不足など数多く存在する[5]-[10]。

中でも問題視されているのは順問題解析アルゴリズムの改良である。前節で述べたとおり、DOT で生体断層像を得るためには多数回の順問題解析を行う必要がある。そのため、生体断層像が得られるまでの所要時間は順問題解析の所要時間に大きく依存している。ここで順問題解析に使用する光輸送モデルとして、式(1.1)に示す輻射輸送方程式(radiative transfer equation, RTE)が広く使用される。

$$[\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla + \mu_a(\boldsymbol{r}) + \mu_s(\boldsymbol{r})]I(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \mu_s(\boldsymbol{r}) \int_{4\pi} d\boldsymbol{\Omega}' p(\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{\Omega}') I(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\Omega}') + q(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\Omega}) \quad (1.1)$$

RTE については 2.2 節で詳しく述べるが、微分と積分を含む多変数方程式であり、複雑であるため単純な条件を除いては解析解を求めることは出来ない。そこで数値解を得るための様々なアルゴリズムが開発、改良され続けている[11]。

しかし、実際のヒト組織に則して計算を行う場合、その体系サイズは、頸部では 1 辺が 10~20cm の 2 次元体系[7]、頭部では 1 辺が 10~20cm の 3 次元体系[8]となる。このサイズにおける十分な精度の計算を現実的な計算時間及び計算容量で実行できるまでには至っておらず、アルゴリズムの更なる改良や新たな観点からのアプローチが求められている。

1.1.3 中性子輸送計算手法の光輸送解析への適用

光輸送計算では、式(1.1)の RTE を解いていることを述べた。一方、原子力分野では、RTE と同種である中性子輸送方程式を扱っている。原子炉を設計する際には中性子の挙動を記述した中性子輸送方程式を解き、炉内の中性子束分布や実効増倍率を予め求める必要がある。これらの値は原子炉を設計し、運転するうえで重要であるため、中性子輸送方程式の効率的な数値計算に関する研究が盛んにおこなわれてきた。その中には医用光学分野におけ

る光輸送計算手法とは異なるアプローチに基づくものが存在する。そのため、中性子輸送計算手法を用いることで、RTE を高速かつ高精度に解き、効率的な光輸送解析を行うことができるかと期待される。

卒業研究では、反射屈折の生じない均質な体系を対象とした検討を行い、中性子輸送計算手法を用いた光輸送解析が可能であること、光子束空間分布の関数展開や輸送補正近似といった中性子輸送計算手法が光輸送解析に有効に機能することを確認した[9]。

しかし、実際のヒト組織に則した計算では、非均質な体系を対象とした計算を行う必要がある。対象とする非均質体系には、頸部における気道等の屈折率の異なる物質が隣接する体系が含まれており、そのような物質境界面では反射屈折現象が生じる。光輸送計算では、反射屈折境界条件によって反射屈折効果を扱っているが、中性子輸送計算手法では、反射屈折を取り扱う方法は確立されていない。そのため、非均質体系を対象とした光輸送解析を行うためには、中性子輸送計算手法における反射屈折の取り扱い方法を新たに考案する必要がある。さらに、反射屈折を考慮した厳密な光輸送計算ができたとしても、従来原子力分野で用いられている高速化手法を適用できるかどうかは不明であるため、その点についても検討が必要である。

1.2 本研究の目的

本研究の最終的な目標は、中性子輸送計算手法を適用することで、非均質な3次元体系における RTE を高速かつ高精度に解き、拡散光トモグラフィの開発に貢献することである。この最終目標に向けて、①反射屈折を考慮した厳密な光輸送計算コードの開発、②中性子輸送計算手法を用いた厳密な光輸送計算の高速化に関する検討を実施した。さらに、高速な光輸送計算を実現するための近似解法として、③反射屈折を考慮した拡散計算による光輸送計算の効率化について検討を実施した。

1.3 本論文の構成

本論文は5章構成となっている。第1章では、本研究の背景と目的を述べた。

第2章では、本研究に用いる中性子輸送計算手法の計算理論をまとめる。まずは RTE と中性子輸送方程式を比較することで相違点を明確にし、本研究で解くべき方程式を示す。次に、輸送方程式を解くための手法である Method of Characteristics(MOC)法[12]、輸送計算を加速させるための手法である拡散加速法について、それぞれ説明する。

第3章では、反射屈折を考慮した厳密な光輸送計算について説明する。上述した通り、中性子輸送計算手法において、反射屈折を取り扱う方法は確立されていない。そこで、MOCにおける反射屈折の取り扱い方法を新たに考案し、反射屈折を考慮した厳密な光輸送計算コードを開発した。まずは考案した手法の理論を説明する。次に、作成した光輸送計算コードの検証作業(verification)の結果を報告する。最後に、反射屈折を考慮する必要性について議論する。

第4章では、拡散加速法による反射屈折を考慮した厳密な光輸送計算の高速化について説明する。反射屈折を考慮した厳密な光輸送計算に対して、従来原子力分野で用いられている拡散加速法を適用することはできなかった。そこで、新たな拡散加速法を考案し、自作計算コードに組み込んだ。考案した手法の計算理論を説明した後に、拡散加速法を組み込んだ自作計算コードの検証作業(verification)の結果を報告し、最後に拡散加速法の加速性能について議論する。

第5章では、反射屈折を考慮した拡散計算による光輸送計算の効率化について説明する。拡散計算において、原子力分野では反射屈折を取り扱う方法が確立されておらず、光輸送計算の分野では体系内部の境界面における反射屈折の取り扱い方法が確立されていない。そこで、体系内部における反射屈折についても考慮可能な拡散計算コードを新たに開発した。まずは考案した手法の理論を説明する。次に、作成した拡散計算コードの検証作業(verification)の結果を報告する。最後に、体系内部における反射屈折を考慮することによる計算精度の向上について議論する。

第6章では、本論文の結論と今後の課題を述べる。

1.4 参考文献

- [1] 芳賀早苗 他, “生体イメージング法による細胞・臓器のリアルタイム評価法の開発”, *Organ Biol*, DOI: <https://doi.org/10.11378/organbio.19.29>.
- [2] John D Mathews et al, “Cancer risk in 680,000 people exposed to computed tomography scans in childhood or adolescence: data linkage study of 11 million Australians”, *BMJ*, DOI: 10.1136/bmj.f2360.
- [3] 山田幸生, “拡散光トモグラフィ光 CT の研究開発”, *生体医工学*, **17**(4), pp.35-43 (2003).
- [4] 星詳子, “高速・高性能拡散光トモグラフィによる甲状腺がん診断”, *上原記念生命科学財団研究報告集*, **35**, pp.93(2021).
- [5] 大川晋平 他, “拡散光トモグラフィによる生体内の光学特性値分布の再構成”, *日本レーザー医学会誌*, **32**(4), pp.402-410 (2012).
- [6] 山田幸生, “時間分解計測法による拡散光トモグラフィ”, *日本レーザー医学会誌*, **26**(3), pp.214-221 (2005).
- [7] H. Fujii et al., “Modeling of light propagation in the human neck for diagnoses of thyroid cancers by diffuse optical tomography”, *Int J Numer Method Biomed Eng*, DOI: 10.1002/cnm.2826.
- [8] 栗原一樹, “拡散光トモグラフィによる脳機能イメージングのための頭部構造モデルの構築”, *慶応義塾大学大学院理工学研究科 学位論文* (2015).
- [9] 天野虎之介, “光輸送解析への中性子輸送計算手法の適用性に関する検討”, *名古屋大学工学部 卒業論文*(2021).

- [10] 星詳子, “拡散光トモグラフィにおける順問題と逆問題”, 第 60 回理論応用力学講演会 講演論文集, OS10-05 (2011).
- [11] 藤井宏之 他, “拡散光トモグラフィのための輻射輸送方程式及び拡散方程式を用いた光学特性値再構成アルゴリズムの開発”, 第 64 回理論応用力学講演会 講演論文集, OS05-08 (2013).
- [12] 牛尾直史, ”Characteristics 法の基礎”, 第 36 回炉物理夏期 セミナーテキスト, 日本原子力学会(2004).

第2章 光輸送計算における中性子輸送計算手法

2.1 本章の概要

本章では、中性子輸送計算手法を用いた光輸送計算の概要と、中性子輸送計算手法の計算理論について説明する。1.2節で述べた通り、生体内を伝搬する光の挙動を示した光輸送方程式と、原子力分野で扱われている中性子輸送方程式が類似していることから、中性子輸送計算手法を光輸送計算へ適用することが可能である。しかし、光輸送方程式と中性子輸送方程式は完全に同一ではないため、従来使用されてきた中性子輸送計算手法をそのまま光輸送計算へ適用することはできない。

そこで、まずは中性子輸送方程式と光輸送方程式を比較することで相違点を明確にし、両者が一致するように中性子輸送方程式を変形する。その後、変形した輸送方程式に基づき、中性子輸送計算手法を整理する。

中性子輸送方程式は複雑であり、解析解を求めることが困難であるため、本来連続である空間領域と光子の飛行方向角度を離散化することで、方程式を簡略化して近似解を求めている。中性子輸送計算手法は、長年の研究によって様々な種類の計算手法が開発されており[1]-[5]、主に中性子の飛行方向を離散化する方法によって区別される。本検討では、現時点で主流の中性子輸送計算手法として広く使用されている、Method of Characteristics(MOC)法[6]を用いる。

MOCは、反復法に基づく数値解法であり、初期推定解から、反復計算によって、真値に近い収束解を求めている。そのため、反復の収束性が悪い場合には、収束解を得るまでに膨大な反復回数が必要となり、現実的な時間内での解析が困難となる。実際に、軽水炉等の散乱が起りやすい体系を対象とした中性子輸送計算では、収束性が悪いために膨大な反復回数を要する。そこで、中性子輸送計算では、拡散加速法を用いて計算の収束性を向上させている。ここで、生体を対象とした光輸送計算においても、散乱の起りやすい体系を取り扱うため、拡散加速法が有効に機能することが期待できる。本章では、光輸送計算を模擬した中性子輸送方程式に基づき、MOCと拡散加速法の計算理論を示す。

本章の構成を以下に示す。2.2節では、2.2.1項にて中性子輸送方程式、2.2.2項にて光輸送方程式についてそれぞれ説明する。続く2.2.3項で、両方程式を比較して相違点を明らかにし、本研究で解くべき光輸送計算を模擬した中性子輸送方程式を示す。2.3節では、中性子輸送計算手法の計算理論を説明する。2.3.1項では、光輸送計算を模擬した中性子輸送方程式に基づいて、MOCについて説明する。続く2.3.2項では、離散化した角度を扱う上で重要な、角度分点セットについて説明する。2.4節では拡散加速法の概要と計算理論を述べる。2.5節で本章のまとめを述べ、2.6節で参考文献を示す。

なお、光の反射屈折現象を考慮した計算手法については、反射屈折現象の取り扱いが本研究の主題であること、MOC計算理論と角度分点セットが前提知識となることから、第3章で詳細に説明することとした。

2.2 中性子輸送計算手法の光輸送計算への適用

2.2.1 中性子輸送方程式

原子炉内を飛行する中性子の挙動はボルツマン輸送方程式によって記述される。そのため、ボルツマン輸送方程式を解くことで、原子炉内の中性子空間分布を求めることができる。ボルツマン輸送方程式は、本来気体分子の挙動を記述した方程式であるが、以下に示す仮定を置くことで、原子炉内の中性子についても適用可能である[7]。

- 電磁気力および重力を無視する。
- 中性子同士の衝突を無視する。

ボルツマン輸送方程式には時間依存の項が含まれているが、本研究で扱う光輸送計算では定常状態の光空間分布を求めているため、時間依存性は無視する。以下、定常状態の中性子挙動を記述したボルツマン輸送方程式を、中性子輸送方程式と呼ぶ。

3次元空間における定常系の中性子輸送方程式を式(2.1)に示す[1]。

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \quad (2.1)$$

式(2.1)の各変数は、それぞれ以下の物理量を表す。

\vec{r} : 位置

E : 中性子のエネルギー

$\vec{\Omega}$: 中性子の飛行方向

$\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$: 角度中性子束

$\Sigma_t(\vec{r}, E)$: 巨視的全断面積

$Q(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$: 中性子源

ここで、角度中性子束 ψ は全中性子束とは異なる物理量であることに注意されたい。角度中性子束は、ある方向へ飛行する中性子が、単位面積を単位時間あたりに通過するときの中性子数であり、全中性子束は、ある位置における角度中性子束を全立体角で積分して得られる中性子数である。中性子源 Q は式(2.2)で表される。

$$Q = \int_{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' dE' + \frac{\chi(E)}{4\pi} \frac{1}{k_{eff}} \int_{4\pi} \int_0^\infty v \Sigma_f(\vec{r}, E') \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' dE' + q(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \quad (2.2)$$

式(2.2)の各変数は、それぞれ以下の物理量を表す。

$\Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$: 巨視的散乱断面積

$\chi(E)$: 核分裂スペクトル

$v \Sigma_f(\vec{r}, E')$: 生成断面積

k_{eff} : 実効増倍率

$S(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$: 外部中性子源

巨視的断面積の物理的な意味や、本研究における核分裂の扱いについては、2.2.3 項にて後述する。

中性子輸送方程式の物理的な意味について説明する。中性子輸送方程式は、位置 \vec{r} において、エネルギー E 、飛行方向 $\vec{\Omega}$ で飛行する中性子に対する方程式である。式(2.1)の左辺第一項は位置 \vec{r} の微少な単位体積から漏洩する中性子数、左辺第二項は同領域内で吸収または散乱により消失する中性子数、右辺は同領域内で生成される中性子数を意味している。つまり式(2.1)は領域から消失する中性子数と領域内で発生する中性子数が等しいことを示している。

式(2.1)は位置 $\vec{r}(=x, y, z)$ 、エネルギー E 、飛行方向 $\vec{\Omega}(=$ 方位角、極角)の計6個の未知数と微分項、積分項を持つ方程式であり、解析解を求めることが困難である。そこで一般的には、本来連続的である空間領域、中性子飛行方向、エネルギーを離散化することで方程式を簡略化して計算を行っている。詳細は2.2.1項にて後述する。

2.2.2 光輸送方程式

1.2 節に示した通り、生体内を伝搬する光は光輸送方程式(輻射輸送方程式)によって記述される。光輸送計算は以下に示す仮定をおくことで、中性子輸送方程式と同様に、ボルツマン方程式から導かれている。

- 光は粒子と波動の二重性を持つが、考えている系の微小長さが光の波長よりも十分に大きい場合、光の波動性は無視される。このとき、光のエネルギーが粒子のように輸送されていると考えることができる[8]。
- 光子同士の衝突を無視する。
- 光が散乱及び吸収される際、波長は変化しないものとする。

3次元空間における定常系の光輸送方程式は次式で与えられる[9]。

$$[\vec{\Omega} \cdot \nabla + \mu_a(\vec{r}) + \mu_s(\vec{r})]I(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \mu_s(\vec{r}) \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' p(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') I(\vec{r}, \vec{\Omega}') + q(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad (2.3)$$

式(2.3)における各変数は、以下の物理量を表す。

\vec{r} : 位置

$\vec{\Omega}$: 光子の飛行方向

$\mu_a(\vec{r})$: 吸収係数

$\mu_s(\vec{r})$: 散乱係数

$I(\vec{r}, \vec{\Omega})$: 光強度

$p(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}')$: 位相関数

$q(\vec{r}, \vec{\Omega})$: 外部光源

光輸送方程式の物理的な意味について説明する。式(2.3)の左辺第一項は \vec{r} 近辺の微少な単位領域からの光の漏洩、左辺第二項は同領域における吸収による光の減衰、左辺第三項は散乱による光の減衰、右辺第一項は散乱による方向 $\vec{\Omega}'$ から方向 $\vec{\Omega}$ への光の増加を

意味する。つまり式(2.3)は領域へ入射する光あるいは領域内で発生する光が、領域内で減衰あるいは領域外へ流出する光と等しく、光子数の収支が釣り合っていることを示している。

式(2.3)は式(2.1)と同様に複数の未知数と微分項、積分項を持つ方程式であり、解析解を求めることが困難である。そのため本来連続的である空間領域、光の進行方向を離散化することで方程式を簡略化して計算している。

2.2.3 光輸送を模擬した中性子輸送方程式

2.2.1 節と 2.2.2 節の内容を比較することで、中性子輸送方程式と光輸送方程式は共にボルツマン方程式から導出された方程式であり、物理的な意味及び式の形状が類似していることが確認できる。両者の相違点として大まかに以下の4つが挙げられる。

- ① 巨視的核反応断面積 Σ と光学特性値 μ
- ② 核分裂の有無
- ③ エネルギー分布の有無
- ④ 非等方散乱の扱い

これらの観点から式(2.1)を変形し、式(2.3)と類似の形にする。以下個別に説明する。

① 巨視的核反応断面積 Σ と光学特性値 μ

吸収係数 μ_a と散乱係数 μ_s をあわせて光学特性値という。光を吸収する物質において、単位面積・単位時間あたりの光子数である光強度 I_0 と、物質を x だけ通過した後の光強度 $I_a(x)$ の関係は、Lambert-Beerの法則より式(2.4)で表せる[10]。同様に光を散乱する物質において、物質に入射する光強度 I_0 と物質を x だけ通過した後の光強度 $I_s(x)$ の関係は式(2.5)で表せる。

$$I_a(x) = I_0 e^{-\mu_a x} \quad (2.4)$$

$$I_s(x) = I_0 e^{-\mu_s x} \quad (2.5)$$

式(2.4),式(2.5)を μ_a, μ_s について解くと次式が得られる。

$$\mu_a = -\frac{1}{x} \log_e(I_a/I_0) \quad (2.6)$$

$$\mu_s = -\frac{1}{x} \log_e(I_s/I_0) \quad (2.7)$$

式(2.6),式(2.7)より、吸収係数は物質中における吸収による光の減衰を表し、散乱係数は物質中における散乱による光の減衰を表す。両者ともに長さの逆数の次元をもつ。ここで物質中の分子に注目すると、吸収係数と散乱係数は式(2.8),式(2.9)のように表せる。

$$\mu_a = \sigma_a \times N \quad (2.8)$$

$$\mu_s = \sigma_s \times N \quad (2.9)$$

式(2.8),式(2.9)の各変数は、それぞれ以下の物理量を表す。

σ_a : 吸収断面積

σ_s : 散乱断面積

N : 物質の粒子数密度

吸収断面積と散乱断面積は物質中の粒子 1 個が光を吸収、散乱する確率を表し、面積の次元を持つ。

一方で物質中での中性子の減衰は巨視的核反応断面積 Σ を用いて表される。巨視的断面積の定義を次式に示す。

$$\Sigma = \sigma \times N \quad (2.10)$$

式(2.10)の各変数は、それぞれ以下の物理量を表す。

σ : 微視的核反応断面積

N : 物質の原子数密度

微視的核反応断面積は物質中の原子核 1 個が中性子と核反応を起こす確率を表し、面積の次元を持つ。巨視的断面積は微視的断面積と原子数密度の積であり、長さの逆数の次元を持つ。巨視的断面積及び微視的断面積はすべての核反応についてそれぞれ定義される。各核反応に対する巨視的断面積及び微視的断面積を以下に示す。

- 散乱反応 : σ_s, Σ_s
- 中性子捕獲反応 : σ_c, Σ_c
- 核分裂 : σ_f, Σ_f
- 吸収反応 : $\sigma_a = \sigma_c + \sigma_f, \Sigma_a = \Sigma_c + \Sigma_f$
- 全反応 : $\sigma_t = \sigma_s + \sigma_a, \Sigma_t = \Sigma_s + \Sigma_a$

このうち、微視的散乱断面積 σ_s と微視的捕獲断面積 σ_c は、それぞれ光輸送における散乱断面積 σ_s 、吸収断面積 σ_a に対応している。式(2.8)から式(2.10)より、式(2.11),式(2.12)が成り立つ。

$$\Sigma_c = \mu_a \quad (2.11)$$

$$\Sigma_s = \mu_s \quad (2.12)$$

② 核分裂の有無

原子炉内ではウラン 235 等に中性子が衝突することで核分裂が発生し、2~3 個の中性子が放出される。その発生量は巨視的核分裂断面積 Σ_f で表され、中性子輸送方程式では式(2.2)の右辺第二項に登場する。光子と生体組織の衝突では、核分裂のような複数の

光子が放出される反応は起こらないため、 $\Sigma_f = 0$ となり、式(2.2)の右辺第二項は無視できる。 $\Sigma_a = \Sigma_c + \Sigma_f$ であるため、式(2.11)をふまえると $\Sigma_f = 0$ より式(2.13)が成り立つ。

$$\Sigma_a = \mu_a \quad (2.13)$$

$\Sigma_t = \Sigma_s + \Sigma_a$ に式(2.12),(2.13)を代入することで、 Σ_t は式で表すことができる。

$$\Sigma_t = \mu_s + \mu_a \quad (2.14)$$

③ エネルギー分布の有無

先に述べた通り、原子炉内に存在する中性子は 10^{-5}eV から 20MeV 程度のエネルギー分布をもつものに対し、生体内を伝搬する近赤外線エネルギーは、散乱及び吸収によって変化しないと仮定している。そのため、本研究では中性子輸送計算における各巨視的反応断面積と中性子束のエネルギー依存性を無視する。

④ 非等方散乱の扱い

生体内に入射した光は、強い前方散乱性を示すことが知られている(Fig 2.1(右))。

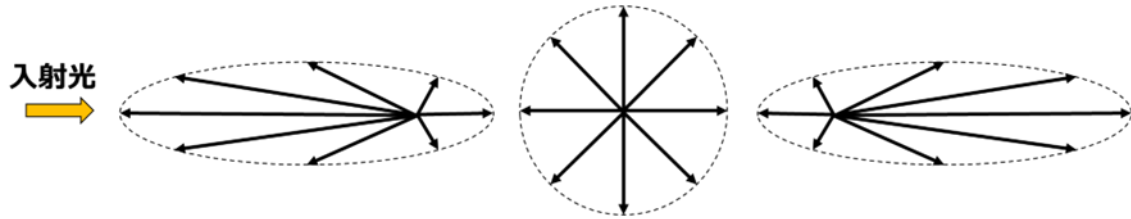


Fig 2.1 光の非等方性(左：後方散乱、中央：等方散乱、右：前方散乱)

非等方散乱について、光輸送計算では μ_s と位相関数の積を用いて計算を行っているのに対し、中性子輸送計算では散乱する方向毎に Σ_s 自体を変えることで計算を行っているといった差異がある。しかし、先行研究では、人体組織のような散乱性の強い物質においては、中性子輸送計算における輸送補正近似が有効であり、非等方散乱は事実上考慮不要であることが示されている[11]。そこで本研究では、輸送補正近似を適用することで、非等方散乱を考慮しないこととした。

以上より、4項目の相違点をふまえると、式(2.1)は式(2.15)に変形できる。

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) + (\mu_s(\vec{r}) + \mu_a(\vec{r}))\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \mu_s(\vec{r}) \int_{4\pi} \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' + q(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad (2.15)$$

式(2.15)において、等方散乱を仮定しており、 $\mu_s = \Sigma_s$, $\mu_a = \Sigma_a$ である。式(2.15)が本研究で解くべき、光輸送計算を模擬した中性子輸送方程式である。

2.3 中性子輸送計算手法

2.3.1 Method of Characteristics(MOC)法

先述した通り、中性子輸送方程式は位置 $\vec{r}(=x, y, z)$ 、飛行方向 $\vec{\Omega}(=$ 方位角、極角)の計5個の未知数と微分項、積分項を持つ方程式であり、解析解を求めることが困難である。そこで一般的には、本来連続的である空間領域、光子飛行方向を離散化することで方程式を簡略化して計算を行っている。

代表的な輸送計算手法の1つに、Method of Characteristics(MOC)法[6]があり、光子が飛行する軌跡(レイトレース)に注目したレイトレース法を用いている点の特徴である。本項では、式(2.15)に基づき、1次元体系におけるMOCの計算手順を説明する。

生体内を飛行する光子の飛行方向は完全にランダムであるが、MOCでは光子の飛行方向を直線で代表している。この直線をCharacteristics Lineと呼び、光子はCharacteristics Line上のみを飛行すると近似して計算を行う。このような近似を、角度離散化と呼ぶ(Fig 2.2)。

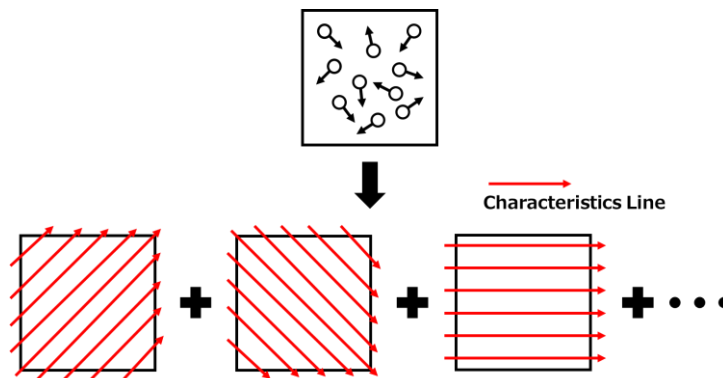


Fig 2.2 MOCにおける光子飛行方向離散化

代表方向の決め方や角度分割数によって、計算精度が変化する。詳細は2.3.2項にて後述する。

ある一本のCharacteristics Lineに注目した場合、式(2.15)は式(2.16)のように表せる。

$$\frac{d\psi_m(s)}{ds} + \Sigma_t(s)\psi_m(s) = Q_m(s) \quad (2.16)$$

式(2.16)における各変数は、それぞれ以下の物理量を表す。

s : Characteristics Line に沿った位置座標

m : 飛行方向番号

ψ_m : 方向番号 m に注目した角度光子束

Q_m : 方向番号 m に注目した光子源

また、下付き文字 m は、飛行方向 m に関する物理量であることを表している。

続いて、空間を細かい領域(メッシュ)に区分し、各空間メッシュ領域内の断面積及び光子源が一定であると仮定すると、式(2.16)は式(2.17)のように表すことができる。

$$\frac{d\psi_{m,i}(s)}{ds} + \Sigma_{t,i}\psi_{m,i}(s) = Q_{m,i} \quad (2.17)$$

式(2.17)における各変数は、それぞれ以下の物理量を表す。

i : 空間メッシュ領域番号

$\psi_{m,i}(s)$: 位置 s 、角度 m 、空間メッシュ領域 i における角度光子束

$\Sigma_{t,i}$: 空間メッシュ領域 i における巨視的全断面積

$Q_{m,i}$: 角度 m 、空間メッシュ領域 i における光子源

また、下付き文字 i は、空間メッシュ領域 i に関する物理量であることを表している。光子源 $Q_{m,i}$ は式(2.18)で表現される。

$$Q_{m,i} = \frac{1}{4\pi}(\Sigma_{s,i}\phi_i + q_i) \quad (2.18)$$

式(2.18)における各変数は、それぞれ以下の物理量を表す。

$\Sigma_{s,i}$: 空間メッシュ領域 i における巨視的散乱面積

ϕ_i : 空間メッシュ領域 i における全光子

q_i : 空間メッシュ領域 i における外部光源(全立体角で積分した値)

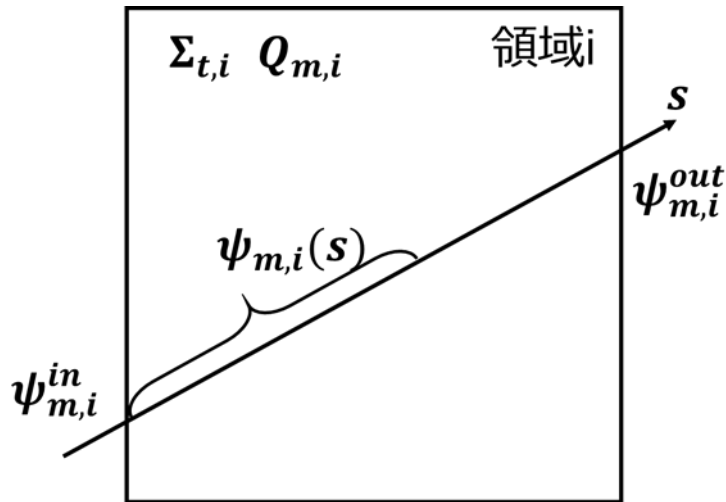


Fig 2.3 空間メッシュ領域 i における Characteristics Line 上の角度光子束

式(2.17)は1変数の微分方程式であるため、解は式(2.19)に示すように解析的に求めることができる。

$$\psi_{m,i}(s) = C \exp(-\Sigma_{t,i}s) + \frac{Q_{m,i}}{\Sigma_{t,i}} \quad (2.19)$$

C は積分定数である。空間メッシュ領域*i*の入射位置を $s = 0$ 、そのときの角度光子束を入射角度光子束 ψ_m^{in} と定義すると、積分定数 C は式(2.20)で与えられる。

$$C = \psi_{m,i}^{in} - \frac{Q_{m,i}}{\Sigma_{t,i}} \quad (2.20)$$

式(2.20)を式(2.19)に代入することで、式(2.21)が得られる。

$$\psi_{m,i}(s) = \psi_{m,i}^{in} \exp(-\Sigma_{t,i}s) + \frac{Q_{m,i}}{\Sigma_{t,i}} [1 - \exp(-\Sigma_{t,i}s)] \quad (2.21)$$

式(2.21)より、方向 m 、空間メッシュ領域*i*における Characteristics Line の長さ $s_{m,i}$ を代入することで、空間メッシュ領域*i*からの流出角度光子束 $\psi_{m,i}^{out}$ は式(2.22)で表すことができる。

$$\psi_{m,i}^{out} = \psi_{m,i}^{in} \exp(-\Sigma_{t,i}s_{m,i}) + \frac{Q_{m,i}}{\Sigma_{t,i}} [1 - \exp(-\Sigma_{t,i}s_{m,i})] \quad (2.22)$$

ここで、 $s_{m,i}$ は極角方向を考慮して長さを補正したものである。空間メッシュ領域*i*の幅を Δx_i 、極角を θ_m とすると、 $s_{m,i}$ は Δx_i よりも長く、式(2.23)を用いて補正される。極角の定義については、2.3.2 項にて後述する。

$$s_{m,i} = \frac{\Delta x_i}{\cos \theta_m} \quad (2.23)$$

空間メッシュ領域*i*からの流出角度中性子束を、空間メッシュ領域*i+1* への入射角度光子束として与えることで、空間メッシュ領域*i+1* における角度中性子束を求めることができる。すなわち、体系内部の境界条件として、角度光子束の連続の式を与えている。

$$\psi_{m,i+1}^{in} = \psi_{m,i}^{out} \quad (2.24)$$

式(2.22)と(2.24)の計算を繰り返すことで、全ての空間メッシュ領域における方向 m の角度光子束が得られる。

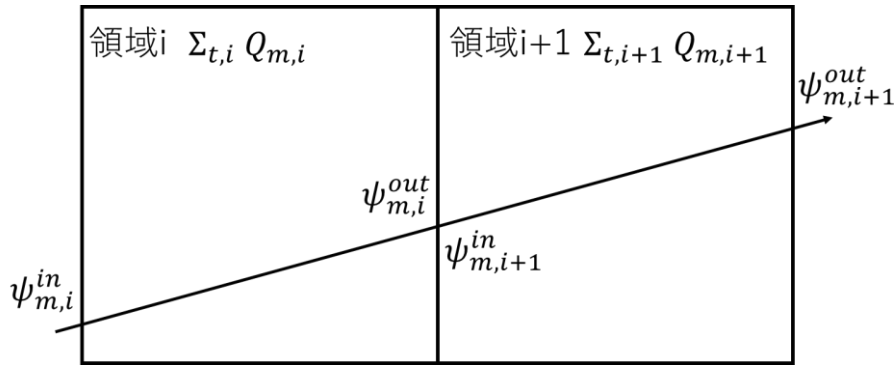


Fig 2.4 MOC における内部境界条件

注目している Characteristics Line における角度光子束の平均値 $\psi_{m,i}^{ave}$ を式(2.25)から求める。

$$\psi_{m,i}^{ave} = \frac{1}{s_{m,i}} \int_0^{s_{m,i}} \psi_{m,i}(s) ds \quad (2.25)$$

式(2.25)を式(2.21)に代入して計算すると

$$\begin{aligned} \psi_{m,i}^{ave} &= \frac{1}{s_{m,i}} \int_0^{s_{m,i}} \left\{ \psi_{m,i}^{in} \exp(-\Sigma_{t,i}s) + \frac{Q_{m,i}}{\Sigma_{t,i}} [1 - \exp(-\Sigma_{t,i}s)] \right\} ds \\ &= \frac{1}{s_{m,i}} \left[-\frac{\psi_{m,i}^{in}}{\Sigma_{t,i}} \exp(-\Sigma_{t,i}s) + \frac{Q_{m,i}}{\Sigma_{t,i}} \left\{ s + \frac{1}{\Sigma_{t,i}} \exp(-\Sigma_{t,i}s) \right\} \right]_0^{s_{m,i}} \\ &= \frac{1}{s_{m,i}} \left\{ -\frac{\psi_{m,i}^{in}}{\Sigma_{t,i}} \exp(-\Sigma_{t,i}s_{m,i}) + \frac{Q_{m,i}}{\Sigma_{t,i}} \left\{ s_{m,i} + \frac{1}{\Sigma_{t,i}} \exp(-\Sigma_{t,i}s_{m,i}) \right\} + \frac{\psi_{m,i}^{in}}{\Sigma_{t,i}} - \frac{Q_{m,i}}{\Sigma_{t,i}^2} \right\} \\ &= \frac{1}{s_{m,i}\Sigma_{t,i}} \left\{ -\psi_{m,i}^{in} \exp(-\Sigma_{t,i}s_{m,i}) - \frac{Q_{m,i}}{\Sigma_{t,i}} [1 - \exp(-\Sigma_{t,i}s_{m,i})] + \psi_{m,i}^{in} + Q_{m,i}s_{m,i} \right\} \\ &= \frac{1}{s_{m,i}\Sigma_{t,i}} \left\{ -\psi_{m,i}^{out} + \psi_{m,i}^{in} + Q_{m,i}s_{m,i} \right\} \\ &= \frac{\psi_{m,i}^{in} - \psi_{m,i}^{out}}{s_{m,i}\Sigma_{t,i}} + \frac{Q_{m,i}}{\Sigma_{t,i}} \end{aligned} \quad (2.26)$$

となる。全ての方向 m について平均角度光子束 $\psi_{m,i}^{ave}$ を求めることで、空間メッシュ領域 i の全光子束 ϕ_i は式(2.27)を用いて計算できる。

$$\phi_i = \sum_m^{N_m} w_m \psi_{m,i}^{ave} \quad (2.27)$$

式(2.27)の各変数は、それぞれ以下の物理量を表す。

N_m : 角度分割数

w_m : m 方向の重み

重み w_m は代表方向 μ_m がカバーする範囲の広さと合うように決定される。詳細は2.3.2項にて後述する。

式(2.25)より、空間メッシュ領域 i の全光子束 ϕ_i を求めるためには、光子源 $Q_{m,i}$ の値が既知である必要があり、式(2.17),(2.18)より、 $Q_{m,i}$ を求めるためには、 ϕ_i の値が既知である必要がある。そこで、光輸送計算では、反復法による数値計算を行うことで、全光子束を求めている。

反復法とは、適当に与えられた初期解をもとに計算を繰り返して近似解を真の値に近づけていき、近似解が十分な精度まで収束したら計算を終了する数値解法である。中性子輸送計算には、核分裂中性子源を更新する外部反復計算と散乱中性子源を更新する内部反復計算が存在しており、核分裂の生じない光輸送計算においては内部反復計算のみを行っている。

MOC 計算のフローを Fig 2.5 に示す。

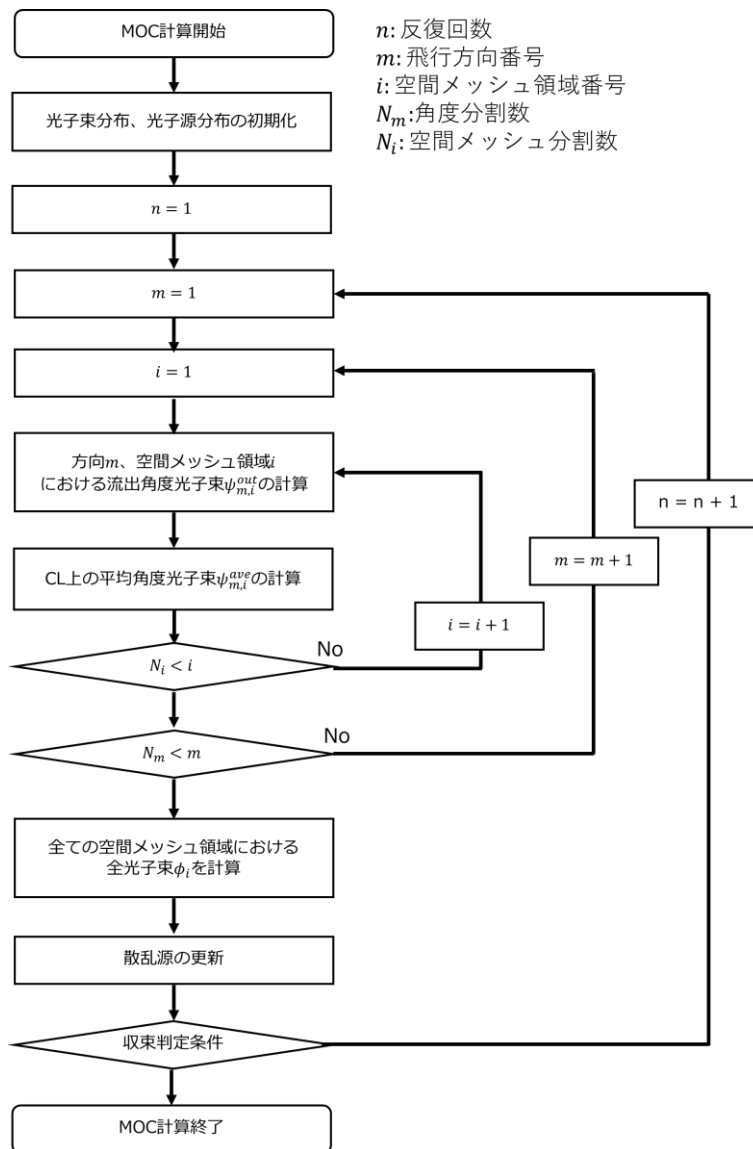


Fig 2.5 MOC 計算のフロー

2.3.2 角度方向の取り扱い

本項では、MOC 計算における光の屈折反射効果を考慮するための前提知識として、従来の中性子輸送計算に用いられている角度分点セットについて、まずは説明を行う。

角度分点セットは、決定論的な中性子輸送計算である離散化座標法(S_N法)[12]や MOC において、連続的な中性子飛行方向を離散化し、効率良く(少ない角度分割数で精度良く)角度数値積分する際に活用されている。

光子の飛行方向は、方位角と極角で表される(Fig 2.6)。本検討では 1 次元体系を対象とした計算を行っており、極角方向のみを取り扱う。極角は飛行方向と z 軸との成す角であり、z 軸は空間メッシュ境界面と垂直に交わる(Fig 2.7)。

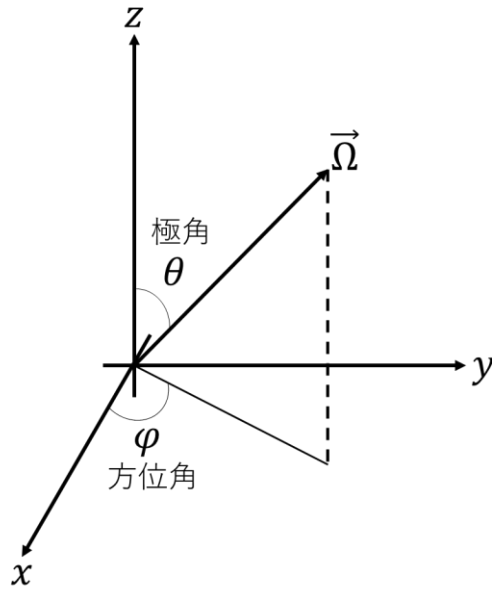


Fig 2.6 飛行方向と方位角、極角の関係

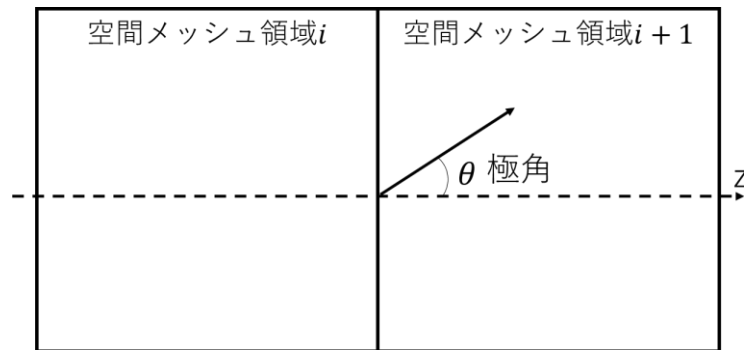


Fig 2.7 離散化した角度における極角

角度光子束の角度離散化について、以下で説明を行う。まず、光子が飛行している全方向を N_m 個の方向範囲(立体角)に分割し、分割した各方向範囲の代表点(一般的には中点)を代表方向とする。ここで、光子が飛行する代表方向の番号は m で表し、 $m(m = 1, 2, \dots, N_m)$ が1から増加するほど μ_m が-1から増えるものとする。次に、 m 番目の代表方向がカバーしている飛行方向の範囲を設定する。ここで、 m 番目の飛行方向の範囲は、その広さが重み w_m と対応するように設定する。

例えば、1次元平板体系において極角方向 θ を離散化する場合、 m 番目の方向範囲(立体角)と対応するように重み w_m を求めることとなる。なお、積分にあたって $\sin\theta d\theta$ で積分しているのは、立体角が $d\Omega = d\theta \sin\theta d\varphi = d\varphi \sin\theta d\theta$ で与えられることによる。

$$w_m = \int_{\theta_{m+}}^{\theta_{m-}} \sin\theta d\theta = \int_{\mu_{m-}}^{\mu_{m+}} d\mu \quad (2.28)$$

$$\mu \equiv \cos\theta \quad (2.29)$$

上式において、 μ は極角 θ の方向余弦を表しており、 m 番目代表方向の極角が θ_m であれば、その方向余弦は $\mu_m = \cos\theta_m$ となる。ここで、飛行方向について全立体角で積分した場合、極角に関する積分については

$$\int_0^\pi \sin\theta d\theta = \int_{-1}^1 d\mu = 2 \quad (2.30)$$

を満足するため、重み w_m の総和は次式を満足することとなる。

$$\sum_m w_m = 2 \quad (2.31)$$

なお、方位角方向は 2π であることから、方位角方向まで考慮すると、重み w_m の総和は 4π となる。

以上で述べたような、代表方向の方向余弦 μ_m と重み w_m のペア N_m 個から成る角度方向のセットを、角度分点セットと呼ぶ。ここでは重み w_m の余弦が等しくなるように分割した分点(以下、等余弦重み分点と呼称)を例として、 μ_m と w_m の計算方法について説明する。等余弦重み分点の場合、 $-1 \leq \mu \leq 1$ 範囲の方向余弦を等しい幅で分割することとなる。 m 番目の方向余弦 μ_m は、等分割された各方向余弦幅の midpoint に対応させれば、以下の式により計算することができる。なお、 $1 \leq m \leq N_m$ である。

$$\mu_m = -1 + \frac{2\left(m - \frac{1}{2}\right)}{N_m} \quad (2.32)$$

また、 $-1 \leq \mu \leq 1$ 範囲の方向余弦を等しい幅で分割することは、等しい重みで分割することに他ならないため、 m 番目の重み w_m は以下のように計算することができる。

$$w_m = \frac{2}{N_m} \quad (2.33)$$

なお、 m 番目の代表方向がカバーしている飛行方向の範囲は以下の範囲となる。

$$\mu_{m-} \leq \mu_m \leq \mu_{m+} \quad (2.34)$$

$$\mu_{m-} = -1 + \frac{2(m-1)}{N_m} \quad (2.35)$$

$$\mu_{m+} = -1 + \frac{2m}{N_m} \quad (2.36)$$

1次元平板体系を対象として、極角 $0 \leq \theta \leq \pi$ の範囲を等余弦重み分点に基づいて4方向で離散化した例を Fig 2.8 に示す。黒矢印は m 番目の飛行方向であり、赤実線は m 番目の飛行方向が代表する範囲の端(下限および上限)を表している。 $\mu_m, \mu_{m-}, \mu_{m+}$ の位置関

係を Fig 2.9 に示す。

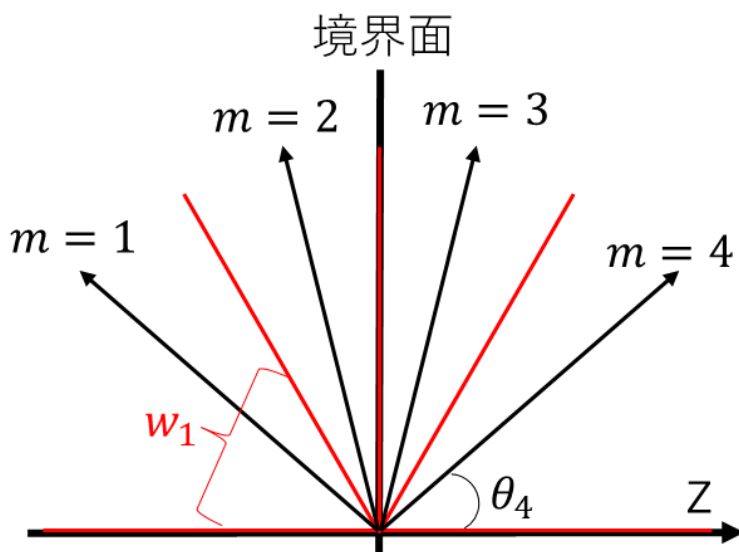


Fig 2.8 角度分点セットの例($N_m = 4$)

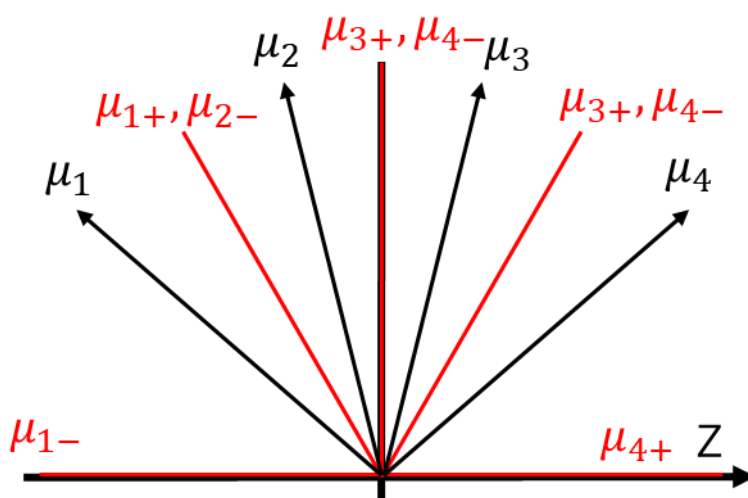


Fig 2.9 $\mu_m, \mu_{m-}, \mu_{m+}$ の位置関係

代表的な角度分点セットとして、Gauss-Legendre 分点セット(GL 分点セット)が挙げられる。GL 分点セットとは、Legendre 多項式の根と Legendre 補間を考慮に入れた重みによって決定される分点セットである。GL 分点セットの詳細は文献[13]にまとめられている。式(2.27)において、全光子束を求めるためにガウス求積法を用いているが、数値積分の誤差は使用した分点と重みによって変化する。一般的には、等余弦重み分点セット

より GL 分点セットの方が同じ分割数でも精度が高く、GL 分点セットを用いることで、数値積分の誤差低減が期待される。

GL 分点セットは、求めたい積分区間に被積分関数の不連続点が含まれる場合、近似の精度が低下することが知られている。そこで、不連続点が含まれている場合には、不連続点を境界に角度範囲を分割し、それぞれの範囲に対して GL 分点セットを適用する。例えば、二分割する場合には、**Double Gauss-Legendre** 分点セット(DGL 分点セット)が活用されている[14]。本研究では、DGL 分点セットを、反射屈折に適した形に改良した多重 Gauss-Legendre 分点セット(多重 GL 分点セット)を用いて検討を行った。

2.4 拡散加速法

2.4.1 拡散加速法の概要

本項では、拡散加速法の概要について説明する。2.2.1 節に示した通り、中性子輸送計算には、核分裂中性子源を更新する外部反復計算と散乱中性子源を更新する内部反復計算が存在しており、核分裂の生じない光輸送計算においては内部反復計算のみを行っている。内部反復計算の収束性は散乱比 Σ_s/Σ_t に依存しており、散乱比が 1 に近いほど収束性が悪く、収束までに多くの反復回数が必要となる[11]。軽水炉の炉心体系等では散乱比が 1 に近く、膨大な計算時間が必要となる。そこで、中性子輸送計算においては拡散加速法が用いられており、多くの中性子輸送計算コード[15][16][17]に拡散加速法を改良した **coarse mesh finite difference** 加速法等が実装されている。計算体系や計算条件にもよるが、炉心体系を対象とした計算では反復回数が約 1/10~1/100 に削減することが知られている[18]。

拡散加速計算とは、拡散理論に基づく光子流に補正項を加えることによって、中性子輸送計算の結果を再現することが可能となった拡散計算のことである。ここで拡散計算とは、光子の飛行方向を関数展開によって近似することで輸送方程式を簡略化した拡散方程式に基づいて、光子束空間分布を求めることを指す。拡散加速法を用いることで反復回数を削減できる主な理由は、拡散加速計算の反復によって輸送計算の反復の多くを代替できることである。拡散計算では自群散乱を考慮しないため収束性が散乱比に依存せず、また、中性子の飛行方向をルジャンドル関数展開の 1 次までで近似していることから、計算に要する時間は短い。従って、拡散計算自体が輸送計算より高速である。輸送計算の回数を削減できることと、計算時間が短いことから、拡散加速法は、特に散乱比が 1 に近い軽水炉のような体系に対して有効である。

拡散加速法を導入した輸送計算の大まかな計算手順を Fig 2.10 に示す。まずは、MOC 計算を数回行う。次に、MOC 計算から得られた光子流補正係数を計算する。続いて、光子流補正係数を用いて、拡散加速計算を行う。拡散加速計算によって求めた全光子束を用いて散乱源を更新し、再度 MOC 計算を行う。

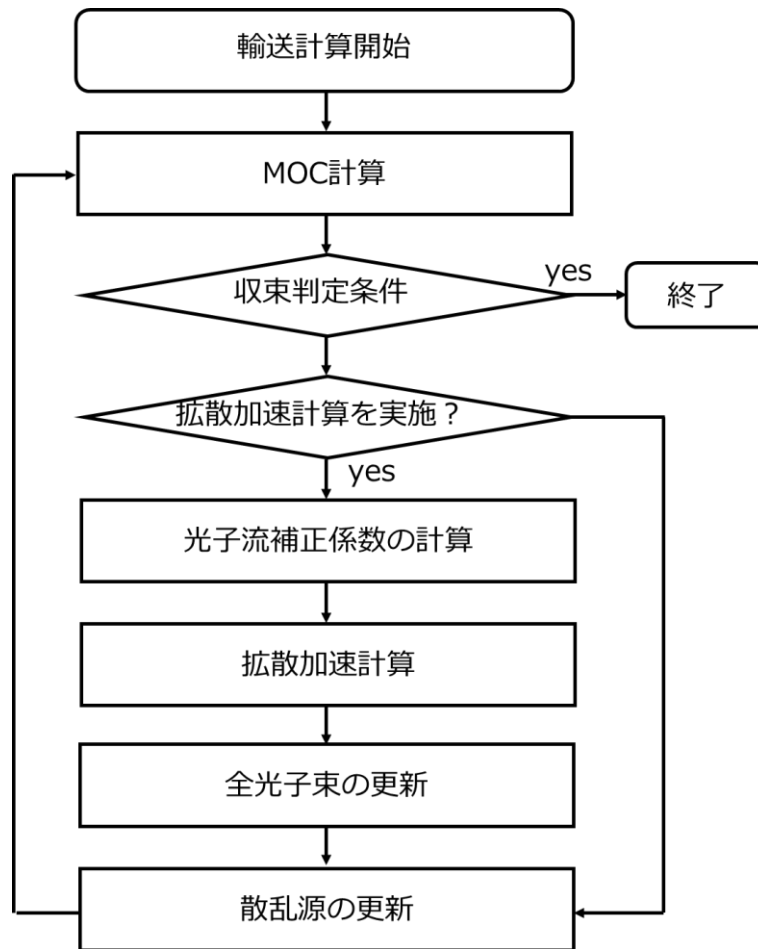


Fig 2.10 拡散加速法を導入した輸送計算の大まかな計算手順

本研究の最終目標である拡散光トモグラフィ実用化のためには、散乱比が1に近い組織を持つ3次元体系における光子束空間分布を高速かつ高精度に求める必要があるが、これは軽水炉の計算条件と類似している。そこで、光輸送計算においても、軽水炉を対象とした炉心計算に利用されている拡散加速法を適用して収束性を向上させ、収束に要する反復回数を削減することで計算時間を短縮することが可能であると考えられる。

2.4.2 拡散加速法の計算理論

本項では、拡散加速法の計算理論について述べる。問題を簡単にするため、エネルギー-1群とした1次元無限平板体系における拡散方程式を式(2.37)に示す。輸送方程式から拡散方程式を導出する過程は、参考文献[11]を参照されたい。

$$-\frac{d}{dx}D(x)\frac{d\phi}{dx} + \mu_a(x)\phi(x) = q(x) \quad (2.37)$$

上式において、各変数は以下の量をそれぞれ表す。

x : 位置 [cm]

$\phi(x)$: 位置 x における全光子束 [$1/\text{cm}^2/\text{s}$]

$\mu_a(x)$: 位置 x における吸収係数 [$1/\text{cm}$]

$q(x)$: 位置 x における外部光子源の強度 [$1/\text{cm}^3/\text{s}$]

$D(x)$: 拡散係数 [cm]

拡散係数 $D(x)$ は、輸送方程式に対して P1 近似を適用することにより、式(2.38)で表すことができる[20]。

$$D(x) = \frac{1}{3\Sigma_t(x)} \quad (2.38)$$

式(2.37)で示されているように、拡散方程式中の各パラメータ($D(x)$ 、 $\mu_a(x)$ 、 $q(x)$ 、 $\phi(x)$)は、位置変数 x に対して連続的に変化する量である。従って、比較的単純な式(2.37)のような拡散方程式であったとしても、その解析解を求めることはできず、有限差分法[20]に基づいて離散化することで数値解を求めている。本項で説明する拡散加速計算の場合についても、通常の拡散計算と同様に、有限差分近似に基づくことで計算を実施する。例えば、ある i 番目の空間メッシュ領域に注目した場合、その有限差分式は式(2.39)のように記述することができる。

$$\frac{J_{i+1/2} - J_{i-1/2}}{\Delta x_i} + \mu_{a,i}\phi_i = q_i \quad (2.39)$$

上式において、各変数は以下の量をそれぞれ表す。

$J_{i-1/2}$: 境界面 $i - 1/2$ における正味光子流

$J_{i+1/2}$: 境界面 $i + 1/2$ における正味光子流

Δx_i : 空間メッシュ i のメッシュ幅

ここで、下添え字 $i - 1/2, i + 1/2$ は空間メッシュ領域 i の左側境界面 $i - 1/2$ 、右側境界面 $i + 1/2$ についての物理量であることを表す。式(2.39)における正味の光子流 $J_{i+1/2}$ は、光子は密度が高い領域から低い領域へ流れるという、Fick の拡散近似[20]を用いて式(2.40)で表せる。

$$J_{i+1/2} = -D_{i+1/2} \frac{d}{dx} \phi(x) \quad (2.40)$$

$D_{i+1/2}$ は境界面 $i + 1/2$ における拡散係数である。式(2.40)において、 $\frac{d}{dx} \phi(x)$ を境界面 $i + 1/2$ の光子束 $\phi_{i+1/2}$ と空間メッシュ領域 i または $i + 1$ での光子束 ϕ_i, ϕ_{i+1} との傾きで表すと式(2.41)、(2.42)となる。なお、以下で現れる物理量の説明を Fig. 2.1 に示す。

$$J_{i+1/2} = -D_i \frac{\phi_{i+1/2} - \phi_i}{\Delta x_i/2} \quad (2.41)$$

$$J_{i+1/2} = -D_{i+1} \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i+1/2}}{\Delta x_{i+1}/2} \quad (2.42)$$

式(2.41)、(2.42)より、 $\phi_{i+1/2}$ を消去することで、 $J_{i+1/2}$ は式(2.43)で表される。

$$J_{i+1/2} = \frac{-2D_i D_{i+1}}{D_i \Delta x_{i+1} + D_{i+1} \Delta x_i} (\phi_{i+1} - \phi_i) \quad (2.43)$$

$J_{i-1/2}$ について、同様の手順によって式(2.44)を得ることができる。

$$J_{i-1/2} = \frac{-2D_{i-1} D_i}{D_{i-1} \Delta x_i + D_i \Delta x_{i-1}} (\phi_i - \phi_{i-1}) \quad (2.44)$$

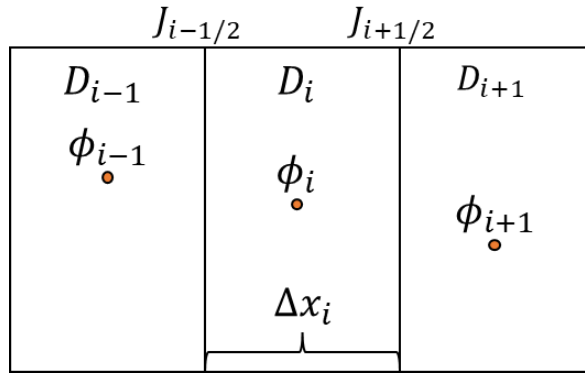


Fig. 2.1 拡散方程式の有限差分式における各物理量の位置関係

しかし、単に式(2.43)、(2.44)に示した正味光子流を用いて拡散方程式(式(1.1))を解いたとしても、輸送計算の加速に使用することはできない。厳密な輸送計算では角度光子束の飛行方向依存性を考慮して正確に光子流を計算しているのに対し、拡散計算では拡散近似に基づいて、有限差分法に基づき全光子束の勾配から光子流を推定している。従って、輸送計算から求まる正味光子流と式(2.43)、(2.44)に示した正味光子流が一致しないためである。そこで、拡散加速計算では、正味光子流の計算式を補正した「特殊な拡散方程式」を解いている。すなわち、式(2.43)、式(2.44)に示した正味光子流の計算式に補正項を加えることにより、輸送計算で得られる光子流の計算結果を再現するように拡散方程式を補正することで、拡散計算結果を利用して輸送計算が加速できるよう工夫している。

以降では、拡散加速計算における正味光子流の補正項について、その計算方法を説明する。まず、MOCなどに基づく輸送計算の結果から、境界面 $i + 1/2$ における正味光子流 $J_{i+1/2}^{\text{MOC}}$ を求める。通常MOCにおいて、 $J_{i+1/2}^{\text{MOC}}$ は境界面 $i + 1/2$ を通過する角度光子束 $\psi_{m,i+1/2}$ 、方向余弦 μ_m 、重み w_m の積を全飛行方向について足し合わせることで、式(2.45)のように求めることができる。

$$J_{i+1/2}^{\text{MOC}} = \sum_{m=1}^{N_m} \mu_m \psi_{m,i+1/2} w_m \quad (2.45)$$

式(2.45)の右辺に現れる $\psi_{m,i+1/2}$ は、境界面 $i + 1/2$ に隣接する空間メッシュ領域 $i, i + 1$ の入射角度光子束 ψ^{in} 及び流出角度光子束 ψ^{out} を用いて、式(2.46)により与えることができる。

$$\psi_{m,i+1/2} = \begin{cases} \psi_{m,i+1}^{\text{out}} = \psi_{m,i}^{\text{in}} & (-1 \leq \mu_m \leq 0) \\ \psi_{m,i}^{\text{out}} = \psi_{m,i+1}^{\text{in}} & (0 \leq \mu_m \leq 1) \end{cases} \quad (2.46)$$

上述した通り、輸送計算による空間メッシュ領域内全光子束 $\phi_i^{\text{MOC}}, \phi_{i+1}^{\text{MOC}}$ を式(2.43)に代入したとしても、輸送計算により求められた正味光子流 $J_{i+1/2}^{\text{MOC}}$ と一致しない。

$$J_{i+1/2}^{\text{MOC}} \neq \frac{-2D_i D_{i+1}}{D_i \Delta x_{i+1} + D_{i+1} \Delta x_i} (\phi_{i+1}^{\text{MOC}} - \phi_i^{\text{MOC}}) \quad (2.47)$$

上式において、輸送計算による空間メッシュ領域内全光子束 $\phi_i^{\text{MOC}}, \phi_{i+1}^{\text{MOC}}$ は、式(2.48)で求めることができる。

$$\phi_i^{\text{MOC}} = \sum_{m=1}^{N_m} \psi_{m,i}^{\text{ave}} w_m = \sum_{m=1}^{N_m} \psi_{m,i}^{\text{ave}} \Delta \mu_m \quad (2.48)$$

そこで、式(2.47)の両辺を一致させるために、式(2.47)の右辺が $J_{i+1/2}^{\text{MOC}}$ と等しくなるような補正項を求め、右辺に加えることとする。正味光子流の補正項としては様々な計算式が考案されているが、数値計算上の安定性を考えて、式(2.49)に基づいて正味光子流の補正を行うことが多い[19]。

$$J_{i+1/2}^{\text{MOC}} = \frac{-2D_i D_{i+1}}{D_i \Delta x_{i+1} + D_{i+1} \Delta x_i} (\phi_{i+1}^{\text{MOC}} - \phi_i^{\text{MOC}}) + D_{\text{cor},i+1/2} (\phi_{i+1}^{\text{MOC}} + \phi_i^{\text{MOC}}) \quad (2.49)$$

ここで、 $D_{\text{cor},i+1/2}$ は境界面 $i + 1/2$ における光子流補正係数を意味する。この補正係数 $D_{\text{cor},i+1/2}$ の値は、式(2.49)を変形した式(2.50)に基づくことで、輸送計算で得られた $\phi_i^{\text{MOC}}, \phi_{i+1}^{\text{MOC}}, J_{i+1/2}^{\text{MOC}}$ を用いて計算することができる。

$$\begin{aligned} D_{\text{cor},i+1/2} (\phi_{i+1}^{\text{MOC}} + \phi_i^{\text{MOC}}) &= J_{i+1/2}^{\text{MOC}} - \frac{-2D_i D_{i+1}}{D_i \Delta x_{i+1} + D_{i+1} \Delta x_i} (\phi_{i+1}^{\text{MOC}} - \phi_i^{\text{MOC}}) \\ \therefore D_{\text{cor},i+1/2} &= \frac{J_{i+1/2}^{\text{MOC}} - \frac{-2D_i D_{i+1}}{D_i \Delta x_{i+1} + D_{i+1} \Delta x_i} (\phi_{i+1}^{\text{MOC}} - \phi_i^{\text{MOC}})}{\phi_{i+1}^{\text{MOC}} + \phi_i^{\text{MOC}}} \end{aligned} \quad (2.50)$$

式(2.49)において補正項を表現する際、全光子束の差 $(\phi_{i+1}^{\text{MOC}} - \phi_i^{\text{MOC}})$ ではなく、全光子束の和 $(\phi_{i+1}^{\text{MOC}} + \phi_i^{\text{MOC}})$ を用いている理由は、式(2.50)で示した補正係数 $D_{\text{cor},i+1/2}$ の計算において $\phi_{i+1}^{\text{MOC}} \approx \phi_i^{\text{MOC}}$ の条件においてゼロ割が生じることを避けるためである。

以上より、輸送計算を再現するように補正した拡散方程式における正味光子流は、式(2.51)、(2.52)によってそれぞれ表すことができる。

$$J_{i-1/2} = \frac{-2D_{i-1} D_i}{D_{i-1} \Delta x_i + D_i \Delta x_{i-1}} (\phi_i - \phi_{i-1}) + D_{\text{cor},i-1/2} (\phi_i + \phi_{i-1}) \quad (2.51)$$

$$J_{i+1/2} = \frac{-2D_i D_{i+1}}{D_i \Delta x_{i+1} + D_{i+1} \Delta x_i} (\phi_{i+1} - \phi_i) + D_{\text{cor},i+1/2} (\phi_{i+1} + \phi_i) \quad (2.52)$$

式(2.51), (2.52)を式(2.39)に代入して得られる拡散方程式を解くことで、輸送計算の結果を再現する拡散計算の数値解を得ることができる。式(2.51), (2.52)を式(1.1)に代入すると

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta x_i} \frac{-2D_i D_{i+1}}{D_i \Delta x_{i+1} + D_{i+1} \Delta x_i} (\phi_{i+1} - \phi_i) + \frac{1}{\Delta x_i} D_{\text{cor},i+1/2} (\phi_{i+1} + \phi_i) \\ & + \frac{1}{\Delta x_i} \frac{2D_{i-1} D_i}{D_{i-1} \Delta x_i + D_i \Delta x_{i-1}} (\phi_i - \phi_{i-1}) - \frac{1}{\Delta x_i} D_{\text{cor},i-1/2} (\phi_i + \phi_{i-1}) + \mu_{a,i} \phi_i \\ & = q_i \end{aligned}$$

となる。両辺の各項を展開すると

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\Delta x_i} \frac{2D_i D_{i+1}}{D_i \Delta x_{i+1} + D_{i+1} \Delta x_i} \phi_{i+1} + \frac{1}{\Delta x_i} \frac{2D_i D_{i+1}}{D_i \Delta x_{i+1} + D_{i+1} \Delta x_i} \phi_i + \frac{1}{\Delta x_i} D_{\text{cor},i+1/2} \phi_{i+1} \\ & + \frac{1}{\Delta x_i} D_{\text{cor},i+1/2} \phi_i + \frac{1}{\Delta x_i} \frac{2D_{i-1} D_i}{D_{i-1} \Delta x_i + D_i \Delta x_{i-1}} \phi_i \\ & - \frac{1}{\Delta x_i} \frac{2D_{i-1} D_i}{D_{i-1} \Delta x_i + D_i \Delta x_{i-1}} \phi_{i-1} - \frac{1}{\Delta x_i} D_{\text{cor},i-1/2} \phi_i - \frac{1}{\Delta x_i} D_{\text{cor},i-1/2} \phi_{i-1} \\ & + \mu_{a,i} \phi_i = q_i \end{aligned}$$

となる。 $\phi_{i-1}, \phi_i, \phi_{i+1}$ に注目してまとめると、

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta x_i} \left(-\frac{2D_{i-1} D_i}{D_{i-1} \Delta x_i + D_i \Delta x_{i-1}} - D_{\text{cor},i-1/2} \phi_{i-1} \right) \phi_{i-1} \\ & + \left\{ \mu_{a,i} + \frac{1}{\Delta x_i} \left(\frac{2D_i D_{i+1}}{D_i \Delta x_{i+1} + D_{i+1} \Delta x_i} + \frac{2D_{i-1} D_i}{D_{i-1} \Delta x_i + D_i \Delta x_{i-1}} + D_{\text{cor},i+1/2} - D_{\text{cor},i-1/2} \right) \right\} \phi_i \\ & + \frac{1}{\Delta x_i} \left(-\frac{2D_i D_{i+1}}{D_i \Delta x_{i+1} + D_{i+1} \Delta x_i} + D_{\text{cor},i+1/2} \right) \phi_{i+1} = q_i \end{aligned}$$

となる。よって、輸送計算の結果を再現する拡散計算の数値解を得るためには、式(2.53)に示す三点階差式を解けばよい。

$$A_{i-1/2} \phi_{i-1} + A_i \phi_i + A_{i+1/2} \phi_{i+1} = q_i \quad (2.53)$$

上式において、係数 A_{i-1}, A_i, A_{i+1} は式(2.54), (2.55), (2.56)でそれぞれ定義される量である。なお、体系端の境界面では、真空境界条件に基づき、外挿距離(= 2.1312D)を用いて定義される[20]。

$$A_{i-1/2} = \begin{cases} \frac{1}{\Delta x_i} \frac{-D_i}{(\Delta x_i/2 + 2.1312D_i)} & (i = 1) \\ \frac{1}{\Delta x_i} \left(\frac{-2D_i D_{i-1}}{D_i \Delta x_{i-1} + D_{i-1} \Delta x_i} - D_{\text{cor},i-1/2} \right) & (i \neq 1) \end{cases} \quad (2.54)$$

$$A_i = \mu_a + \frac{1}{\Delta x_i} \left(\frac{2D_i D_{i+1}}{D_i \Delta x_{i+1} + D_{i+1} \Delta x_i} + \frac{2D_{i-1} D_i}{D_{i-1} \Delta x_i + D_i \Delta x_{i-1}} + D_{\text{cor},i+1/2} - D_{\text{cor},i-1/2} \right) \quad (2.55)$$

$$A_{i+1/2} = \begin{cases} \frac{1}{\Delta x_i} \left(\frac{-2D_{i+1}D_i}{D_{i+1}\Delta x_i + D_i\Delta x_{i+1}} + D_{\text{cor},i+1/2} \right) & (i \neq N_x) \\ \frac{1}{\Delta x_i (2.1312D_i + \Delta x_i/2)} & (i = N_x) \end{cases} \quad (2.56)$$

式(2.53)を、LU 分解を利用して解くことで、すべての空間メッシュ領域について、輸送計算の解を再現する拡散計算の数値解 ϕ_i^{DIF} を得ることができる。こうして得られた全光子束 ϕ_i^{DIF} を使用し、 ϕ_i^{DIF} を n 反復目の輸送計算解 $\phi_{n,i}^{\text{MOC}}$ で割った係数 $\phi_i^{\text{DIF}}/\phi_{n,i}^{\text{MOC}}$ を求め、式(2.57)で示したように $\phi_{n,i}^{\text{MOC}}$ にかけることによって輸送計算の全光子束分布を更新する。

$$\tilde{\phi}_{n,i}^{\text{MOC}} = \phi_{n,i}^{\text{MOC}} \frac{\phi_i^{\text{DIF}}}{\phi_{n,i}^{\text{MOC}}} \quad (2.57)$$

ここで、 $\tilde{\phi}_{n,i}^{\text{MOC}}$ は更新後の輸送計算の全光子束である。ただし、 ϕ_i^{DIF} に負の値が生じた場合には、更新後の $\tilde{\phi}_{n,i}^{\text{MOC}}$ が負の値となることを避けるために更新は行わない。

2.5 本章のまとめ

本章では、光輸送計算における中性子輸送計算手法について説明した。

まず2.2節では、中性子輸送方程式と光輸送方程式についてそれぞれ説明し、両者の相違点を明らかにした。相違点として、①光輸送計算における光学特性値 μ と中性子輸送計算における巨視的反応断面積 Σ が等価な物理量であること、②光輸送計算では核分裂が生じないこと、③光輸送計算中ではエネルギー分布が変化しないこと、④非等方性を事実上考慮する必要がないことが挙げられる。これらの相違点に注意して中性子輸送方程式を変形し、本研究で解くべき光輸送計算を模擬した中性子輸送方程式を示した。

2.3節では、本研究で用いた中性子輸送計算手法について説明した。まず2.3.1項では、1次元体系における Method of Characteristics(MOC)法の計算理論を述べた。光輸送方程式は複雑であり、解析解を求めることが困難であるため、本来連続である空間領域と光子の飛行方向角度を離散化することで、方程式を簡略化して近似解を求めている。空間領域を N_i 個に分割、光子の飛行方向を N_m 個に分割する場合、 $N_i \times N_m$ 個の1階線形微分方程式を解くことで、全ての空間メッシュ領域における全光子束 ϕ_i を求めることができる。ただし、全光子束 ϕ_i を求めるためには、光子源 Q_i の値が既知である必要があり、光子源 Q_i を求めるためには、全光子束 ϕ_i の値が既知である必要がある。そこで、光子束空間分布から光子源空間分布を更新する内部反復計算を用いることで、真値に近い収束解を求めている。続く2.3.2項では、離散化した角度方向を取り扱う上で重要な、角度分点セットについて説明した。角度分点セットとは、代表方向の方向余弦 μ_m と重み w_m のペア N_m 個から成る角度方向のセットであり、これを適切に設定することで効率良く角度数値積分を行うことができる。光輸送計算においても、原子力分野で広く用いられている Gauss-Legendre 分点(GL 分点)や、角度分布が不連続点を保つ場合に有効な Double Gauss-Legendre 分点(DGL 分点)等を用いることで、効率的な数値積分を行うことが可能であると期待される。

2.4節では、拡散加速法について説明した。まず2.4.1項では、拡散加速法の概要を述

べた。中性子輸送計算にて行われる内部反復計算の収束性は、散乱比 Σ_s/Σ_t に依存しており、散乱比が1に近いほど収束性が悪く、収束までに多くの反復回数が必要となる。散乱比が1に近い軽水炉等の体系において効率的に輸送計算を行うために、拡散加速法が用いられる。光輸送計算においても、散乱比が1に近い体系が登場するため、拡散加速法が有効に機能し、収束に要する反復回数を削減できることが期待される。続く2.4.1項では、拡散加速法の計算理論を説明した。拡散加速法は、中性子輸送計算の反復中に輸送計算の解を再現する拡散加速計算を行い、拡散加速計算の解で輸送計算の解を更新することでその収束を加速する。拡散加速計算において、輸送計算の解を再現するためには、輸送計算の結果から、各境界面における光子流補正係数 D_{cor} を求める必要がある。光子流補正係数 D_{cor} を求めることができれば、三点階差式を解くことで、比較的簡単に全空間メッシュ領域の全光子束は計算される。

2.6 参考文献

- [1] 山本章夫, “Boltzmann 方程式の解法 ～決定論的手法～”, 第34回炉物理夏期セミナーテキスト, 日本原子力学会 (2002).
- [2] 山本俊弘, “Boltzmann 方程式の解法 -確率論的手法による解法”, 第34回炉物理夏期セミナーテキスト, 日本原子力学会 (2002).
- [3] 山本章夫, “拡散方程式の数値解法の基礎”, 第36回炉物理夏期セミナーテキスト, 日本原子力学会 (2004).
- [4] 加藤祐生, “LEAF 法に基づく三次元中性子輸送計算手法の開発”, 名古屋大学大学院工学研究科 修士論文 (2015).
- [5] 山本章夫, “炉心解析手法講義資料”, 名古屋大学大学院工学研究科山本章夫研究室 ;<https://www.fermi.energy.nagoya-u.ac.jp/reserch.html> (2022年11月10日現在).
- [6] 牛尾直史, “Characteristics 法の基礎”, 第36回炉物理夏期セミナーテキスト, 日本原子力学会(2004).
- [7] 成田正邦, “ボルツマン方程式の起源”, 第34回炉物理夏期セミナーテキスト, 日本原子力学会 (2002).
- [8] M. Planck, *Theory of Heat Radiation*, Dover Publications, Nabu Press, ISBN0486668118(2012).
- [9] 藤井宏之, “生体における光の輸送現象: 輻射輸送方程式の数値計算と光トモグラフィへの応用に向けて”, 第50回炉物理夏期セミナーテキスト, pp.39-64(2018).
- [10] 小池裕幸, “分光測定 of 基礎”, 低温科学, 光合成研究法. 北海道大学低温科学研究所, 日本光合成研究会共編, **67**, pp.432-447(2009).
- [11] 天野虎之介, “光輸送解析への中性子輸送計算手法の適用性に関する検討”, 名古屋大学工学部 卒業論文(2021).
- [12] R. E. ALCOUFFE et al., “PARTISN: A Time-Dependent, Parallel Neutral Particle Transport Code System,” LA-UR-08-07258 (2008).

- [13] 田渕将人, “Characteristics 法に基づいた輸送計算手法の高精度化の検討”, 名古屋大学大学院工学研究科 修士論文(2006).
- [14] 山本敏久 他, “離散系のシミュレーション手法(その 1)”, 日本原子力学会誌, **48**, pp.579-585 (2006).
- [15] A. Yamamoto et al., “GENESIS: A three-dimensional heterogeneous transport solver based on the Legendre polynomial expansion of angular flux method,” *Nucl. Sci. Eng.*, DOI:10.1080/00295639.2016.1273002.
- [16] J. RHODES, K. SMITH, and D. LEE, “CASMO-5 Development and Applications,” Proc. PHYSOR 2006, Vancouver, Canada, September 10–14, 2006 (2006).
- [17] B. KOCHUNAS et al., “Overview of Development and Design of MPACT: Michigan Parallel Characteristics Transport Code,” Proc. M&C 2013, Sun Valley, Idaho, May 5–9 (2013) (CD-ROM).
- [18] K. S. SMITH and J. D. RHODES III, Full-Core, 2-D, LWR Core Calculations with CASMOProc. PHYSOR 2002, Seoul, Korea, October 7 10, 2002, 13A-04 (2002) (CD-ROM).
- [19] K. S. SMITH, “Nodal Method Storage Reduction by Non-Linear Iteration,” *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **44**, 265 (1984).
- [20] 丸山博見 他, 1 原子炉物理(シリーズ: 現代核科学技術の基礎), 日本原子力学会, Tokyo, p66, ISBN-978-4-89047-174-4 (2008).

第3章 反射屈折を考慮した MOC に基づく光輸送計算コードの開発および検証

3.1 本章の概要

第1章で説明した通り、本研究の最終目標は、中性子輸送計算手法を用いることで、3次元体系における生体内光輸送計算を高速かつ高精度に行い、拡散光トモグラフィの解決に貢献することである。中性子輸送計算手法を光輸送計算へ適用する上での課題として、中性子輸送計算では反射屈折を考慮する方法が確立されていないことが挙げられる。生体組織の屈折率はおよそ 1.4 であり、ヒト頸部等に存在する空気領域(屈折率 1.0)との境界面で反射屈折現象が生じる[2]。反射屈折現象が生じると、光子束の角度分布は大きく変化し、光子束空間分布に影響が及ぶ。そのため、まずは反射屈折を考慮した厳密な光輸送計算に対して、中性子輸送計算手法を適用することが可能であることを確認し、反射屈折が計算結果に及ぼす影響を確認する必要がある。

そこで、本章では、上記の理由から、以下で述べるような検討を実施した。

- ① 中性子輸送計算手法(MOC[1])における反射屈折現象の取り扱い方法を考案し、反射屈折を考慮した厳密な光輸送計算コードを開発。
- ② 作成した自作光輸送計算コードの検証作業(verification)として、光輸送モンテカルロ計算コード MCML[3]で得られた参照解と同じ結果になることを確認。
- ③ 反射屈折現象を考慮する必要があることを確かめるために、反射屈折を考慮しない条件での収束解、反射のみを考慮した条件での収束解が、反射屈折を考慮した条件での収束解とどの程度の差異を生じるかを確認。

本章の構成を説明する。まず 3.2 節では、輸送計算における反射屈折現象について説明する。3.2.1 項では、反射屈折現象の概要を確認し、反射屈折現象を境界条件として取り扱うことが可能であると示す。続く 3.2.2 項及び 3.2.3 項では、それぞれ反射境界条件及び屈折境界条件について説明する。

3.3 節では、反射屈折を考慮した厳密な光輸送計算コードについて説明する。本計算コードで用いている MOC では、本来連続的な光子の飛行方向を、いくつかの代表方向に離散化している。そのため、反射境界条件及び屈折境界条件についても、離散化した角度を用いて計算する必要がある。3.3.1 項で離散化した角度を用いた場合の反射境界条件、屈折境界条件についてそれぞれ説明する。続いて、両者を組み合わせた反射屈折境界条件について、反射屈折重みテーブルを用いた計算方法を提案する。3.3.2 項では、反射屈折境界条件の実装に伴う従来 MOC との差異について述べる。3.3.3 項では、作成した計算コードのフローチャートを示し、3.3.4 項ではその詳細設計を述べる。

3.4 節では、自作計算コードを用いた検証結果について報告する。3.4.1 項では、検証に用いる計算体系と計算条件を示す。続く 3.4.2 項では、参照解の計算方法について説明する。3.4.3 項では、自作計算コードによる収束解と MCML の参照解を比較することで、自作計算コードが正しく反射屈折現象を取り扱うことができることを確認する。3.4.4 項では、自作計算コードを用いて、反射屈折を考慮しない条件、反射のみを考慮する条件、反

射屈折を考慮する条件でそれぞれ計算を行い、比較することで反射屈折効果の重要性を議論する。

3.5 節では本章のまとめ、3.6 節では参考文献をそれぞれ示す。

3.2 輸送計算における反射屈折現象

3.2.1 反射屈折現象

光が屈折率の異なる物質間の境界面に入射すると、一部が入射側へ反射、残りが境界面を透過し、透過した光は進行方向が変化する(Fig 3.1)。原子炉物理学の中性子輸送計算で対象としている $10^{-5}\text{eV}\sim 20\text{MeV}$ の中性子とは異なり、反射屈折は光特有の現象であり、光が反射及び透過する割合は後述するフレネルの法則[2]、屈折による角度変化の大きさはスネルの法則[2]に従っている。

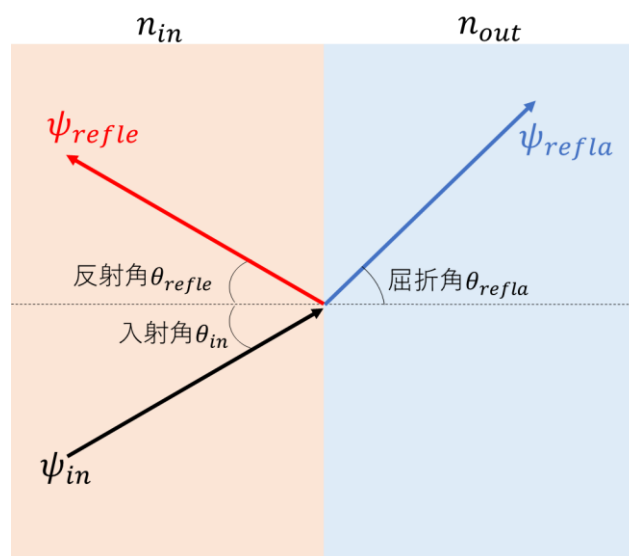


Fig 3.1 反射屈折現象の模式図

反射及び屈折は光が物質の境界面に入射した際に生じる現象であり、MOC においては境界条件として考慮することで取り扱うことができると考えられる。そこで本研究では、中性子輸送計算における決定論的手法の一つとして活用されている MOC に対して、反射・屈折現象を考慮した計算を行うことができるように、屈折率の異なる物質境界面における反射・屈折境界条件の与え方を新たに考案した。次項より、反射・屈折境界条件の詳細について、反射境界条件と屈折境界条件に分けて説明する。

3.2.2 反射境界条件

本項では、屈折率の異なる物質の境界面における光の反射境界条件について説明する。屈折率の異なる物質間の境界面に入射した光子束 ψ_{in} は、一部反射あるいは全反射される。反

射される光子束の割合は反射率 R で表され、屈折率 n_{in} の物質から屈折率 n_{out} の物質へ、入射角 θ_{in} で入射した光の反射率 R はフレネルの法則[2]を用いて、次式で評価することができる。

$$R(\theta_{in}, n_{in}, n_{out}) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[\frac{n_{in} \cos \theta_{in} - n_{out} \cos \theta^{refra}}{n_{in} \cos \theta_{in} + n_{out} \cos \theta^{refra}} \right]^2 + \frac{1}{2} \left[\frac{n_{in} \cos \theta^{refra} - n_{out} \cos \theta_{in}}{n_{in} \cos \theta^{refra} + n_{out} \cos \theta_{in}} \right]^2, & 0 \leq \theta_{in} < \theta_c \\ 1, & \theta_c \leq \theta_{in} \leq \frac{\pi}{2} \end{cases} \quad (3.1)$$

ここで θ^{refra} は屈折角であり、次式で計算される。 θ^{refra} の特性については次項にて後述する。

$$\theta^{refra} = \sin^{-1} \left(\frac{n_{in}}{n_{out}} \sin \theta_{in} \right) \quad (3.2)$$

θ_c は臨界角であり、次式で計算される量である。

$$\theta_c = \begin{cases} \sin^{-1} \left(\frac{n_{out}}{n_{in}} \right), & n_{in} > n_{out} \\ 0, & n_{in} < n_{out} \end{cases} \quad (3.3)$$

臨界角 θ_c の物理的な意味について補足する。光が屈折率の大きい物質から屈折率の小さい物質に入射する際、屈折角は入射角よりも大きくなる。この条件で入射角を大きくしていくと、ある角度で屈折角が 90° に達するが、この角を臨界角という。入射角が臨界角よりも大きい場合、屈折光が存在せず、全反射が生じる(Fig 3.2)。光が屈折率の小さい物質から屈折率の大きい物質に入射する際には、屈折角は入射角よりも小さくなるため、臨界角は存在せず全反射は生じない。

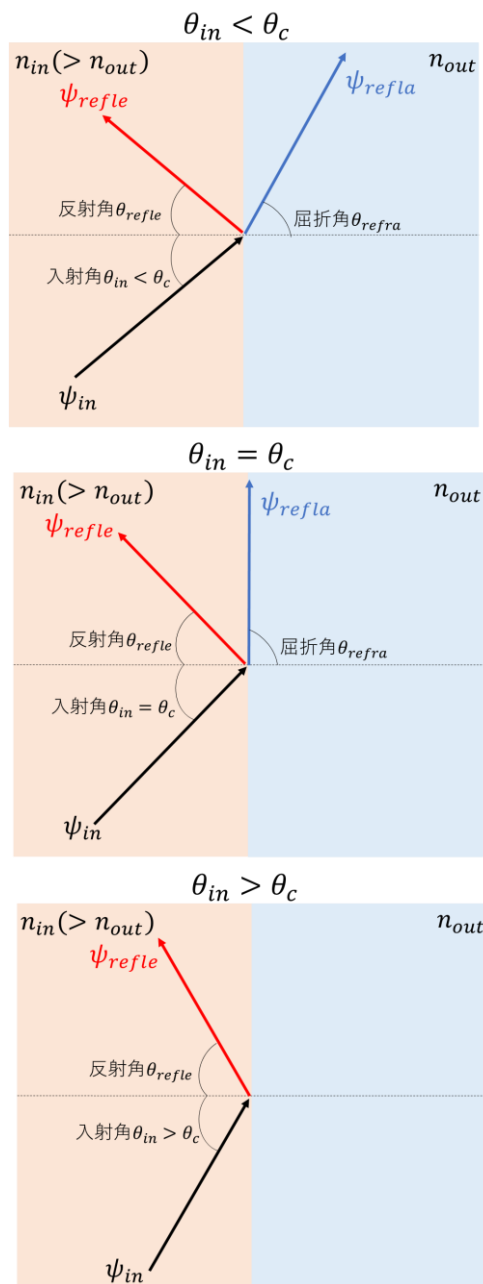


Fig 3.2 臨界角 θ_c の概念図

屈折率の大きい方を $n = 1.001, 1.4, 2.0$ 、屈折率の小さい方を $n = 1.0$ とし、各屈折率の組み合わせにおける反射率 R の角度依存性を Fig 3.3 から Fig 3.8 に示す。ここで、 $n = 1.4, 1.0$ は生体組織および空気領域の屈折率の値であり、文献[2]に基づいて設定した。

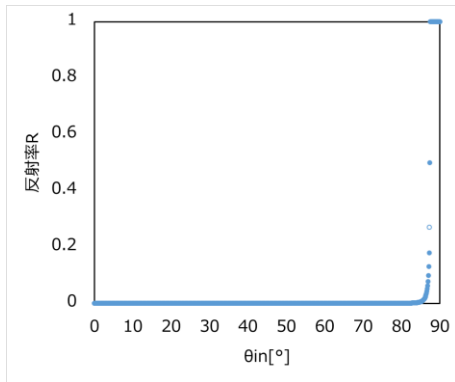


Fig 3.3 反射率 R の角度依存性
 $(n_{in} = 1.001, n_{out} = 1.0)$

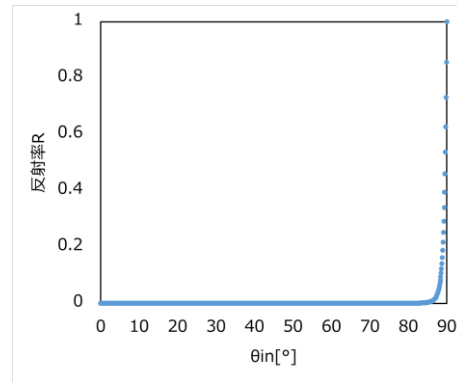


Fig 3.4 反射率 R の角度依存性
 $(n_{in} = 1.0, n_{out} = 1.001)$

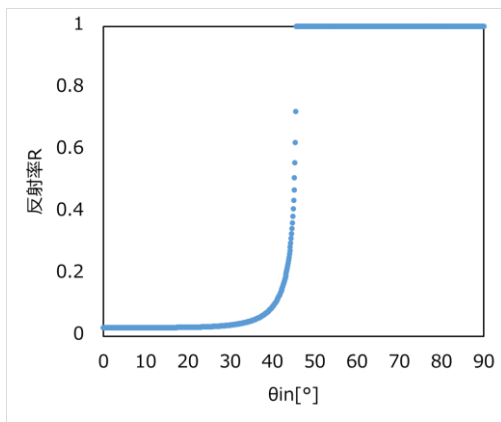


Fig 3.5 反射率 R の角度依存性
 $(n_{in} = 1.4, n_{out} = 1.0)$

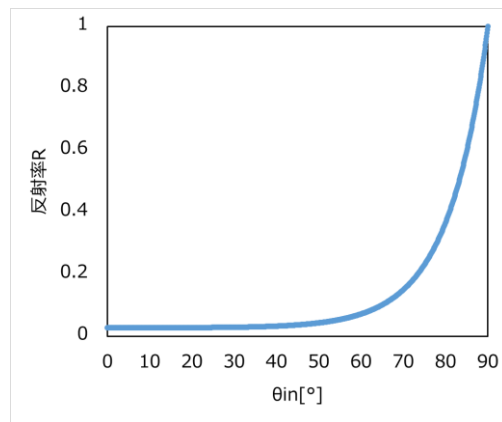


Fig 3.6 反射率 R の角度依存性
 $(n_{in} = 1.0, n_{out} = 1.4)$

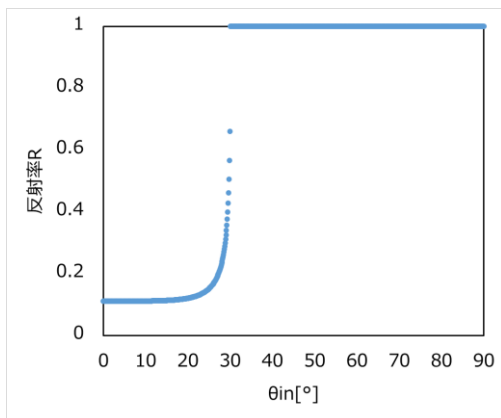


Fig 3.7 反射率 R の角度依存性
 $(n_{in} = 2.0, n_{out} = 1.0)$

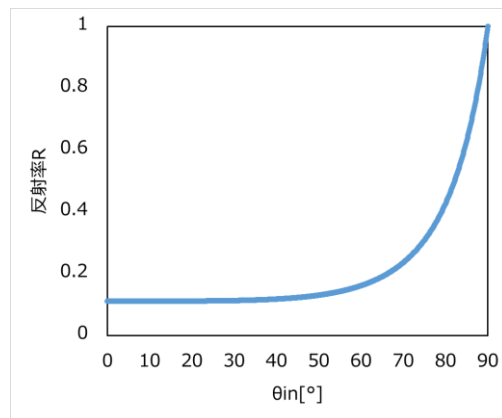


Fig 3.8 反射率 R の角度依存性
 $n_{in} = 1.0, n_{out} = 2.0$

$n_{in} > n_{out}$ の場合(Fig 3.3, Fig 3.5, Fig 3.7)を観察すると、それぞれの条件における臨界角は $\theta_c \approx 87.4^\circ, 45.6^\circ, 30^\circ$ であり、 $\theta_c < \theta_{in}$ の範囲で全反射が生じていることが確認できる。 $\theta_{in} = \theta_c$ のとき、 R の微分値は不連続となり、滑らかでない。 $\theta_c > \theta_{in}$ の範囲では、 θ_{in} が小さいほど、すなわち境界面に対して垂直に近い角度で入射するほど R も小さく、 θ_{in} が θ_c に近づくと

R が急激に増加する。この R の立ち上がり方は物質の屈折率に依存しており、屈折率同士の差が小さい場合には、 θ_c が大きくなり、立ち上がり方が急峻になる。 n_{in} の値が大きいほど、入射した光子束に対する、反射される光子束の割合が多くなる傾向が読み取れる。

$n_{in} < n_{out}$ の場合(Fig 3.4, Fig 3.6, Fig 3.8)を観察すると、 θ_c が存在しないことが確認できる。これは前述の通り、空気領域の屈折率が生体組織の屈折率よりも小さく、屈折角が入射角よりも小さくなるためである。 θ_c が存在しないにも関わらず、 $\theta_{in} = 90^\circ$ のとき $R = 1$ となり、直感に反する。式(3.1)に $\theta_{in} = 90^\circ$ を代入すると、 $\cos\theta_{in} = 0$ より分母分子が約分され、 n_{in}, n_{out} の値によらず $R = 1$ となることが確認できる。これは物理的なイメージからも納得することができる。 $\theta_{in} = 90^\circ$ は、光が境界面に対して完全に水平方向へ直進することを表す。そのため光が境界面を透過することはあり得ず、 $R = 1$ として辻褃を合わせている。 n_{in} が大きいほど、 R の立ち上がり方は緩やかになる。

Fig 3.3 と Fig 3.4、Fig 3.5 と Fig 3.6、Fig 3.7 と Fig 3.8 を、同じ入射角でそれぞれ見比べると、 $n_{in} > n_{out}$ の場合には、 $n_{in} < n_{out}$ の場合よりも反射される光子束の割合が大きい。ただし、 $\theta_{in} = 0^\circ$ では、 $n_{in} > n_{out}$ の場合と $n_{in} < n_{out}$ の場合で、 R の値が一致していることが読み取れる。式(3.2)に $\theta_{in} = 0^\circ$ を代入すると、 $\theta_{out} = 0^\circ$ となる。よって $\cos\theta_{in} = \cos\theta_{out} = 1$ であり、式(3.1)より $\theta_{in} = 0^\circ$ での R は n_{in}, n_{out} の値のみで決定される。

光の反射角 θ_{refle} は入射角 θ_{in} に等しく、次式で決定することができる。

$$\theta_{refle} = \theta_{in} \quad (3.4)$$

式(3.1),(3.4)より、屈折率の異なる物質境界面において反射した光子束 $\psi_{refle}(\theta_{refle})$ は次式で求めることができる。

$$\psi_{refle}(\theta_{refle}) = R(\theta_{in}, n_{in}, n_{out})\psi_{in}(\theta_{in}) \quad (3.5)$$

3.2.3 屈折境界条件

本項では、屈折率の異なる物質の境界面における屈折境界条件について説明する。屈折後の光子束 ψ_{refla} は、境界面を透過した光子束 ψ_{out} を求め、 ψ_{out} の角度変化を考慮することで得られる。そこで、まずは透過光子束 ψ_{out} の求め方を説明する。

屈折率の異なる物質間の境界面に入射した光子束 ψ_{in} は、透過率 T に基づいて一部透過する。反射率 R と透過率 T の総和が1になることから、透過率 T は次式で計算できる。

$$T(\theta_{in}, n_{in}, n_{out}) = 1 - R(\theta_{in}, n_{in}, n_{out}) \quad (3.6)$$

屈折率の大きい方を $n = 1.001, 1.4, 2.0$ 、屈折率の小さい方を $n = 1.0$ とし、各屈折率の組み合わせにおける透過率 T の角度依存性を Fig 3.9 から Fig 3.14 に示す。ここで、 $n = 1.4, 1.0$ は生体組織および空気領域の屈折率の値であり、文献[2]に基づいて設定した。

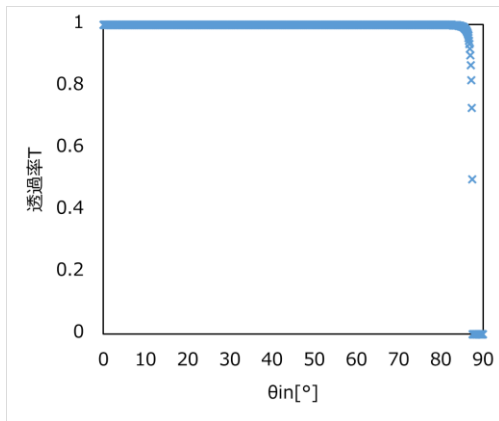


Fig 3.9 透過率 T の角度依存性
($n_{in} = 1.001, n_{out} = 1.0$)

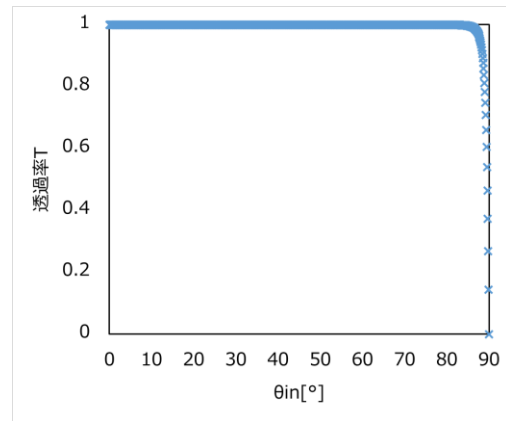


Fig 3.10 透過率 T の角度依存性
($n_{in} = 1.0, n_{out} = 1.001$)

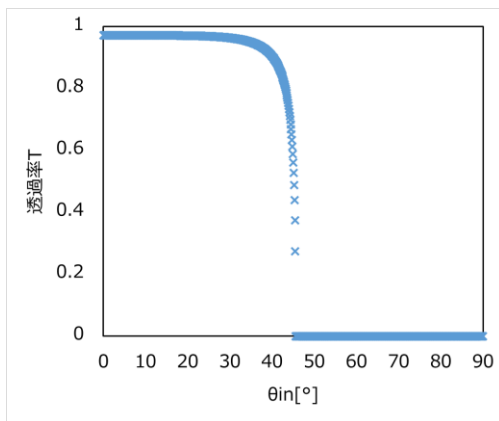


Fig 3.11 透過率 T の角度依存性
($n_{in} = 1.4, n_{out} = 1.0$)

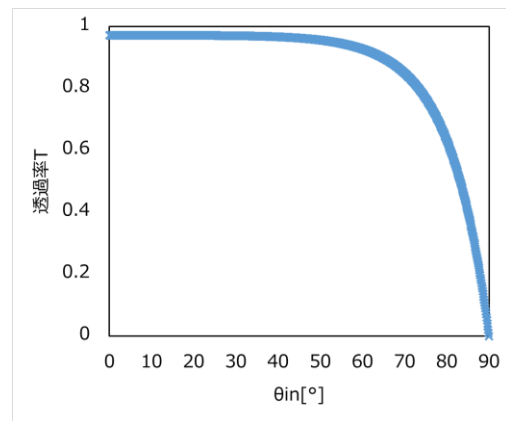


Fig 3.12 透過率 T の角度依存性
($n_{in} = 1.0, n_{out} = 1.4$)

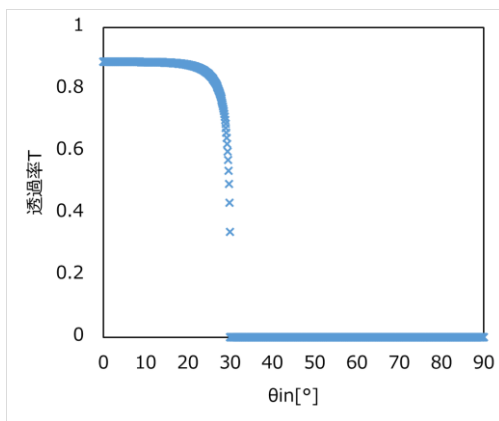


Fig 3.13 透過率 T の角度依存性
($n_{in} = 2.0, n_{out} = 1.0$)

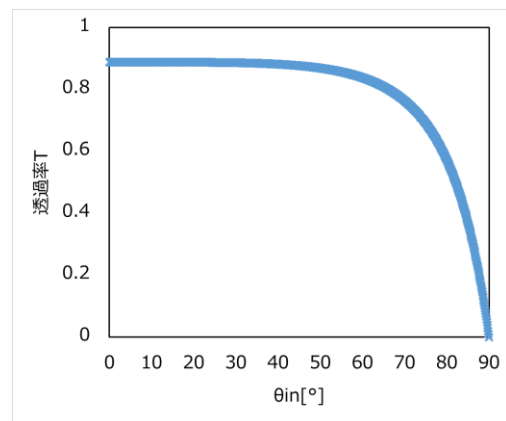


Fig 3.14 透過率 T の角度依存性
 $n_{in} = 1.0, n_{out} = 2.0$

$n_{in} > n_{out}$ の場合(Fig 3.9, Fig 3.11, Fig 3.13)を観察すると、それぞれの条件における臨界角は前節で述べた通り、 $\theta_c \approx 87.4^\circ, 45.6^\circ, 30^\circ$ であり、 $\theta_c < \theta_{in}$ の範囲では全反射が生じること
で $T = 0$ となることが確認できる。透過光子束 ψ_{out} は透過率 T を用いて次式で計算できる。

$$\psi_{out} = T(\theta_{in}, n_{in}, n_{out})\psi_{in}(\theta_{in}) \quad (3.7)$$

続いて、 ψ_{out} の角度変化を考慮した屈折後光子束 ψ_{refra} の求め方を説明する。式(3.1)で示した通り、 θ_{refra} は次式で計算できる。

$$\theta_{refra} = \sin^{-1}\left(\frac{n_{in}}{n_{out}}\sin\theta_{in}\right) \quad (3.8)$$

屈折率の大きい方を $n = 1.001, 1.4, 2.0$ 、屈折率の小さい方を $n = 1.0$ とし、各屈折率の組み合わせにおける入射角 θ_{in} と屈折角 θ_{refra} の関係性を Fig 3.15 から Fig 3.20 に示す。

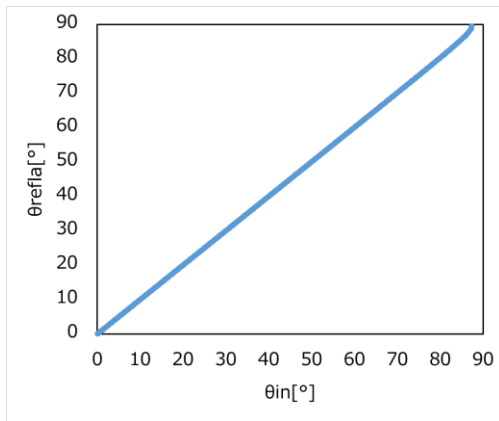


Fig 3.15 θ_{refra} と θ_{in} の関係
($n_{in} = 1.001, n_{out} = 1.0$)

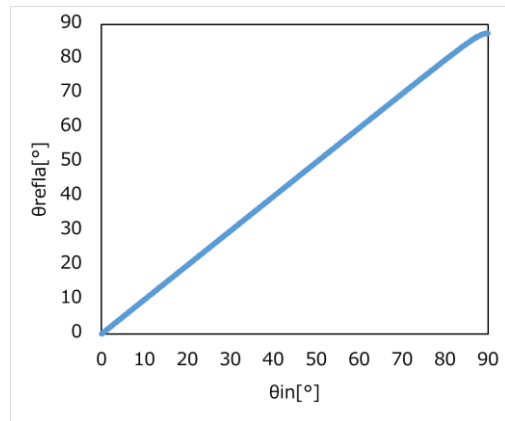


Fig 3.16 θ_{refra} と θ_{in} の関係
($n_{in} = 1.0, n_{out} = 1.001$)

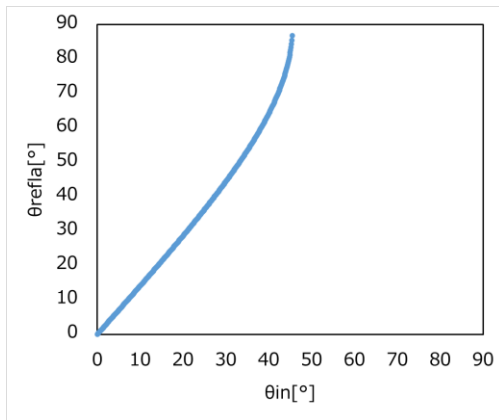


Fig 3.17 θ_{refra} と θ_{in} の関係
($n_{in} = 1.4, n_{out} = 1.0$)

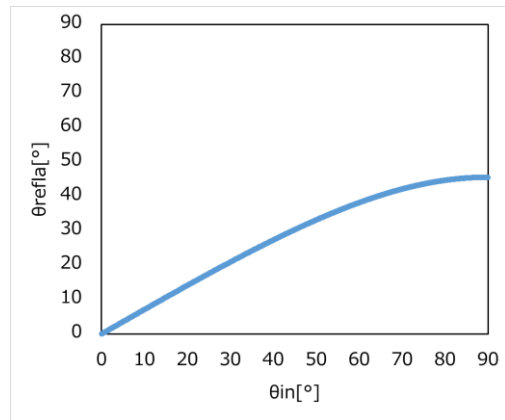


Fig 3.18 θ_{refra} と θ_{in} の関係
($n_{in} = 1.0, n_{out} = 1.4$)

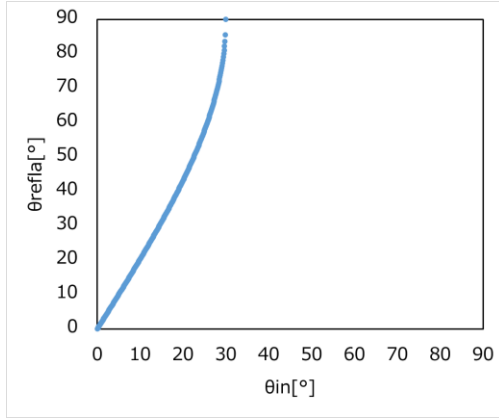


Fig 3.19 θ_{refra} と θ_{in} の関係

$$(n_{in} = 2.0, n_{out} = 1.0)$$

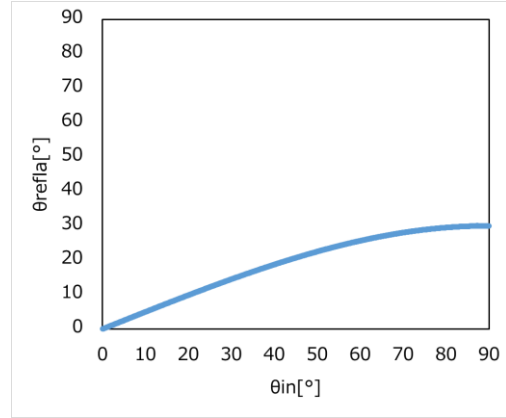


Fig 3.20 θ_{refra} と θ_{in} の関係

$$(n_{in} = 1.0, n_{out} = 2.0)$$

$n_{in} = n_{out}$ の場合、 $\theta_{in} = \theta_{refra}$ となるため、右上がりの対角線となる。全ての条件に共通して、 θ_{in} が大きくなるほど、グラフと対角線のずれが大きくなり、屈折による角度変化の影響が顕著に表れる。 $n_{in} > n_{out}$ の場合(Fig 3.15, Fig 3.17, Fig 3.19)を観察すると、 θ_{in} の最大値は θ_c と一致している。 θ_{refra} は $0^\circ \sim 90^\circ$ に分布しており、 $0^\circ \leq \theta_{in} < \theta_c$ で入射した光子束は $0^\circ \sim 90^\circ$ に拡散するように進行する。

$n_{in} < n_{out}$ の場合(Fig 3.16, Fig 3.18, Fig 3.20)を観察すると、 $\theta^{refra} < \theta_{in}$ であり、 n_{out} が大きくなるほどグラフはなだらかになる。 θ_{refra} は $0^\circ \sim \theta_c$ に分布しており、 $0^\circ \leq \theta_{in} \leq 90^\circ$ で入射した光子束は $0^\circ \sim \theta_c$ に密集するように進行する。Fig 3.15 と Fig 3.16、Fig 3.17 と Fig 3.18、Fig 3.19 と Fig 3.20 をそれぞれ見比べると、 $y = x$ に対して対象になっている。これは、ある n_{in}, n_{out} に対する $\theta_{in}, \theta^{refra}$ が、 n_{in}, n_{out} を反転させた条件での $\theta^{refra}, \theta_{in}$ にそれぞれ一致することを表している。

式(3.7),(3.8)より屈折後の光子束 ψ_{refra} は $\psi_{refra}(\theta_{refra}) = T(\theta_{in}, n_{in}, n_{out})\psi_{in}(\theta_{in})$ で計算できるように思われるが、そう単純ではない。なぜなら、 ψ^{refra} を計算する際には、境界面での光子流を保存する必要があるためである。光子流とは単位面積を単位時間あたりに通過する光子の正味の数であり、角度方向の余弦 μ と光子束 ψ の積 $\mu\psi$ で表される。この定義から、ある境界面に入射する直前の光子束に基づく光子流と境界面を通過して流出した直後の光子束に基づく光子流は一致するはずである。よって ψ_{refra} は次式を満たす。

$$T(\theta_{in}, n_{in}, n_{out})\mu_{in}\psi_{in}(\theta_{in})d\mu_{in} = \mu_{refra}\psi_{refra}(\theta_{refra})d\mu_{refra} \quad (3.9)$$

$$T(\theta_{in}, n_{in}, n_{out})\cos\theta_{in}\psi_{in}(\theta_{in})d(\cos\theta_{in}) = \cos\theta_{refra}\psi_{refra}(\theta_{refra})d(\cos\theta_{refra})$$

式(3.9)を整理すると、 ψ_{refra} は次式で表せる。

$$\psi_{refra}(\theta_{refra}) = \frac{T(\theta_{in}, n_{in}, n_{out})\mu_{in}d\mu_{in}\psi_{in}(\theta_{in})}{\mu_{refra}d\mu_{refra}} \quad (3.10)$$

3.3 反射屈折を考慮した MOC 光輸送計算コードの開発

3.3.1 MOC への反射屈折境界条件の実装

本項では、3.2 節の内容をふまえ、反射・屈折境界条件を MOC に組み込むための計算手順について説明する。第 2 章で説明した通り、MOC では飛行方向を離散化して取り扱っている。そのため、反射屈折境界条件を MOC へ実装するためには、離散化した角度を用いて反射屈折境界条件を表現する必要がある。

そこで、まず 3.3.1.1 目で離散化した角度における反射境界条件の概要を、3.3.1.2 目で離散化した角度における屈折境界条件の概要を説明する。屈折境界条件では、屈折によって光子の飛行代表方向と代表方向の重みが増減する関係上、離散化することでむしろ計算方法が複雑になっている。そこで、屈折境界条件については、離散化した角度で計算を行う上での課題とその解決策に分けて説明する。3.3.1.3 目では、計算コード上における反射屈折境界条件の計算方法について説明する。

3.3.1.1 離散化した角度における反射境界条件

3.2.2 項では、飛行方向が連続的な場合、反射境界条件は式(3.5)で表現できることを説明した。ある境界面 $i + 1/2$ について、式(3.5)を離散化した角度を用いて書き換えると、方向 m から光が入射した場合の反射境界条件は式(3.11),(3.12)になる。ここで、 m は $m = 1, 2, \dots, N_m$ の範囲をとり、 m が増加するほど、 μ_m が -1 から 1 に近づく。なお、 N_m は角度分割数である。

$$\psi_{m \rightarrow N_m - m + 1, i}^{refle} = R_{m, i + 1/2} \psi_{m, i}^{out} \quad (1 \leq m \leq \frac{N_m}{2}) \quad (3.11)$$

$$\psi_{m \rightarrow N_m - m + 1, i + 1}^{refle} = R_{m, i + 1/2} \psi_{m, i + 1}^{out} \quad (\frac{N_m}{2} + 1 \leq m \leq N_m) \quad (3.12)$$

ψ^{refle} における下添え字 i は、反射後の光子束が空間メッシュ領域 i に入射することを意味する。上記の式における各変数は、それぞれ以下の物理量を表す。

$\psi_{m \rightarrow N_m - m + 1, i}^{refle}$: 方向 m から $N_m - m + 1$ 方向へ反射された光子束

$R_{m, i + 1/2}$: 方向 m で空間メッシュ境界面 $i + 1/2$ へ入射した光子束の反射率

$\psi_{m, i}^{out}$: 方向 m で空間メッシュ領域 i から流出する光子束

ここで、反射率 $R_{m, i + 1/2}$ は、 $\mu_m > 0$ の場合は式(3.13)を用いて、 $\mu_m < 0$ の場合は式(3.14)を用いて計算している。

$$R_{m, i + 1/2} = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[\frac{n_i \mu_m - n_{i+1} \mu_m^{refra}}{n_i \mu_m + n_{i+1} \mu_m^{refra}} \right]^2 + \frac{1}{2} \left[\frac{n_i \mu_m^{refra} - n_{i+1} \mu_m}{n_i \mu_m^{refra} + n_{i+1} \mu_m} \right]^2, & \mu_c \leq \mu_m \leq 1 \\ 1, & 0 \leq \theta_m < \mu_c \end{cases} \quad (3.13)$$

$$R_{m, i + 1/2} = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[\frac{n_{i+1} |\mu_m| - n_i \mu_m^{refra}}{n_{i+1} |\mu_m| + n_i \mu_m^{refra}} \right]^2 + \frac{1}{2} \left[\frac{n_{i+1} \mu_m^{refra} - n_i |\mu_m|}{n_{i+1} \mu_m^{refra} + n_i |\mu_m|} \right]^2, & \mu_c \leq \mu_m \leq 1 \\ 1, & 0 \leq \mu_m \leq \mu_c \end{cases} \quad (3.14)$$

上式において、 μ_c は臨界角の余弦を表す。 μ_m^{refra} は方向 m で入射した光の屈折角の余弦であり、式(3.15)で計算される。

$$\mu_m^{refra} = \begin{cases} \cos\left(\sin^{-1}\left(\frac{n_i}{n_{i+1}}\sin\theta_m\right)\right), & (\mu_m > 0) \\ \cos\left(\sin^{-1}\left(\frac{n_{i+1}}{n_i}\sin\theta_m\right)\right), & (\mu_m < 0) \end{cases} \quad (3.15)$$

上式において、 θ_m は方向 m における代表方向の極角である。式(3.13),(3.14)において、反射率を計算する際の入射角度は代表飛行方向 μ_m としており、代表飛行方向がカバーする範囲内で反射率が一定であると仮定している。そのため、角度分割数が少ないと離散化誤差が大きくなり、計算精度が悪化する。

以下、具体例を用いて、反射境界条件の概要を確認する。等余弦重み分点を用いて飛行方向を8分割する。屈折率1.4の物質から屈折率1.0の物質へ強度1の光子束が入射して反射が生じることを考える。Fig 3.21は、 $m = 8$ 番目の方向で入射する光子を表している。このとき、代表飛行方向は $\mu_8 = 0.875$ 、重みは $\Delta\mu_8 = 0.25$ であり、反射率は式(3.13)から $R_8 = 0.034$ と計算できる。 $\mu_1 = -0.875$ であるため、式(3.11)より、反射された光子束の強度は0.034となり、その飛行方向は $\mu_8^{refle} = -0.875$ で重みは変化しない。

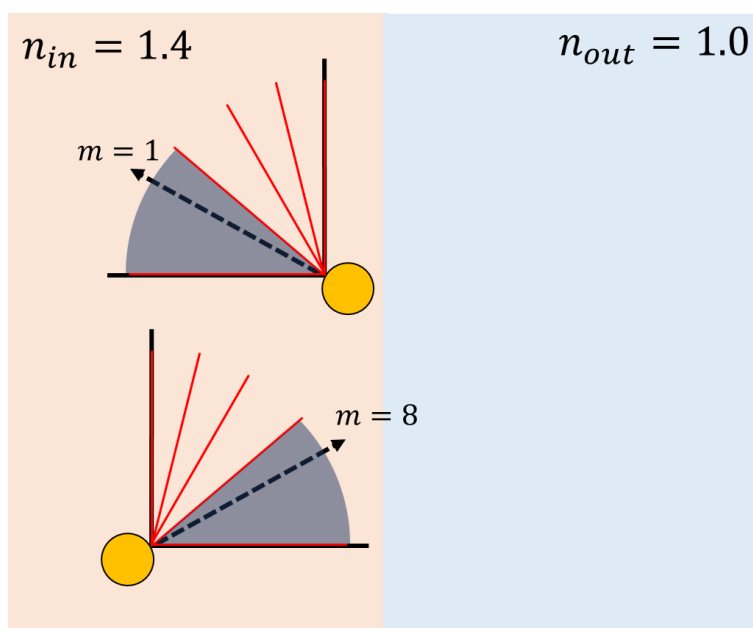


Fig 3.21 離散化した角度における反射境界条件の具体例($N_m = 8$)

3.3.1.2 離散化した角度における屈折境界条件

3.2.3項では、飛行方向が連続的な場合、屈折境界条件は式(3.10)で表現できることを説明した。空間メッシュ境界面 $i + 1/2$ において、式(3.10)を離散化した角度を用いて書き換えると、方向 m から光が入射した場合の屈折境界条件は式(3.16),(3.17)になる。

$$\psi_{m \rightarrow m', i}^{refra} = \frac{T_{m, i+1/2} \mu_m \Delta \mu_m}{\mu_{m'}^{refra} \Delta \mu_{m'}^{refra}} f_{m \rightarrow m'} \psi_{m, i+1}^{out} \quad (1 \leq m \leq \frac{N_m}{2}) \quad (3.16)$$

$$\psi_{m \rightarrow m', i+1}^{refra} = \frac{T_{m, i+1/2} \mu_m \Delta \mu_m}{\mu_{m'}^{refra} \Delta \mu_{m'}^{refra}} f_{m \rightarrow m'} \psi_{m, i}^{out} \quad (\frac{N_m}{2} + 1 \leq m \leq N_m) \quad (3.17)$$

ここで、上記の式における各変数は、それぞれ以下の物理量を表す。

$\psi_{m \rightarrow m', i+1/2}^{refra}$: 方向 m から方向 m' へ屈折した光子束

$T_{m, i+1/2}$: 方向 m で空間メッシュ境界面 $i + 1/2$ へ入射した光子束の透過率

$\mu_{m'}^{refra}$: 方向 m' へ屈折後の飛行方向余弦

$\Delta \mu_{m'}^{refra}$: 方向 m' へ屈折後の飛行方向余弦 $\mu_{m'}^{refra}$ の幅

$f_{m \rightarrow m'}$: 方向 m で入射した光子束のうち、 m' 方向に寄与する光子束の割合(後述)

なお、 m' は複数の値をとる可能性があるが、詳細は後述する。透過率 $T_{m, i+1/2}$ は、反射と透過の総和が1になることから、式(3.18)を用いて計算することができる。

$$T_{m, i+1/2} = 1 - R_{m, i+1/2} \quad (3.18)$$

式(3.16)は屈折前後の光子流を保存することができており、屈折後の光子束自体は正しく評価することができている。しかし、MOCの計算アルゴリズムの都合上、式(3.16)を用いて計算を行うためには、以下に示す2つの課題を解決する必要がある。

課題① : $\Delta \mu_m^{refra}$ の計算方法の考案

屈折が生じる場合、光子の代表飛行方向のみならず、代表方向がカバーする範囲の幅も変化する($\mu_m \neq \mu_m^{refra}$, $\Delta \mu_m \neq \Delta \mu_m^{refra}$)。屈折後の代表飛行方向の余弦 μ_m^{refra} は、スネルの法則に基づいて式(3.15)で計算することができるが、 μ_m^{refra} がカバーする範囲幅 $\Delta \mu_m^{refra}$ を計算する方法は確立されていない。そのため、 $\Delta \mu_m^{refra}$ の計算方法を新たに考案する必要がある。

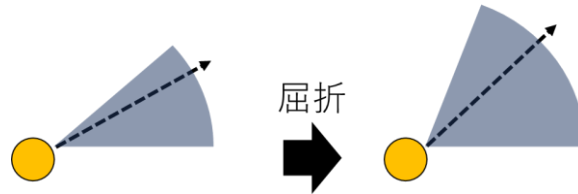


Fig 3.22 屈折による代表飛行方向とその範囲幅の変化

課題② : 屈折後の光子束が複数の代表方向範囲にまたがる場合の計算方法の考案

屈折によって代表飛行方向の余弦が大きく変化する場合や、代表方向がカバーする範囲が増加する場合($\Delta \mu_m < \Delta \mu_m^{refra}$)、屈折後の光子束が複数の代表方向範囲にまたがって存在する。例として、等余弦重み分点を用いて角度を8分割した場合をFig 3.23に示す。 $m = 8$ 方向から境界面に入射して境界面を透過した光子のうち、一部は $m = 6$ が代表する範囲や $m = 7$ が代表する範囲へ屈折し、残りの光子は $m = 8$ 方向へ直進する。これが、先述した m'

が複数の値をとる例である。このとき、各方向へ寄与する割合を評価する必要がある。この割合の計算方法は存在しないため、新たに考案する必要がある。

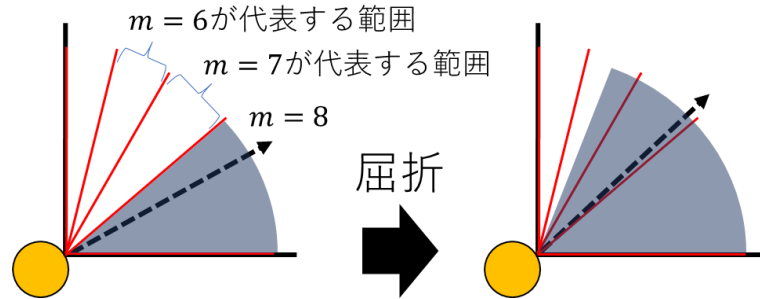


Fig 3.23 屈折後の光子束が複数の範囲にまたがる例

課題①の解決策として、代表方向がカバーする範囲の上端と下端に注目した。以下、 μ_m が代表する範囲の下端を μ_{m-} 、上端を μ_{m+} とし、 μ_{m-} と μ_{m+} の組み合わせを角度分点端セットと呼称する。2.3.2 節で述べた通り、角度分点端セットと代表方向がカバーする範囲の幅には式(3.19)に示す関係が成り立つ。

$$\Delta\mu_m = \mu_{m+} - \mu_{m-} \quad (3.19)$$

ここで、 μ_{m-} と μ_{m+} の屈折後の値 μ_{m-}^{refra} 、 μ_{m+}^{refra} は、式(3.15)を用いて計算することができる。 μ_{m-}^{refra} 、 μ_{m+}^{refra} を式(3.19)にあてはめることで、 $\Delta\mu_m^{refra}$ は式(3.20)で求めることができる。

$$\Delta\mu_m^{refra} = \mu_{m+}^{refra} - \mu_{m-}^{refra} \quad (3.20)$$

課題②の解決策として、角度光子束の屈折後の各方向への寄与 $f_{m \rightarrow m'}$ を評価する方法を考案した。以下、具体例を用いて計算方法を示す。

等余弦重み分点を用いて飛行方向を8分割したとき、 $m = 8$ 番目の方向から強度1の光子束が、屈折率1.4の物質から屈折率1.0の物質へ入射し、屈折が生じることを考える(Fig 3.24)。このとき、入射角度光子束の代表飛行方向余弦は $\mu_8 = 0.875$ 、その下端は $\mu_{8-} = 0.75$ 、上端は $\mu_{8+} = 1.0$ 、範囲幅は $\Delta\mu_8 = 0.25$ である。式(3.15)を用いて屈折後の余弦を計算すると、 $\mu_8^{refra} = 0.7353$ 、 $\mu_{8-}^{refra} = 0.3775$ 、 $\mu_{8+}^{refra} = 1.0$ となり、式(3.20)を用いて屈折後の範囲幅を計算すると、 $\Delta\mu_8^{refra} = 0.6225$ となる。ここで、 μ_m が代表する範囲と μ_{8-}^{refra} 、 μ_{8+}^{refra} の位置関係を Fig 3.25 にまとめる。 μ_{8-}^{refra} と μ_{8+}^{refra} の位置を確認すると、 μ_{8-}^{refra} は μ_6 が代表する範囲に存在し、 μ_{8+}^{refra} は μ_8 が代表する範囲に存在している。このことから、 $m = 8$ 方向から入射して境界面を通過した光子束のうち、ある割合で $m = 6$ 方向へ屈折し、ある割合で $m = 7$ 方向へ屈折し、ある割合で $m = 8$ 方向へ直進すると判断できる。

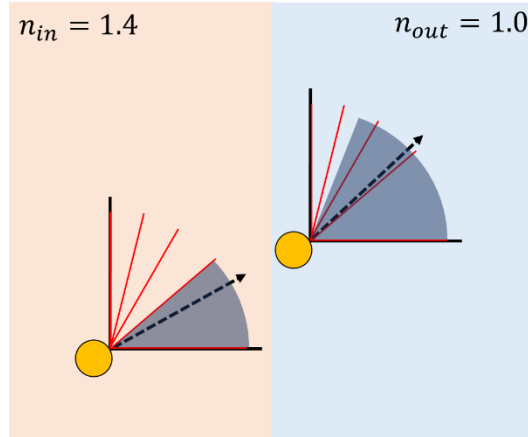


Fig 3.24 離散化した角度における屈折境界条件の具体例($N_m = 8$)

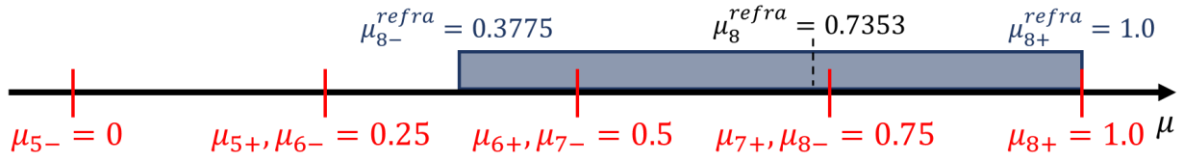


Fig 3.25 μ_m と μ_{8-}^{refra} , μ_{8+}^{refra} の位置関係

ここで、 μ_6, μ_7, μ_8 が代表する範囲と μ_8^{refra} が代表する範囲を見比べると、 μ_7, μ_8 が代表する範囲は全てが μ_8^{refra} が代表する範囲と重複しており、その幅は $\mu_{7+} - \mu_{7-} = \mu_{8+} - \mu_{8-} = 0.25$ である。対して、 μ_6 が代表する範囲は半分程度しか重複しておらず、その幅は $\mu_{6+} - \mu_{8-}^{refra} = 0.1225$ である。 μ_8^{refra} が代表する範囲における光子束は μ の値によらず一定であるため、 $m = 7$ 方向へ屈折する光子束と $m = 8$ 方向へ直進する光子束の割合は等しく、 $m = 6$ 方向へ屈折する光子束の割合は、 $m = 7, 8$ 方向へ進行する光子束の半分程度になると推測できる。よって、各方向へ寄与する割合は、式(3.21),(3.22),(3.23)のように、 $\Delta\mu_8^{refra}$ と $\Delta\mu_6, \Delta\mu_7$ または $\Delta\mu_8$ の重複する範囲の幅が $\Delta\mu_8^{refra}$ 全体に占める比によって決定することにした。

$$(m = 6 \text{ 方向へ屈折する割合}) = \frac{\mu_{6+} - \mu_{8-}^{refra}}{\Delta\mu_8^{refra}} = \frac{0.5 - 0.3775}{0.6225} \approx 0.1968 \quad (3.21)$$

$$(m = 7 \text{ 方向へ屈折する割合}) = \frac{\mu_{7+} - \mu_{7-}}{\Delta\mu_8^{refra}} = \frac{0.75 - 0.5}{0.6225} \approx 0.4016 \quad (3.22)$$

$$(m = 8 \text{ 方向へ直進する割合}) = \frac{\mu_{8+} - \mu_{8-}}{\Delta\mu_8^{refra}} = \frac{1.0 - 0.75}{0.6225} \approx 0.4016 \quad (3.23)$$

式(3.21),(3.22),(3.23)より、各割合を足し合わせると1となり、各方向へ振り分ける前後で光子束の総和は変化しないことが確認できる。以上が角度光子束の屈折後の各方向への寄与を評価する計算方法の説明である。

式(3.21),(3.22),(3.23)によって求めることができる割合は、境界面を透過した光子束を各

方向へ振り分けるための係数であることに注意されたい。各方向へ屈折または直進する光子束の値は、式(3.16)と式(3.21),(3.22),(3.23)を用いることで、式(3.24),(3.25),(3.26)のように計算することができる。

$$(m = 6 \text{ 方向へ屈折する光子束}) = \frac{T_{8,i+1/2}\mu_8\Delta\mu_8}{\mu_8^{refra}\Delta\mu_8^{refra}}\psi_{8,i}^{out} \times \frac{\mu_{6+} - \mu_{8-}^{refra}}{\Delta\mu_8^{refra}} \quad (3.24)$$

$$(m = 7 \text{ 方向へ屈折する光子束}) = \frac{T_{8,i+1/2}\mu_8\Delta\mu_8}{\mu_8^{refra}\Delta\mu_8^{refra}}\psi_{8,i}^{out} \times \frac{\mu_{7+} - \mu_{7-}}{\Delta\mu_8^{refra}} \quad (3.25)$$

$$(m = 8 \text{ 方向へ直進する光子束}) = \frac{T_{8,i+1/2}\mu_8\Delta\mu_8}{\mu_8^{refra}\Delta\mu_8^{refra}}\psi_{8,i}^{out} \times \frac{\mu_{8+} - \mu_{8-}}{\Delta\mu_8^{refra}} \quad (3.26)$$

上記の内容をふまえ、離散化した角度における屈折境界条件を式に示す。

$$\psi_{m \rightarrow m',i}^{refra} = w_{m \rightarrow m'}\psi_{m,i+1}^{out} \quad (1 \leq m \leq \frac{N_m}{2}) \quad (3.27)$$

$$\psi_{m \rightarrow m',i+1}^{refra} = w_{m \rightarrow m'}\psi_{m,i}^{out} \quad (\frac{N_m}{2} + 1 \leq m \leq N_m) \quad (3.28)$$

$$w_{m \rightarrow m'} = \frac{T_{m,i+1/2}\mu_m\Delta\mu_m}{\mu_m^{refra}\Delta\mu_m^{refra}} \times f_{m \rightarrow m'} = \frac{T_{m,i+1/2}\mu_m\Delta\mu_m}{\mu_m^{refra}\Delta\mu_m^{refra}} \times \frac{\Delta\mu_{m' \cap m}^{refra}}{\Delta\mu_m^{refra}} \quad (3.29)$$

上式における各変数はそれぞれ以下の値を表す。

$w_{m \rightarrow m'}$: m 方向から入射した光の m' 方向への寄与割合

$\mu_{m' \cap m}^{refra}$: $\Delta\mu_{m'}$ と $\Delta\mu_m^{refra}$ の重複している範囲の幅

3.3.1.3 反射屈折境界条件の計算手順

ここまでの説明に基づき、今回自作した計算コードにおける反射屈折境界条件の計算手順について説明する。離散化した角度において、式(3.11)を用いることで反射境界条件を、式(3.27)を用いることで屈折境界条件を取り扱うことができると説明した。輸送計算によって、空間メッシュ領域 i 及び $i + 1$ からの流出光子束 $\psi_i^{out}, \psi_{i+1}^{out}$ を全ての方向について求めることができたとすると、式(3.11),(3.12),(3.27),(3.28)の計算を経ることで、反射屈折後に空間メッシュ領域 i 及び $i + 1$ へ入射する方向 m への角度光子束 $\psi_{m,i}^{in}, \psi_{m,i+1}^{in}$ は式(3.30),(3.31)のように計算される。

$$\psi_{m,i}^{in} = \psi_{N_m - m + 1 \rightarrow m,i}^{refle} + \sum_{m'=1}^{\frac{N_m}{2}} \psi_{m' \rightarrow m}^{refra} \quad (1 \leq m' \leq \frac{N_m}{2}) \quad (3.30)$$

$$\psi_{m,i+1}^{in} = \psi_{N_m - m + 1 \rightarrow m,i+1}^{refle} + \sum_{m'=\frac{N_m}{2}+1}^{N_m} \psi_{m' \rightarrow m}^{refra} \quad (\frac{N_m}{2} + 1 \leq m \leq N_m) \quad (3.31)$$

ここで、空間メッシュ分割数 N_i 、角度分割数 N_m の条件で、収束までに N 回の反復を要する

計算を行う場合、式(3.19)の計算をそれぞれ $N_i \times N_m \times N$ 回行う必要がある。これを効率化するために、反射率 $R_{m,i+1/2}$ と屈折後の光子束の重み係数 $w_{m \rightarrow m'}$ を1つの行列 $\mathbf{W}_{i+1/2}$ にまとめ、式(3.32)に示すように一度の行列計算によって反射屈折後の光子束を $\tilde{\psi}_{i+1/2}$ 計算することとした。反射境界条件と屈折境界条件を同時に計算できることから、式(3.32)を反射屈折境界条件と呼称する。

$$\tilde{\psi}_{i+1/2} = \mathbf{W}_{i+1/2} \psi_{i+1/2}^{in} \quad (3.32)$$

ここで、 $\tilde{\psi}_{i+1/2}$ は、空間メッシュ境界面 $i+1/2$ からの反射屈折後の角度光子束 $\tilde{\psi}_{i+1/2} = \{\tilde{\psi}_{1,i+1/2}, \tilde{\psi}_{2,i+1/2}, \dots, \tilde{\psi}_{m,i+1/2}, \dots, \tilde{\psi}_{N_m,i+1/2}\}$ である。また、 $\mathbf{W}_{i+1/2}$ は反射屈折重みテーブルと命名した。

以下、反射屈折重みテーブル $\mathbf{W}_{i+1/2}$ について説明する。左側に屈折率 1.4 の物質、右側に屈折率 1.0 の物質が存在する境界面において、角度を 8 分割、左側から右側に光子束が入射する条件での反射屈折重みテーブルを Fig 3.26 に示す。反射屈折重みテーブルは、与えた角度分割数、角度分点セット、境界面に接する物質の屈折率によってのみ決定され、反復計算中に変化することはない。

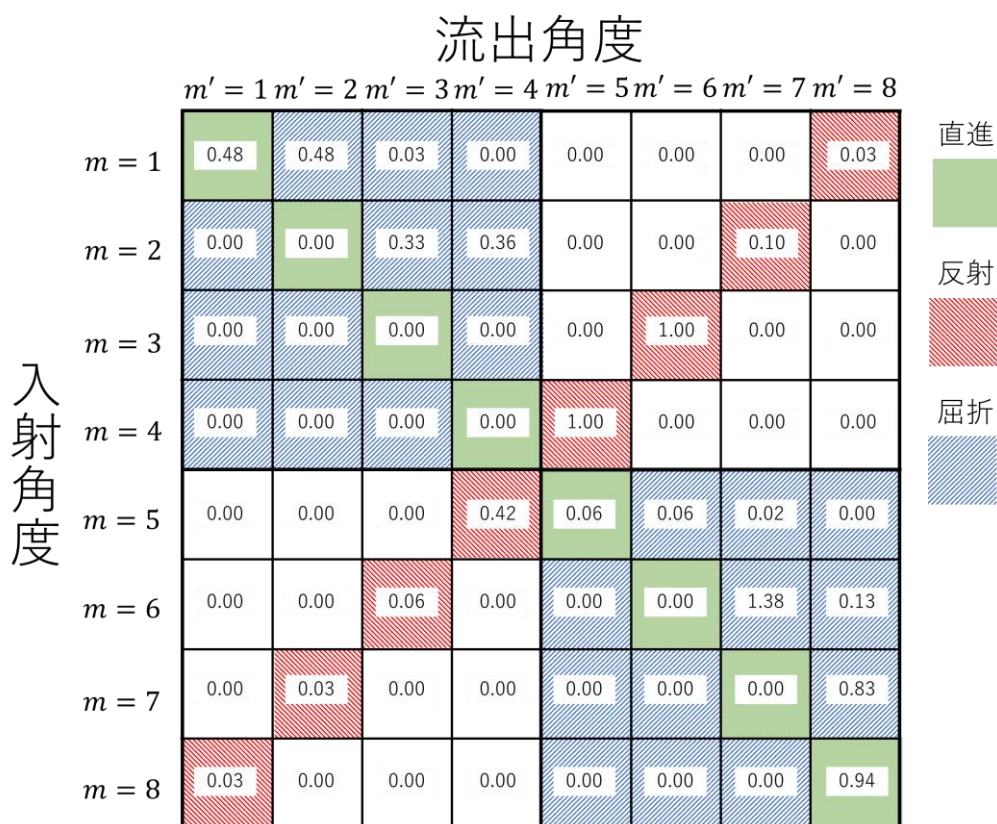


Fig 3.26 反射屈折重みテーブルの例(角度分割数 8、入射側屈折率 1.4、流出側屈折率 1.0)

各行は入射角度、各列は流出角度に対応している。1行目に注目すると、 $m = 1$ 方向から入射した光は、48%が $m = 1$ 方向へ直進し、48%が $m = 2$ 方向へ屈折し、3%が $m = 3$ 方向へ屈折し、3%が $m = 8$ 方向へ反射することを意味している。1列目に注目すると、反射屈折後に $m = 1$ 方向へ進行する光子束は、 $m = 1$ 方向から入射した光の48%と、 $m = 8$ 方向から入射した光の3%を足し合わせた値となる。 m 行1列目の要素を $w_{m,1}$ とすると、 $w_{m,1}$ と反射屈折後に方向 m へ飛行する光子束 $\tilde{\psi}_{m,i+1/2}$ の関係は、式(3.33)で表すことができる。

$$\tilde{\psi}_{1,i+1/2} = \sum_{m=1}^{N_m} w_{m,1} \psi_m^{\text{in}} \quad (3.33)$$

2.3.2節で述べた通り、 $m \leq N_m/2$ の場合は飛行方向が右から左方向であり、 $m > N_m/2$ の場合は飛行方向が左から右方向となる。この大まかな飛行方向に着目すると、反射屈折重みテーブルは左上((1,1)から(4,4))、左下((5,1)から(5,4))、右上((1,5)から(4,8))、右下((5,5)から(8,8))に区分できる。左上と右下はそれぞれ、境界面に左向きに入射して左向きに流出、右向きに入射して右向きに流出する光子束を示しており、左下と右上はそれぞれ、右向きに入射して左向きに流出、左向きに入射して右向きに流出する光子束を示している。

表中の割合を、物理現象毎に色分けして注目すると、直進する光子束(緑)の割合は右下がりの対角成分に分布し、反射される光子束(反射)の割合は右上がりの対角成分に分布している。これは、光が直進する場合は光の進行方向が m のまま変化せず、光が反射する場合は反射の法則に基づいて、光の進行方向が $N_m - m + 1$ となるためである。屈折する光子束(青)は、表の左上と右下にのみ分布している。これは、屈折が生じる場合、屈折の前後で角度は変化するが、逆方向へ飛行する(μ_m の符号が反転する)ことはないためである。

3.3.1項の内容をまとめ、反射屈折重みテーブル作成までのフローチャートを Fig 3.27 に示す。

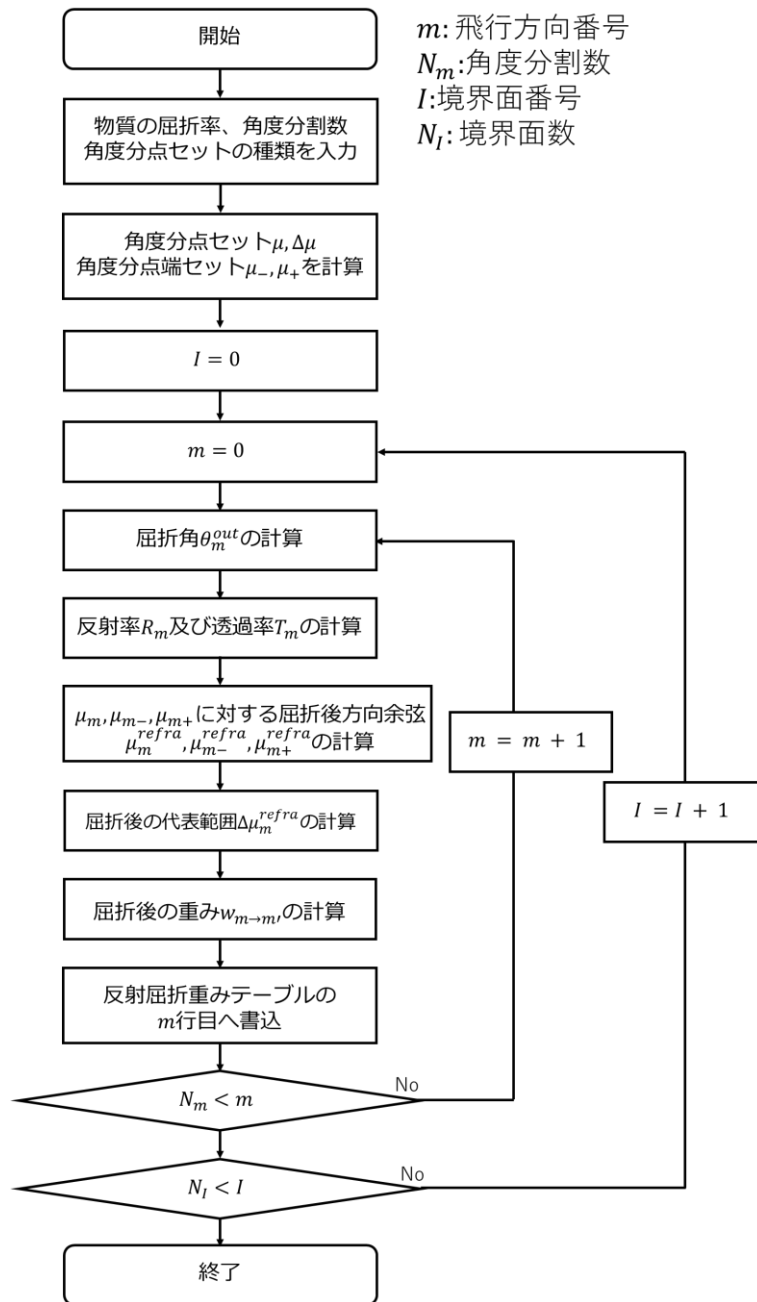


Fig 3.27 反射屈折重みテーブル作成までのフローチャート

3.3.2 反射屈折境界条件の実装による従来 MOC との差異

本項では、反射屈折現象の生じない、従来の MOC 計算と、反射屈折現象の生じる MOC 計算との計算方法の差異について説明する。両者の最大の差は、3.3.1 節で説明した反射屈折重みテーブルの作成であるが、それ以外にも計算手順が一部異なる。以下、計算手順の異なる部分について、まずは反射屈折現象の生じない従来の MOC 計算の手順を説明する。次

に反射屈折現象の生じる MOC 計算の手順を説明するとともに、両者の相違点を述べる。

2.3.1 項で述べた通り、MOC 計算では、空間メッシュ領域*i*への入射角度光子束 $\psi_{m,i}^{in}$ を既知の値として、空間メッシュ領域*i*からの流出角度光子束 $\psi_{m,i}^{out}$ を式(3.34)から求める。

$$\psi_{m,i}^{out} = \psi_{m,i}^{in} \exp(-\Sigma_{t,i} S_{m,i}) + \frac{Q_{m,i}}{\Sigma_{t,i}} [1 - \exp(-\Sigma_{t,i} S_{m,i})] \quad (3.34)$$

ここで、空間メッシュ領域*i*に隣接する空間メッシュへの入射角度光子束を求めるために、境界条件を与える必要がある。

反射屈折現象の生じない従来の MOC では、方向*m*で境界面へ入射した光子束 $\psi_{m,i+1/2}^{in}$ と方向*m*で境界面から流出する光子束 $\psi_{m,i+1/2}^{out}$ が一致する(Fig 3.28)。そのため、式(3.35)のように、空間メッシュ領域*i*からの流出角度光子束 $\psi_{m,i}^{out}$ を空間メッシュ領域*i+1*への入射角度光子束 $\psi_{m,i+1}^{in}$ として与えることができる。

$$\psi_{m,i}^{out} = \psi_{m,i+1/2}^{in} = \psi_{m,i+1/2}^{out} = \psi_{m,i+1}^{in} \quad (3.35)$$

これを全ての空間メッシュ領域に対して行うことで、*m*方向についての輸送計算が完了する。つまり、飛行方向が右向きならば体系右側外部境界面からの、飛行方向が左向きならば体系右側外部境界面からの入射角度光子束のみを前回反復時の結果から与えることで、Transport sweep を行うことができる(Fig 3.29)。

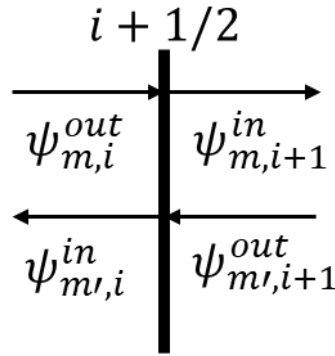


Fig 3.28 反射屈折現象の生じない従来 MOC 計算における境界面の角度光子束

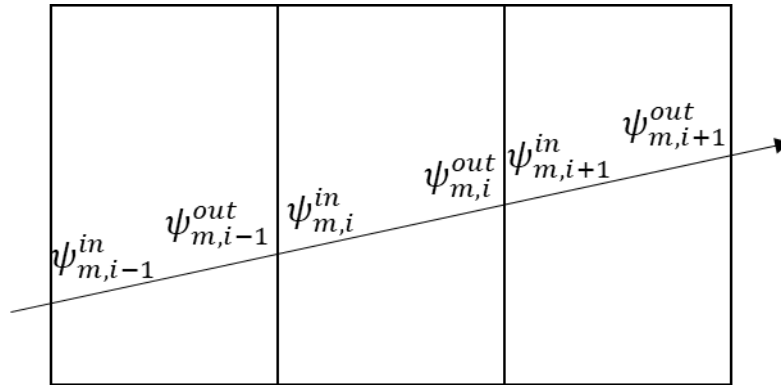


Fig 3.29 反射屈折現象の生じない従来 MOC における Transport sweep

反射屈折現象の生じる MOC 計算では、 $\psi_{m,i+1/2}^{in}$ と $\psi_{m,i+1/2}^{out}$ が一致しない (Fig 3.30)。これは、 m 方向で空間メッシュ領域 i から流出した光子束のみならず、 m 以外の方向から m 方向へ屈折する光子束や、 $N_m - m + 1$ 方向から m 方向へ反射する光子束が、 $\psi_{m,i+1}^{in}$ となるためである。そのため、 $\psi_{m,i+1}^{in}$ を求めるためには、式 (3.30) の計算を行う必要があり、境界面 $i + 1/2$ へ入射する角度光子束をすべての飛行方向について与えなければならない。境界面 $i + 1/2$ へ入射する角度光子束を求めるためには、境界面 $i - 1/2, i + 3/2$ における反射屈折境界条件を計算して角度光子束を計算する必要がある。しかし、境界面 $i - 1/2, i + 3/2$ へ入射する角度光子束を求めるためには、境界面 $i + 1/2$ における反射屈折境界条件を計算して角度光子束を計算する必要があるため、いずれの境界面の光子束も求めることができない。つまり、反射屈折現象の生じる MOC 計算では、体系外部境界面からの入射角度光子束を与えただけでは、Transport sweep を行うことが不可能である。

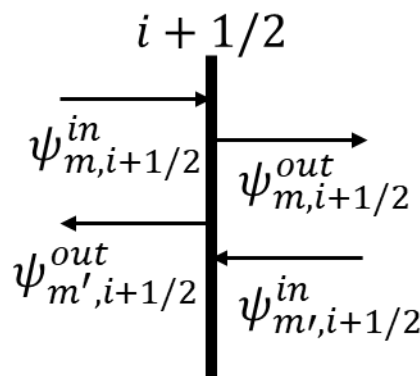


Fig 3.30 反射屈折現象の生じる MOC 計算における境界面の角度光子束

そこで、自作した光輸送計算コードでは、全ての空間メッシュ領域への入射角度光子束を、前反復時の結果から与えることとした。反射屈折現象の生じる条件における Transport sweep

の手順を以下に示す。

- ① 各空間メッシュ領域への入射角度光子束を前回反復時の反射屈折後角度光子束 $\tilde{\psi}$ から与える(Fig 3.31)。
- ② 式(3.34)を用いて、各空間メッシュ領域の流出角度光子束を入射角度光子束から計算する。
- ③ 式(3.33)を用いて、反射屈折後の角度光子束を計算する。

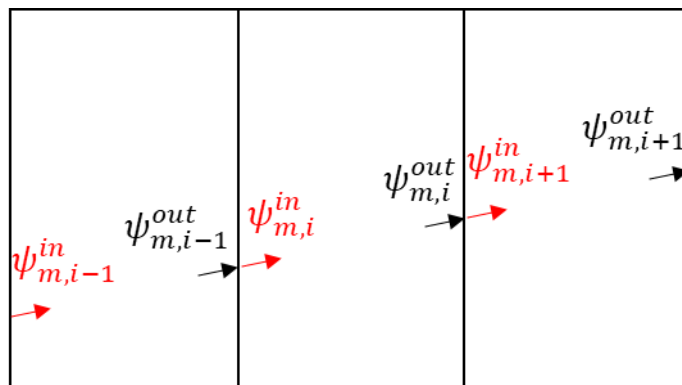


Fig 3.31 反射・屈折を考慮する場合の Transport sweep(赤字は前回反復時の値)

3.3.3 全体の計算フロー

作成した自作計算コードについて、全体の計算フローを Fig 3.32 に示す。なお、1次元平板体系での計算を想定している。

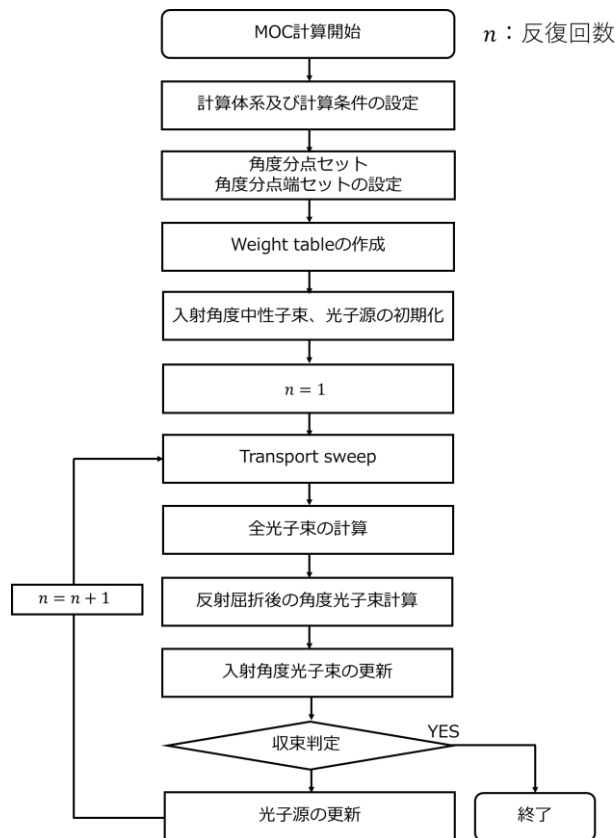


Fig 3.32 全体の計算フロー

3.3.4 計算フローの詳細

計算フローの詳細を以下に示す。

(1) 計算体系及び計算条件の設定

計算体系の情報として、以下のパラメータを与える必要がある。

- ・ 物質領域数
- ・ 各物質領域幅
- ・ 各物質領域の光学特性値(吸収係数、散乱係数、屈折率)
- ・ 体系外部の屈折率

MOC を用いた輸送計算を行うために、以下の条件を与える必要がある。

- ・ 空間メッシュ分割数
- ・ 角度分割数
- ・ 角度分点タイプ
- ・ 収束判定条件

(2) 角度分点セット及び角度分点端セットの計算

(1)で与えた角度分割数を用いて、光子の代表飛行方向と重みを計算する。求めた重み

を用いて、角度分点端セットを式(3.36),(3.37)のように計算する。

$$\mu_{m+} = -1 + \sum_{k=1}^m w_k \quad (3.36)$$

$$\mu_{m-} = \mu_{(m-1)+} \quad (3.37)$$

(3) 反射屈折重みテーブルの計算

角度分点セット、角度分点端セット及び屈折率を用いて、3.3.1.3 目に示した手順で反射屈折重みテーブルを作成する。

(4) 入射角度光子束、光子源の初期値設定

2.3.1 節で述べた通り、MOC では反復計算を行っているが、1 反復の計算においては、初期値を用いて計算を行う。今回自作した計算コードでは、入射角度光子の初期値は全ての角度及び空間メッシュで 1 と設定している。光子源の初期値(極角の単位方向余弦あたり)は、輸送計算前に拡散計算を行い、得られた全光子束から式(3.38)を用いて決定している。

$$Q_i = \frac{1}{2} (\mu_{s,i} \phi_i^{DIFF} + q_i) \quad (3.38)$$

上式において、各変数は以下の量をそれぞれ表す。

Q_i : 空間メッシュ領域*i*における光子源[1/cm³/s]

$\mu_{s,i}$: 空間メッシュ領域*i*における散乱係数[1/cm²]

ϕ_i^{DIFF} : 拡散計算から得られる、空間メッシュ領域*i*における全光子束[1/cm²/s]

q_i : 空間メッシュ領域*i*における外部光子源[1/cm³/s]

式(3.38)を用いて光子源を設定している理由は、初期値が収束値に近いほど、少ない反復回数で収束判定条件を満足することができるためである。

(5) Transport sweep

(1)~(4)で設定した値を用いて、各空間メッシュにおいて流出角度光子束及び全光子束を求める。計算の詳細は、2.3.1 項で説明している。

(6) 反射屈折後の角度光子束の計算

まず、各空間メッシュ領域からの流出角度光子束を用いて、各境界面への入射角度光子束を式(3.39),(3.40)のように設定する。

$$\psi_{m,i-1/2}^{in} = \begin{cases} \psi_{m,i-1}^{out} & (m \leq \frac{N_m}{2}) \\ \psi_{m,i}^{out} & (m \geq \frac{N_m}{2} + 1) \end{cases} \quad (3.39)$$

$$\psi_{m,i+1/2}^{in} = \begin{cases} \psi_{m,i}^{out} & (m \leq \frac{N_m}{2}) \\ \psi_{m,i+1}^{out} & (m \geq \frac{N_m}{2} + 1) \end{cases} \quad (3.40)$$

設定した各境界面への入射角度光子束に反射屈折重みテーブルを作用させ、式(3.32)の

ように、反射屈折後の角度光子束を求める。

(7) 入射角度光子束の更新

反射屈折後の角度光子束を用いて、入射角度光子束を更新する。ここで、反射屈折後の角度光子束は、前回の Transport sweep のものを使用する。

$$\psi_{m,i}^{in} = \begin{cases} \tilde{\psi}_{m,i-1/2}^{out} & (m \leq \frac{N_m}{2}) \\ \tilde{\psi}_{m,i+1/2}^{out} & (m \geq \frac{N_m}{2} + 1) \end{cases} \quad (3.41)$$

(8) 収束判定

(5)で求めた全光子束と、前回反復時の全光子束との残差を計算する。全ての空間メッシュ領域において、残差が収束判定条件を下回っていれば、収束解を得ることができていると判断する。

(9) 光子源の更新

式に基づき、(5)で求めた全光子束を用いて光子源の値を更新する。

(10) 収束解が得られるまで、(5)～(9)を繰り返し行う。

3.3.1 項で説明した通り、反射率・透過率及び屈折角は、境界面に隣接する空間メッシュ領域の屈折率と光子の入射角度によってのみ決定する。計算途中で屈折率の空間分布及び角度分点セットは変化しないため、反射屈折重みテーブルを反復ごとに再計算する必要はない。

3.4 自作輸送計算コードを用いた検討

3.3 節では、反射屈折境界条件を新たに考案し、MOC 計算コードに組み込むことで、反射屈折現象を考慮した厳密な光輸送計算コードを開発したことを述べた。本節では、自作計算コードを用いて、以下に示す検討を行った。

検討①：自作計算コードの収束解の検証作業(verification)として、光輸送の分野で用いられているモンテカルロ計算コード MCML で得られた参照解と比較し、同じ結果になることを確認。

検討②：反射屈折現象を考慮する必要があることを確かめるために、反射屈折を考慮しない条件での収束解、反射のみを考慮した条件での収束解が、反射屈折を考慮した条件での収束解とどの程度の差異を生じるのかを確認。

3.4.1 計算体系・計算条件

計算体系として、Fig 3.33 に示す、光源、物質①、物質②からなる 3 物質領域の 1 次元無限平板体系を設定した。光輸送計算の分野における文献[4]を参考し、体系全体のサイズは 0.3cm、各物質領域のサイズは 0.1cm とした。体系左端へ設置した光源領域のみ、等方光源をもつ。また、体系外部へ流出した光が体系内部へ再度入射することはない。

各物質領域の光学特性値を Table 3.1 に示す。全ての物質領域について、隣接する物質領

域同士の屈折率を異なる値に設定した。これにより、全ての物質境界面で反射屈折現象が生じる。外部境界面での反射屈折境界条件を計算するために、体系外部の屈折率を与える必要がある。外部境界面においても反射屈折現象が生じるように、体系左端の物質と体系外部の屈折率は異なる値に設定した。屈折率の値は、生体内の光輸送に用いられる代表的な値を使用した。1.4 は近赤外線(約600 nm~1100 nm)に対する生体組織の屈折率[5]であり、1.0 は頸部等に存在する空気領域の屈折率である。3.2 節で説明した通り、屈折率が大きい領域から小さい領域へ光が進行する場合と、屈折率が小さい領域から大きい領域へ光が進行する場合では、反射屈折現象の様子が異なる。光源領域と物質①との境界面では、主として屈折率が大きい領域から小さい領域へ進行する様子が、物質①と物質②の境界面では、主として屈折率が小さい領域から屈折率が大きい領域へ進行する様子が観察される。

体系の散乱係数 μ_s 及び吸収係数 μ_a は、光学特性値は人体組織がとりえる値から代表的なものを選択した。 $\mu_s = 90[\text{cm}^{-1}]$, $\mu_a = 0.15[\text{cm}^{-1}]$ は、ヒト成人頭部の白質の値である[6]。本来、屈折率 1.0 である空気の μ_s, μ_a は生体組織の値とはかけ離れた $0.0001[\text{cm}^{-1}]$ 程度であるが[7]、作成したコードの検証のために簡略化し、他の物質領域と同じ値に設定している。

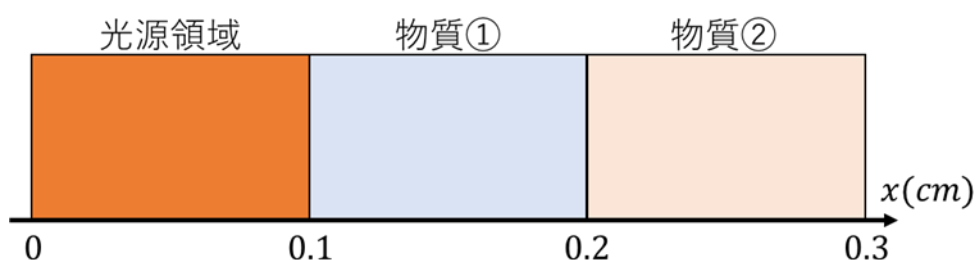


Fig 3.33 自作計算コード検証のための1次元無限平板体系

Table 3.1 各物質領域における光学特性値

	$\mu_s [\text{cm}^{-1}]$	$\mu_a [\text{cm}^{-1}]$	$n[-]$	$q [\text{cm}^{-3}]$
光源	90	0.15	1.4	1.0
物質①	90	0.15	1.4	0.0
物質②	90	0.15	1.0	0.0
体系外部	0	0	1.0	0.0

自作計算コードにおける、MOC 計算の計算条件を以下に示す。角度分割数及び空間メッシュ分割数について簡単なパラメータサーベイを行い、離散化誤差が十分に小さくなる範囲でなるべく少ない分割数を条件として設定した。

- 角度分点セット：多重ガウスルジャンドル分点
- 角度分割数：200 ($-1 \sim -\mu_c, -\mu_c \sim 0, 0 \sim \mu_c, \mu_c \sim 1$ をそれぞれ 50 分割)
- 境界面の法線に対する光子の飛行方向を極角とし、極角を $-1 \leq \mu \leq 1$ の範囲で分割

- 空間メッシュ分割数：300
- 収束判定条件： 10^{-10}

反射屈折現象による光子束分布への影響を確かめるために、反射屈折を考慮しない条件、反射のみを考慮する条件、反射屈折を考慮する条件、それぞれについて光子束分布を求める。3.3節で説明した通り、自作計算コードでは、反射屈折重みテーブルを用いて反射屈折現象を取り扱っている。そのため、反射屈折重みテーブルの値を適切に与えることで、それぞれの条件に合致した計算を行うことができる。以下、各条件における反射屈折重みテーブルの設定方法を示す。

反射屈折を考慮しない条件における反射屈折重みテーブルの例を Fig 3.34 に示す。このとき、全ての光子束について、方向 m で境界面に入射した光子束は方向 m へ直進する。そのため、反射屈折重みテーブルにおいて、直進する光子束の割合を表す右下がりの対角要素の値が1となり、その他の値は0となる。

反射のみを考慮する条件における反射屈折重みテーブルの例を Fig 3.36 に示す。このとき、方向 m で境界面に入射した光子束は、反射率 R_m 分だけ $N_m - m + 1$ 方向へ反射され、残りは全て m 方向へ直進する。そのため、反射屈折重みテーブルにおいて、反射される光子束の割合を表す右上がりの対角要素の値が R_m 、直進する光子束の割合を表す右下がりの対角要素の値が $1 - R_m$ となり、その他の値は0となる。ここでの R_m の計算方法は、反射屈折を考慮する条件における R_m の計算方法と同様であり、式(3.13),式(3.14)を用いて計算される。

反射屈折を考慮する条件における反射屈折重みテーブルの例を Fig 3.36 に示す。このとき、反射屈折重みテーブルは 3.3.1.3 目に示した手順で作成される。

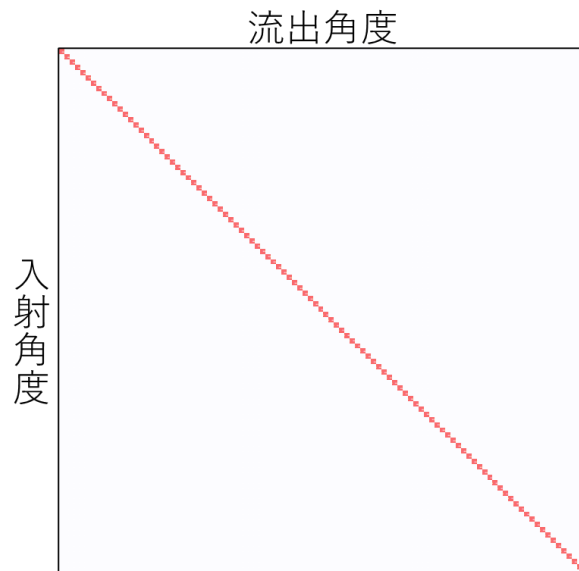


Fig 3.34 反射屈折を考慮しない条件における反射屈折重みテーブルの例

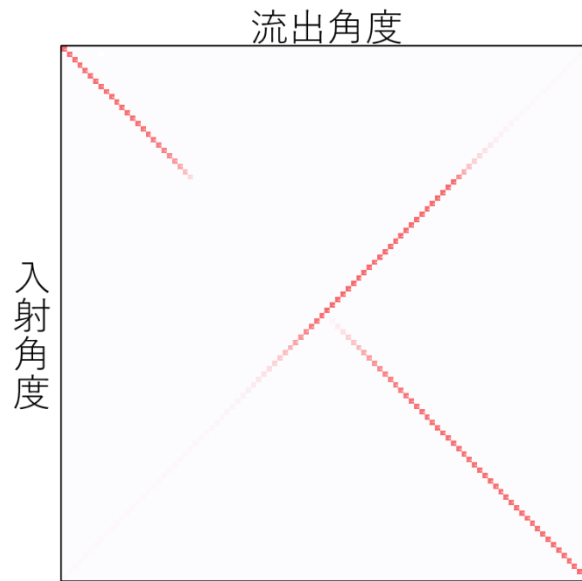


Fig 3.35 反射のみを考慮する条件における反射屈折重みテーブルの例

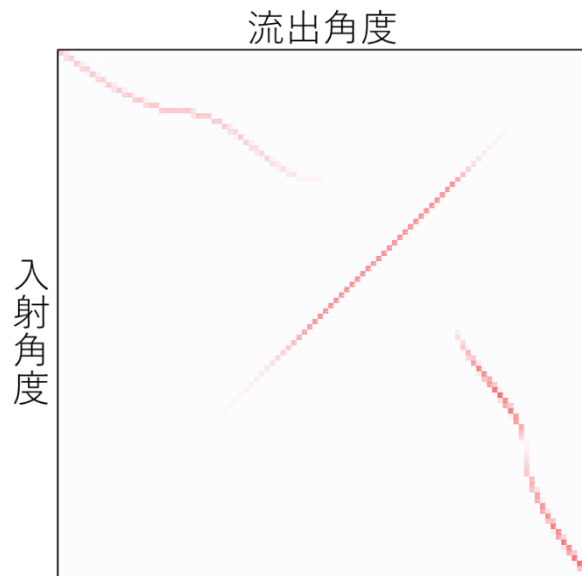


Fig 3.36 反射屈折を考慮する条件における反射屈折重みテーブルの例

3.4.2 参照解の計算方法

本項では、自作コードの検証作業にあたって使用した、MCML コード[3]について説明する。MCML とは A Monte Carlo model of steady-state light transport in multi-layered tissues の略であり、光輸送計算の分野で実績をあげているオープンソースのモンテカルロ計算コードである。本研究では、MCML を参照解として使用した。

第2章で説明した通り、中性子輸送計算と光輸送計算では、外部中性子源と外部光源の扱

い方が異なる。中性子輸送計算では、ある一定の体積をもつ中性子源から中性子が等方に飛び出す形で、等方の体積線源が与えられる。対して、光輸送計算では、ある一定の空間的な幅をもった光が体系内に面入射する形で、非等方の面線源が光源として与えられる。そのため MCML では、以下の処理が行われている。

- ① 最初の光子は $(x, y, z) = (0, 0, 0)$ から $(\mu_x, \mu_y, \mu_z) = (0, 0, 1)$ 方向にのみ飛行
- ② 体系左側の外部境界面に入射する際に一部が反射されることを想定し、最初の光子の重みを補正

これらの処理を中性子輸送計算における中性子源の処理へ近づけるために、MCML マニュアル[3]の「11. How to Modify mcml」章を参考にして、MCML のソースコードを改良した。①については、指定した領域内で光子が一様かつ等方向に放出されるように修正し、②については、補正の値を 0 に修正した。

上記の修正を施した後の MCML コードを用いて、Fig 3.33 及び Table 3.1 に示した体系で計算を行った。その他の計算条件を以下に示す。

- ヒストリー数：100,000,000
- 空間メッシュ分割数：300

3.4.3 自作輸送計算コードの妥当性に関する検証

まずは、自作計算コードの妥当性に関する検証結果について述べる。自作計算コードを用いて、反射屈折を考慮する条件で得られた各空間メッシュ領域全光子束の計算結果、及び MCML による参照解を Fig 3.37 に示す。また、MCML の参照解に対する、自作計算コードの収束解の相対誤差を Fig 3.38 に示す。

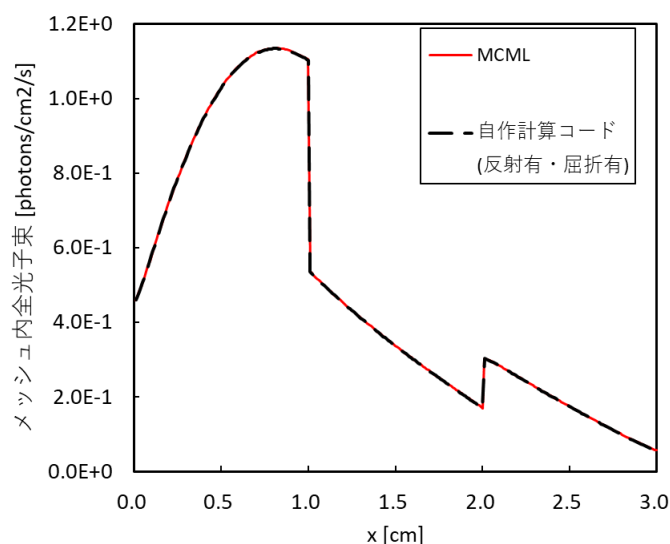


Fig 3.37 光子束空間分布(反射有・屈折有)

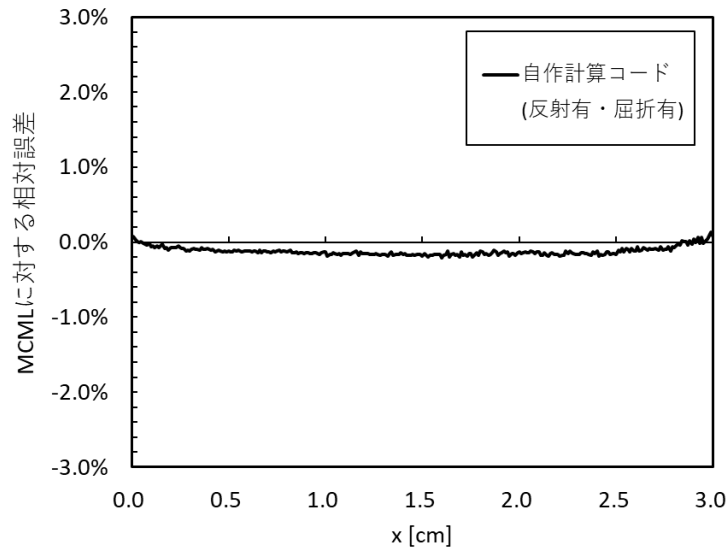


Fig 3.38 MCML に対する相対誤差分布(反射有・屈折有)

Fig 3.37 より、反射屈折を考慮する条件での自作計算コード結果と MCML の参照解が互いによく一致することが確認できる。光源領域($0.0 \leq x \leq 0.1\text{cm}$)では、領域全体に分布した等方光源による光子束の増加と、領域内での吸収及び領域外への漏洩による光子束の減衰が起こるため、光子束は領域中央付近で最大となり、最大値をとる位置から離れるほど光子束は減少する。 $x = 0.1\text{cm}$ における境界面では、反射の影響によって光子束が不連続となる。光源領域から物質①への輸送は、屈折率が大きい領域から屈折率が小さい領域への輸送であり、 $\mu_c \approx 0.8$ 以上の角度で入射した光子束は全反射される。そのため、境界面の光源側と物質①側とでは、光子束の値に約 2 倍の差が生じる。物質①の領域($0.1 \leq x \leq 0.2\text{cm}$)では、領域内での吸収と領域外への漏洩による減衰のみが生じるため、 $x = 0.1\text{cm}$ から $x = 0.2\text{cm}$ へかけて光子束が減衰し続ける。 $x = 0.2\text{cm}$ における境界面では、 $x = 0.1\text{cm}$ における境界面と同様に、反射の影響によって光子束が不連続となる。物質①と物質②では、物質②の屈折率が大きいため、物質②側の光子束が大きくなる。物質②の領域($0.2 \leq x \leq 0.3\text{cm}$)では、物質①の領域と同様に、吸収と漏洩により、 $x = 0.2\text{cm}$ から $x = 0.3\text{cm}$ へかけて光子束が減衰し続ける。

Fig 3.38 より、相対誤差の絶対値は、最大で約 0.2%であることが確認できる。誤差を数%まで許容すると[9]、自作計算コードの収束解は現実的な精度で計算できていると言える。

3.4.4 反射屈折現象を考慮する必要性に関する検証

続いて、反射屈折を考慮する必要性に関する検証結果について述べる。自作計算コードを用いて、反射屈折を考慮する条件、反射のみを考慮する条件、反射屈折を考慮しない条件で得られた各空間メッシュ領域全光子束の計算結果を Fig 3.39 に示す。また、反射屈折を考慮

する条件に対する、反射のみを考慮する条件と反射屈折を考慮しない条件での光子束の相対誤差分布を Fig 3.40 に示す。

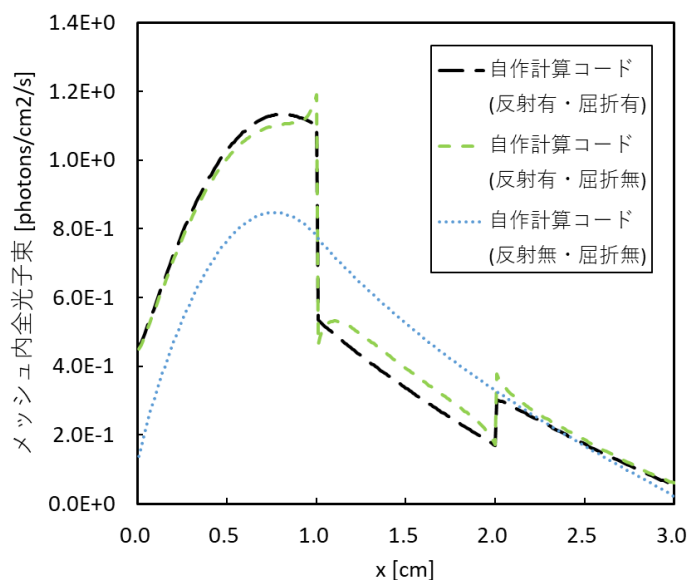


Fig 3.39 各条件における光子束空間分布

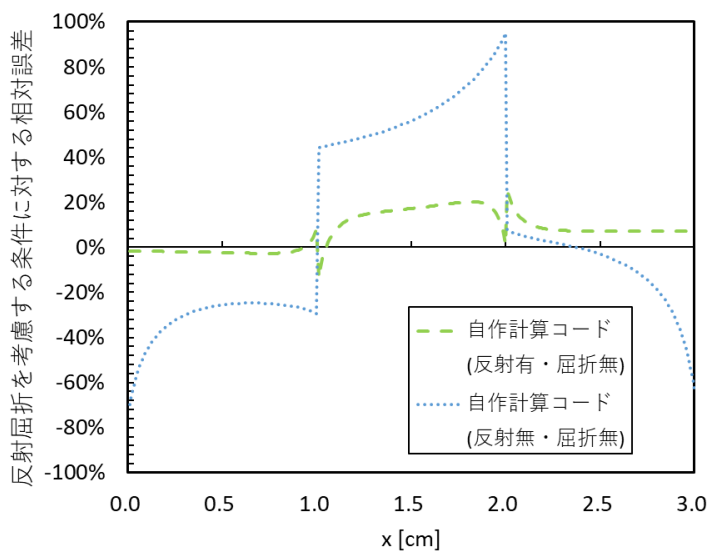


Fig 3.40 反射屈折を考慮した条件に対する相対誤差分布

Fig 3.39 より、反射のみを考慮する条件及び反射屈折を考慮しない条件における光子束は、反射屈折を考慮した条件における光子束と、明らかに一致しないことが観察できる。反射屈折を考慮しない条件と反射のみを考慮する条件を見比べると、反射を考慮しないことによ

って、以下の問題が生じることがわかる。

- 屈折率の異なる物質同士の境界面で、光子束が不連続となることを考慮できない
- 屈折率の大きい領域で光子束が大きく、屈折率の小さい領域で光子束が小さくなる傾向を考慮できない

反射のみを考慮する条件と反射屈折を考慮する条件を見比べると、屈折を考慮しないことによって、以下の問題が生じることがわかる。

- 屈折率の異なる物質同士の境界面において、屈折率が大きい側で光子束を過大評価し、屈折率の小さい側で光子束を過小評価してしまう
- 屈折率の大きい領域中の光子束を過小評価し、屈折率小さい領域中の光子束を過大評価してしまう

Fig 3.40 より、反射のみを考慮する条件では、内部の物質境界面において相対誤差が大きくなり、反射屈折を考慮しない条件では、内部の物質境界面及び外部境界面で相対誤差が大きくなることが観察できる。このことから、内部の物質境界面では、反射と屈折による光子束への影響が大きく、外部境界面では、反射による光子束への影響が大きいと考えられる。各条件における最大相対誤差、最小相対誤差(負方向への最大相対誤差)、平均二乗誤差を Table 3.2 に示す。反射屈折を考慮しない条件では最大相対誤差が約 95%、反射のみを考慮する条件では最大相対誤差が約 25%生じていることから、反射屈折現象が光子束空間分布へ与える影響は大きいといえる。以上の結果から、反射屈折を考慮することは必須であると判断した。

Table 3.2 各条件における最大相対誤差、最小相対誤差、平均二乗誤差

	反射屈折を考慮しない条件	反射のみ考慮する条件
最大相対誤差	94.71%	24.79%
最小相対誤差	-69.88%	-13.72%
平均二乗誤差	41.48%	10.56%

3.5 本章のまとめ

本章では、光輸送計算における反射屈折を取り扱う方法として、反射屈折重みテーブルを用いた反射屈折境界条件を提案し、1次元無限平板体系を対象とした検証計算を行った。中性子輸送計算手法を光輸送計算へ適用するにあたって、中性子輸送計算手法では反射屈折の取り扱い方法が確立されていないことが課題となっていた。そこで、まずは簡単な体系を対象とし、反射屈折を考慮した厳密な光輸送計算コードを開発することを目標とした。

反射屈折は、屈折率の異なる物質間の境界面で生じる現象であるため、輸送計算における境界条件として取り扱うことができる。反射境界条件は、フレネルの法則から求まる反射率 R を用いることで計算でき、屈折境界条件は、透過率 T とスネルの法則から求まる屈折角を用いることで計算できる。

本研究では、原子力分野で用いられている MOC に基づいて計算コードを作成した。MOC では、本来連続である光子の飛行方向を、いくつかの代表方向に離散化して計算を行っている。そのため、反射屈折境界条件を離散化した角度を用いて計算する必要がある。反射境界条件は比較的簡単に計算することができる。対して、屈折境界条件は、屈折による代表方向がカバーする範囲の変化や、屈折後の光子束が複数の代表方向範囲にまたがる場合に注意して計算を行う必要がある。ここで、空間メッシュ分割数 N_i 、角度分割数 N_m の条件で、収束までに N 回の反復を要する計算を行う場合、反射屈折境界条件の計算を $N_i \times N_m \times N$ 回行う必要がある。これを効率化するために、反射率 $R_{m,i+1/2}$ と屈折後の光子束の重み係数 $w_{m \rightarrow m'}$ を 1 つの行列 $W_{i+1/2}$ (反射屈折重みテーブル)にまとめ、一度の行列計算によって反射屈折後の光子束を $\tilde{\psi}_{i+1/2}$ 計算することとした。

反射屈折重みテーブルを用いた計算を MOC に組み込むことによって、反射屈折を考慮した厳密な光輸送計算コードを開発した。自作計算コードの妥当性検証として、反射屈折の生じる生体を簡略に模擬した体系を対象とした、自作計算コードを用いた輸送計算と光輸送モンテカルロ計算コード MCML を用いた計算を行い、互いの解を比較した。自作計算コードの収束解と MCML の参照解が互いによく一致したことから、自作計算コードで正しく反射屈折を取り扱うことができていることが確認された。

反射屈折を考慮する必要性の検証として、自作計算コードを用いて、反射屈折を考慮しない条件、反射のみを考慮する条件、反射屈折を考慮する条件でそれぞれ計算を行い、光子束空間分布を比較した。反射屈折を考慮する条件に対する相対誤差を計算すると、反射屈折を考慮しない条件では最大で約 95%、反射のみを考慮する条件では最大で約 25%の相対誤差が生じており、反射屈折の考慮は必須であると判断した。

3.6 参考文献

- [1] 牛尾直史, “Characteristics 法の基礎”, 第 36 回炉物理夏期セミナーテキスト, pp.27-46(2004).
- [2] 藤井宏之, ”生体における光の輸送現象：輻射輸送方程式の数値計算と光トモグラフィへの応用に向けて”, 第 50 回炉物理夏期セミナーテキスト, pp.39-64(2018).
- [3] L. Wang et al., “MCML—Monte Carlo modeling of light transport in multi-layered tissues,” *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, DOI:10.1016/0169-2607(95)01640-F.
- [4] 藤井宏之 他, “拡散光トモグラフィのための輻射輸送方程式及び拡散方程式を用いた光学特性値再構成アルゴリズムの開発”, 第 62 回理論応用力学講演会 講演論文集, OS05-08 (2013).
- [5] R. Khan et al., “Refractive index of biological tissues: Review, measurement techniques, and applications,” *Photodiagnosis. Photodyn, Ther.*, DOI:10.1016/j.pdpdt.2021.102192.
- [6] 岡田英史, “高散乱媒質中の光伝播解析” *kogaku*, **34**(11), pp562-567 (2005).
- [7] H. Fujii et al., “Modeling of light propagation in the human neck for diagnoses of thyroid cancers

by diffuse optical tomography”, *Int J Numer Meth Biomed Engng*, DOI 10.1002/cnm.2826.

- [8] L. Wang, S. L. Jacques, “Monte Carlo Modeling of Light Transport in Multi-layered Tissues in Standard C,” University of Texas M. D. Anderson Cancer Center (1995).
- [9] 私信, 北海道大学工学研究院 藤井宏之助教(2020).

第4章 拡散加速法による反射屈折を考慮した光輸送解析の高速化

4.1 本章の概要

3章では、反射屈折を考慮した厳密な光輸送計算コードを開発し、光輸送の分野で用いられているモンテカルロ計算コード MCML[1]と比較することで、正しい光子束空間分布が得られていることを確認した。その際、簡単のために 0.3cm の 1次元無限平板体系を対象としたが、実際のヒト組織に則して計算を行う場合、その体系サイズは、頸部では1辺が 10~20cm の 2次元体系[2]、頭部では1辺が 10~20cm の 3次元体系[3]となる。さらに、1章で述べた通り、光学特性値の空間分布を推定するためには逆問題解析を行う必要がある。よって、生体断層画像を作成する過程で、1辺が 10~20cm の多次元体系を対象とした計算を多数回実施しなければならない。現実的な時間内で画像を作成するためには、1回あたりの光輸送計算の高速化が必要である。

そこで本章では、原子力分野で広く用いられている効率的な計算手法である拡散加速法による、反射屈折を考慮した光輸送計算の高速化について検討した。ただし、中性子輸送計算では、中性子が物質境界面において反射あるいは屈折するといった物理現象を取り扱っていない点に注意せねばならない。従って、中性子輸送計算の高速化として活用されている従来の拡散加速法が、反射屈折を考慮した厳密な光輸送計算に対して適用可能なかどうか、明らかにする必要がある。本章では、反射屈折を考慮した厳密な光輸送計算に対する拡散加速法の適用性を示すことを目的として、以下で述べるような検討を実施した。

- ① 反射屈折を考慮した厳密な光輸送計算に適用できるように、従来の拡散加速法(中性子流補正項の計算方法)を改良。
- ② 改良した拡散加速法を適用した光輸送計算の収束解の検証作業(verification)として、加速法を適用した場合と適用しない場合が同じ結果になることを確認。
- ③ 拡散加速法を用いることにより、収束までに必要な外部反復回数を削減できることを確認。

本章の構成を説明する。まず 4.2 節では、反射屈折を考慮した拡散加速法について述べる。4.2.1 項では、本研究において新たに考案した、反射屈折現象を考慮した光輸送計算における拡散加速法について、計算理論を説明する。反射屈折を考慮する場合、境界面において角度光子束が不連続になるために、従来中性子輸送計算で用いられている拡散加速法では、光輸送計算を加速することはできない。そこで、反射屈折を考慮した光輸送計算に適した新たな拡散加速法を考案した。続く 4.2.2 項では、拡散加速法を含めた、反射屈折現象を考慮した厳密な光輸送計算コードの計算フローチャートを示し、その詳細設計を述べる。4.3 節では、新たに考案した拡散加速法を実装した自作計算コードを用いた検証結果について報告する。4.3.1 項では反射屈折の生じない条件において、4.3.2 項では反射屈折の生じる条件において、拡散加速法を適用した自作した計算コードによる収束解と参照解(モンテカルロ計算コード MCML の結果)を比較した。これらを比較することで、本研究で開発した拡散加速

法を適用した光輸送計算コードにより、正しい全光子束空間分布を得ることができることを確認する。続いて4.3.3項では、拡散加速法無し輸送計算と拡散加速法有り輸送計算の収束までに必要な反復回数比較することで、拡散加速法によって反復回数を削減可能であることを確認する。本検証により、拡散加速法の加速性能は、反射屈折現象の有無や屈折率の大きさによって変化することが明らかとなった。その影響や原因についての考察を述べる。4.4節では本章のまとめ、4.5節では参考文献をそれぞれ示す。

4.2 反射屈折を考慮した光輸送計算における拡散加速法

4.2.1 計算理論

3.1節で述べた通り、生体を対象とした光輸送計算では、生体組織と生体組織を覆う空気との境界面、または生体組織と生体組織内に存在する空気領域との境界面において反射屈折現象が生じる。反射屈折を考慮した問題を解く場合、2.4節で説明した従来の拡散加速計算をそのまま適用することはできない。以下、この理由を説明する。

反射屈折を考慮しない場合、空間メッシュ領域*i*から正方向へ流出した角度光子束 $\psi_{m,i}^{out}$ と空間メッシュ領域*i+1*への入射角度光子束 $\psi_{m,i+1}^{in}$ が一致する。そのため、2.4節で述べた通り、境界面を通過する角度光子束 $\psi_{m,i+1/2}$ は式(4.1)から容易に決定することができる。ただし、 $m = 1, 2, \dots, N_m$ であり、 N_m は角度分割数である。

$$\psi_{m,i+1/2} = \begin{cases} \psi_{m,i+1}^{out} = \psi_{m,i}^{in} & (-1 \leq \mu_m \leq 0) \\ \psi_{m,i}^{out} = \psi_{m,i+1}^{in} & (0 \leq \mu_m \leq 1) \end{cases} \quad (4.1)$$

μ_m は*m*番目の光子の代表飛行方向の余弦を表す。 $\psi_{m,i+1/2}$ を用いることで、輸送計算の結果に基づく正味光子流は式(4.2)から計算できる。

$$J_{i+1/2}^{MOC} = \sum_{m=1}^{N_m} \mu_m \psi_{m,i+1/2} w_m \quad (4.2)$$

上式において、各変数はそれぞれ以下の物理量を表す。

$J_{i+1/2}^{MOC}$: 輸送計算結果から計算される境界面*i+1/2*の正味光子流

w_m : *m*番目の代表飛行方向の重み

$J_{i+1/2}^{MOC}$ を用いることで、光子流補正係数は式(4.3)から計算することができる。

$$D_{cor,i+1/2} = \frac{J_{i+1/2}^{MOC} - \frac{-2D_i D_{i+1}}{D_i \Delta x_{i+1} + D_{i+1} \Delta x_i} (\phi_{i+1}^{MOC} - \phi_i^{MOC})}{\phi_{i+1}^{MOC} + \phi_i^{MOC}} \quad (4.3)$$

上式において、各変数はそれぞれ以下の物理量を表す。

$D_{cor,i+1/2}$: 境界面*i+1/2*における光子流補正係数

D_i : 空間メッシュ領域*i*における拡散係数

Δx_i : 空間メッシュ領域*i*の領域幅

ϕ_i^{MOC} : 空間メッシュ領域*i*の全光子束

$D_{cor,i+1/2}$ を用いることで、拡散理論に基づく正味光子流 $J_{i+1/2}$ は式(4.4)で補正することができる。

$$J_{i+1/2} = \frac{-2D_i D_{i+1}}{D_i \Delta x_{i+1} + D_{i+1} \Delta x_i} (\phi_{i+1} - \phi_i) + D_{cor,i+1/2} (\phi_{i+1} + \phi_i) \quad (4.4)$$

式(4.4)を拡散方程式に代入して解くことで、輸送計算結果を再現するような拡散計算結果が得られる。

一方、反射屈折を考慮する場合、空間メッシュ領域 i から正方向へ流出した角度光子束 $\psi_{m,i}^{out}$ の一部は反射されて境界面を通過せず、境界面を通過した光子束の一部は屈折によって m 以外の方向で空間メッシュ領域 $i+1$ へ入射することとなる。従って、 $\psi_{m,i}^{out}$ と $\psi_{m,i+1}^{in}$ が一致しないため、式(4.1)により $\psi_{m,i+1/2}$ を決定することができず、 $J_{i+1/2}$ 及び $D_{cor,i+1/2}$ を計算することができない(Fig 4.1)。

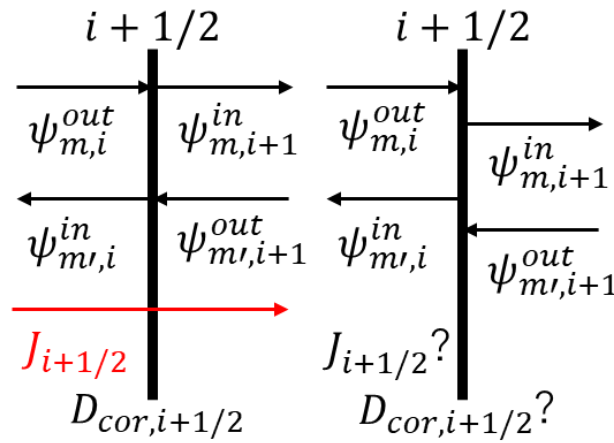


Fig 4.1 境界面における角度光子束、正味光子流、光子流補正係数の位置関係

(左：従来 MOC、右：反射屈折現象を考慮した MOC)

以上の要因から、反射屈折を考慮した光輸送計算に対して拡散加速法を導入するためには、角度光子束が不連続となる境界面について、正味光子流と光子流補正係数の計算方法を新たに考案する必要があった。Fig 4.1 に示した通り、1つの境界面について4種類の方向 m に関する角度光子束が存在しており、正味光子流を求めるために使用する角度光子束の組み合わせはいくつか挙げられる。ただし、拡散加速法に用いる正味光子流は、正味光子流と全光子束のバランス式を満足する必要がある。以上で述べた点を考慮し、左側と右側の流入/流出角度光子束を区別することで、それぞれに基づいて左側正味光子流と右側正味光子流を定義し、拡散加速計算で利用することにした。ここで、左側正味光子流 $J_{L,i+1/2}$ は式(4.5)、右側正味光子流 $J_{R,i+1/2}$ は式(4.6)でそれぞれ定義される量である。

$$J_{L,i+1/2} = \sum_{m=1}^{N_m/2} \mu_m \psi_{m,i}^{in} \Delta\mu_m + \sum_{m=N_m/2+1}^{N_m} \mu_m \psi_{m,i}^{out} \Delta\mu_m \quad (4.5)$$

$$J_{R,i+1/2} = \sum_{m=1}^{N_m/2} \mu_m \psi_{m,i+1}^{out} \Delta\mu_m + \sum_{m=N_m/2+1}^{N_m} \mu_m \psi_{m,i+1}^{in} \Delta\mu_m \quad (4.6)$$

ここで、左側正味光子流 $J_{L,i+1/2}$ 及び右側正味光子流 $J_{R,i+1/2}$ という用語における左側/右側や下添え字L/Rという表現は、境界面 $i + 1/2$ の左側及び右側をそれぞれ意味している。

式(4.5)、式(4.6)で定義された J_L, J_R を用いることで、空間メッシュ領域 i における全光子束 ϕ_i と正味光子流のバランス式を以下のように書き直すことができる。

$$\frac{J_{L,i+1/2} - J_{R,i-1/2}}{\Delta x_i} + \mu_{a,i} \phi_i = q_i \quad (4.7)$$

また、 $J_{L,i+1/2}, J_{R,i+1/2}$ に基づくことで、左側光子流補正係数 $D_{\text{corL},i+1/2}$ は式(4.8)、右側光子流補正係数 $D_{\text{corR},i+1/2}$ は式(4.9)により、それぞれ求めることができる。

$$D_{\text{corL},i+1/2} = \frac{J_{L,i+1/2} - \frac{-2D_i D_{i+1}}{D_i \Delta x_{i+1} + D_{i+1} \Delta x_i} (\phi_{i+1}^{\text{MOC}} - \phi_i^{\text{MOC}})}{\phi_{i+1}^{\text{MOC}} + \phi_i^{\text{MOC}}} \quad (4.8)$$

$$D_{\text{corR},i+1/2} = \frac{J_{R,i+1/2} - \frac{-2D_i D_{i+1}}{D_i \Delta x_{i+1} + D_{i+1} \Delta x_i} (\phi_{i+1}^{\text{MOC}} - \phi_i^{\text{MOC}})}{\phi_{i+1}^{\text{MOC}} + \phi_i^{\text{MOC}}} \quad (4.9)$$

境界面 $i + 1/2$ における角度光子束と正味光子流 $J_{L,i+1/2}, J_{R,i+1/2}$ 及び光子流補正係数 $D_{\text{corL},i+1/2}, D_{\text{corR},i+1/2}$ の位置関係を Fig 4.2 に示す。

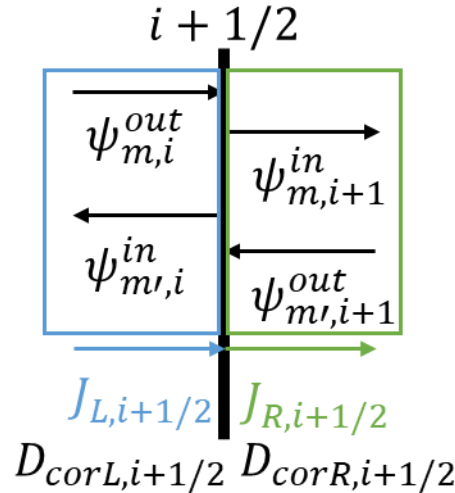


Fig 4.2 境界面における角度光子束と $J_{L,i+1/2}, J_{R,i+1/2}$ 及び $D_{\text{corL},i+1/2}, D_{\text{corR},i+1/2}$ の位置関係

最終的な結果として、反射屈折を考慮した拡散加速計算の三点階差式における係数 A_{i-1}, A_i, A_{i+1} は、式(4.10),(4.11),(4.12)で示したように $D_{\text{corL}}, D_{\text{corR}}$ を用いてそれぞれ求めるこ

とができる。

$$A_{i-1/2} = \frac{1}{\Delta x_i} \left(\frac{-2D_i D_{i-1}}{D_i \Delta x_{i-1} + D_{i-1} \Delta x_i} - D_{\text{corR},i-1/2} \right) \quad (4.10)$$

$$A_i = \mu_a + \frac{1}{\Delta x_i} \left(\frac{2D_i D_{i+1}}{D_i \Delta x_{i+1} + D_{i+1} \Delta x_i} + \frac{2D_{i-1} D_i}{D_{i-1} \Delta x_i + D_i \Delta x_{i-1}} + D_{\text{corL},i+1/2} - D_{\text{corR},i-1/2} \right) \quad (4.11)$$

$$A_{i+1/2} = \frac{1}{\Delta x_i} \left(\frac{-2D_{i+1} D_i}{D_{i+1} \Delta x_i + D_i \Delta x_{i+1}} + D_{\text{corL},i+1/2} \right) \quad (4.12)$$

なお、反射屈折現象の生じない条件では、境界面 $i + 1/2$ において $J_{L,i+1/2}$ と $J_{R,i+1/2}$ は一致するため、境界面 $i - 1/2$ では式(4.13)、境界面 $i + 1/2$ では式(4.14)の関係が成り立つ。

$$J_{i-1/2} = J_{L,i-1/2} = J_{R,i-1/2} \quad (4.13)$$

$$J_{i+1/2} = J_{L,i+1/2} = J_{R,i+1/2} \quad (4.14)$$

式(4.13)と式(4.14)を式(4.7)に代入することで、従来の拡散加速法と同様の計算を実行していることが確認できる。

反射屈折現象の生じる条件であっても、解が収束していれば $J_{L,i+1/2}$ と $J_{R,i+1/2}$ は一致するはずである。しかし、現段階のコードでは、反復計算初期では $J_{L,i+1/2}$ と $J_{R,i+1/2}$ との差が 10^{-2} 程度存在し、収束付近では 10^{-6} 程度存在する。この差異が生じる原因は未だ明らかにできていないが、要因の1つとして反射屈折重みテーブルの離散化誤差による影響が考えられる。

3.3.2 項に記載した通り、自作した光輸送計算コードでは、ある方向から入射した光が反射屈折後に各方向へ寄与する割合を個別に求めて1つのテーブル(反射屈折重みテーブル)にまとめ、反射屈折重みテーブルを角度光子束に作用させることで反射屈折現象を取り扱っている。反射屈折後に各方向へ寄与する割合を求める際、光子流を保存することを優先して係数を決定しているため、光子束を厳密に保存できていない。式(4.15)を満足するように反射屈折重みテーブルを規格化することができれば、光子束が保存され、反復計算収束時に $J_{L,i+1/2}$ と $J_{R,i+1/2}$ が一致する可能性がある。

$$\frac{(\text{反射屈折重みテーブルの総和})}{(\text{角度分割数})} = 1 \quad (4.15)$$

反復計算収束時に $J_{L,i+1/2}$ と $J_{R,i+1/2}$ が一致するならば、 $J_{i+1/2}$ を式(4.16)のように $J_{L,i+1/2}$ と $J_{R,i+1/2}$ の平均値として与えることで、光子流を境界面の左側と右側で区別することなく取り扱うことができる可能性がある。

$$J_{i+1/2} = \frac{J_{L,i+1/2} + J_{R,i+1/2}}{2} \quad (4.16)$$

4.2.2 計算フローと詳細設計

3章にて、反射屈折を考慮した厳密な光輸送計算コードを自作したことを述べた。この自

作光輸送計算コードに対して、4.2.1 項で説明した拡散加速法を導入した。本項では、拡散加速計算のフローと拡散加速法を導入した輸送計算全体のフローを示し、その詳細設計を説明する。

拡散加速法を導入した輸送計算全体のフローチャート及び拡散加速計算のフローチャートを Fig. 4.1 に示す。

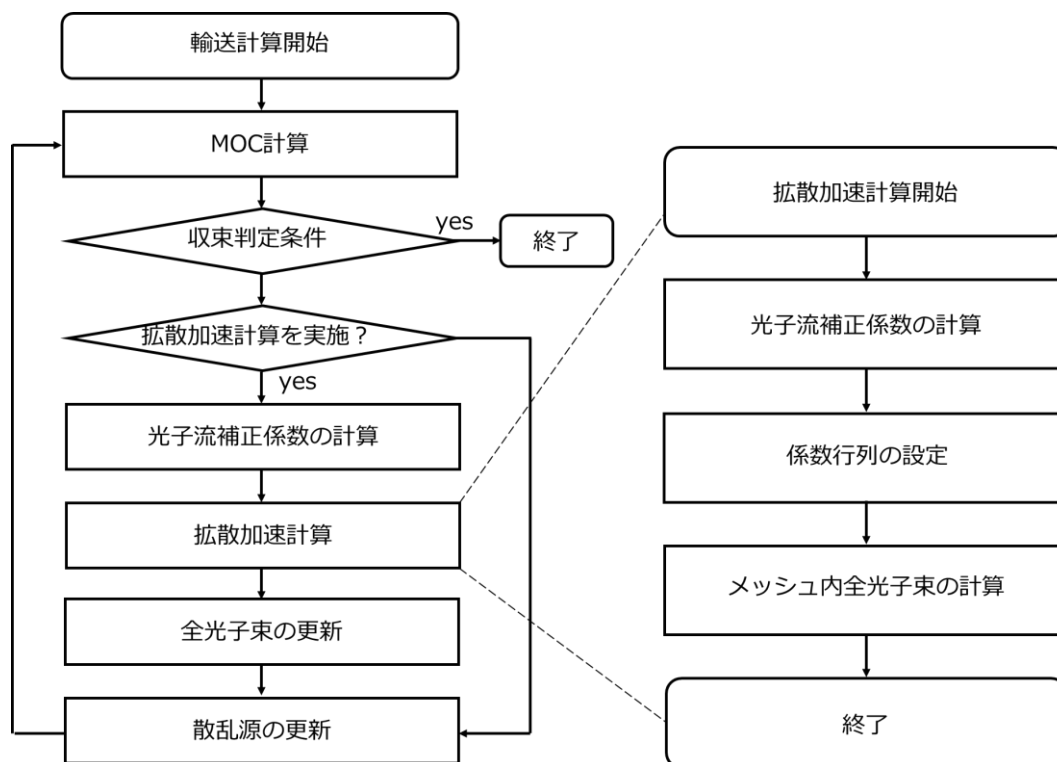


Fig. 4.1 反射屈折を考慮した拡散加速計算のフローチャート

以下では、拡散加速計算に関連する各要素に注目し、それらの計算手順について説明する。

- ① Transport sweep 終了後、境界面の角度光子束を用いて、式(4.5)により左側正味光子流 J_L を、式(4.6)により右側正味光子流 J_R をそれぞれ計算する。
- ② 拡散加速計算を行う場合、③以降の処理を実行する。拡散加速計算を実施する頻度は任意に設定することができる。計算高速化の観点からは高い頻度で実施することが望ましいが、収束性が不安定となる場合がある。安定して計算を行うために、一般的には、拡散加速計算は transport sweep 数回おきに実施される。4.3 節にて後述する検証では、4回 transport sweep を行う毎に拡散加速計算を実施している。
- ③ J_L, J_R 及び全光子束 ϕ^{MOC} を用いて、式(4.8)に基づいて左側光子流補正係数 D_{corL} を、式(4.9)に基づいて右側光子流補正係数 D_{corR} をそれぞれ求める。
- ④ D_{corL}, D_{corR} を用いて、係数行列 \mathbf{A} を補正する。 \mathbf{A} は光子の漏れ及び吸収を表す $N \times N$ 行 $N \times N$ 列の疎行列であり、その要素 $a_{i,i-1}$ は式(4.17)、対角要素 $a_{i,i}$ は式(4.18)、要素 $a_{i,i+1}$

は式(4.19)から求めることができる。

$$a_{i,i-1} = \frac{1}{\Delta x_i} \left(\frac{-2D_i D_{i-1}}{D_i \Delta x_{i-1} + D_{i-1} \Delta x_i} - D_{\text{corR},i-1/2} \right) \quad (4.17)$$

$$a_{i,i} = \mu_a + \frac{1}{\Delta x_i} \left(\frac{2D_i D_{i+1}}{D_i \Delta x_{i+1} + D_{i+1} \Delta x_i} + \frac{2D_{i-1} D_i}{D_{i-1} \Delta x_i + D_i \Delta x_{i-1}} + D_{\text{corL},i+1/2} - D_{\text{corR},i-1/2} \right) \quad (4.18)$$

$$a_{i,i+1} = \frac{1}{\Delta x_i} \left(\frac{-2D_{i+1} D_i}{D_{i+1} \Delta x_i + D_i \Delta x_{i+1}} + D_{\text{corL},i+1/2} \right) \quad (4.19)$$

- ⑤ 輸送計算の解を再現するように補正した拡散計算を実施する。解くべき方程式を式(4.20)に示す。

$$\mathbf{A} \vec{\phi} = \vec{q} \quad (4.20)$$

自作した計算コードでは、LU分解を用いて式(4.20)を解いている。まずは係数行列 \mathbf{A} を下三角行列 \mathbf{L} と上三角行列 \mathbf{U} に分解する。

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} \mathbf{U} \quad (4.21)$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_{0,1} & A_{x+,1} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ A_{x-,2} & A_{0,2} & A_{x+,2} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & A_{x-,3} & A_{0,3} & A_{x+,3} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & A_{x-,NX} & A_{0,NX} \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ L_2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & L_3 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & L_{NX} & 1 \end{pmatrix} \quad (4.23)$$

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} U_1 & A_{x+,1} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & U_2 & A_{x+,2} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & U_3 & A_{x+,3} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & U_{NX} \end{pmatrix} \quad (4.24)$$

$$L_i = \begin{cases} 0 & (i = 1) \\ \frac{A_{x-,i}}{U_{i-1}} & (i \neq 1) \end{cases} \quad (4.25)$$

$$U_i = \begin{cases} A_{0,1} & (i = 1) \\ A_{0,i} - L_i A_{x+,i-1} & (i \neq 1) \end{cases} \quad (4.26)$$

次に、得られた下三角行列 \mathbf{L} と上三角行列 \mathbf{U} を用いた直接解法によって、中性子束の解を求める。具体的には、 \vec{q} に対して下三角行列 \mathbf{L} を作用させることで式(4.27),(4.28)のように前進消去し、上三角行列 \mathbf{U} を用いて式(4.29),(4.30)のように後退代入することで解を求めている。このように直接解法を用いているため、加速計算内部では反復計算を行う

必要がない。

$$\vec{z} = (z_1, z_2, \dots, z_{NX})^T = \mathbf{L}^{-1}\vec{q} \quad (4.27)$$

$$z_i = \begin{cases} Q_1 & (i = 1) \\ Q_i - L_i z_{i-1} & (i \neq 1) \end{cases} \quad (4.28)$$

$$\vec{\phi} = \mathbf{U}^{-1}\vec{z} \quad (4.29)$$

$$\phi_i = \begin{cases} \frac{z_{NX}}{U_{NX}} & (i = NX) \\ \frac{z_i - A_{x+}\phi_{i+1}}{U_i} & (i \neq NX) \end{cases} \quad (4.30)$$

- ⑥ 式(4.30)で求めた全光子束 $\vec{\phi}$ を用いて、式(4.31)に基づいて輸送計算の全光子束を更新する。ただし、 $\phi_i^{\text{DIF}}/\phi_i^{\text{MOC}}$ に負の値が生じた場合には、更新後の全光子束が負の値となることを避けるために更新は行わないこととした。

$$\tilde{\phi}_{n,i}^{\text{MOC}} = \phi_i^{\text{DIF}} \quad (4.31)$$

ここで、 $\tilde{\phi}_{n,i}^{\text{MOC}}$ は、加速計算による更新後の輸送計算の全中性子束である。

4.3 拡散加速法の光輸送計算への適用性に関する検討

4.3.1 反射屈折現象の生じない条件における検討

4.3.1.1 本検討の目的

4.2節では、新たな拡散加速法を考案し、それを導入した光輸送計算コードを作成したことを述べた。自作した光輸送計算コードは反射屈折現象を取り扱うことを前提として作成しているが、反射屈折現象が生じない条件においても正しい結果が得られることを確認する必要がある。

そこで、反射屈折現象の生じない、通常の中性子輸送計算と同じ条件において、新たな拡散加速法を適用した自作計算コードの収束解とモンテカルロ計算から得られた参照解を比較する。

なお、拡散加速法の加速性能に関する検討については4.3.3項で述べる。

4.3.1.2 計算体系・計算条件

計算体系はFig 4.3に示すように、光源、物質①、物質②からなる3物質領域の1次元無限平板体系である。なお、計算体系については、4.3.2項で述べる反射屈折現象が生じる計算条件で得られた計算結果と比較するために、ヒト頸部を想定して体系を設定することとした。この詳細については、4.3.2項にて後述する。

計算体系の条件を以下に示す。光輸送計算の分野における文献[4]を参考し、体系サイズを調整した。

- 体系サイズ：0.3cm
- 各物質領域サイズ：0.1cm
- 等方光源
- 外部境界面：真空境界条件

各物質領域の光学特性値を Table 4.1 に示す。各物質領域の屈折率は 1.0 であり、内部境界面・外部境界面共に反射屈折現象は生じない。外部境界面は両側とも真空境界条件となっており、体系外部に流出した光子が体系内部に再度入射することはない。

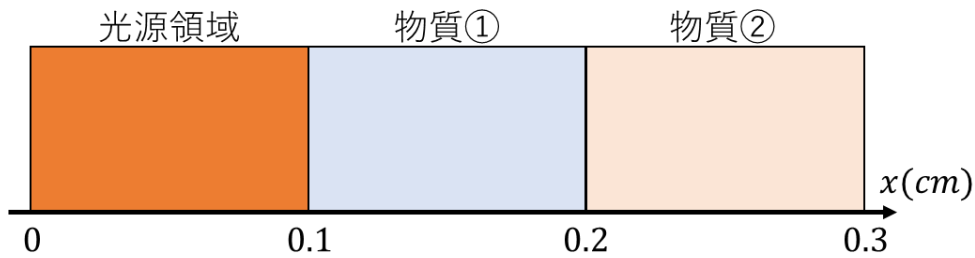


Fig 4.3 自作計算コード検証のための 1次元無限平板体系

Table 4.1 自作計算コード検証のための 1次元無限平板体系の各物質領域での光学特性値 (反射屈折現象の生じない仮想的な体系)

	μ_s [cm^{-1}]	μ_a [cm^{-1}]	n	q [cm^{-3}]
光源	90	0.15	1.0	1.0
物質①	0.0001	0.0001	1.0	0.0
物質②	90	0.15	1.0	0.0
体系外部	0	0	1.0	0.0

自作計算コードにおける、その他の計算条件を以下に示す。角度分割数及び空間メッシュ分割数について簡単なパラメータサーベイを行い、離散化誤差が十分に小さくなる範囲でなるべく少ない分割数を条件として設定した。

- 角度分点セット：多重 GL 分点、 $\mu = 0$ と臨界角で区切って展開
- 角度分割数：300 ($-1 \sim -\mu_c, -\mu_c \sim 0, 0 \sim \mu_c, \mu_c \sim 1$ をそれぞれ 75 分割)
- 境界面に垂直な極角方向を $-1 \leq \mu \leq 1$ の範囲で分割
- 空間メッシュ分割数：300
- 全光子束収束判定条件： 10^{-6}
- 拡散加速計算無し、拡散加速計算有りそれぞれ計算を実施
- 拡散加速計算有りでは、輸送計算 4 回ごとに拡散加速計算を実施

4.3.1.3 参照解の計算

MCML の条件を以下に示す。

- ヒストリー数：10,000,000,000
- 全光子束のタリーを求める際の空間メッシュ分割数：300

ヒストリー数については、簡単なパラメータサーベイを行った上で、計算精度と計算時間の兼ね合いから決定した。上記の条件では、統計誤差が数%程度で収まり、計算に要する時間は24時間程度である。空間メッシュ分割数は、上述した自作計算コードの条件と統一した。

4.3.1.4 反射屈折現象の生じない条件における妥当性検証結果

拡散加速法を用いた光子束空間分布の妥当性に関する検討結果について述べる。自作計算コードを用いて、加速計算無し、加速計算有りの条件で得られた各空間メッシュ領域全光子束の計算結果、及びMCMLによる参照解を Fig 4.4 に示す。また、MCMLの参照解に対する、加速無し輸送計算、加速有り輸送計算の相対誤差の空間分布を Fig 4.5 に示す。相対誤差は、式(4.32)を用いて計算した。

$$\frac{\phi_i^{MOC} - \phi_i^{MCML}}{\phi_i^{MCML}} \quad (4.32)$$

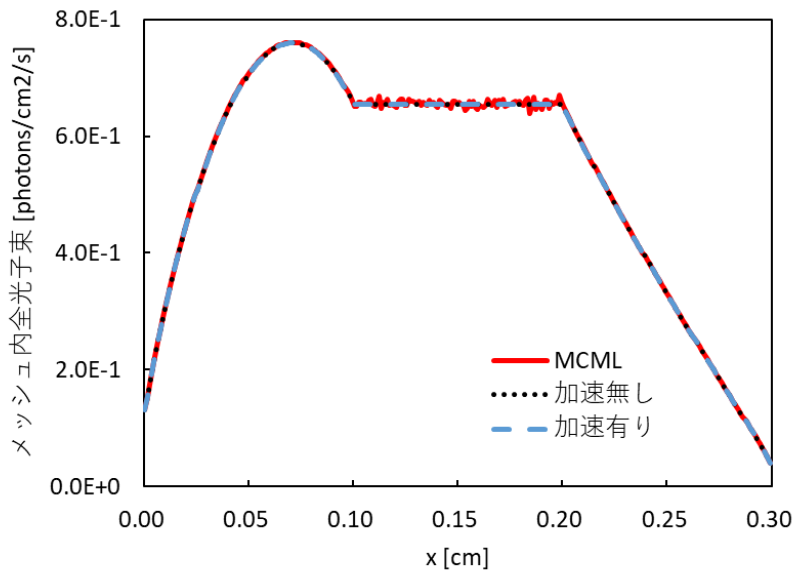


Fig 4.4 光子束空間分布(反射屈折無し)

Fig 4.4 より、(a) MCML による参照解、(b) 自作計算コードによる加速無し輸送計算で得られた計算結果、(c) 自作計算コードによる加速有り輸送計算で得られた結果、それぞれが互いによく一致していることが確認できる。光源領域($0.0 \leq x \leq 0.1$ cm)では、領域全体に分布した等方光源による光子束の増加と漏洩及び吸収による光子束の減衰が起こるため、光

光子束は領域中央付近で最大となり、最大となる位置から離れるほど減少する。物質①の領域 ($0.1 \leq x \leq 0.2 \text{ cm}$)において光子束空間分布が平坦になっている理由は、光学特性値 μ_s, μ_a が $10^{-4}[\text{/cm}]$ と小さく、光子と物質との相互作用がほとんど起こらないためである。物質②の領域($0.2 \leq x \leq 0.3 \text{ cm}$)では $x = 0.2 \text{ cm}$ の境界面から入射した光子束が、吸収及び境界面からの漏洩によって減衰している。

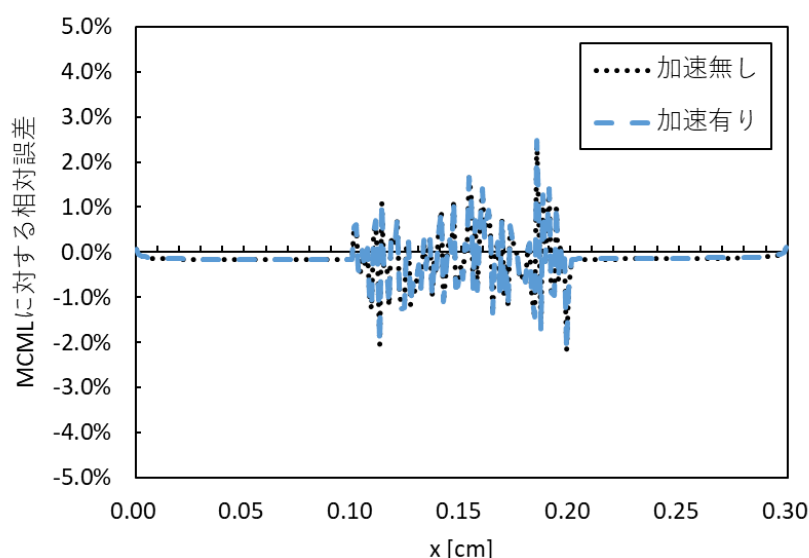


Fig 4.5 MCML に対する相対誤差分布(反射屈折無し)

Fig 4.5より、参照解(MCML)との相対誤差は、(b) 加速無し輸送計算で得られた計算結果、(c) 加速有り輸送計算で得られた計算結果、ともに同様の傾向を示すことが確認できた。これは、加速計算の有無によらず、計算結果が同一であることも示している。光源領域及び物質②の領域では誤差が 0.1%程度生じているが、これは計算手法の差による系統的な誤差であると考えられる。また、物質①の領域では誤差数%程度の範囲でばらついている。この理由は、物質①の散乱係数及び吸収係数が 10^{-4} と小さく、光子が領域内の物質と反応する確率が極めて小さいため、collision estimator による推定精度が悪化し、MCML の統計誤差が大きくなるためと考えることができる。

反射屈折現象の生じない条件において加速無し輸送計算、あるいは加速有り輸送計算で得られた計算結果について、参照解(MCML)に対する最大相対誤差、最小相対誤差、平均二乗誤差を Table 4.2 にそれぞれ示す。拡散加速法有りの条件における誤差と、拡散加速法無しの条件における誤差と比較すると、誤差の大きさが同じ結果が得られており、誤差は最大でも 2.5%程度に収まっている。反射屈折現象の生じない条件について、加速計算を実行し

た輸送計算から正しい光子束空間分布を得ることができることを確認した。

Table 4.2 MCML に対する相対誤差の最大値、最小値、平均二乗誤差(反射屈折無し)

	加速無し輸送計算	加速有り輸送計算
最大相対誤差[%]	2.5	2.5
最小相対誤差[%]	-2.2	-2.2
平均二乗誤差[%]	0.5	0.5

4.3.2 反射屈折現象の生じる条件における検討

4.3.2.1 本検討の目的

本項では、反射屈折現象の生じる条件における拡散加速法の有用性を確認するための検討を行った。反射屈折現象の生じる条件についても、拡散加速計算有りの輸送計算から正しい光子束空間分布が得られていることを確認するために、新たな拡散加速法を適用した自作計算コードの収束解と MCML を用いて得られた参照解と比較した。

4.3.2.2 計算体系・計算条件

反射屈折現象は屈折率の異なる物質間の境界面で生じ、その影響の大きさは屈折率同士の差で決まる。近赤外線(約600 nm~1100 nm)に対する生体組織の屈折率は、その多くが 1.4 近傍の値をとる[5]。一方で空気の屈折率は 1.0 であり、生体組織と空気領域の境界面で生じる反射屈折効果は、生体組織同士の境界面で生じる反射屈折効果よりも、光子束空間分布に対して大きな影響を及ぼすこととなる。生体組織と空気領域が隣接する部位としてヒト頸部があり、拡散光トモグラフィはヒト頸部も計測の対象としている[6]。そこで、本項で実施した計算体系は、ヒト頸部を想定するように設定することとした。光子は光源領域($0.0 \leq x \leq 0.1 \text{ cm}$)でのみ発生し、空気を想定した物質①の領域を經由して、生体組織を想定した物質②の領域へ輸送される。この過程で、 $x = 0.1 \text{ cm}$ における内部境界面では屈折率の高い物質から低い物質への入射となり、臨界角以上の角度で入射した光は全反射され、流出した光子束は屈折により、 $0^\circ < \theta_{refra} < 90^\circ$ の範囲に分布する。また、 $x = 0.2 \text{ cm}$ における境界面では屈折率の低い物質から高い物質への入射となり、流出した光子束は屈折により、 $0^\circ < \theta_{refra} < \theta_c$ の範囲に分布する。反射屈折現象の生じない条件における拡散加速計算の性能と比較するために、屈折率を除いた計算体系の条件を 4.3.1 項に示した値と統一して検討を実施した。反射屈折現象の生じる条件における光学特性値を Table 4.3 に示す。物質①及び体系外部の屈折率は 1.0、光源領域及び物質②の屈折率を 1.001, 1.01, 1.2, 1.4, 1.6, 1.8, 2.0 の 7 条件とし、光源と物質②の屈折率は同一の値を設定した。この条件では、全ての内部境界面及び外部境界面で反射屈折現象が生じ、光源領域及び物質②に与えた屈折率が大きいほど反射屈折現象による影響も大きくなる。

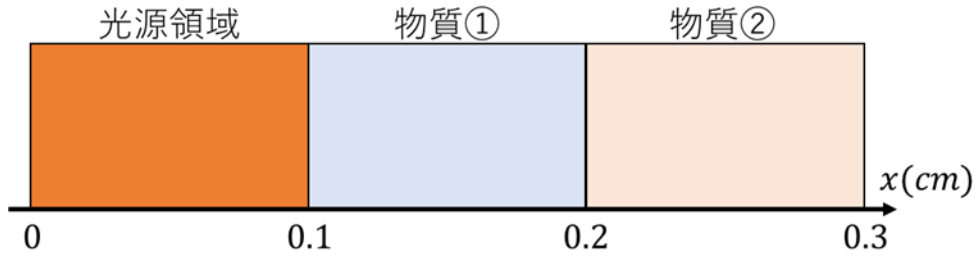


Fig 4.6 自作計算コード検証のための1次元無限平板体系(Fig 4.3 再掲)

Table 4.3 屈折率の異なる領域を持つ1次元無限平板体系の各領域での光学特性値

	μ_s [cm^{-1}]	μ_a [cm^{-1}]	n [-]	q [cm^{-3}]
光源	90	0.15	1.001, 1.01, 1.2, 1.4, 1.6, 1.8, 2.0	1.0
物質①	0.0001	0.0001	1.0	0.0
物質②	90	0.15	1.001, 1.01, 1.2, 1.4, 1.6, 1.8, 2.0	0.0
体系外部	0	0	1.0	0.0

計算条件は 4.3.1 項に示したものと統一した。以下に示す計算条件は 4.3.1 項の再掲となっている。

- 角度分点セット：多重 GL 分点、 $\mu = 0$ と臨界角で区切って展開
- 角度分割数：300 ($-1 \sim -\mu_c, -\mu_c \sim 0, 0 \sim \mu_c, \mu_c \sim 1$ をそれぞれ 75 分割)
- 境界面に垂直な極角方向を $-1 \leq \mu \leq 1$ の範囲で分割
- 空間メッシュ分割数：300
- 全光子束収束判定条件： 10^{-6}
- 拡散加速計算無し、拡散加速計算有りそれぞれ計算を実施
- 拡散加速計算有りでは、輸送計算 4 回ごとに拡散加速計算を実施

4.3.2.3 反射屈折現象の生じる条件における妥当性検証結果

反射屈折現象の生じる条件における、拡散加速法を用いた光子束空間分布の妥当性に関する検討結果について述べる。自作計算コードを用いて、加速計算無し、加速計算有りの条件で得られた光子束空間分布結果、及び MCML による参照解をそれぞれ Fig 4.7, Fig 4.9, Fig 4.11, Fig 4.13, Fig 4.15, Fig 4.17 に示す。また、MCML の結果に対する加速計算無し、加速計算有りの相対誤差の空間分布を Fig 4.8, Fig 4.10, Fig 4.12, Fig 4.14, Fig 4.16, Fig 4.18 に示す。相対誤差は、4.3.3.3 目にて述べた式(4.32)で計算した。

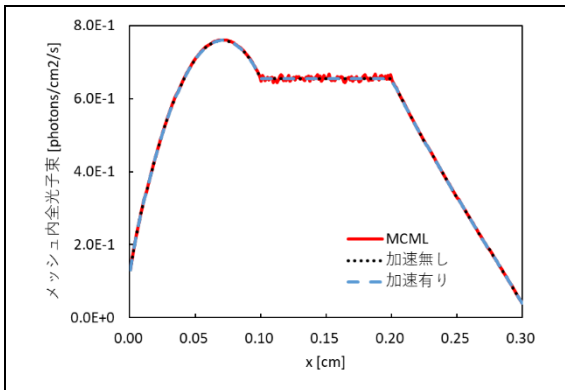


Fig 4.7 光子束空間分布結果
(光源及び物質②の屈折率 1.001)

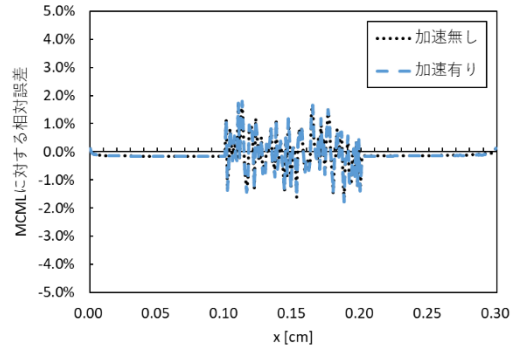


Fig 4.8 参照解に対する相対誤差
(光源及び物質②の屈折率 1.001)

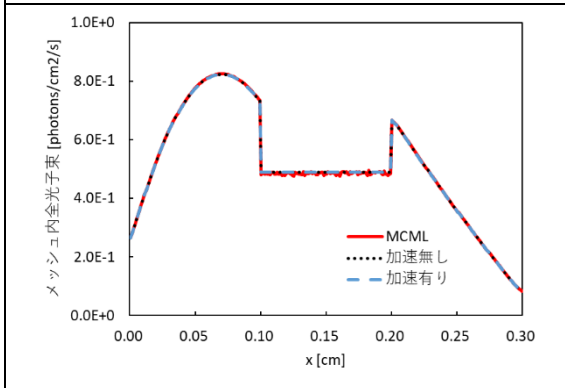


Fig 4.9 光子束空間分布結果
(光源及び物質②の屈折率 1.2)

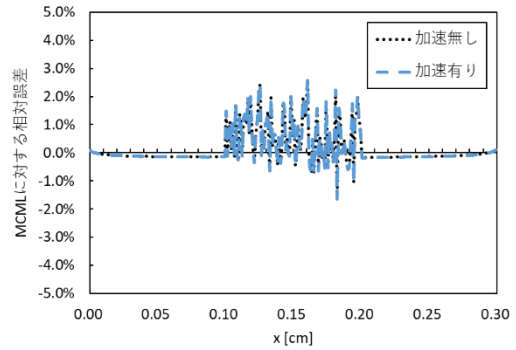


Fig 4.10 参照解に対する相対誤差
(光源及び物質②の屈折率 1.2)

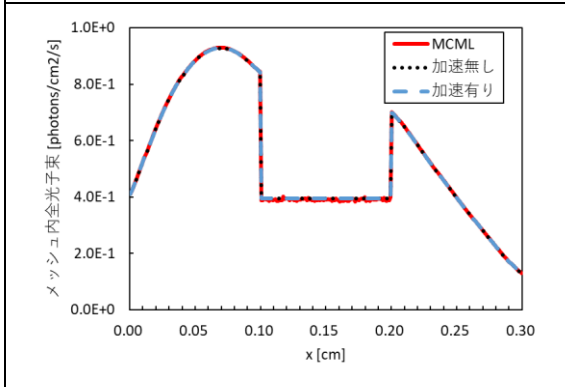


Fig 4.11 光子束空間分布結果
(光源及び物質②の屈折率 1.4)

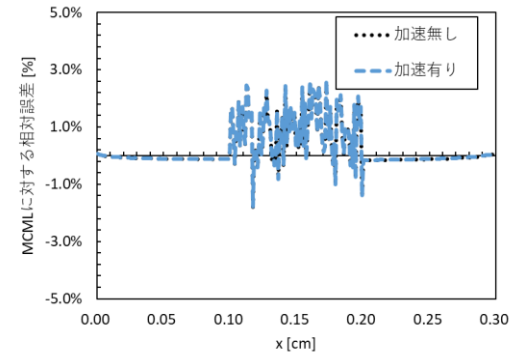


Fig 4.12 参照解に対する相対誤差
(光源及び物質②の屈折率 1.4)

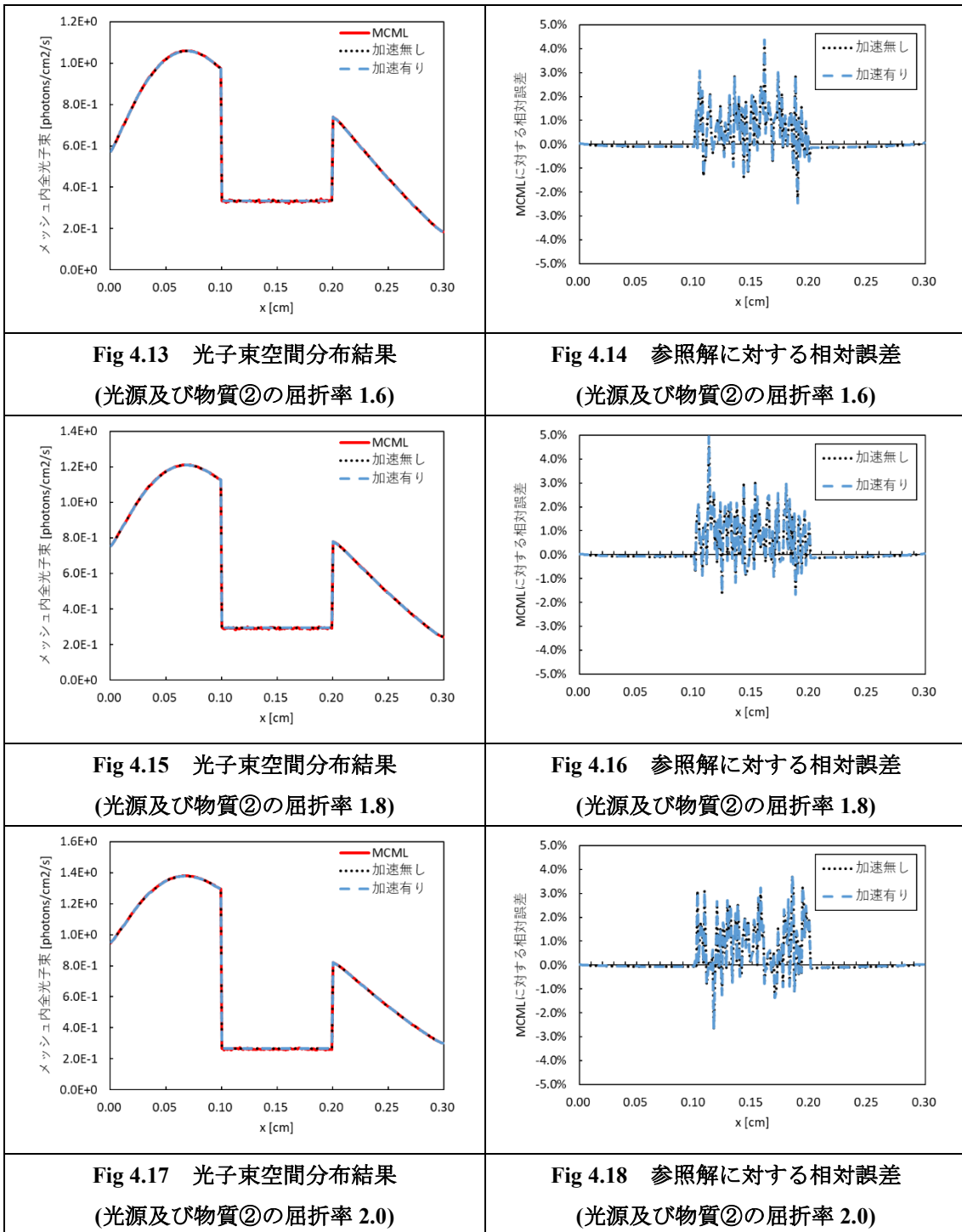


Fig 4.7, Fig 4.9, Fig 4.11, Fig 4.13, Fig 4.15, Fig 4.17 より、屈折率の値によらず、(a)MCML による参照解、(b)自作計算コードによる加速計算無し輸送計算で得られた計算結果、(c)自作計算コードによる加速有り輸送計算で得られた計算結果がよく一致していることが確認できる。また、4.3.1 節で示した Fig 4.4 と Fig 4.7 を比較すると、物質領域同士の屈折率の差が小さい場合(Fig 4.7)では、反射屈折の影響も小さく、光子束空間分布はほとんど変化しないことが観察できる。物質領域同士の屈折率の差が大きい場合(Fig 4.9, Fig 4.11, Fig 4.13, Fig

4.15, Fig 4.17)では、屈折の影響により、以下で述べるような相違点が観察できる。

- 内部境界面で光子束が不連続となる
- 光源領域($0.0 \leq x \leq 0.1 \text{ cm}$)及び物質②($0.2 \leq x \leq 0.3 \text{ cm}$)の領域において、全光子束の空間分布の相対的な形状は互いに似ているが、光子束大きさは屈折率によって異なっている
- 物質①($0.1 \leq x \leq 0.2 \text{ cm}$)の領域では、光源領域及び物質②領域と比較して光子束が小さくなっている

3章で述べた通り、屈折率が大きい物質から屈折率が小さい物質へ光が入射する場合には、屈折率が小さい物質から屈折率が大きい物質へ光が入射する場合に比べて反射率が大きい。よって、屈折率の大きい光源と物質②の領域からは光が流出しにくいために光子束が大きくなり、屈折率の小さい物質①の領域からは光が流出しやすいために光子束が小さくなり、その境界面では光子束が不連続になる。Fig 4.9, Fig 4.11, Fig 4.13, Fig 4.15, Fig 4.17を比較すると、光源及び物質②の屈折率を 1.001~2.0 の範囲で変化させた場合、屈折率が大きいほど上記の効果も大きくなることを確認できる。

Fig 4.8, Fig 4.10, Fig 4.12, Fig 4.14, Fig 4.16, Fig 4.18 より、参照解(MCML)に対する相対誤差は、拡散加速無しの輸送計算の場合および拡散加速有りの輸送計算の場合、それぞれの条件についてほぼ同じ結果となることが確認できた。光源及び物質②の屈折率 1.4 の場合について、拡散加速無しの輸送計算、および拡散加速有りの輸送計算で得られた計算結果について、参照解(MCML)に対する最大相対誤差、最小相対誤差、平均二乗誤差を Table 4.4 にそれぞれ示す。拡散加速有り輸送計算の誤差と拡散加速無し輸送計算の誤差を比較すると、誤差の大きさは同じ結果が得られており、誤差は最大でも 2.6%程度に収まっている。さらに Table 4.2 と比較すると、反射屈折現象の生じない条件と同等の精度の結果が得られている。以上の結果より、反射屈折現象の生じる条件の場合についても、拡散加速計算有りの輸送計算により、妥当な光子束空間分布を得ることができることを確認した。

**Table 4.4 MCML に対する相対誤差の最大値、最小値、平均二乗誤差
(光源及び物質②の屈折率 1.4)**

	加速無し輸送計算	加速有り輸送計算
最大相対誤差[%]	2.6	2.6
最小相対誤差[%]	-1.8	-1.8
平均二乗誤差[%]	0.8	0.8

4.3.3 拡散加速法の加速性能に関する検討

4.3.3.1 反射屈折現象の生じない条件における加速性能検証

続いて、拡散加速法の加速性能に関する検討結果について述べる。光輸送計算では反復計算を行っており、反復回数が増えるほど光子束は収束解に近づいていく。拡散加速計算無し

の場合と拡散加速計算有りの場合で得られた全光子束について、外部反復回数 n に対する全光子束残差の減少を比べることにより、拡散加速法の加速性能を評価することができると考えた。ここで光子束の残差は、 $(n - 1)$ 反復目の光子束に対する n 反復目の光子束の相対誤差であり、空間メッシュ領域 i における光子束の残差は式(4.33)で計算される。

$$\left| \frac{\phi_{n,i} - \phi_{n-1,i}}{\phi_{n-1,i}} \right| \quad (4.33)$$

なお、本項の計算条件において既に説明したように、本計算では収束判定条件を 10^{-6} と設定している。すべての空間メッシュ領域 i について光子束の残差を計算し、その最大値が 10^{-6} 未満となった時点で解が収束したと判断した。

拡散加速計算無しの場合及び拡散加速計算有りの場合について、外部反復回数 n における全光子束の残差の最大値を Fig 4.19 に示す。Fig 4.19 において、黒の丸印は拡散加速計算なしの場合、青のバツ印は拡散加速計算有りの場合で得られた全光子束の残差の最大値をそれぞれ示している。2.4 節で述べた通り、反射屈折現象の生じない条件では従来の拡散加速法と同様の計算を実施しているため、本研究で実装した拡散加速計算が正しく実装できているのであれば、収束までに要する反復回数は約 1/10~1/100 に削減されると期待できる。

Fig 4.19 より、拡散加速計算有りの輸送計算の場合には、拡散加速計算無しの輸送計算の場合と比べて、外部反復計算毎の光子束残差の減少度合が大きく、反復計算の収束性を向上できていることが確認できた。ここで、収束判定基準を満足する収束解を得るまでに、加速無しの輸送計算の場合には 543 回の外部反復を要したのに対して、加速有りの輸送計算の場合には 21 回の外部反復計算で済むことが分かった。すなわち、拡散加速計算を適用することによって、外部反復計算回数を約 1/25 まで削減できており、反射屈折現象の生じない条件においては、期待通りの加速性能が発揮されていることが確認できた。

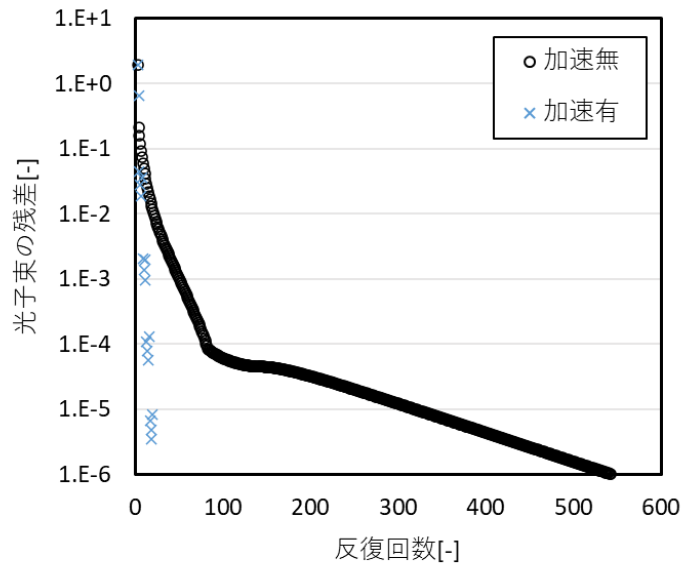


Fig 4.19 加速計算の有無による光子束残差の差異(反射屈折無し)

4.3.3.2 反射屈折現象の生じる条件における加速性能検証

続いて、拡散加速法の加速性能に関する検討結果について述べる。加速計算無し輸送計算及び加速計算有り輸送計算について、光源及び物質②の屈折率が 1.001, 1.01, 1.2, 1.4, 1.6, 1.8, 2.0 での各反復時における光子束の残差の最大値を Fig 4.20～Fig 4.26 に示す。

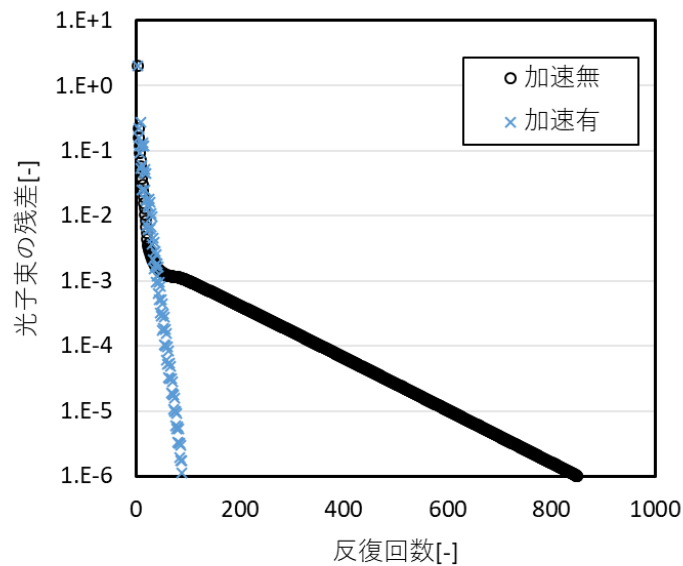


Fig 4.20 加速計算の有無による光子束残差の差異(光源及び物質②の屈折率 1.001)

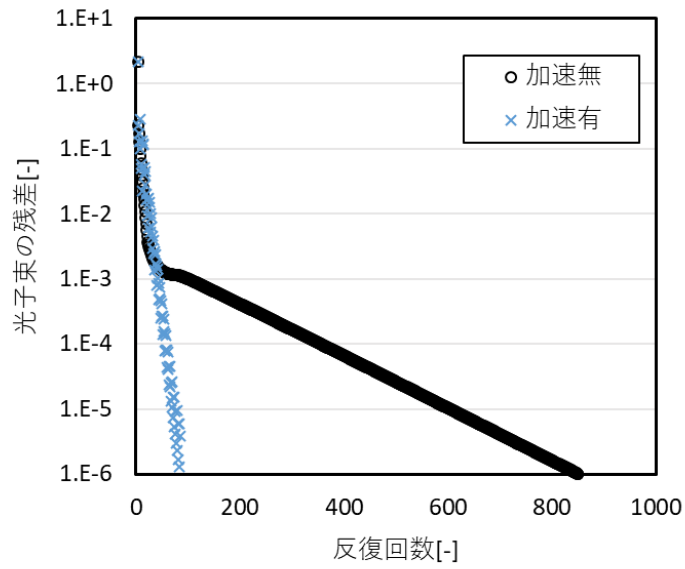


Fig 4.21 加速計算の有無による光子束残差の差異(光源及び物質②の屈折率 1.01)

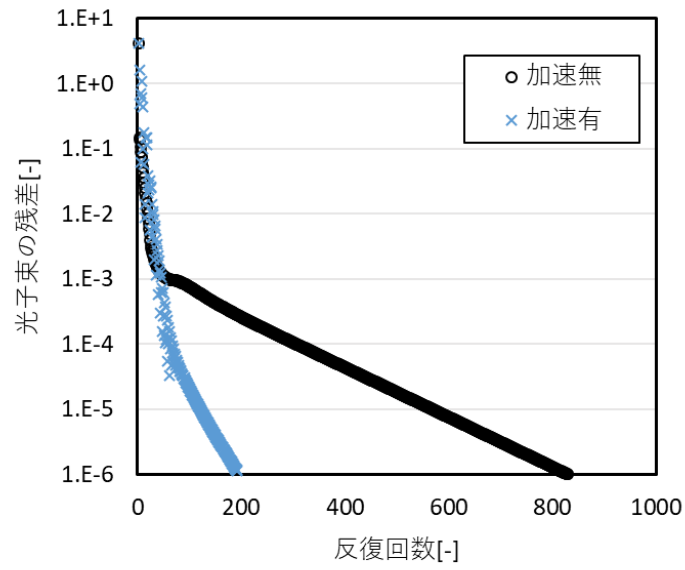


Fig 4.22 加速計算の有無による光子束残差の差異(光源及び物質②の屈折率 1.2)

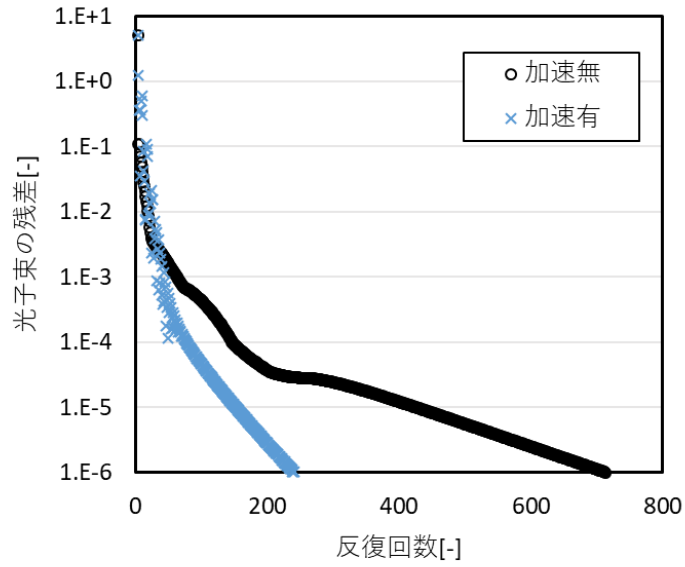


Fig 4.23 加速計算の有無による光子束残差の差異(光源及び物質②の屈折率 1.4)

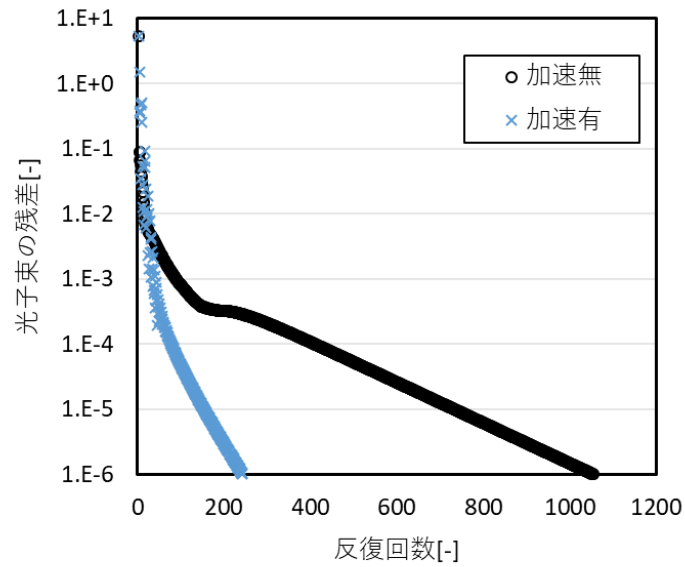


Fig 4.24 加速計算の有無による光子束残差の差異(光源及び物質②の屈折率 1.6)

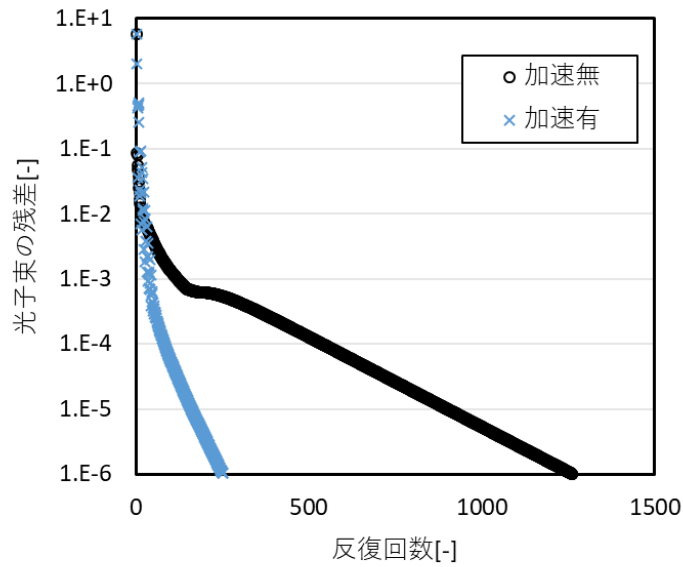


Fig 4.25 加速計算の有無による光子束残差の差異(光源及び物質②の屈折率 1.8)

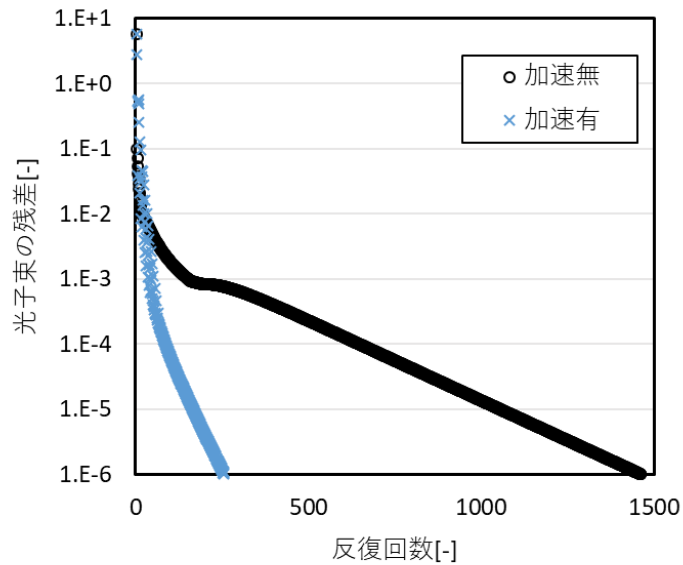


Fig 4.26 加速計算の有無による光子束残差の差異(光源及び物質②の屈折率 2.0)

Fig 4.20~Fig 4.26 それぞれについて、拡散加速計算無しの場合と拡散加速計算有り輸送計算の結果を比較すると、拡散加速計算有り輸送計算における反復計算毎の光子束残差の減少は早いことが確認できる。従って、拡散加速法を適用することで、体系の屈折率によって収束解を得るまでの外部反復回数に違いはあるものの、外部反復計算の収束性を向上

できることが分かった。

次に、光源及び物質②の屈折率が 1.0, 1.001, 1.01, 1.2, 1.4, 1.6, 1.8, 2.0 の場合の加速計算無し輸送計算及び加速計算有り輸送計算での収束に必要な反復回数を Fig 4.27 に示す。なお、屈折率 1.0 は反射屈折現象が生じない条件に対応している。また、体系の屈折率と拡散加速法の加速性能の関係を調べるために、式(4.34)に基づいて反復回数削減割合を求めて加速性能を評価した。

$$\text{反復回数削減割合} = \frac{\text{加速計算無し輸送計算の反復回数}}{\text{加速計算有り輸送計算の反復回数}} \quad (4.34)$$

光源及び物質②の屈折率を変化させた際の、拡散加速法による反復回数削減割合の変化を Fig 4.28 に示す。

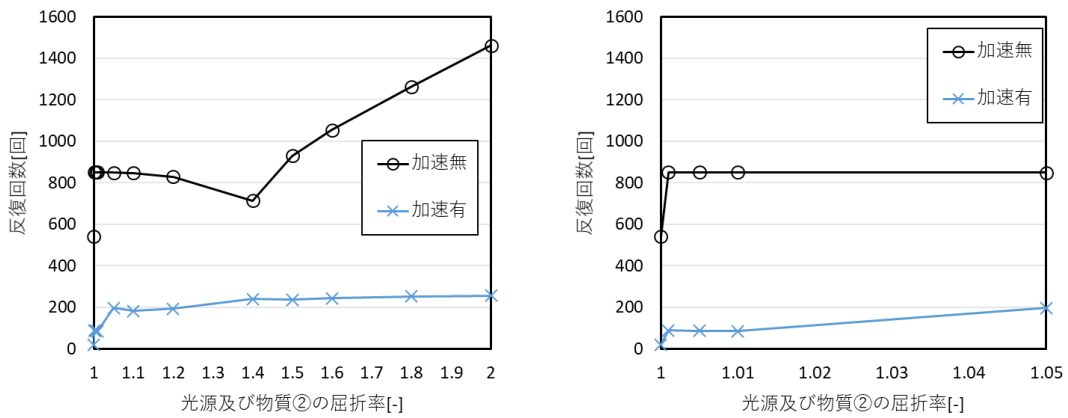


Fig 4.27 光源及び物質②の屈折率と収束に要する反復回数の関係

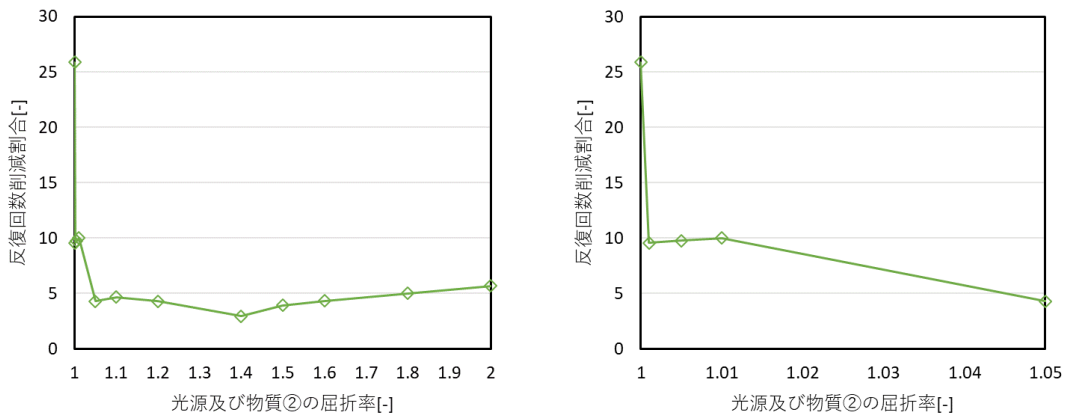


Fig 4.28 光源及び物質②の屈折率と拡散加速法の加速性能の関係

Fig 4.28 より、以下の点が観察できる。

- 光源及び物質②の屈折率が 1.2 以上の場合、屈折率の値による加速性能の変化は小さく、反復回数削減割合は 3~5 程度となる
- 屈折率の差が 10^{-2} 以下の場合、反復回数削減割合は 10 程度であり、屈折率が 1.2 以上の場合と比べて加速性能が倍以上高い
- 光源及び物質②の屈折率が 1.001 の場合を 1.0 の場合と比較すると、加速性能は約半分に低下している

以上の結果より、反射屈折が生じる条件においても拡散加速法は有効であるが、その加速性能は反射屈折現象が生じない条件と比べて低下することが明らかになった。加速性能低下が原因する理由については、次項で考察する。

4.3.3.3 反射屈折現象による拡散加速法の加速性能への影響

前項において、拡散加速法は反射屈折現象の生じる条件においても有効であるが、反射屈折現象の生じない条件と比べると加速性能が低下することを明らかとした。この原因について、光源及び物質②の屈折率が 1.0 の場合と 1.001 の場合に注目して考える。屈折率が 1.001 の場合、物質同士の屈折率の差が十分に小さく、光子束分布への影響はほとんどない。それにもかかわらず、加速性能は約 1/2 と大きく低下している。

以上の結果から、加速性能低下の原因は、反射屈折現象そのものではなく、反射屈折を考慮するために実装した輸送計算の計算アルゴリズムにあるのではないかと考察した。3 章で述べた通り、自作 MOC では反射屈折が生じない場合と生じる場合で **Transport sweep** の処理が異なっている。具体的に説明すると、反射屈折が生じない場合には、各境界面で角度光子束が連続となるため、各空間メッシュ領域への入射角度光子束は隣接する空間メッシュ領域からの流出角度光子束の値をそのまま与えられており、 n 反復目の計算は n 反復目の計算結果を用いて行うことができる。一方、反射屈折が生じる場合には、各境界面で角度光子束が連続でないため、自作計算コードでは屈折率の異なる空間メッシュ境界面への入射角度光子束は、1 外部反復前に推定された各境界面の角度光子束の結果から与えており、ヤコビ法[7]に相当するような形で反復計算を実施している。

以上の理由から、反射屈折が生じる条件では反射屈折が生じない条件に比べて、屈折率の異なる物質境界面に限るものの、収束解から離れた近似値に基づいて拡散加速計算を実施する形となるため、収束性が悪化すると考察した。そこで、このアルゴリズムによる加速性能への影響を調査すべく、反射屈折現象の生じる条件と反射屈折現象の生じない条件における輸送計算を、同一の **Transport sweep** アルゴリズムを用いて実施することとした。すなわち、反射屈折の生じない条件及び反射屈折の生じる条件の両方について、全てのメッシュへの入射角度光子束を 1 外部反復前の角度光子束の結果から与えるよう変更したアルゴリズムを用いて **transport sweep** 計算を行い、光子束の残差の推移を比較した。ただし、このアルゴリズムを使用すると収束性が悪化するため、4.3.1 項、4.3.2 項で実施した計算条件をそ

のまま利用すると、拡散加速計算無しの条件で収束解を得るまでに非常に長時間を要して本検討を実施することが困難である。そこで、収束解が得やすいように計算条件を緩和して検討を実施した。

本検討における計算体系を Fig 4.29 に、各物質領域の光学特性値を Table 4.5 にそれぞれ示す。4.3.1 項、4.3.2 項に示した条件からの変更点は、すべての物質の散乱係数及び吸収係数を等しい値に統一した点、空間メッシュの分割を粗くした点、の二点である。

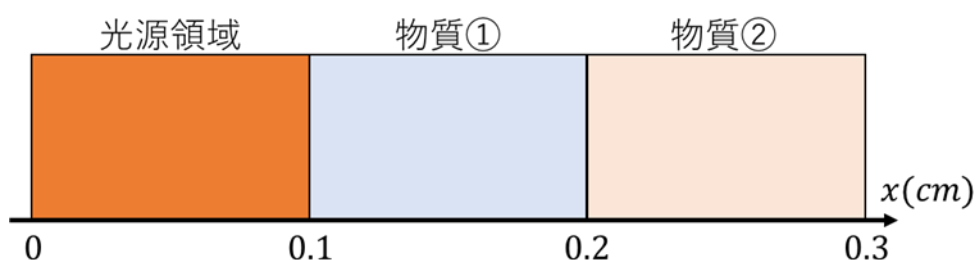


Fig 4.29 自作計算コード検証のための1次元無限平板体系(Fig 4.3 再掲)

Table 4.5 μ_s, μ_a を統一した体系の光学特性値

	μ_s [cm^{-1}]	μ_a [cm^{-1}]	n (反射屈折無)	n (反射屈折有)	q [cm^{-3}]
光源	90	0.15	1.0	1.4	1.0
物質①	90	0.15	1.0	1.0	0.0
物質②	90	0.15	1.0	1.4	0.0
体系外部	0	0	1.0	1.0	0.0

本検討における自作コードの計算条件を以下に示す。

- 角度分点セット：多重 GL 分点、 $\mu = 0$ と臨界角で区切って展開
- 角度分割数：300
- 空間メッシュ分割数：30
- 収束判定条件： 10^{-6}

空間メッシュ分割数を少なくすることで、計算精度が悪化することを代償に計算時間を短縮することができる。4.3.1 項、4.3.2 項に示した MCML との相対誤差が数%以内に収まる範囲で分割数を減らし、計算時間の短縮を図った。

1 外部反復前に得られた角度光子束の推定結果を入射光子束としたアルゴリズムによって得られた全光子束残差の推移について、反射屈折の生じない条件で得られた結果を Fig 4.30 に、反射屈折の生じる条件で得られた結果を Fig 4.31 に、それぞれ示す。

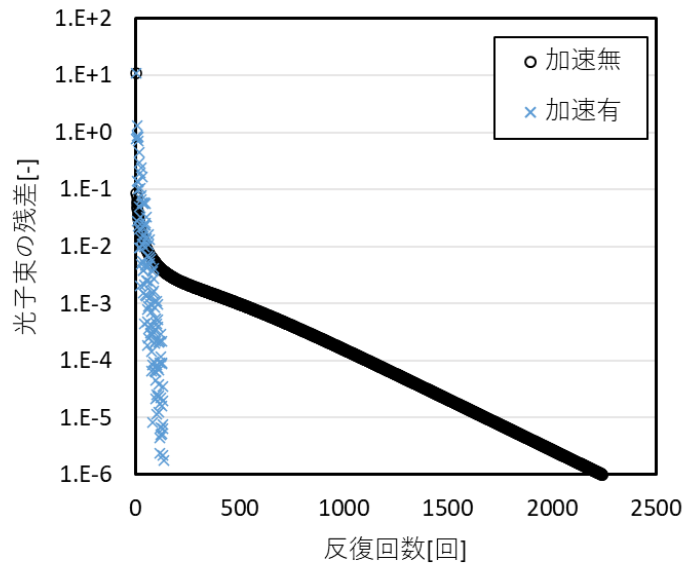


Fig 4.30 1 反復前の結果を入射光子束としたアルゴリズムでの光子束残差の差異
(反射屈折無し)

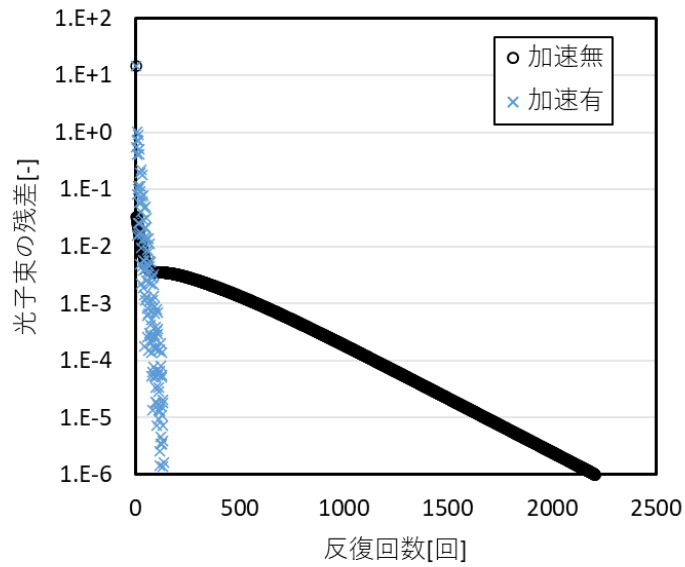


Fig 4.31 1 反復前の結果を入射光子束としたアルゴリズムでの光子束残差の差異
(反射屈折有り)

Fig 4.30 より、反射屈折が生じない条件では加速無し輸送計算が 2242 回、加速有り輸送計算が 135 回の反復を要した。Fig 4.31 より、反射屈折が生じる条件では加速無し輸送計算が 2208 回、加速有り輸送計算が 135 回の反復を要した。すなわち、拡散加速計算を行うこ

とによって、反射屈折が生じない条件及び反射屈折が生じる条件ともに、外部反復回数を約 1/16 に低減できており、両者の加速性能は同程度となることが確認できた。

ここまでの加速性能に関する結果を以下にまとめる。4.3.1 節、4.3.2 節の検討より、①②の結果が得られた。

- ① 入射光子束を同じ反復内の結果から与えた反射屈折現象の生じない条件：約 1/25
- ② 物質境界面でのみ、入射光子束を 1 反復前の結果から与えた反射屈折現象の生じる条件：約 1/3

4.3.3 節の検討より、①②の検討から計算条件を緩和した条件において、③④の結果が得られた。

- ③ 全ての空間メッシュ境界面で、入射光子束を 1 反復前の結果から与えた反射屈折現象の生じない条件：約 1/16
- ④ 全ての空間メッシュ境界面で、入射光子束を 1 反復前の結果から与えた反射屈折現象の生じる条件：約 1/16

上記の結果について、①と②を比較すると、反射屈折を考慮することまたは入射光子束を 1 反復前の結果から与えることによって、拡散加速法の加速性能は低下することが考えられる。続いて③と④を比較すると、反射屈折を考慮することによっては拡散加速法の加速性能が低下しないことが分かる。

このことから、反射屈折現象の生じる条件における拡散加速法の加速性能が約数分の 1 程度にとどまってしまう原因は、反射屈折現象そのものではなく、**Transport sweep** の過程において入射光子束を 1 反復前の結果から与えていることにあると結論付けた。したがって、**Transport sweep** のアルゴリズムを改善することで、収束性を改善できる可能性がある。具体的には、反射屈折前後の光子束が保存されるような実効的な係数を求めることができれば、入射角度光子束を同じ反復内の結果から与えることが可能となり収束性が向上すると考えられる。

4.4 本章のまとめ

本章では、拡散加速法を用いた、反射屈折を考慮した光輸送計算の高速化について結果を報告した。

4.2 節では、反射屈折を考慮した光輸送解析における拡散加速法について説明した。拡散加速計算では、輸送計算の解を再現するために、各境界面における光子流補正係数 D_{cor} を求める必要がある。この過程で各境界面における正味光子流を求める必要がある。従来中性子輸送計算では、境界面における角度光子束が連続であるため、単に角度光子束と飛行方向余弦の積を足し合わせることで正味光子流を求めることができる。しかし反射屈折現象が生じる条件では、境界面で角度光子束が不連続となるため、従来どおりに正味光子流及び D_{cor} を計算することは不可能であり、これらの新たな計算手法の考案が課題として挙げられた。そこで、左側と右側の流入/流出角度光子束を区別することで、それぞれに基

づき左側光子流補正係数 D_{corL} と右側光子流補正係数 D_{corR} を求めることにした。最後に、拡散加速計算のフローと詳細設計を示した。

4.3 節では、考案した新しい拡散加速法を実装した自作計算コードを用いて検証を行った。まずは、新しい拡散加速法を用いた光輸送計算から正しい収束解が得られることを確認するために、自作計算コードを用いた結果と参照解(MCML)を、反射屈折現象の生じない条件及び反射屈折現象の生じる条件についてそれぞれ比較した。反射屈折現象の生じない条件では、参照解に対する相対誤差が数%程度に収まることを確認した。反射屈折現象の生じる条件では、体系物質の屈折率を変化させ、生じる反射屈折現象の強弱を変えた合計 6 つの条件で比較した。反射屈折現象の強弱によらず、参照解に対する相対誤差が数%程度に収まることを確認した。

続いて、拡散加速法を用いることで収束に要する反復回数を削減可能か検証した。反射屈折現象の生じない条件及び反射屈折現象の生じる条件それぞれについて、加速計算無しの輸送計算と加速計算有りの輸送計算を行い、拡散加速法によって収束までに要する反復回数がどの程度削減されるのか比較した。反射屈折現象の生じない条件においては、拡散加速法を適用した輸送計算を実施することで、収束までに要する反復回数を約 1/25 に削減できることを確認した。反射屈折現象の生じる条件においては、体系物質の屈折率を変化させ、生じる反射屈折現象の強弱を変えた合計 11 の条件で比較した。拡散加速法を用いることで、収束までに要する反復回数を、体系物質間の屈折率の差が十分小さい(10^{-2} 程度)場合には約 1/10、それ以外では約 1/3~1/5 程度に削減できることを確認した。反射屈折現象の生じる条件では、反復回数を削減できているものの、その加速性能は反射屈折現象の生じない条件と比較して約 1/8 以下と大きく劣ることが明らかとなった。そこで反射屈折による加速性能低下の原因を調査した。反射屈折現象が生じる条件では、輸送計算における Transport sweep の処理が反射屈折現象の生じない条件と異なっており、各空間メッシュ領域への入射角度光子束を 1 反復前の結果から与えるヤコビ法のような反復計算を行っている。これが加速性能へ影響を与えていると予測し、反射屈折現象の有無によらず同一の Transport sweep 処理を実行するようにコードを変更し、反射屈折現象の生じる条件と反射屈折現象の生じない条件との加速性能を比較した。その結果、両条件において、加速計算を実施することで収束までに要する反復回数を約 1/16 に削減できており、同等の加速性能を示した。よって反射屈折による加速性能低下の原因は Transport sweep のアルゴリズムにあると結論付けた。反射屈折前後の光子束が保存されるような実効的な係数を求めることができれば、入射角度光子束を同じ反復内の結果から与えることが可能となり収束性が向上すると考えられるが、これは今後の課題となっている。

4.5 参考文献

- [1] L. Wang et al., “MCML—Monte Carlo modeling of light transport in multi-layered tissues,” *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, DOI:10.1016/0169-2607(95)01640-F.

- [2] H. Fujii et al., “Modeling of light propagation in the human neck for diagnoses of thyroid cancers by diffuse optical tomography”, *Int J Numer Method Biomed Eng*, DOI: 10.1002/cnm.2826.
- [3] 栗原一樹, “拡散光トモグラフィによる脳機能イメージングのための頭部構造モデルの構築”, 慶応義塾大学大学院理工学研究科 学位論文 (2015).
- [4] 藤井宏之 他, “拡散光トモグラフィのための輻射輸送方程式及び拡散方程式を用いた光学特性値再構成アルゴリズムの開発”, 第 62 回理論応用力学講演会 講演論文集, OS05-08 (2013).
- [5] R. Khan et al., “Refractive index of biological tissues: Review, measurement techniques, and applications,” *Photodiagnosis. Photodyn, Ther.*, DOI:10.1016/j.pdpdt.2021.102192.
- [6] H. Fujii et al., “Modeling of light propagation in the human neck for diagnoses of thyroid cancers by diffuse optical tomography,” *Int. J. Numer. Method Biomed. Eng.*, DOI:10.1002/cnm.2826.
- [7] 平川直弘 他, “拡散方程式の数値解法”, 日本原子力学会誌, **42**, pp.1270-1281(2000)

第5章 反射屈折を考慮した拡散計算による光輸送計算の効率化

5.1 本章の概要

第4章では、原子力分野で広く用いられている効率的な計算手法である拡散加速法を自作光輸送計算コードに適用し、反射屈折を考慮した光輸送計算の高速化を試みた。自作光輸送計算コードから得られた収束解と MCML[1]による参照解を比較することで、正しい光子束空間分布を計算できること、拡散加速無しと拡散加速有りの条件で収束に要する反復回数を比較することで反射屈折現象を考慮した場合に反復回数を約 1/3 に削減できることを確認した。

拡散加速法を適用することで、反復回数の削減には成功したが、未だ 200 回程度の反復を要している。最終的に、1 辺が 10~20cm の 3 次元体系を対象として光輸送計算を実施しなければならないことを考えると、拡散加速法を用いたとしても、逆問題に適用できる程度の実用的な計算時間で解を得ることは困難であることが予想される。

高速かつ高精度な光輸送計算の実現へ向けたアプローチは、大きく 2 つに分けられる。1 つ目は、第4章で行ったような、厳密な解が得られる輸送計算を高速化する方法である。そして 2 つ目は、低い計算コストで解が得られる拡散計算の精度を向上させる方法である。本章では、後者のアプローチに沿って、反射屈折現象を考慮した拡散計算による光輸送解析の効率化を試みた。

原子力分野における拡散計算では、屈折率の差に基づく反射屈折現象は取り扱っていないが、不連続因子を用いて境界面の不連続条件を考慮することができる。この不連続因子を用いることは、物質境界面における反射率・透過率を調整することと等価であると知られている[2]。しかし、不連続因子を用いた場合、物質境界面における反射率に制約が生じてしまう。例えば、ある物質境界面において、光が左から右へ入射する場合の反射率が R になるとする。このとき、不連続因子を用いた計算では、光が右から左へ入射する場合の反射率が $-R$ にならなければならない。これは、光輸送計算における反射率と比べて制約条件が厳しく、光輸送計算とは相容れない。従って、まずは光輸送分野における先行研究を参考とし、反射屈折現象を考慮した拡散計算の理論を考案する必要がある。本研究の成果による波及効果として、原子力分野における不連続因子の概念を拡張できる可能性がある。

上記の理由から、以下で述べるような検討を行った。

- ① 反射屈折を考慮した拡散計算手法、特に内部境界条件の考案
- ② 反射屈折を考慮した条件における有限差分式の導出
- ③ 反射屈折現象を考慮した拡散計算コードの作成
- ④ 作成した拡散計算コードの検証作業(verification)として、モンテカルロ光輸送計算コード MCML で得られた参照解と結果を比較。

本章の構成を説明する。まず 5.2 節では、反射屈折現象を考慮した拡散計算について説明する。5.2.1 項では、反射屈折現象を考慮した拡散計算の概要を説明する。反射屈折現象を

扱うためには、輸送計算と同様に、物質境界や外部境界において反射屈折境界条件を設定する必要がある。拡散計算における反射屈折境界条件の鍵となる実効的な反射率 R_{eff} について、概要を述べる。続く5.2.2項では、反射屈折現象を考慮した拡散計算の計算理論を説明する。まずは、実効的な反射率 R_{eff} の計算方法を説明し、次に実効的な反射率を用いた場合の拡散理論における境界条件を導出する。最後に、反復法を用いた、最適な実効的な反射率の求め方について説明する。5.2.3項では、自作拡散計算コードについて、フローチャートを示し、その詳細を述べる。5.3節では、自作拡散計算コードを用いた検討結果を報告する。5.3.1項では、反射屈折現象の生じない条件について、5.3.2項では、反射屈折現象の生じる条件について、自作拡散計算コードと参照解(モンテカルロ光輸送計算コード MCML の結果)を比較した。これらを比較することで、自作拡散計算コードにより、現実的な計算精度で解を得ることができていることを確認する。また、反復法を用いた実効的な反射率によって、計算精度がどの程度向上するか調査する。5.4節では本章のまとめ、5.5節では参考文献をそれぞれ示す。

5.2 反射屈折を考慮した拡散計算

5.2.1 反射屈折を考慮した拡散計算の概要

本項では、反射屈折を考慮した拡散計算の概要を説明する。拡散計算は、下に示す拡散方程式(式(2.37))の解を求める計算を指す。なお、生体イメージング画像を作成するためには3次元体系における光輸送計算を行う必要があるが、本研究では計算原理の確認に重点を置いているため、1次元体系を対象として検討を行う。

$$-\frac{d}{dx}D(x)\frac{d\phi(x)}{dx} + \mu_a(x)\phi(x) = q(x) \quad \text{式(2.37)}$$

再掲

式(2.37)において、各変数は以下の物理量を表す。

x : 位置 [cm]

$\phi(x)$: 位置 x における全光子束 [$1/\text{cm}^2/\text{s}$]

$\mu_a(x)$: 位置 x における吸収係数 [$1/\text{cm}$]

$q(x)$: 位置 x における外部光子源の強度 [$1/\text{cm}^3/\text{s}$]

$D(x)$: 拡散係数 [cm]

拡散係数 $D(x)$ は、式(2.38)で表すことができる[5]。詳細な導出は、文献を[6]参照されたい。

$$D(x) = \frac{1}{3\Sigma_t(x)} \quad \text{式(2.38)}$$

再掲

1次元平板の拡散方程式では、式(5.1)のように、角度光子束をルジャンドル多項式の P_1 成分までを用いて展開して近似している。

$$\psi(r, \mu) \approx \frac{1}{2}\{P_0(\mu)\phi_0(r) + 3P_1(\mu)\phi_1(r)\} = \frac{1}{2}\{P_0(\mu)\phi(r) + 3P_1(\mu)J(r)\} \quad \text{(5.1)}$$

なお、 $\mu = \cos\theta$ である。 $P_0(\mu), P_1(\mu)$ はそれぞれ式(5.2)で定義される。

$$\begin{aligned} P_0(\mu) &= 1 \\ P_1(\mu) &= \mu \end{aligned} \tag{5.2}$$

上記の通り、拡散方程式では光子の飛行方向を関数展開して扱っているため、角度方向ごとに方程式を解く必要がない。また、自群散乱に関する反復計算も行う必要がない。このような理由から、第3章及び第4章で実施した輸送計算と比較して、拡散計算は少ない計算コストで光子束空間分布を求めることができる。

屈折率の異なる物質を含む体系を対象とする場合、拡散計算においても反射屈折の影響を考慮する必要がある。しかし、拡散計算では光子の飛行方向を関数展開によって扱うため、フレネルの法則から計算される角度依存の反射率や角度光子束をそのまま用いて、反射屈折境界条件を設定することはできない。そこで、光学分野では、拡散計算から得られる光子束の角度分布とフレネルの法則から実効的な反射率 R_{eff} を近似的に求めることによって、反射屈折境界条件を設定している[4]。空間メッシュ領域 $i, i+1$ の間にある境界面 $i+1/2$ を具体例に説明する(Fig 5.1)。領域 i から境界面 $i+1/2$ へ流出した部分光子流 $J_{i+1/2}^{out}$ のうち、実効的な反射率 $R_{eff,i+1/2}$ 分の部分光子流が領域 i 方向へ反射される。境界面へ流出した部分光子流は、実効的な透過率 T_{eff} に基づいて一部透過する。

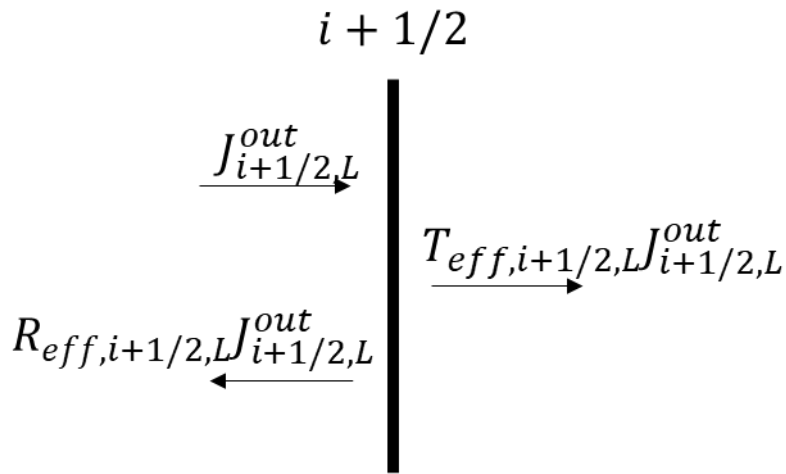


Fig 5.1 拡散計算における反射屈折境界条件

詳細は 5.2.2 項にて後述するが、実効的な反射率は、近似的に境界面両端の屈折率によってのみ決定することも可能である。この場合、体系情報が与えられていれば事前に実効的な反射率を計算することができる。また、境界面の位置や境界面両端の散乱係数・吸収係数が異なる場合においても、屈折率の組み合わせさえ同一であれば、実効的な反射率の値も等しくなる(Fig 5.2)。

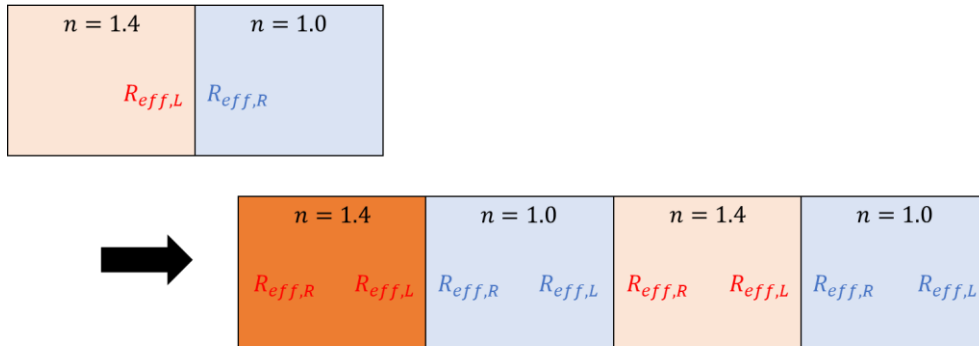


Fig 5.2 実効的な反射率

5.2.2 反射屈折を考慮した拡散計算の理論

本項では、反射屈折を考慮した拡散計算の理論について説明する。まずは、実効的な反射率 R_{eff} の計算方法を説明し、次に実効的な反射率を用いた拡散方程式を導出する。最後に、反復法を用いた、最適な実効的な反射率の求め方について説明する。空間メッシュ領域 i を左側、空間メッシュ領域 $i + 1$ を右側とし、右向きを正とする。扱う変数が多いため、各変数の意味を予め以下にまとめる。なお、下添え字の L, R は、それぞれ境界面の左側及び右側に関する物理量であることを表す。

$J_{i+1/2,L}^n$: 空間メッシュ境界面 $i + 1/2$ 左側における正味の光子流

$J_{i+1/2,R}^n$: 空間メッシュ境界面 $i + 1/2$ 右側における正味の光子流

$J_{i+1/2,L}^{out}$: 境界面 $i + 1/2$ の左側に空間メッシュ領域 i から流出する部分光子流

$J_{i+1/2,R}^{out}$: 境界面 $i + 1/2$ の右側に空間メッシュ領域 $i + 1$ から流出する部分光子流

$J_{i+1/2,L}^{in}$: 境界面 $i + 1/2$ の左側から空間メッシュ領域 i に入射する部分光子流

$J_{i+1/2,R}^{in}$: 境界面 $i + 1/2$ の右側から空間メッシュ領域 $i + 1$ に入射する部分光子流

$\phi_{i+1/2,L}$: 空間メッシュ境界面 $i + 1/2$ 左側における全光子束

$\phi_{i+1/2,R}$: 空間メッシュ境界面 $i + 1/2$ 右側における全光子束

$R_{eff,i+1/2,L}$: 境界面 $i + 1/2$ へ左側から入射する際の実効反射率

$R_{eff,i+1/2,R}$: 境界面 $i + 1/2$ へ右側から入射する際の実効反射率

$T_{eff,i+1/2,L}$: 境界面 $i + 1/2$ へ左側から入射する際の実効透過率

$T_{eff,i+1/2,R}$: 境界面 $i + 1/2$ へ右側から入射する際の実効透過率

Δx_i : 空間メッシュ領域 i のメッシュ幅

D_i : 空間メッシュ領域 i における拡散係数

上記の変数が表す物理量の位置関係を Fig 5.3 に示す。

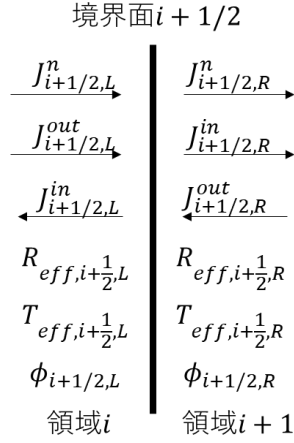


Fig 5.3 境界面 $i + 1/2$ に関する物理量の位置関係

5.2.2.1 実効的な反射率

境界面 $i + 1/2$ に空間メッシュ領域 i (左側)から流出した光子束のうち、反射される光子束 ψ^{refle} は、式(5.4)で計算できる。

$$\psi^{refle} = R(\theta_{in}, n_{in}, n_{out})\psi(\theta_{in}) \quad (5.3)$$

式(5.3)における各変数は、それぞれ以下の物理量を表す。

- θ_{in} : 境界面 $i + 1/2$ への入射角
- $R(\theta_{in}, n_{in}, n_{out})$: 角度依存の反射率
- $\psi(\theta_{in})$: 入射角度光子束

なお、 θ は光子の飛行方向と z 軸とのなす角であり、 z 軸は境界面に垂直である。3.2節で説明した通り、反射率 $R(\theta_{in}, n_{in}, n_{out})$ はフレネルの法則を用いて、式(3.1)で計算できる[3]。

$$R(\theta_{in}, n_{in}, n_{out}) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[\frac{n_{in} \cos \theta_{in} - n_{out} \cos \theta^{refra}}{n_{in} \cos \theta_{in} + n_{out} \cos \theta^{refra}} \right]^2 + \frac{1}{2} \left[\frac{n_{in} \cos \theta^{refra} - n_{out} \cos \theta_{in}}{n_{in} \cos \theta^{refra} + n_{out} \cos \theta_{in}} \right]^2, & 0 \leq \theta_{in} < \theta_c \\ 1, & \theta_c \leq \theta_{in} \leq \frac{\pi}{2} \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{式(3.1)} \\ \text{再掲} \end{array}$$

式(3.1)における各変数は、それぞれ以下の物理量を表す。

- n_{in} : 入射側の物質の屈折率
- n_{out} : 流出側の物質の屈折率
- θ^{refra} : 屈折角
- θ_c : 臨界角

屈折角 θ^{refra} は式(3.2)、臨界角 θ_c は式(3.3)でそれぞれ計算される。

$$\theta^{refra} = \sin^{-1} \left(\frac{n_{in}}{n_{out}} \sin \theta_{in} \right) \quad \text{式(3.2)}$$

再掲

$$\theta_c = \begin{cases} \sin^{-1} \left(\frac{n_{out}}{n_{in}} \right), & n_{in} > n_{out} \\ 0, & n_{in} < n_{out} \end{cases} \quad \text{式(3.3)}$$

再掲

式(5.3)より、反射された光子束による部分光子流 $J_{i+1/2,L}^{refle}$ は、式(5.4)で計算できる。

$$J_{i+1/2,L}^{refle} = \int_{\mu>0} R(\mu_{in}) \psi(\mu_{in}) \mu_{in} d\mu_{in} \quad \text{(5.4)}$$

ただし、 μ_{in} は入射角の余弦である。境界面左側から右側へ入射する光子束を考えると、式(5.1)を式(5.4)の右辺に代入することで、式(5.5)が得られる。

$$\begin{aligned} J_{i+1/2,L}^{refle} &= \int_{\mu>0} R(\mu_{in}) \psi(\mu_{in}) \mu_{in} d\mu_{in} \\ &= \int_{\mu>0} R(\mu_{in}) \left\{ \frac{1}{2} \phi_{i+1/2,L} + \frac{3}{2} \mu_{in} J_{i+1/2,L}^n \right\} \mu_{in} d\mu_{in} \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mu>0} R(\mu_{in}) \phi_{i+1/2,L} \mu_{in} d\mu_{in} + \frac{3}{2} \int_{\mu>0} R(\mu_{in}) J_{i+1/2,L}^n \mu_{in}^2 d\mu_{in} \\ &= R_\phi \frac{\phi_{i+1/2,L}}{4} + R_j \frac{J_{i+1/2,L}^n}{2} \end{aligned} \quad \text{(5.5)}$$

式(5.5)における R_ϕ, R_j はそれぞれ式(5.6),式(5.7)で定義される。

$$R_\phi = \int_{\mu>0} 2R(\mu_{in}) \mu_{in} d\mu_{in} \quad \text{(5.6)}$$

$$R_j = \int_{\mu>0} 3R(\mu_{in}) \mu_{in}^2 d\mu_{in} \quad \text{(5.7)}$$

$d\mu = \sin \theta d\theta$ であるため、 R_ϕ, R_j は θ を用いると、式(5.8),式(5.9)で表される。

$$R_\phi = \int_0^{\pi/2} 2 \sin \theta_{in} \cos \theta_{in} R(\theta_{in}) d\theta_{in} \quad \text{(5.8)}$$

$$R_j = \int_0^{\pi/2} 3 \sin \theta_{in} \cos^2 \theta_{in} R(\theta_{in}) d\theta_{in} \quad \text{(5.9)}$$

ここで、境界面 $i+1/2$ の左側から空間メッシュ領域 i に入射する部分光子流 $J_{i+1/2,L}^{in}$ は、全光子束、正味光子流の関係から、式(5.10)で表現できる。

$$J_{i+1/2,L}^{in} = \frac{\phi_{i+1/2,L}}{4} - \frac{J_{i+1/2,L}^n}{2} \quad \text{(5.10)}$$

空間メッシュ領域 $i+1$ からの光子束の流入を無視し、 $J_{i+1/2,L}^{refle} = J_{i+1/2,L}^{in}$ とすると、式(5.5),式(5.10)より式(5.11)が成り立つ。

$$R_\phi \frac{\phi_{i+1/2,L}}{4} + R_j \frac{J_{i+1/2,L}^n}{2} = \frac{\phi_{i+1/2,L}}{4} - \frac{J_{i+1/2,L}^n}{2} \quad (5.11)$$

式(5.11)を $\phi_{i+1/2,L}$ について整理すると、式(5.12)となる。

$$\phi_{i+1/2,L} = \frac{2(1+R_j)J_{i+1/2,L}^n}{1-R_\phi} \quad (5.12)$$

また、境界面 $i+1/2$ に空間メッシュ領域 i から流出する部分光子流 $J_{i+1/2,L}^{out}$ は、式(5.13)で表せる。

$$J_{i+1/2,L}^{out} = \frac{\phi_{i+1/2,L}}{4} + \frac{J_{i+1/2,L}^n}{2} \quad (5.13)$$

ここで、実効的な反射率は、式(5.14)で定義される。

$$R_{eff,i+1/2,L} = \frac{J_{i+1/2,L}^{refl}}{J_{i+1/2,L}^{out}} \quad (5.14)$$

式(5.14)に、式(5.5),式(5.13)を代入して整理すると、式(5.15)となる。

$$R_{eff,i+1/2,L} = \frac{R_\phi \phi_{i+1/2,L} + 2R_j J_{i+1/2,L}^n}{\phi_{i+1/2,L} + 2J_{i+1/2,L}^n} \quad (5.15)$$

式(5.15)に式(5.12)を代入して整理することで、 $R_{eff,i+1/2,L}$ は式(5.16)となる[4]。

$$R_{eff,i+1/2,L} = \frac{R_\phi + R_j}{2 - R_\phi + R_j} \quad (5.16)$$

同様の手順で、 $R_{eff,i+1/2,R}$ も計算することができる。この結果は、空間メッシュ領域 $i+1$ からの光子束の流入を無視している条件で導出されたことに留意が必要である。

式(5.16)に基づき、屈折率 1.4 または 1.0 の物質間の境界面における実効的な反射率を計算した結果を Table 5.1 に示す。 $n_{in} = 1.4, n_{out} = 1.0$ における $R_{eff} = 0.493$ は、 $n_{in} = 1.4$ の物質領域から境界面へ流出した部分光子流の49.3%が、 $n_{in} = 1.4$ の物質領域へ反射されることを意味している。

Table 5.1 実効的な反射率の例

n_{in}	n_{out}	R_ϕ	R_j	R_{eff}
1.00	1.00	0	0	0
1.40	1.00	0.529	0.389	0.493
1.00	1.40	0.077	0.049	0.064

なお、 $R_{eff,i+1/2,R}$ の導出過程においては、空間メッシュ領域 $i+1$ からの光子束の流入を無視している。従って、 $R_{eff,i+1/2,R}$ は外部からの光子束の流入がない外部境界条件としては適切であるが、一般的に隣接メッシュからの光子束の流入が無視できない内部境界条件としては、精度が低下することが予想される。そのため、内部境界条件に対しては、5.2.2.3 目で述べる方法により $R_{eff,i+1/2,R}$ を計算する必要がある。

実効的な反射率を用いると、拡散計算における反射屈折境界条件は、式で(5.17)表せる。

$$J_{i+1/2,L}^{refl} = R_{eff,i+1/2,L} J_{i+1/2,L}^{out} \quad (5.17)$$

5.2.2.2 反射屈折を考慮した条件における拡散方程式の解法

2.4.2 項にて、反射屈折を考慮しない条件における有限差分に基づく拡散方程式は式(2.39)で表現できることを述べた。

$$\frac{J_{i+1/2} - J_{i-1/2}}{\Delta x_i} + \mu_{a,i} \phi_i = q_i \quad (2.39)$$

再掲

以下、空間メッシュ領域 $i, i+1$ の間の境界面 $i+1/2$ について、反射屈折を考慮した条件における、有限差分法に基づく拡散方程式を導出する。

Fick の拡散近似に基づく、空間メッシュ境界面 $i+1/2$ の左側における正味の光子流は式(5.18)で計算できる。

$$J_{i+1/2,L}^n = -D_i \frac{\phi_{i+1/2,L} - \phi_i}{\Delta x_i/2} \quad (5.18)$$

正味光子流 $J_{i+1/2,L}^n$ を部分光子流の足し合わせで表現すると、式(5.19)のようになる。ここで、 $J_{i+1/2,L}^{in}$ は、 $J_{i+1/2,L}^{out}$ の反射及び $J_{i+1/2,R}^{out}$ の透過の足し算で与えられる。

$$\begin{aligned} J_{i+1/2,L}^n &= J_{i+1/2,L}^{out} - J_{i+1/2,L}^{in} \\ &= J_{i+1/2,L}^{out} - (R_{eff,i+1/2,L} J_{i+1/2,L}^{out} + T_{eff,i+1/2,R} J_{i+1/2,R}^{out}) \end{aligned} \quad (5.19)$$

ここで、正味光子流、全光子束、部分光子流の関係より、式(5.20)が成り立つ。

$$J_{i+1/2,L}^{out} = \frac{\phi_{i+1/2,L}}{4} + \frac{J_{i+1/2,L}^n}{2} \quad (5.20)$$

式(5.19),式(5.20)と同様に、それぞれ式(5.22),式(5.23)が成り立つ。

$$J_{i+1/2,R}^n = -D_{i+1} \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i+1/2,R}}{\Delta x_{i+1}/2} \quad (5.21)$$

$$\begin{aligned} J_{i+1/2,R}^n &= -J_{i+1/2,R}^{out} + J_{i+1/2,R}^{in} \\ &= -J_{i+1/2,R}^{out} + (R_{eff,i+1/2,R} J_{i+1/2,R}^{out} + T_{eff,i+1/2,L} J_{i+1/2,L}^{out}) \end{aligned} \quad (5.22)$$

$$J_{i+1/2,R}^{out} = \frac{\phi_{i+1/2,R}}{4} - \frac{J_{i+1/2,R}^n}{2} \quad (5.23)$$

式(5.19),式(5.22)に、式(5.20),式(5.23)を代入し、 $T = 1 - R$ として整理すると式(5.24)となる。

$$\begin{aligned} J_{i+1/2,L}^n &= \frac{T_{eff,i+1/2,L} \phi_{i+1/2,L} - T_{eff,i+1/2,R} \phi_{i+1/2,R} + 2T_{eff,i+1/2,R} J_{i+1/2,R}^n}{2(R_{eff,i+1/2,L} + 1)} \\ J_{i+1/2,R}^n &= \frac{-T_{eff,i+1/2,R} \phi_{i+1/2,R} + T_{eff,i+1/2,L} \phi_{i+1/2,L} + 2T_{eff,i+1/2,L} J_{i+1/2,L}^n}{2(R_{eff,i+1/2,R} + 1)} \end{aligned} \quad (5.24)$$

ここで、式(5.18),式(5.21)より、全光子束について整理すると式(5.25)となる。

$$\begin{aligned}\phi_{i+1/2,L} &= \frac{2D_i\phi_i - \Delta x_i J_{i+1/2,L}^n}{2D_i} \\ \phi_{i+1/2,R} &= \frac{2D_{i+1}\phi_{i+1} + \Delta x_{i+1} J_{i+1/2,R}^n}{2D_{i+1}}\end{aligned}\quad (5.25)$$

式(5.25)を式(5.24)に代入する。

$$\begin{aligned}& \left\{ 2(R_{eff,i+1/2,L} + 1) + \frac{\Delta x_i}{2D_i} T_{eff,i+1/2,L} \right\} J_{i+1/2,L}^n \\ &= T_{eff,i+1/2,L} \phi_i - T_{eff,i+1/2,R} \phi_{i+1} \\ &+ \left\{ 2T_{eff,i+1/2,R} - \frac{\Delta x_{i+1}}{2D_{i+1}} T_{eff,i+1/2,R} \right\} J_{i+1/2,R}^n \\ & \left\{ 2(R_{eff,i+1/2,R} + 1) + \frac{\Delta x_{i+1}}{2D_{i+1}} T_{eff,i+1/2,R} \right\} J_{i+1/2,R}^n \\ &= T_{eff,i+1/2,L} \phi_i - T_{eff,i+1/2,R} \phi_{i+1} \\ &+ \left\{ 2T_{eff,i+1/2,L} - \frac{\Delta x_i}{2D_i} T_{eff,i+1/2,L} \right\} J_{i+1/2,L}^n\end{aligned}\quad (5.26)$$

式(5.26)より $J_{i+1/2,R}^n$ を消去して整理すると、式(5.27)が得られる。

$$\begin{aligned}& \left\{ 8(R_{eff,i+1/2,L} + R_{eff,i+1/2,R}) + \frac{2\Delta x_i}{D_i} T_{eff,i+1/2,L} + \frac{2\Delta x_{i+1}}{D_{i+1}} T_{eff,i+1/2,R} \right\} J_{i+1/2,L}^n \\ &= 4T_{eff,i+1/2,L} \phi_i - 4T_{eff,i+1/2,R} \phi_{i+1}\end{aligned}\quad (5.27)$$

よって、境界面左側の正味光子流 $J_{i+1/2,L}^n$ は式(5.28)となる。

$$\begin{aligned}J_{i+1/2,L}^n &= - \frac{2D_i D_{i+1}}{D_i \Delta x_{i+1} T_{eff,i+1/2,R} + D_{i+1} \Delta x_i T_{eff,i+1/2,L} + 4D_i D_{i+1} (R_{eff,i+1/2,L} + R_{eff,i+1/2,R})} (-T_{eff,i+1/2,L} \phi_i \\ &+ T_{eff,i+1/2,R} \phi_{i+1})\end{aligned}\quad (5.28)$$

同様に、式(5.26)より $J_{i+1/2,L}^n$ を消去して整理すると式(5.29)となる。

$$\begin{aligned}& \left\{ 8(R_{eff,i+1/2,L} + R_{eff,i+1/2,R}) + \frac{2\Delta x_i}{D_i} T_{eff,i+1/2,L} + \frac{2\Delta x_{i+1}}{D_{i+1}} T_{eff,i+1/2,R} \right\} J_{i+1/2,R}^n \\ &= 4T_{eff,i+1/2,R} \phi_i + 4T_{eff,i+1/2,L} \phi_{i+1}\end{aligned}\quad (5.29)$$

よって、境界面右側の正味光子流 $J_{i+1/2,R}^n$ は式(5.30)となる。

$$\begin{aligned}J_{i+1/2,R}^n &= - \frac{2D_i D_{i+1}}{D_i \Delta x_{i+1} T_{eff,i+1/2,R} + D_{i+1} \Delta x_i T_{eff,i+1/2,L} + 4D_i D_{i+1} (R_{eff,i+1/2,L} + R_{eff,i+1/2,R})} (-T_{eff,i+1/2,L} \phi_i \\ &+ T_{eff,i+1/2,R} \phi_{i+1})\end{aligned}\quad (5.30)$$

式(5.28),式(5.30)の右辺が等しいことから、境界面の左側と右側で光子流が一致することが確認できる。

次に、体系左端の外部境界面について考える。外部境界面の右側における正味光子流 $J_{1/2,R}^n$

は式(5.31)で計算できる。

$$J_{1/2,R}^n = -D_i \frac{\phi_1 - \phi_{1/2,R}}{\Delta x_1/2} \quad (5.31)$$

正味光子流 $J_{1/2,R}^n$ を部分光子流の足し合わせで表現すると、式(5.32)のようになる。

$$J_{1/2,R}^n = R_{eff,1/2,R} J_{1/2,R}^{out} - J_{1/2,R}^{out} = -T_{eff,1/2,R} J_{1/2,R}^{out} \quad (5.32)$$

また、正味光子流、全光子束、部分光子流の関係から、式(5.33)が成り立つ。

$$J_{1/2,R}^{out} = \frac{\phi_{1/2,R}}{4} - \frac{J_{1/2,R}^n}{2} \quad (5.33)$$

式(5.33)を式(5.32)に代入して整理すると式(5.34)となる。

$$\phi_{1/2,R} = -\frac{2(1 + R_{eff,1/2,R})}{T_{eff,1/2,R}} J_{1/2,R}^n \quad (5.34)$$

式(5.34)を式(5.31)に代入して整理すると、正味光子流 $J_{1/2,R}^n$ は式(5.35)となる。

$$J_{1/2,R}^n = -\frac{2D_1 T_{eff,1/2,R}}{4D_1(1 + R_{eff,1/2,R}) + \Delta x_1 T_{eff,1/2,R}} \phi_1 \quad (5.35)$$

最後に、体系右端の外部境界面について考える。式(5.31),式(5.32),式(5.33)と同様に、式(5.36),式(5.37),式(5.38)が成り立つ。

$$J_{N_x+1/2,L}^n = -D_{N_x} \frac{\phi_{N_x+1/2,L} - \phi_{N_x}}{\Delta x_{N_x}/2} \quad (5.36)$$

$$J_{N_x+1/2,L}^n = J_{N_x+1/2,L}^{out} - R_{eff,N_x+1/2,L} J_{N_x+1/2,L}^{out} = T_{eff,N_x+1/2,L} J_{N_x+1/2,L}^{out} \quad (5.37)$$

$$J_{N_x+1/2,L}^{out} = \frac{\phi_{N_x+1/2,L}}{4} + \frac{J_{N_x+1/2,L}^n}{2} \quad (5.38)$$

式(5.38)を式(5.37)に代入して整理すると、式(5.39)となる。

$$\phi_{N_x+1/2,L} = \frac{2(1 + R_{eff,N_x+1/2,L})}{T_{eff,N_x+1/2,L}} J_{N_x+1/2,L}^n \quad (5.39)$$

式(5.39)を式(5.36)に代入して整理すると、正味光子流 $J_{N_x+1/2,L}^n$ は式(5.40)となる。

$$J_{N_x+1/2,L}^n = -\frac{-2D_{N_x} T_{eff,N_x+1/2,L}}{4D_{N_x}(1 + R_{eff,N_x+1/2,L}) + \Delta x_{N_x} T_{eff,N_x+1/2,L}} \phi_{N_x} \quad (5.40)$$

式(5.28),式(5.30),式(5.35),式(5.40)を式(2.39)に代入することで、反射屈折を考慮した条件における空間メッシュを離散化された拡散方程式は式(5.41)となる。

$$\frac{J_{i+1/2,L}^n - J_{i-1/2,R}^n}{\Delta x_i} + \mu_{a,i} \phi_i = q_i \quad (5.41)$$

式(5.28)と式(5.30)の左辺を式(5.41)に代入し、全光子束について整理すると(5.42)となる。

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\Delta x_i} \frac{2D_{i-1}D_i T_{eff,i-1/2,L}}{D_{i-1}\Delta x_i T_{eff,i-\frac{1}{2},R} + D_i\Delta x_{i-1} T_{eff,i-\frac{1}{2},L} + 4D_{i-1}D_i (R_{eff,i-\frac{1}{2},L} + R_{eff,i-\frac{1}{2},R})} \phi_{i-1} \\
& + \left\{ \frac{1}{\Delta x_i} \frac{2D_{i-1}D_i T_{eff,i-1/2,R}}{D_{i-1}\Delta x_i T_{eff,i-\frac{1}{2},R} + D_i\Delta x_{i-1} T_{eff,i-\frac{1}{2},L} + 4D_{i-1}D_i (R_{eff,i-\frac{1}{2},L} + R_{eff,i-\frac{1}{2},R})} \right. \\
& \quad + \frac{1}{\Delta x_i} \frac{2D_i D_{i+1} T_{eff,i+\frac{1}{2},L}}{D_i\Delta x_{i+1} T_{eff,i+\frac{1}{2},R} + D_{i+1}\Delta x_i T_{eff,i+\frac{1}{2},L} + 4D_i D_{i+1} (R_{eff,i+\frac{1}{2},L} + R_{eff,i+\frac{1}{2},R})} \\
& \quad \left. + \mu_{a,i} \right\} \phi_i
\end{aligned} \tag{5.42}$$

$$\frac{1}{\Delta x_i} \frac{2D_i D_{i+1} T_{eff,i+1/2,R}}{D_i\Delta x_{i+1} T_{eff,i+\frac{1}{2},R} + D_{i+1}\Delta x_i T_{eff,i+\frac{1}{2},L} + 4D_i D_{i+1} (R_{eff,i+\frac{1}{2},L} + R_{eff,i+\frac{1}{2},R})} \phi_{i+1} = q_i$$

よって、拡散計算の数値解を得るためには、式(5.43)に示す三点階差式を解けば良い。

$$A_{i-1/2}\phi_{i-1} + A_i\phi_i + A_{i+1/2}\phi_{i+1} = q_i \tag{5.43}$$

式(5.43)において、係数 $A_{i-1/2}$, A_i , $A_{i+1/2}$ は式(5.44),式(5.45),式(5.46)でそれぞれ定義される量である。

$$\begin{aligned}
& A_{i-1/2} \\
& = \frac{1}{\Delta x_i} \frac{-2D_{i-1}D_i T_{eff,i-1/2,L}}{D_{i-1}\Delta x_i T_{eff,i-\frac{1}{2},R} + D_i\Delta x_{i-1} T_{eff,i-\frac{1}{2},L} + 4D_{i-1}D_i (R_{eff,i-\frac{1}{2},L} + R_{eff,i-\frac{1}{2},R})} \quad (\because i \neq 1)
\end{aligned} \tag{5.44}$$

$$\begin{aligned}
& A_i \\
& = \mu_{a,i} + \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Delta x_i} \frac{-2D_i T_{eff,i+1/2,L}}{\Delta x_i \Delta x_{i+1} T_{eff,i+1/2,L} + 4D_i(1 + R_{eff,i+1/2,L})} \quad (i = 1) \\ \frac{1}{\Delta x_i} \frac{2D_{i-1}D_i T_{eff,i-\frac{1}{2},R}}{D_{i-1}\Delta x_i T_{eff,i-\frac{1}{2},R} + D_i\Delta x_{i-1} T_{eff,i-\frac{1}{2},L} + 4D_{i-1}D_i (R_{eff,i-\frac{1}{2},L} + R_{eff,i-\frac{1}{2},R})} \\ + \frac{1}{\Delta x_i} \frac{2D_i D_{i+1} T_{eff,i+\frac{1}{2},L}}{D_i\Delta x_{i+1} T_{eff,i+\frac{1}{2},R} + D_{i+1}\Delta x_i T_{eff,i+\frac{1}{2},L} + 4D_i D_{i+1} (R_{eff,i+\frac{1}{2},L} + R_{eff,i+\frac{1}{2},R})} \quad (i \neq 1, N_x) \\ \frac{1}{\Delta x_i} \frac{-2D_i T_{eff,i-1/2,R}}{\Delta x_i \Delta x_{i-1} T_{eff,i-1/2,R} + 4D_i(1 + R_{eff,i-1/2,R})} \quad (i = N_x) \end{array} \right.
\end{aligned} \tag{5.45}$$

$$\begin{aligned}
& A_{i+1/2} \\
& = \frac{1}{\Delta x_i} \frac{-2D_i D_{i+1} T_{eff,i+1/2,R}}{D_i\Delta x_{i+1} T_{eff,i+\frac{1}{2},R} + D_{i+1}\Delta x_i T_{eff,i+\frac{1}{2},L} + 4D_i D_{i+1} (R_{eff,i+\frac{1}{2},L} + R_{eff,i+\frac{1}{2},R})} \quad (\because i \neq N_x)
\end{aligned} \tag{5.46}$$

なお、反射屈折を考慮しない条件($R_L = R_R = 0$, $T_L = T_R = 1$)では、式(5.44),式(5.45),式(5.46)に示した係数と 2.4.2 項に示した係数が一致し、従来の拡散計算と同様の計算を実行していることが確認できる。

5.2.2.3 反復法を用いた最適な実効的な反射率

ここまで、実効的な反射率と反射屈折を考慮した条件における拡散方程式の導出を示した。実効的な反射率は、式(5.16)で計算できると述べたが、これは厳密ではない。なぜなら、式(5.16)を導出する過程で、空間メッシュ領域*i* + 1からの流入を無視しているためである。

そこで、自作拡散計算コードでは、反復法を用いて、より適した実効的な反射率を求めることとした。実効的な反射率は、式(5.16)だけでなく、式(5.15)を用いても求めることができる。実効的な反射率の初期値を式(5.16)から求めて光子束 $\phi_{i+1/2,L}^{Diff}$ 及び光子流 $J_{i+1/2,L}^{Diff}$ を計算すると、式(5.15)を用いて実効的な反射率は式(5.47)のように更新できる。

$$R_{eff,i+1/2,L} = \frac{R_{\phi}\phi_{i+1/2,L}^{Diff} + 2R_J J_{i+1/2,L}^{Diff}}{\phi_{i+1/2,L}^{Diff} + 2J_{i+1/2,L}^{Diff}} \quad (5.47)$$

よって、以下に示す手順で反復計算を実行することで、より適した実効的な反射率を用いて拡散計算を行うことができる。

- 式(5.16)から求めた実効的な反射率を初期値として拡散計算を実行し、光子束及び光子流を求める
- 式(5.47)で更新した実効的な反射率を用いて拡散計算を実行し、光子束及び光子流を求める
- 求めた光子束及び光子流を式(5.47)に代入し、実効的な反射率を更新する

5.2.3 計算フローと詳細設計

反射屈折を考慮した拡散計算の計算フローを Fig 5.4 に示す。

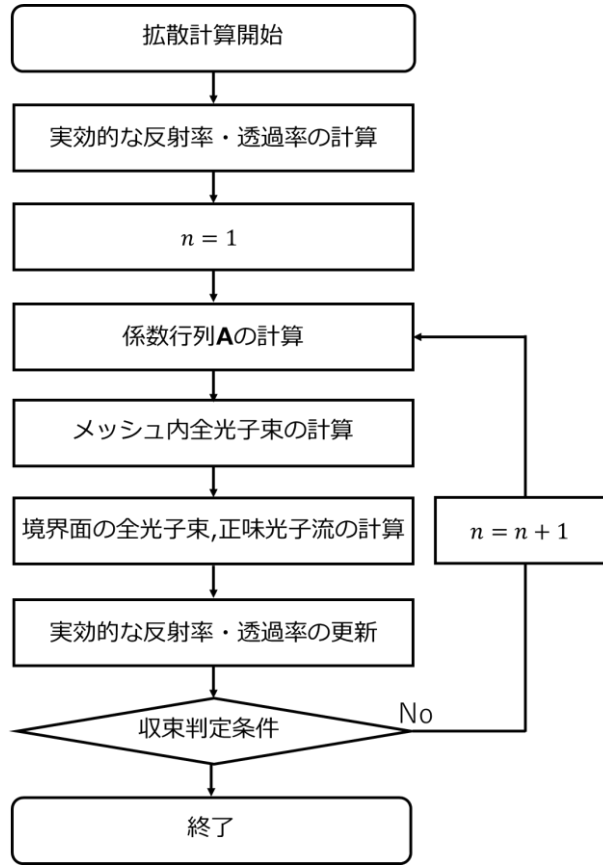


Fig 5.4 反射屈折を考慮した拡散計算の計算フロー

以下、計算フローの詳細を説明する。

- ① 式(5.16)に基づき、異なる屈折率をもつ物質境界面における実効的な反射率 R_{eff} を計算する。また、反射と透過の総和が1となることから、実効的な透過率 T_{eff} を $T_{eff} = 1 - R_{eff}$ として計算する。 R_{eff} を計算する過程で、フレネルの法則から反射率 $R(\theta)$ を求める必要がある。本拡散計算コードでは、3.3節にて説明した自作光輸送計算コードと同様に、離散化した角度を用いて式(3.13),式(3.14)で計算した。 $\mu_m, \mu_m^{refra}, \mu_c$ はそれぞれ、方向 m の余弦、方向 m の屈折後の余弦、臨界角の余弦である。

$$R_{m,i+1/2} = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[\frac{n_i \mu_m - n_{i+1} \mu_m^{refra}}{n_i \mu_m + n_{i+1} \mu_m^{refra}} \right]^2 + \frac{1}{2} \left[\frac{n_i \mu_m^{refra} - n_{i+1} \mu_m}{n_i \mu_m^{refra} + n_{i+1} \mu_m} \right]^2, & \mu_c \leq \mu_m \leq 1 \\ 1, & 0 \leq \theta_m < \mu_c \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{式(3.13)} \\ \text{再掲} \end{array}$$

$$R_{m,i+1/2} = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[\frac{n_{i+1} |\mu_m| - n_i \mu_m^{refra}}{n_{i+1} |\mu_m| + n_i \mu_m^{refra}} \right]^2 + \frac{1}{2} \left[\frac{n_{i+1} \mu_m^{refra} - n_i |\mu_m|}{n_{i+1} \mu_m^{refra} + n_i |\mu_m|} \right]^2, & \mu_c \leq \mu_m \leq 1 \\ 1, & 0 \leq \mu_m \leq \mu_c \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{式(3.14)} \\ \text{再掲} \end{array}$$

ここで計算される実効的な反射率 R_{eff} は初期値であり、後の反復計算で更新される。また、物質境界面以外の空間メッシュ境界面では、境界面両端の屈折率が等しく、 $R = 0, T = 1$ となるため、実効的な反射率を計算する必要はない。

- ② 拡散係数、空間メッシュ幅、実効的な反射率・透過率を用いて、係数行列 \mathbf{A} を設定する。
係数行列 \mathbf{A} は光子の漏れ及び吸収を表す $N \times N$ 行 $N \times N$ 列の疎行列であり、その要素 $a_{i,i-1}$ は式(5.48)、対角要素 $a_{i,i}$ は式(5.49)、要素 $a_{i,i+1}$ は式(5.50)から求めることができる。

$$a_{i,i-1} = \frac{1}{\Delta x_i D_{i-1} \Delta x_i T_{i+1/2,effL} + D_i \Delta x_{i-1} T_{i-1/2,effR} + 4D_{i-1} D_i (R_{i+1/2,effL} + R_{i-1/2,effR})} (-2D_{i-1} D_i T_{i-1/2,effR}) \quad (\because i \neq 1) \quad (5.48)$$

$$a_{i,i} = \mu_{i,a} + \begin{cases} \frac{1}{\Delta x_i \Delta x_i T_{i+1/2,effL} + 4D_i (1 + R_{i+1/2,effL})} (-2D_i T_{i+1/2,effL}) & (i = 1) \\ \frac{1}{\Delta x_i D_{i-1} \Delta x_i T_{i+1/2,effL} + D_i \Delta x_{i-1} T_{i-1/2,effR} + 4D_{i-1} D_i (R_{i-1/2,effR} + R_{i+1/2,effL})} (-2D_{i-1} D_i T_{i+1/2,effL}) & (i \neq 1, N_x) \\ \frac{1}{\Delta x_i \Delta x_i T_{i-1/2,effR} + 4D_i (1 + R_{i-1/2,effR})} (-2D_i T_{i-1/2,effR}) & (i = N_x) \end{cases} \quad (5.49)$$

$$a_{i,i+1} = \frac{1}{\Delta x_i D_i \Delta x_{i+1} T_{i+1/2,L} + D_{i+1} \Delta x_i T_{i-1/2,R} + 4D_i D_{i+1} (R_{i+1/2,effL} + R_{i-1/2,effR})} (-2D_{i+1} T_{i+1/2,effL}) \quad (\because i \neq N_x) \quad (5.50)$$

- ③ 反射屈折を考慮した拡散計算を実施し、メッシュ内全光子束を求める。本自作拡散計算コードでは、4.2.2 項と同様の手順で計算している。式に基づき、③で求めたメッシュ内全光子束を用いて、境界面における全光子束と正味光子流を計算する。
- ④ 式(5.47)に基づき、実効的な反射率・透過率を更新する。
- ⑤ 式(5.51),式(5.52)に基づき、実効的な反射率の残差を計算する。

$$\left| \frac{R_{i+1/2,effL}^n - R_{i+1/2,effL}^{n-1}}{R_{i+1/2,effL}^{n-1}} \right| \quad (5.51)$$

$$\left| \frac{R_{i+1/2,effR}^n - R_{i+1/2,effR}^{n-1}}{R_{i+1/2,effR}^{n-1}} \right| \quad (5.52)$$

残差の最大値が収束判定条件を下回っていた場合、③で求めたメッシュ内全光子束を解とする。

5.3 反射屈折を考慮した拡散計算の妥当性に関する検討

5.3.1 反射屈折現象の生じない条件における検討

5.3.1.1 本検討の目的

5.2 節では、光輸送計算で用いられている手法を改良する形式で、反射屈折を考慮した拡散計算コードを作成したことを述べた。自作拡散計算コードは、反射屈折現象が生じる体系を取り扱うことを前提としているが、反射屈折現象が生じない条件においても、正しい結果が得られることを確認する必要がある。

そこで本項では、反射屈折現象が生じない条件において、自作拡散計算コードを用いた解

と MCML から得られた参照解を比較することで、自作拡散計算コードの計算精度を確認する。

5.3.1.2 計算体系・計算条件

以下、本検討の計算体系と計算条件を述べる。4.3.1 項に示した輸送計算結果と比較を行うために、計算体系及び体系に関する条件を 4.3.1 項と統一した。

自作拡散計算コードにおける、その他の計算条件を以下に示す。反射屈折を考慮しない条件では、 $R_{eff} = 0$ となるため、角度分点セット、角度分割数及び実効的な反射率収束判定条件を設定する必要がない。空間メッシュ分割数については、4.3.1 項の条件と統一した。

- 空間メッシュ分割数：300

また、参照解として使用したモンテカルロ光輸送計算コード MCML の条件は 4.3.1 節と同様であるため、そちらを参照されたい。

5.3.1.3 反射屈折を考慮しない条件における妥当性検証

自作拡散コードの光子束空間分布の妥当性に関する検討結果について述べる。自作計算コードを用いて得られた各空間メッシュ領域全光子束の計算結果、及び MCML による参照解を Fig 5.5 に示す。また、MCML の参照解に対する、自作拡散コードの相対誤差の空間分布を Fig 5.6 に示す。相対誤差は、式(5.53)を用いて計算した。

$$\frac{\phi_i^{Diff} - \phi_i^{MCML}}{\phi_i^{MCML}} \tag{5.53}$$

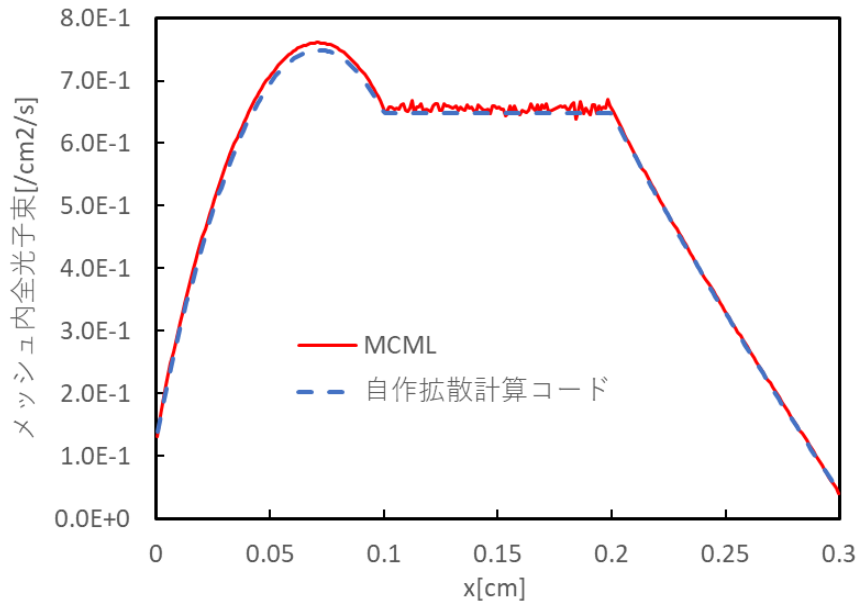


Fig 5.5 自作拡散計算コードと MCML による光子束空間分布(反射屈折無し)

Fig 5.5 より、自作拡散計算コードの結果と MCML による参照解がよく一致していることが観察できる。光子束空間分布の形状に関する考察は、4.3.1 節の内容と同様である。

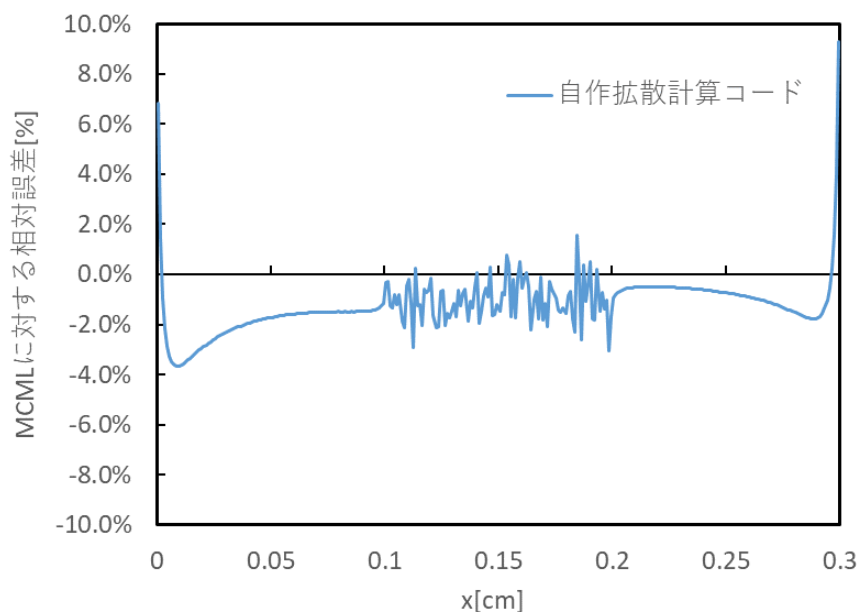


Fig 5.6 MCML に対する自作拡散計算コードの相対誤差(反射屈折無し)

Fig 5.6 より、体系内部では平均して 2%程度、体系外部付近では 10%程度の相対誤差が生じていることが観察できる。外部境界面では、真空境界条件に基づく相対誤差が生じている。物質①の領域では誤差数%程度の範囲でばらついている。この理由は、物質①の散乱係数及び吸収係数が 10^{-4} と小さく、光子が領域内の物質と反応する確率が極めて小さいため、collision estimator による推定精度が悪化し、MCML の統計誤差が大きくなるためと考えることができる。

MCML に対する最大相対誤差、最小相対誤差(負方向への最大相対誤差)、平均二乗誤差を Table 5.2 にそれぞれ示す。相対誤差を数%まで許容すると[7]、自作拡散コードは現実的な精度で計算できていると言える。しかし、外部境界面における最大相対誤差は許容値と同程度であり、精度向上が今後の課題となる。

Table 5.2 MCML に対する最大相対誤差、最小相対誤差、平均二乗誤差(反射屈折無し)

最大相対誤差[%]	最小相対誤差[%]	平均二乗誤差[%]
9.7	-3.7	1.7

5.3.2 反射屈折現象の生じる条件における検討

5.3.2.1 本検討の目的

5.3.1 項では、反射屈折現象の生じない条件において、自作拡散計算コードによる解が平均二乗誤差約 1.8%の範囲で参照解と一致することを述べた。本項では、反射屈折の生じる条件において、3つの検討を行った。まず、反射屈折現象の生じる条件においても、自作拡散計算コードを用いた拡散計算の計算精度を確認するために、自作拡散計算コードの解と MCML を用いて得られる参照解を比較した。次に、拡散計算における反射屈折効果の影響を確かめるために、反射屈折を考慮しない条件と反射屈折を考慮する条件でそれぞれ計算した結果を比較した。最後に、反復法を用いた実効的な反射率による計算精度の向上度合いを確かめるために、従来法で求めた実効的な反射率と反復法を用いて求めた実効的な反射率をそれぞれ使用して計算を行い、その結果を比較した。

5.3.2.2 計算体系・計算条件

以下、本検討の計算体系と計算条件を述べる。4.3.2 項に示した輸送計算結果と比較を行うために、計算体系及び体系に関する条件を 4.3.2 項と統一した。

自作拡散計算コードの計算条件を以下に示す。実効的な反射率の収束判定条件は、簡単なパラメータサーベイを行い、結果が収束する範囲でなるべく小さい値に設定した。なお、角度分点セット及び角度分割数は、実効的な反射率を計算するために設定する必要がある。

- 角度分点セット：多重 GL 分点、 $\mu = 0$ と臨界角で区切って展開
- 角度分割数：300
- 空間メッシュ分割数：300
- 実効的な反射率の収束判定条件： 10^{-15}

5.3.2.3 反射屈折を考慮した条件における妥当性検証

自作拡散計算コードの光子束空間分布の妥当性に関する検討結果について述べる。自作計算コードを用いて得られた各空間メッシュ領域全光子束の計算結果、及び MCML による参照解を Fig 5.7 に示す。また、MCML の参照解に対する、自作拡散コードの相対誤差の空間分布を Fig 5.8 に示す。相対誤差は、式(5.53)を用いて計算した。

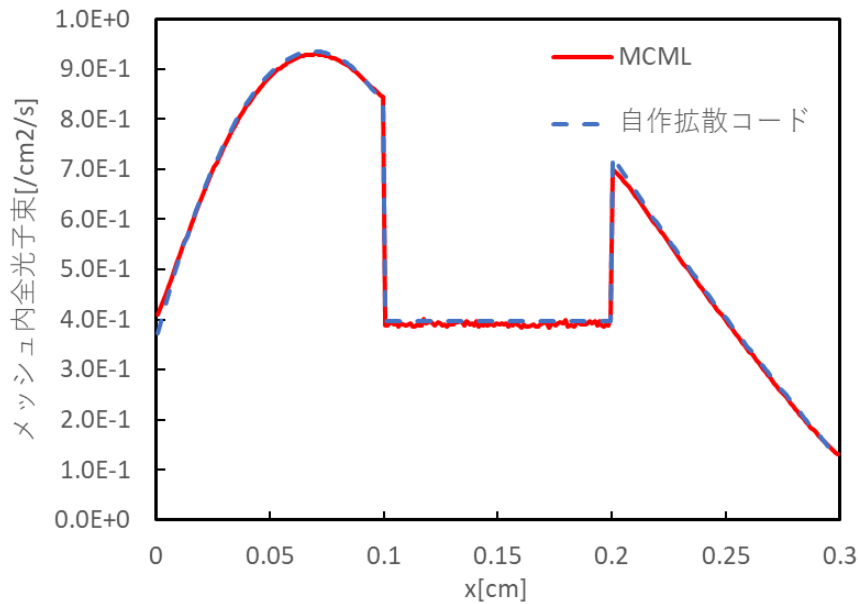


Fig 5.7 自作拡散計算コードと MCML による光子束空間分布(反射屈折有り)

Fig 5.7 より、反射屈折を考慮しない条件における結果と同様に、以下の傾向が観察される。

- 自作拡散コードと MCML の光子束空間分布の形状がよく一致している
- 光源領域($0.0 \leq x \leq 0.1$ cm)では、光子束は領域中央付近で最大となり、最大値をとる位置から離れるほど減少する
- 物質①の領域($0.1 \leq x \leq 0.2$ cm)では、光子束空間分布がほとんど平坦となる
- 物質②の領域($0.2 \leq x \leq 0.3$ cm)では、光子束は $x = 0.2$ cmで最大となり、 $x = 0.3$ cmへ近づくにつれて減少する

また、 $x = 0.1, 0.2$ cmにおける物質境界面では、反射効果によって光子束が不連続であり、光源及び物質②側の光子束と比べて物質①側の光子束が小さくなっている。これは、Table 5.1 に示した実効的な反射率の値から説明できる。屈折率が大きい物質から屈折率が小さい物質へ光が入射する場合($R_{eff} = 0.493$)には、屈折率が小さい物質から屈折率が大きい物質へ光が入射する場合($R_{eff} = 0.064$)に比べて反射率が大きい。そのため、屈折率の大きい光源と物質②の領域からは光が流出しにくいのに対し、屈折率の小さい物質①の領域からは光が流出しやすく、物質①側の光子束が小さくなる。

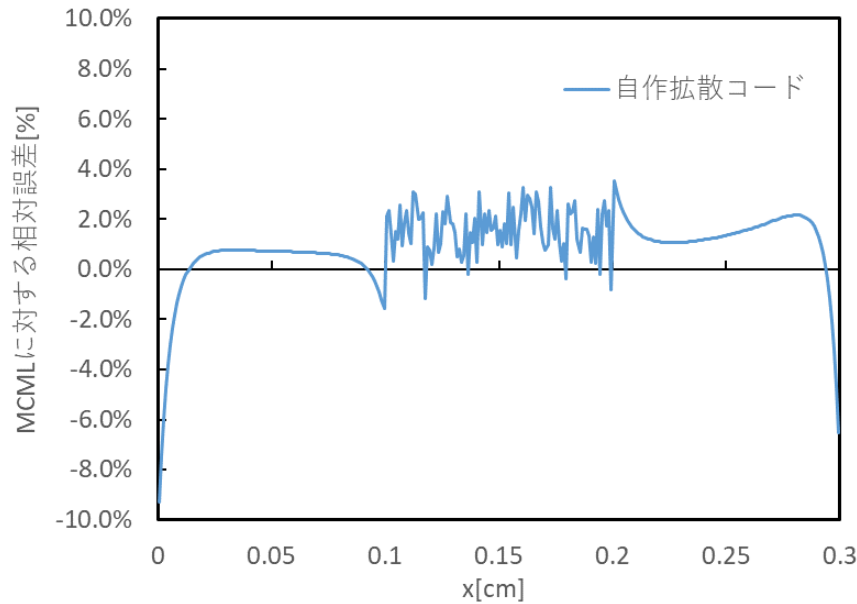


Fig 5.8 MCML に対する自作拡散計算コードの相対誤差(反射屈折有り)

Fig 5.8 より、反射屈折を考慮しない条件と同様に、以下の傾向が観察される。

- 体系内部における相対誤差は数%程度に収まっている
- 外部境界面付近で 10%程度の相対誤差が生じている
- 物質①の領域($0.1 \leq x \leq 0.2$ cm)では、collision estimator による推定精度が悪く、MCML の統計誤差が大きい

また、 $x = 0.1, 0.2$ cmにおける物質境界面では反射屈折が生じているが、相対誤差は数%にとどまっている。このことから、実効的な反射率を用いた拡散計算によって、反射屈折の影響を考慮できているといえる。

MCML に対する最大相対誤差、最小相対誤差(負方向への最大相対誤差)、平均二乗誤差を Table 5.3 にそれぞれ示す。反射屈折を考慮しない条件における平均二乗誤差(約 1.7%)と比較すると、反射屈折を考慮した条件における平均二乗誤差は約 1.8%であり、両者がほぼ一致していることから、自作拡散コードでは反射屈折効果を考慮できていると判断した。相対誤差を数%まで許容すると、自作拡散コードは現実的な精度で計算できていると言える。しかし、外部境界面における最大相対誤差は許容値と同程度であり、精度向上が今後の課題となる。

Table 5.3 MCML に対する最大相対誤差、最小相対誤差、平均二乗誤差(反射屈折有り)

最大相対誤差[%]	最小相対誤差[%]	平均二乗誤差[%]
3.5	-9.3	1.8

5.3.2.4 反復法を用いた実効的な反射率に関する検証

反復法を用いた実効的な反射率に関する検討結果について述べる。自作拡散計算コードを用いて、実効的な反射率を反復計算無し（初期値から変更しない）で求めた条件と反復計算有り（初期値から更新する）で求めた条件での計算結果と MCML を用いた計算結果を Fig 5.9 に示す。なお、自作拡散計算コード(反復有)は、Fig 5.7 に示した自作拡散計算コードと同一の結果である。MCML による結果に対する自作拡散計算コードの結果の相対誤差を Fig 5.10 に示す。

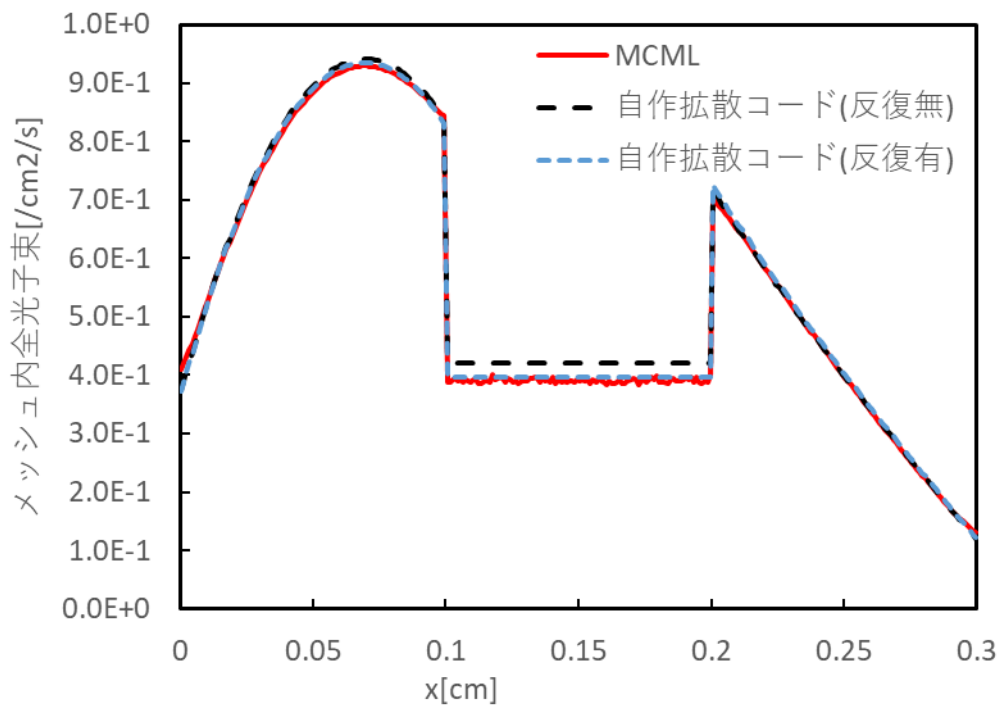


Fig 5.9 両手法による実効的な反射率を用いた光子束空間分布結果

Fig 5.9 より、光源領域及び物質②領域では、全ての結果が比較的良好に一致しているが、物質①領域では、反復無しの自作拡散計算コードの結果が過大評価となっている様子が観察できる。

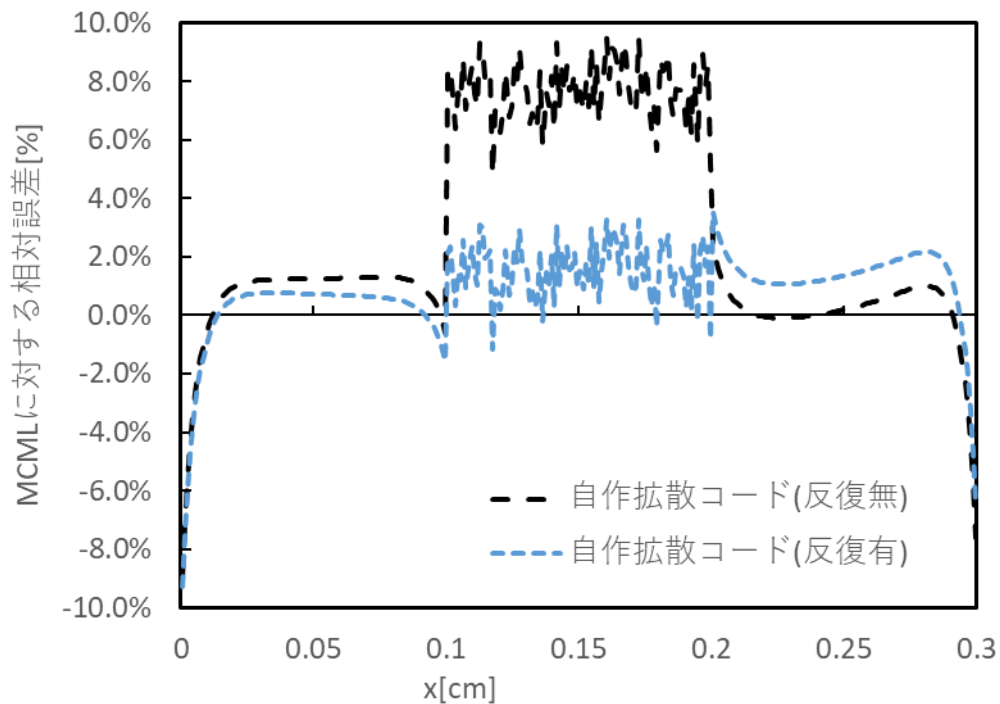


Fig 5.10 両手法による実効的な反射率を用いた拡散計算の MCML に対する相対誤差

Fig 5.10 より、以下の傾向が観察される。

- 物質①の領域では、反復無しの結果と比較して、反復有りの結果の相対誤差が約 6% 低減されている。
- 外部境界面における相対誤差は、両手法でほとんど差がない。

実効的な反射率の反復計算無し・反復有りの両条件の結果の MCML に対する最大相対誤差、最小相対誤差、平均二乗誤差を Table 5.4 に示す。

Table 5.4 MCML に対する最大・最小相対誤差、平均二乗誤差(反復無・反復有)

	最大相対誤差[%]	最小相対誤差[%]	平均二乗誤差[%]
反復無し	9.52	-8.97	4.7
反復有り	3.53	-9.31	1.8

Table 5.4 より、反復無しの拡散計算と比較して、反復有りの拡散計算では、最大相対誤差が約 6%、平均二乗誤差が約 3% 低減されていることが確認できる。以上より、反復法を用いた実効的な反射率によって、内部境界面における誤差が低減されることで、計算精度が向上すると判断した。

以下、反復法を用いた実効的な反射率によって計算精度が向上する理由を説明する。従来

法(反復無し)を用いて計算した実効的な反射率と反復法を用いて計算した実効的な反射率を Table 5.5 と Table 5.6 に示す。

Table 5.5 従来法(反復による更新なし)による実効的な反射率

	$x = 0.0$ [cm]	$x = 0.1$ [cm]	$x = 0.2$ [cm]	$x = 0.3$ [cm]
$R_{eff,L}$		0.493	0.064	0.493
$R_{eff,R}$	0.493	0.064	0.493	

Table 5.6 反復法(反復による更新あり)を用いた実効的な反射率

	$x = 0.0$ [cm]	$x = 0.1$ [cm]	$x = 0.2$ [cm]	$x = 0.3$ [cm]
$R_{eff,L}$		0.521	0.074	0.493
$R_{eff,R}$	0.493	0.081	0.540	

Table 5.5 より、従来法では隣接する物質の屈折率の値によってのみ実効的な反射率が決定されるため、屈折率 1.4 の物質から屈折率 1.0 の物質への入射に対応する 4 箇所値が 0.493 となり、屈折率 1.0 の物質から屈折率 1.4 の物質への入射に対応する 2 箇所値が 0.064 となる。ここで、5.2.2 節で述べた通り、従来法における実効的な反射率は、導出する過程で境界面反対側からの流入光子流を無視していることが問題となる。実効的な反射率は、境界面から領域へ入射する光子流/境界面へ領域から流出する光子流であり、式(5.54)のように表せる。

$$R_{eff,i+1/2,L} = \frac{J_{i+1/2,L}^{in}}{J_{i+1/2,L}^{out}} = \frac{R_{eff,i+1/2,L}^0 J_{i+1/2,L}^{out} + T_{eff,i+1/2,R}^0 J_{i+1/2,R}^{out}}{J_{i+1/2,L}^{out}} \quad (5.54)$$

ここで、 $R_{eff,i+1/2,L}^0, T_{eff,i+1/2,R}^0$ は実効的な反射率及び実効的な透過率の初期値である。式(5.54)より、境界面反対側からの流出光子流(式(5.54)では $J_{i+1/2,R}^{out}$) が大きいほど、実効的な反射率も大きくなるはずである。従って、境界面反対側からの流出光子流が 0 である外部境界面の実効的な反射率よりも、内部境界面の実効的な反射率は大きな値となるはずである。

上記の内容を踏まえて Table 5.5 と Table 5.6 を見比べると、外部境界面における実効的な反射率は両手法で等しく、内部境界面における実効的な反射率は反復法を用いた方が大きくなっている。このことから、反復法を用いた実効的な反射率では、内部境界面において、より正しく反射屈折現象を取り扱えていることが確認できる。

最後に、実効的な反射率の残差の推移を Fig 5.11 に示す。実効的な反射率の収束性は非常に良好であり、9 回の反復で収束判定条件である 10^{-15} に到達している。

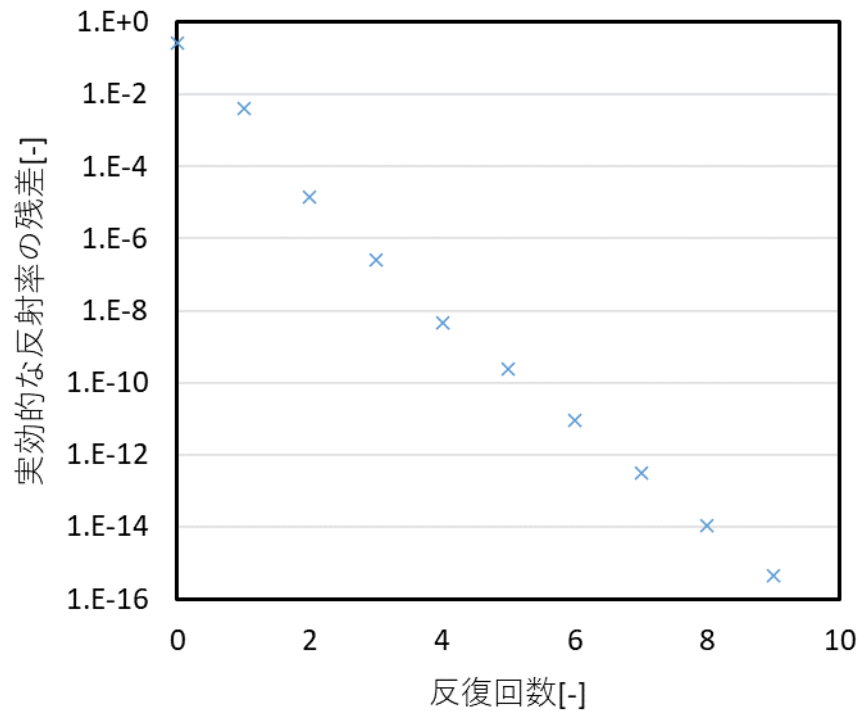


Fig 5.11 実効的な反射率の残差の推移

5.3.3 反射屈折現象を考慮する必要性に関する検証

続いて、拡散計算における反射屈折を考慮する必要性に関する検証について述べる。自作拡散計算コードを用いて、反射屈折を考慮しない条件と反射屈折を考慮する条件でそれぞれ計算を行い、光子束空間分布を求めた。得られた光子束空間分布結果を Fig 5.12 に示す。また、反射屈折を考慮する条件に対する反射屈折を考慮しない条件の相対誤差分布を Fig 5.13 に示す。

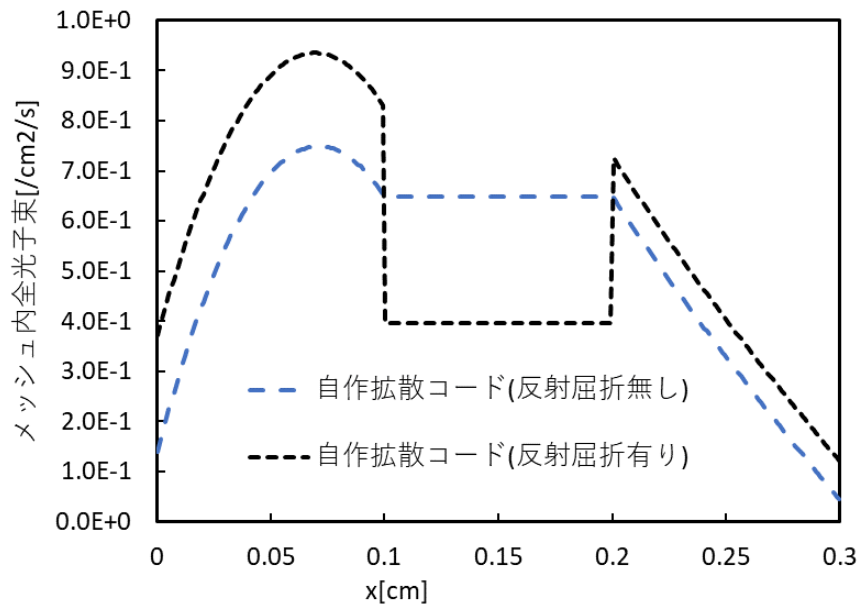


Fig 5.12 各反射屈折条件における光子束空間分布

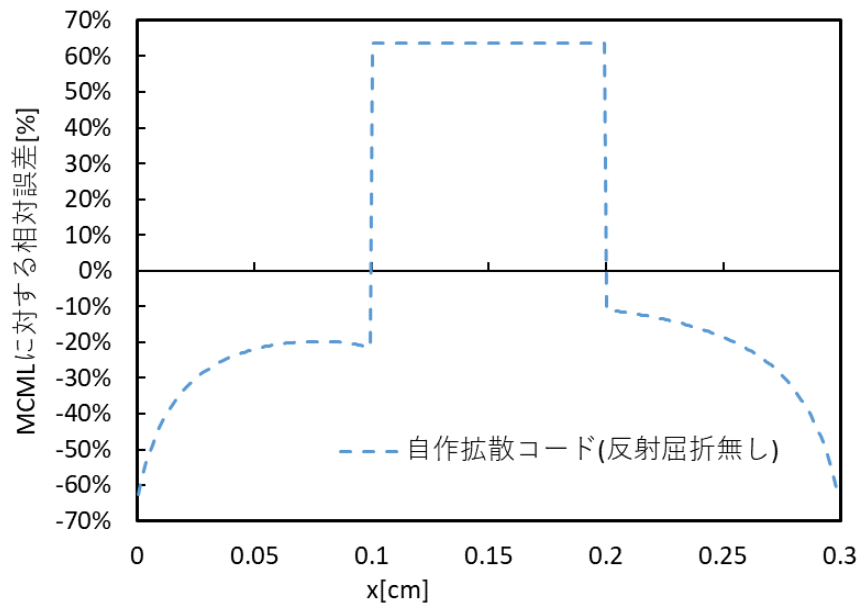


Fig 5.13 反射屈折を考慮する条件に対する反射屈折を考慮しない条件の相対誤差

Fig 5.12 より、反射屈折を考慮しない条件と反射屈折を考慮する条件では、光子束空間分布が明らかに一致しないことが観察できる。 $x = 0.1, 0.2$ [cm]における物質境界面に注目す

ると、反射屈折を考慮する条件では光子束が不連続となっているのに対し、反射屈折を考慮しない条件では光子束が連続となっている。

Fig 5.13 より、反射屈折を考慮しない条件では、屈折率 1.0 の物質領域内で光子束を過大評価し、屈折率 1.4 の物質領域内では光子束を過小評価していることが観察できる。これは、5.3.2 項で説明した通り、反射屈折によって、屈折率の大きい物質領域からは光が流出しにくいのに対し、屈折率の小さい物質領域からは光が流出しやすいためである。

Table 5.7 に、反射屈折を考慮する条件に対する反射屈折を考慮しない条件の最大相対誤差、最小相対誤差、平均二乗誤差を示す。誤差を数%まで許容すると[7]、反射屈折を考慮しない条件の相対誤差は許容値を 30%~50%上回っており、拡散計算において反射屈折現象が光子束空間分布に与える影響は大きいといえる。以上の結果から、拡散計算において反射屈折現象を考慮する必要ことは必須であると判断した。

Table 5.7 反射屈折を考慮する条件に対する反射屈折を考慮しない条件の相対誤差

最大相対誤差[%]	最小相対誤差[%]	平均二乗誤差[%]
64	-64	43

5.4 本章のまとめ

本章では、反射屈折現象を考慮した拡散計算による光輸送計算の効率化について説明した。

5.2 節では、反射屈折現象を考慮した拡散計算について説明した。まず 5.2.1 項では、反射屈折現象を考慮した拡散計算の概要を説明した。拡散計算では、光子の飛行方向を関数展開によって取り扱っているため、フレネルの法則から得られる角度依存の反射率をそのまま使用することができない。そこで、反射される部分光子流の割合を表す、実効的な反射率を用いて反射屈折境界条件を設定している。続く 5.2.2 項では、反射屈折現象を考慮した拡散計算の計算理論を説明した。実効的な反射率の計算方法を導出し、拡散計算における反射屈折境界条件を示した。導いた実効的な反射率を用いて、反射屈折現象を考慮した条件における拡散方程式を導出した。さらに、より適した実効的な反射率を求める方法として、反復法を用いた実効的な反射率の計算方法を提案した。自作拡散計算コードでは、従来通りの実効的な反射率を初期値として拡散計算を行い、求めた光子束と光子流を用いて実効的な反射率を更新している。最後に 5.2.3 項では、反射屈折現象を考慮した拡散計算の計算フローと詳細を示した。

5.3 節では、作成した自作拡散計算コードを用いた検討を行った。まずは、反射屈折現象の生じない条件において、自作拡散計算コードから正しい解が得られていることを確認するために、参照解(MCML)と比較を行った。MCML との相対誤差は数%程度に収まっており、現実的な精度で計算できていると言える。しかし、外部境界面における最大相対誤差は許容値寸前であり、精度向上が今後の課題となる。続いて、反射屈折現象の生じる条件において

も、自作拡散計算コードから正しい解が得られていることを確認するために、参照解 (MCML) と比較を行った。反射屈折現象の生じない条件と同様に、誤差は数%以内で収まっているものの、外部境界面における最大相対誤差は許容値寸前であるため、精度向上が今後の課題となる。反射屈折現象の生じない条件と生じる条件の相対誤差を比較すると、両者とも平均二乗誤差は約 1.8%程度であり、外部境界面にて許容値と同程度の大きな誤差が観察される。このことから、MCML との相対誤差の原因は、反射屈折現象の扱いではなく、拡散近似に基づくものであるといえる。よって、自作拡散計算コードでは、反射屈折現象を考慮できていると判断した。最後に、反復法を用いた実効的な反射率による計算精度の向上度合いを確かめるために、従来法で求めた実効的な反射率と反復法を用いて求めた実効的な反射率をそれぞれ使用して計算を行い、その結果を比較した。反復法を用いて求めた実効的な反射率によって、最大相対誤差が約 6%、平均二乗誤差が約 3%低減され、計算精度が向上することが確認された。

5.5 参考文献

- [1] L. Wang et al., “MCML—Monte Carlo modeling of light transport in multi-layered tissues,” *Computer Methods and Programs in Biomedicine*, DOI:10.1016/0169-2607(95)01640-F.
- [2] A. Yamamoto et al., “A New Interpretation of Discontinuity Factor”, *Nucl. Sci. Eng.*, DOI: 10.1080/00295639.2019.1579514.
- [3] 藤井宏之,” 生体における光の輸送現象： 輻射輸送方程式の数値計算と光トモグラフィへの応用に向けて”, 第 50 回炉物理夏期セミナーテキスト, pp.39-64(2018).
- [4] Richard C. Haskell et al., “Boundary conditions for the diffusion equation in radiative transfer”, *J Opt Soc Am*, DOI: 10.1364/JOSAA.11.002727.
- [5] 丸山博見 他, 1 原子炉物理(シリーズ: 現代核科学技術の基礎), 日本原子力学会, Tokyo, p66, ISBN-978-4-89047-174-4 (2008).
- [6] 天野虎之介,”光輸送解析への中性子輸送計算手法の適用性に関する検討”, 名古屋大学工学部 卒業論文(2021).
- [7] 私信, 北海道大学工学研究院 藤井宏之助教(2020).

第6章 結論

6.1 本論文のまとめ

本論文では、反射屈折を考慮した光輸送解析への中性子輸送計算手法の応用とその効率化について検討を行った。医用工学分野では、光を用いた生体イメージング技術の一種である拡散光トモグラフィの実用化が待ち望まれている。拡散光トモグラフィによって生体内組織などの画像を作成するためには、多変数の微分方程式である輻射輸送方程式を多数回解く必要がある。そのため、輻射輸送方程式を高速かつ高精度に解く手法の確立が求められている。一方、原子力分野では、輻射輸送方程式とよく似た中性子輸送方程式を取り扱っており、光輸送計算とは異なるアプローチで数値解を求めている。そのため、中性子輸送計算手法を応用することで、輻射輸送方程式を高速かつ高精度に解き、効率的な光輸送解析を行うことができるかと期待される。

実際のヒト組織に則した光輸送計算では、屈折率の異なる物質同士の境界面で、反射屈折現象が生じる。光輸送計算では、反射屈折境界条件によって反射屈折効果を扱っているが、中性子輸送計算手法では、反射屈折を取り扱う方法は確立されていない。そのため、非均質体系を対象とした光輸送解析を行うためには、中性子輸送計算手法における反射屈折の取り扱い方法を新たに考案する必要がある。さらに、反射屈折を考慮した厳密な光輸送計算ができたとしても、従来原子力分野で用いられている高速化手法を適用できるかどうかは不明であるため、その点についても検討が必要である。

以上より、本研究では、①反射屈折を考慮した厳密な光輸送計算コードの開発、②拡散加速法を用いた光輸送計算の高速化について、検討を実施した。さらに、高速な光輸送計算を実施するための近似解法として、③反射屈折を考慮した拡散計算による光輸送計算の効率化について検討を実施した。

第1章では、本研究の背景と目的を述べた。拡散光トモグラフィの原理と利点を示し、輻射輸送方程式を高速かつ高精度に解くためのアルゴリズムの改良が課題であることを述べた。この課題の解決策として、光輸送解析への中性子輸送計算手法の応用を挙げ、中性子輸送計算手法における反射屈折の取り扱い方法を新たに考案する必要があることを説明した。

第2章では、本研究にて光輸送計算へ適用する中性子輸送計算手法を説明した。まずは、中性子輸送方程式と光輸送方程式を比較し、両者が一致するように中性子輸送方程式を変形することで、本研究で解くべき方程式を導出した。続いて、現在原子力分野で広く用いられている Method of Characteristics(MOC)法について説明し、光子の飛行方向を離散化して取り扱っていることを強調した。最後に、MOCの収束性を向上させる手法である拡散加速法についてまとめた。

第3章では、反射屈折を考慮したMOCに基づく光輸送計算コードに関する検討について説明した。まずは、本検討の目的が、①中性子輸送計算手法(MOC)における反射屈折現象の取り扱い方法の考案と反射屈折を考慮した厳密な光輸送計算コードの開発、②自作光輸送計算コードの検証作業(verification)の実施、③反射屈折現象を考慮する必要の確認、である

と述べた。①について、まずは離散化された光子飛行角度における反射屈折境界条件を導出した。続いて、自作光輸送計算コードでは、反射屈折重みテーブルによって反射屈折境界条件を処理することを説明した。最後に自作光輸送計算コードのフローチャートと詳細を説明した。②について、1次元の仮想的な体系を対象とし、自作光輸送計算コードと光輸送モンテカルロ計算コードMCMLの結果を比較した。MCMLに対する自作光輸送計算コードの相対誤差は最大で約0.2%であり、自作光輸送計算コードは現実的な精度で計算できていると判断した。③について、1次元の仮想的な体系を対象とし、反射屈折を考慮しない条件、反射のみを考慮する条件、反射屈折を考慮する条件における結果を比較した。反射屈折を考慮する条件に対する相対誤差は、反射屈折を考慮しない条件で約95%、反射のみを考慮する条件で約25%であり、反射屈折現象が光子束空間分布へ与える影響は大きいといえる。

第4章では、拡散加速法を用いた光輸送計算の高速化に関する検討について説明した。従来原子力分野で用いられている拡散加速法を、反射屈折を考慮した光輸送計算にそのまま適用することは、収束性の観点から実施できなかった。そこで、①反射屈折を考慮した厳密な光輸送計算に適用できるように従来の拡散加速法(中性子流補正項の計算方法)を改良、②改良した拡散加速法を適用した光輸送計算の収束解の検証作業(verification)の実施、③拡散加速法を用いることによって収束に要する外部反復回数を削減できることを確認、上記3つの検討を行った。①について、反射屈折現象が生じる条件では、境界面で角度光子束が不連続となることが加速計算を実施する上での課題となっていたため、左側と右側の流入/流出角度光子束を区別して光子流補正係数を求めることにした。光子流補正係数の求め方を導出し、これを利用した自作光輸送計算コードのフローと詳細を示した。②について、1次元の仮想的な体系を対象とし、自作輸送計算コードを用いて拡散加速無しの場合と拡散加速有りの場合でそれぞれ計算を行い、結果を比較した。拡散加速無しの場合の結果に対する拡散加速有りの場合の結果の相対誤差は最大で約0.01%であり、拡散加速法は適切に導入できていると判断した。③について、反射屈折を考慮しない条件と反射屈折を考慮する条件において、拡散加速無しの場合と拡散加速有りの場合でそれぞれ計算を行い、収束までに要する外部反復計算回数を比較した。拡散加速有りの場合の反復回数は、拡散加速無しの場合と比べて、反射屈折を考慮しない条件で約1/25、反射屈折を考慮する条件で約1/3に削減されることを確認した。反射屈折を考慮する条件で加速性能が低下する原因は、反射屈折の生じる境界面で、入射角度光子束を1反復前の結果から与えるヤコビ法を用いた反復計算を行う必要があるためである。

第5章では、反射屈折を考慮した拡散計算による光輸送解析の効率化に関する検討について説明した。拡散計算は、光子の飛行方向を関数展開によって近似することで簡略化し、計算コストを削減した手法であり、均質な媒質内の光輸送方程式を解くための近似的な解法として用いられている。まず、反射屈折を考慮した拡散計算における境界条件について説明した。拡散計算では光子の飛行方向を直接扱わないため、フレネルの法則から求まる角度依存の反射率ではなく、光子束と正味光子流から計算出来る実効的な反射率を用いる。実効

的な反射率を境界条件として使用し、反射屈折現象を考慮した条件における拡散方程式の差分式を導出した。さらに、実効的な反射率を精度良く求める方法として、反復計算中に求められる全光子束と正味光子流を用いた実効的な反射率の反復計算方法を提案した。次に、作成した反射屈折現象を考慮した拡散計算コードのフローと詳細を示した。最後に、自作拡散計算コードを用いた検証結果を示した。屈折率が異なる物質を含む 1 次元の仮想的な体系を対象とし、自作拡散計算コードと光輸送モンテカルロ計算コード MCML の結果を比較した。MCML に対する自作拡散計算コードの平均二乗誤差は約 1.8% であり、自作拡散計算コードは現実的な精度で計算できていると判断した。

6.2 今後の検討内容

今後の課題を以下に示す。

- 拡散計算の精度向上

第 5 章より、体系外部境界面付近で約 10% の誤差が生じることが確認された。これは、外挿距離の近似精度に由来すると考えられる。よって、誤差改善のためには、反射屈折を考慮した条件における外挿距離の近似的な値を新たに設定する必要がある。

- 多次元体系における検討

本研究では、中性子輸送計算手法を光輸送計算へ応用することに重点を置いていたため、1 次元体系を対象として検討を行った。拡散光トモグラフィを用いて生体イメージング画像を作成するためには、3 次元体系を対象とした計算を行う必要がある。従って、本研究で提案した手法を多次元へ拡張する必要がある。

- 光輸送計算手法との比較

本研究では、中性子輸送計算手法を用いて、高速かつ高精度な光輸送計算の実現を試みた。一方、医用工学分野においても、効率的な光輸送計算を目指して盛んに研究が行われている。そのため、提案手法と新たに開発されている光輸送計算手法を比較し、提案手法の優位性を確認する必要がある。

- 輸送計算のさらなる高速化

第 4 章より、反射屈折の生じる条件において、厳密な光輸送計算を行う場合、屈折率が異なる物質への入射角度光子束を 1 反復前の結果から与える必要があるために、拡散加速法の加速性能が低下することが判明した。そのため、反射屈折境界条件の処理を改良または近似的な手法を導入することで、同じ反復内の結果から入射角度光子束を与えることができれば、拡散加速法の加速性能が向上し、輸送計算の高速化につながる。近似的な手法の案として、 $\alpha = \text{反射屈折後の入射角度光子束} \psi_m^{\text{in}} / \text{流出角度光子束} \psi_m^{\text{out}}$ となるような実効的な係数 α を事前に求め、 $\psi_m^{\text{in}} = \alpha \psi_m^{\text{out}}$ と計算する方法が挙げられる。

公刊論文

- [1] 天野虎之介, 遠藤知弘, 山本章夫, 日本原子力学会 2022 年秋の大会, 1G12, 9 月 7 日-9 日 (2022).