

生体光イメージングへ向けた高精度輻射輸送計算システムの構築

Time-dependent radiative transfer simulations for in-vivo bioimaging

矢島秀伸

筑波大学 計算科学研究センター

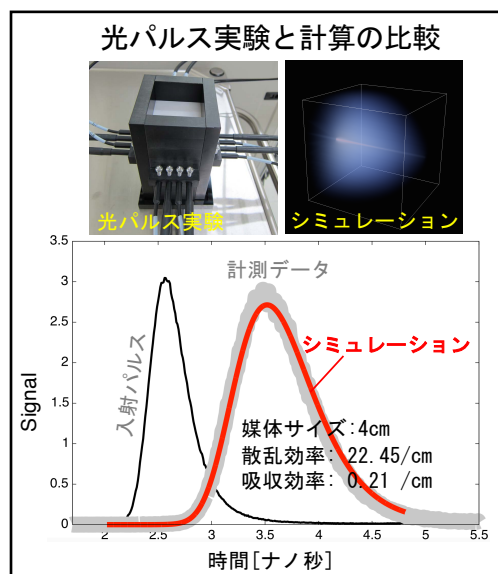
1. 研究目的

本研究の目的は、時間変動する輻射場を高速かつ高精度に計算するコードを開発し、大規模輻射輸送シミュレーションを実行する事である。この計算技術開発によって、天文学及び、医学の生体イメージングにおいて革新的となる技術発展に貢献する。最終的には、輻射輸送計算と機械学習による逆問題解析を組み合わせた構造解析のシステムを確立する事で、直接測定する事が難しい生体内の3次元情報の取得を可能にする。生体光イメージングではピコ秒オーダーの短時間パルスの照射、体内での伝播を計算する必要がある。したがって、高精度な時間依存輻射輸送計算を行う必要がある。それに向けて、新たに計算コードを開発し、実験と比較することで計算コードの検証を行う。また、計算の精度を落とさずに、高速化、低メモリ化を実現するために、Wavelet法を使った角度分割法を計算コードに導入する。

2. 研究成果の内容

代表者が宇宙物理で開発した、Authentic Radiative Transfer (ART) 法をベースにして、生体光イメージング用の計算コードを開発した。宇宙物理の大抵の問題と違い、生体光イメージングでは短時間での輻射場の変動を扱う。そのため、解くべき方程式は宇宙物理とは違い、時間依存型の方程式となる。また、生体内物質では強い前方散乱が生じる。これらを考慮した計算コードを開発した。計算は空間グリッドの1辺が100程度の場合、要求される計算メモリは数百ギガバイト以上となる。そのため、MPI並列によって領域分割し、計算を可能にした。

右図は現在浜松医科大学と共同で行っている、光パルス実験と我々のグループのシミュレーション比較である。生体に近い光学特性を持つポリウレタン (ファントム) に対してナノ秒スケールの近赤外線パルスを照射した実験である。我々が開発した輻射輸送シミュレーションによって見事に実験データを再現する事に成功した (矢島, 梅村, 他, 論文投稿準備中)。パルス照射点から遠い位置の検出器ほどシグナル波形は広がった形となる。これは、一部の光子が多重散乱過程により、パルスから検出器へ至る経路長が長くなったためであ



る。今後は非一様媒体、実際の生体を用いた実験との比較を行っていく。

上記の計算では角度分解能を一定にした計算を行った。100 コア程度の並列計算で2日ほどの計算時間を要している。今後の臨床応用に向けて、より高速な計算が望まれる。そこで Wavelet 法を用いた角度離散化を導入した計算コード改良を行った。生体内で数 mm 以上の深度では多重散乱の効果によって輻射場は等方に近づく。その場合は、角度 bin の分割数は少なくても良い。Wavelet 法は天球面を正三角形に再帰的に分割していく手法で、異方性の度合いによって角度分解能を自動的に変化させる事が出来る。この手法を導入する事で、精度を保ったまま計算メモリを数倍減らし、かつ計算速度を数倍加速させる事に成功した(安部, 矢島, 梅村, 投稿準備中)。現在これら2編の論文について執筆中で、1-2ヶ月以内に投稿する予定である。

3. 学際共同利用が果たした役割と意義

学際共同利用によって大規模な並列計算が可能となり、光イメージングで要求される空間分解能を達成する事が出来た。また、可能な並列コア数も数百以上をスムーズに使う事が出来たため、上記のファントム実験を数日のタイムスケールで実行する事が可能であった。また、Cygnus の GPU 並列計算を想定して計算コードの改良に着手した。この改良が終われば、小規模の GPU 搭載 PC クラスタでも高精度な光イメージング計算が可能となる。このような大規模計算、GPU 計算高速化にチャレンジ出来る環境が得られた事は本プロジェクトの課題を進める上で非常に有用であった。

4. 今後の展望

前述のように生体光イメージングの計算コードの土台は完成し、ファントムを使った実験との比較にも成功した。これを更に発展させ、以下の研究を今後推進していく。

- (1) 非均一ファントムデータや甲状腺・脳計測データとの比較
- (2) GPU/FPGAを使った計算高速化
- (3) 機械学習による逆問題解析モデルの構築

生体内に悪性腫瘍などがあると血液が集中し、吸収係数が局所的に大きくなる。このような状況を想定したファントム実験との比較を行う。その後、甲状腺や脳などの実際の生体計測データを使った実験との比較に進む。また、今後の臨床応用のために、多数のパラメータを短時間で計算するための高速化を考え、GPU/FPGA を利用出来るように計算コードを改良する。すでに安部牧人研究員が計算コードの GPU 化に着手しており、GPU 上で動作出来るようになったところである。今後、チューニングを行い、GPU の性能を引き出した高速計算を目指していく。これに加え、GPU では加速に適していない箇所を研究し、FPGA への発展を考えていく。また、医療診断に重要な逆問題解析にも取り組む。輻射輸送シミュレーションをさまざまなパラメータで調べてデータセットを作成し、それらを教師データとして機械学習のモデルを構築していく。現在高水裕一研究員が Keras を用いた機械学習研究に着手している。

5. 成果発表

- (1) 学術論文 (著者名, タイトル, 年, 雑誌名, volume, page の順に記載)
 - a) Arata, S., Yajima, H., Nagamine, K., Li, Y., Khochfar, S., “Radiative properties of the first galaxies: rapid transition between UV and infrared bright phases”, 2019, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 448, 2629
 - b) Zhang, Haibin, Ouchi, Masami, Itoh, Ryohei, Shibuya, Takatoshi, et al. incl. Hidenobu Yajima, “CHORUS. III. Photometric and Spectroscopic Properties of Ly Blobs at $z = 4.9-7.0$ ”, 2020, The Astrophysical Journal, 891, 177
 - c) Li, Yuexing, Gu, Ming F., Yajima, Hidenobu, Zhu, Qirong, Maji, Moupiya, “ART2: A 3D Parallel Multi-wavelength Radiative Transfer Code for Continuum and Atomic and Molecular Lines”, 2020, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 494, 1919
 - d) Fujimoto, Seiji; Ouchi, Masami; Ferrara, Andrea; Pallottini, Andrea; Ivison, R. J.; Behrens, Christoph; Gallerani, Simona; Arata, Shohei; Yajima, Hidenobu; Nagamine, Kentaro, “First Identification of 10 kpc [C II] $158 \mu\text{m}$ Halos around Star-forming Galaxies at $z = 5-7$ ”, 2020, The Astrophysical Journal, 887, 107
 - e) Shimizu, Ikkoh; Todoroki, Keita; Yajima, Hidenobu; Nagamine, Kentaro, “Osaka feedback model: isolated disc galaxy simulations”, 2019, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 484, 2632
- (2) 学会発表 (発表者, 講演タイトル, 会議名, 場所, 日時)
 - a) 矢島秀伸. “Formation of dusty starburst galaxies in cosmological simulations with radiative transfer”. ALMA workshop: The blind search for hidden galaxies in an abundant line of sight (NAOJ Mitaka, Japan, Mar. 11-12, 2020). 招待講演
 - b) 矢島秀伸. “Time-dependent radiative transfer simulations for in-vivo bioimaging”. 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (International Congress Center EPOCHAL TSUKUBA, Japan, Oct. 15, 2019).
 - c) Makito Abe. “Structure Formation in the Early Universe using Radiation Hydrodynamic Simulations”. 11th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (International Congress Center EPOCHAL TSUKUBA, Japan, Oct. 15, 2019).

- d) 矢島秀伸. “Cosmological simulations of first galaxies and first star clusters”. Gravitational wave physics and astronomy: Genesis, Area workshop 2020 Winter (Cottage Biwako Club, Shiga, Japan, Jan. 11–13, 2020).
- e) 矢島秀伸. “Cosmological simulations of galaxy formation at the epoch of reionization”. 国立天文台科学研究部研究会 2019 (伊豆休暇村, 静岡県, Dec. 2–4, 2019). 招待講演
- f) 矢島秀伸. “三次元輻射輸送計算コードの開発:宇宙物理から医用ひかり学への新展開”. 日本学術振興会 第 186 委員会 2019 年度第 1 回研究会 (京都大学 東京オフィス, June 19, 2019). 招待講演
- g) 福島肇. “3 次元輻射流体シミュレーションによる低金属量星団形成”. 日本天文学会秋季年会 (熊本大学, Sept. 11–13, 2019).
- h) 福島 肇. “巨大分子雲における星団形成の金属量依存性”. 初代星・初代銀河研究会 2019 (名古屋大学, Nov. 11–13, 2019).
- i) 福島肇 矢島秀伸 and 梅村雅之. “星形成領域における円偏光波生成に関する輻射輸送シミュレーション”. 第 32 回 理論懇シンポジウム (国立天文台三鷹キャンパス, Dec. 25–25, 2019).
- j) 福島肇. “星形成領域の円偏光生成に関する輻射輸送計算”. ABC 若手分野間連携 WS (国立天文台三鷹 キャンパス, Dec. 14, 2019).
- k) 福島肇, 矢島秀伸, and 梅村雅之. “星形成領域における円偏光波に関する輻射輸送シミュレーション”. 日本天文学会春季年会 (筑波大学, Mar. 16–19, 2020).
- l) 矢島秀伸. “生体光イメージングに向けた並列輻射輸送計算コードの開発”. 計算メディカルサイエンス事業部発足シンポジウム (筑波大学, Dec. 6, 2019).
- m) 矢島秀伸. “原始銀河団領域における巨大ブラックホール形成”. 日本天文学会秋季年会 (熊本大学, Sept. 11–13, 2019).
- n) 矢島秀伸. “数値シミュレーションで探る宇宙再電離期の銀河、原始銀河団、クエーサー”. SKA-Japan シンポジウム 2019 (国立天文台, Sept. 2–6, 2019).
- o) 矢島 秀伸. “数値シミュレーションで探る大域的輝線マップと銀河形成の関係”. 面分光研究会 2019-新面分光装置で花開く新しいサイエンス- (国立天文台(三鷹), Oct. 29–30, 2019).
- p) 矢島 秀伸. “原始銀河団領域における銀河と巨大ブラックホールの形成”. 初代星・初代銀河研究会 2019 (名古屋大学, Nov. 11–13, 2019).

(3) その他

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース※	
		当初配分	追加配分
Cygnus	○	18000	0
Oakforest-PACS	○	225000	0
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			