

輻射輸送計算と機械学習による生体光イメージングモデルの構築

Radiative transfer simulations and machine learning for in-vivo bioimaging

矢島秀伸

筑波大学 計算科学研究センター

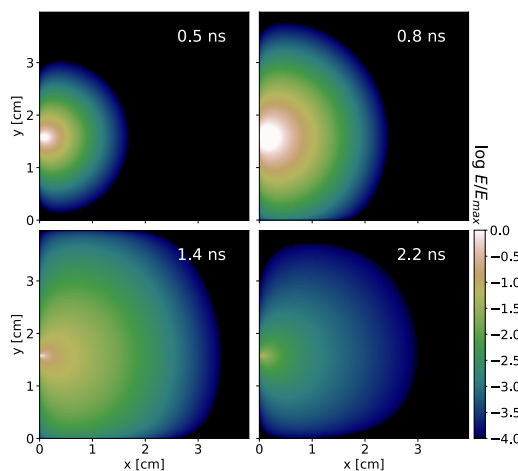
1. 研究目的

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、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。特に、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。本研究では、大規模な数値シミュレーションによって生体内1ミリ程度の空間分解能を達成し、既に3次元データが取得されている甲状腺に対して光応答反応の理論モデルを構築する。この計算結果と実際の光計測の結果を比較する事で理論モデルを検証し、生体光イメージング技術の土台を完成させる。

2. 研究成果の内容

a) 3次元時間依存輻射輸送計算コードの開発

高精度に輻射輸送を解くことができる計算スキーム ART 法をベースにして、生体に応用可能な輻射輸送計算コード TRINITY (Time-dependent Radiative transfer In Near Infrared Tomography)を開発した。先行研究では光線を空間グリッドごとに分割する手法が取られている。一方、本研究では光線を計算ボックス内で直線的に繋いだいわゆる long-characteristic 法をベースにした手法を取り入れた。これによって、光伝播に伴う数値拡散を大きく抑えることに成功した。また、先行研究では複数の CPU を用いた並列計算はほとんど行われていない。TRINITY コードでは MPI と

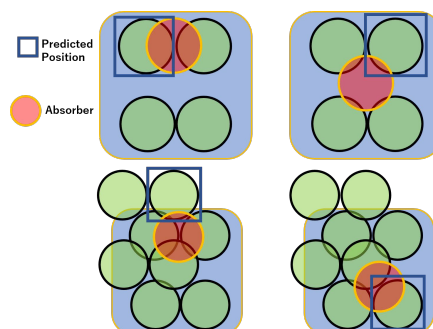


OpenMP を組み合わせたハイブリッド並列によって、Oakforest-PACS 上で大規模な並列計算を実行する事が出来た。この計算コードを用いて光パルス照射実験との比較を行った。実験は大きさ 4cm のポリウレタン製生体模擬物質 (ファントム) に対するナノ秒スケールのパルス照射である。左図は計算結果で、ファントム内に光が拡散しながら伝わっている様子を示している (色は光のエネルギー密度)。2.2 ナノ秒では既にパルス照射は消

えているが、多重散乱により光子が補足されてファントム内に残っていることが分かる。結果として、ファントム表面での検出シグナルが計測データと見事に一致する事を示した。これらの結果は *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 誌に現在投稿している (Yajima, Abe, Umemura, Takamizu, Hoshi, 2021)。

b) 機械学習による判定モデルの作成

上記のファントムにおける計算を用いて、機械学習による逆問題解析の研究を行った。実際の臨床では、あらかじめシミュレーションのデータベースを作成し、光計測結果との比較から適切な生体パラメータを抽出する事を想定している。その際のシミュレーションと計測を繋ぐのが機械学習による判定である。ここではシミュレーション結果に人工的なノイズを付加し、教師データとした。機械学習は



TensorFlow (Google)を用いている。図の緑丸は教師データとして考えた吸収体、赤丸がテストの際の吸収体位置、青四角が機械学習による判定結果である。結果として、教師データとして与えていない場所に吸収体を設置しても正確に判定出来る事が分かった。その正解率は95%以上に達している。これらの結果は *Medical Physics* 誌に現在投稿している (Takamizu, Umemura, Yajima, Abe, Hoshi, 2021)。

3. 学際共同利用が果たした役割と意義

本研究の輻射輸送計算は空間3次元、方向2次元、時間1次元の6次元位相空間上の分布関数を精度良く求める事に相当する。そのため、膨大な計算量と計算メモリが必要となる。今回、このような計算は Oakforest-PACS を使った大規模並列計算によって実現する事が出来た。また、現在開発中の TRINITY コード GPU 版では、Cygnus による GPU を用いたテスト計算が必要不可欠である。

4. 今後の展望

これまでの計算で、ファントムなどの理想的な物質における数値実験には成功した。今後は甲状腺や脳の生体データを用いて計算を進めて行く。甲状腺は太い動脈や、脊髄、気道が複雑に分布しており、光学特性（吸収、散乱効率、屈折率）が変化する。それに伴い、輻射輸送計算も各部位の境界における反射、屈折や、散乱時の位相関数の変化を適宜取り入れた計算を実行する必要がある。これらの効果を取り入れて、計算コードを改良し、数値シミュレーションを実行していく予定である。また、輻射輸送計算を膨大なパラメータに対して実行し、大規模なデータベースを作成するためには更なる計算の高速化が必要である。そこで、現在 GPU を用いた計算高速化に取り組んでいる。今後、チューニングを続け GPU 並列計算による高速計算を目指す。同時に、FPGA を用いた計算も視野に入れ、FPGA 化に適した計算部分を調べていく。

5. 成果発表

(1) 学術論文

- a) Fukushima, Hajime; Yajima, Hidenobu; Umemura, Masayuki, “High circular polarization of near-infrared light induced by micron-sized dust grains”, 2020, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 496, 2762-2767
- b) Fukushima, Hajime; Yajima, Hidenobu; Sugimura, Kazuyuki; Hosokawa, Takashi; Omukai, Kazuyuki; Matsumoto, Tomoaki, “Star cluster formation and cloud dispersal by radiative feedback: dependence on metallicity and compactness”, 2020, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 497, 3830-3845
- c) Inoue, Shigeki; Yoshida, Naoki; Yajima, Hidenobu, “The CO universe: modelling CO emission and H₂ abundance in cosmological galaxy formation simulations”, 2020, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 498, 5960-5971
- d) Arata, Shohei; Yajima, Hidenobu; Nagamine, Kentaro; Abe, Makito; Khochfar, Sadegh, “Starbursting [O III] emitters and quiescent [C II] emitters in the reionization era”, 2020, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 498, 5541-5556
- e) Li, Yuexing; Gu, Ming F.; Yajima, Hidenobu; Zhu, Qirong; Maji, Moupiya, “ART²: a 3D parallel multiwavelength radiative transfer code for continuum and atomic and molecular lines”, 2020, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 494, 1919-1935

(2) 学会発表

- a) 矢島 秀伸. “Time-dependent radiative transfer for in-vivo bioimaging”. 12th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (オンライン開催, Oct. 6, 2020).
- b) 矢島秀伸 and 福島肇. “Radiation-hydrodynamic simulations of star clusters in GMCs”. Gravitational wave physics and astronomy: Genesis 4th annual symposium (オンライン, Feb. 22–24, 2021).
- c) 井上茂樹. “あえて銀河を分解しない輝線研究とその理論モデル + (時間があれば) 少し磁場の話”. 国立天文台研究集会「(サブ) ミリ波単一鏡の革新で挑む, 天文学の未解決問題」(オンライン, Mar. 29–31, 2021).
- d) 矢島秀伸. “銀河形成シミュレーションのブレイクスルーと今後の展開”. 第33回理論懇シンポジウム (オンライン, Dec. 23–25, 2020, 招待講演).

- e) 阿左美進也, 安部牧人, and 梅村雅之. “原始ガス雲の進化における Ly α 輻射の水素分子抑制効果について”. 日本天文学会秋季年会 (弘前大学, オンライン開催, Sept. 8–10, 2020).
- f) 阿左美進也, 安部牧人, and 梅村雅之. “1 次元球対称計算を用いた原始ガス雲進化に対する Ly α 輻射 の効果について”. 初代星初代銀河研究会 2020 (東北大学, Online, Nov. 16–18, 2020).
- g) 阿左美進也, 安部牧人, and 梅村雅之. “Ly α 輻射による原始ガス雲中での水素分子形成抑制効果の質量依存性”. 日本天文学会 2021 年春季年会 (オンライン, Mar. 16–19, 2021).
- h) Hajime Fukushima, Hidenobu Yajima, and Masayuki Umemura. “Radiation transfer simulation of circular polarization at the NIR/UV wavelengths”. JpGU-AGU Joint Meeting 2020 (オンライン会議, July 16, 2020).
- i) 福島肇, 矢島秀伸, 杉村和幸, 細川隆史, 大向一行, et al. “星団形成における輻射フィードバックについて”. 日本天文学会秋季年会 (弘前大学, オンライン開催, Sept. 8–10, 2020).
- j) 福島肇 and 矢島秀伸. “輻射流体シミュレーションによる星団形成”. 天体形成研究会 2020 (筑波大学, Online, Nov. 6–7, 2020).
- k) 福島肇 and 矢島秀伸. “モーメント法による輻射流体シミュレーションを用いた低金属量星団形成”. 初代星初代銀河研究会 2020 (東北大学, Online, Nov. 16–18, 2020).
- l) 福島肇 and 矢島秀伸. “星団形成における輻射フィードバックについて”. 分子雲から原始星誕生までを追う 新時代の星形成モデル構築に向けて (オンライン開催, Dec. 1–3, 2020).
- m) 福島肇 and 矢島秀伸. “星団形成における輻射フィードバック”. 第 33 回 理論懇シンポジウム (オンライン, Dec. 23–25, 2020).
- n) 福島肇 and 矢島秀伸. “輻射流体シミュレーションによる星団形成に関する研究”. CfCA ユーザーミーティング (オンライン, Jan. 19–20, 2021).
- o) 福島肇 and 矢島秀伸. “輻射流体シミュレーションによる星団形成に関する研究”. CfCA ユーザーズミーティング (オンライン, Jan. 19–20, 2021).
- p) 福島肇 and 矢島秀伸. “モーメント法を用いた輻射流体シミュレーションによる星団形成の解明”. 日本天文学会 2021 年春季年会 (オンライン, Mar. 16–19, 2021).
- q) 尾形絵梨花, 大須賀健, and 矢島秀伸. “Super-Eddington 天体に対する dusty-gas の Hoyle-Lyttleton 降着過程”. 天体形成研究会 2020 (筑波大学, Online, Nov. 6–7, 2020).
- r) 武者野拓也, 大須賀健, 矢島秀伸, and 小川拓未. “Ly α 光子の輻射圧を考慮したガス降着シミュレーションに向けて”. 第 33 回理論懇シンポジウム (オンライン, Dec. 23–25, 2020).

- s) 尾形絵梨花, 大須賀健, and 矢島秀伸. “dusty-gas 中で浮遊するブラックホールの成長過程の解明に向けて”. 「富岳で加速する素粒子・原子核・宇宙・惑星」シンポジウム (オンライン, Jan. 28–29, 2021).
- t) 尾形絵梨花, 大須賀健, and 矢島秀伸. “Super-Eddington 天体に対する dusty-gas の Hoyle-Lyttleton 降着: 角度依存性と定常構造”. 日本天文学会 2021 年春季年会 (オンライン, Mar. 16–19, 2021).
- u) 尾形絵梨花, 大須賀健, and 矢島秀伸. “Super-Eddington 天体に対する dusty-gas の Hoyle-Lyttleton 降着過程”. 第 33 回理論懇シンポジウム (オンライン, Dec. 23–25, 2020).
- v) 井上茂樹 and 矢島秀伸. “Modelling line emission of galaxies: Connecting cosmological simulations with ALMA”. ALMA Grant Fellow Symposium 2020 (オンライン開催, Dec. 8–15, 2020).
- w) 井上茂樹, 松尾宏, 吉田直紀, 矢島秀伸, and 森脇可奈. “高赤方偏移銀河の [OIII] 輝線比で探るブラックホールによる星形成抑止効果”. ALMA 高周波バンドを用いた星形成研究を考える 2021 (オンライン, Mar. 2, 2021).
- x) 井上茂樹, 松尾宏, 吉田直紀, 矢島秀伸, and 森脇可奈. “[OIII] 輝線比によるブラックホール理論モデルへの制限”. 日本天文学会 2021 年春季年会 (オンライン, Mar. 16–19, 2021).

(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	○	24300	0
Oakforest-PACS	○	192000	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。			