

輻射輸送計算と機械学習の融合で拓く生体光イメージング

Development of in-vivo optical tomography by combining radiative transfer simulations and machine learning

矢島 秀伸

筑波大学 計算科学研究センター

1. 研究目的

健康的な社会を構築していく上で、安全、安心な早期の病気診断技術は必要不可欠である。これまで、X線 CT や MRI などの様々な方法によって、生体診断が行われてきた。しかしながら、これらの医療診断には被曝や造影剤のリスクが常に伴っている。我々は、近赤外線による生体光イメージングに着目し、数値シミュレーションによる研究を行った。生体光イメージングは、波長約 700-1000 ナノメートル程度の近赤外線パルスを照射し、多重散乱を経て検出された光を用いる診断法である。非侵襲であり、健康に対するリスクを伴わないことから、安心安全な次世代の医療診断技術として期待されている。しかしながら、その診断のためには、生体内で散乱を伴いながら伝播する光のモデリングが必須である。本プロジェクトでは、大規模並列計算により、生体光イメージングに必要な光輸送モデルの構築を行う事を目指している。また、理論モデルと計測データをもとに診断を下すための機械学習を用いた逆問題解析についても研究を行う。

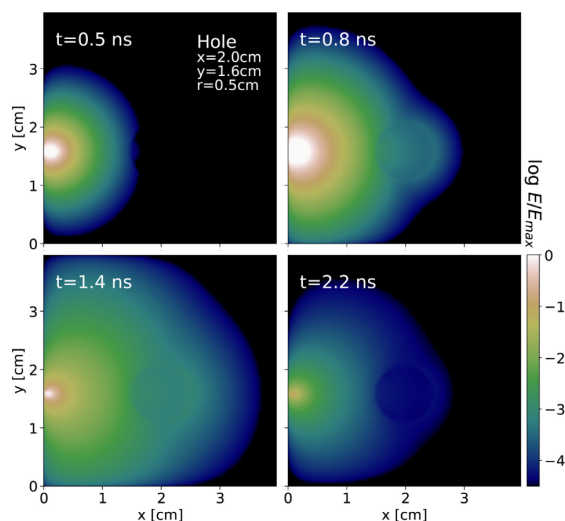
2. 研究成果の内容

当該年度の成果をまとめると、(1)輻射輸送計算コード TRINITY の開発、(2) Wavelet 法を用いた輻射輸送計算コードの開発、(3) 機械学習モデルの作成、の 3 項目である。以下で詳細に説明する。

(1) 輻射輸送計算コード TRINITY

の開発

Ray-tracing 法に基づいた輻射輸送計算コード TRINITY の開発に成功した。TRINITY は MPI 並列と OpenMP による並列を組み合わせた、大規模並列計算コードである。Oakforest-PACS による 1000 コア以上の並列計算によって、1 辺が 100 グリッド以上の計算が可能とな



った。これにより、生体を 1mm 程度の分解能で計算が可能になった。図は生体模擬物質ファントムにおける輻射輸送計算結果である。色は光子密度を示している。気道を想定した空気層を中心に置いて計算を行った。図にあるように、空気層で光が早く伝播し、境界での屈折・反射を取り入れた計算に成功した。このような効果は、従来の拡散近似を用いた計算では不可能であったため、本研究の計算コードにより、初めて複雑な生体を現実的に取り扱えるようになったと言える。これらの結果は査読付き雑誌 JSQRT で既に出版済みである。

(2) Wavelet 法を用いた輻射輸送計算コード開発

Wavelet 法は各場所での輻射の非等方性を基に、適宜角度分解能を自動的に調整する手法である。生体内は非等方性が強い体表面付近、散乱により等方に近い深部が考えられる。本プロジェクトでは Wavelet 法を取り入れた輻射輸送計算によって、計算精度を落とさず、計算を高速化する事が可能となった。また、このコードは Cygnus を用いて GPU 版も同時に開発を行った。

(3) 機械学習モデルの作成

LSTM 法を用いて、シミュレーションデータを教師データとした機械学習モデルを作成した。まずは 2 次元データに対して教師データを作成し、さまざまな場所、サイズに対応する機械学習モデルを作成する事が出来た。その後、3 次元での機械学習モデルも作成し、高い正解率を得るための光照射位置、検出器の位置などについて明らかにした。

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、ファントム実験、機械学習用の教師データ作成をスムーズに実行する事が可能であった。加えて、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。GPU 版の輻射輸送計算コードも完成し、1CPU に対して 1GPU で 5 倍以上の加速に成功している。これにより、機械学習に必要となる大量のパラメータサーベイが可能になった。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

今後は開発した輻射輸送計算コード、機械学習作成コードをベースにして、ヒト頸部、ヒト頭部をターゲットにした研究に取り組む予定である。そして、癌などの異常部位が存在する場合に、どのような大きさの時にどれくらいの正解率で判定出来るかを定量的に調べて行く。また、偏光現象や、光と細胞の相互作用について、第一原理的な計算を行う。それによって、散乱の位相関数、偏光の変化率について導出する。

5. 成果発表

- (1) 学術論文 (著者名, タイトル, 雑誌名, volume, page, 年の順に記載)
 - a) Yajima, H., Abe, M., Umemura, M., Takamizu, Y., Hoshi, Y., “TRINITY: a three-dimensional radiative transfer code for in-vivo bioimaging”, *Journal of Spectroscopy and Quantitative Radiative Transfer*, 277, 107948 (2022)
 - b) Yajima, H., et al., “FOREVER22: galaxy formation in protocluster regions”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 509, 4037 (2022)
 - c) Abe, M., Yajima, H., Khochfar, S., Dalla Vecchia, C., Omukai, K., “Formation of the first galaxies in the aftermath of the first supernovae”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 508, 3226 (2021)
 - d) Fukushima, H., Yajima, H., “Radiation hydrodynamics simulations of massive star cluster formation in giant molecular clouds”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 506, 5512 (2021)
 - e) Ogata, E., Ohsuga, K., Yajima, H., “Hoyle-Lyttleton accretion on to black hole accretion disks with super-Eddington luminosity for dusty gas”, *Publication of the Astronomical Society Japan*, 73, 929 (2021)
 - f) Inoue, S., Takagi, T., Miyazaki, Cooper, E., Egusa, F., Yajima, H., “Instability analysis for spiral arms of local galaxies: M51, NGC 3627, and NGC 628”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 506, 84 (2021)
 - g) Kojima, T., et al. (incl. Umemura, M.), “EMPRESS. II. Highly Fe-enriched Metal-poor Galaxies with 1.0 (Fe/O)_⊙ and 0.02 (O/H)_⊙: Possible Traces of Supermassive (>300 M_⊙) Stars in Early Galaxies”, *The Astrophysical Journal*, 913, 22 (2021)
 - h) Sakurai, Y., Ishihara, T., Furuya, H., Umemura, M., “Effects of the Compressibility of Turbulence on the Dust Coagulation Process in Protoplanetary Disks”, *The Astrophysical Journal*, 911, 140 (2021)
- (2) 学会発表 (発表者, 講演タイトル, 会議名, 場所, 日時)
 - a) H. Yajima. “Cosmological simulations of massive galaxies in protocluster regions”. Sino-French Workshop on Confronting Simulations with Observations of High-redshift Galaxies and (Proto)Clusters (Nanjing University (hybrid), Nov. 14–16, 2021). 招待講演

- b) Hajime Fukushima and Hidenobu Yajima. “Conditions for massive star cluster formation in lowmetallicity environments”. Gravitational wave physics and astronomy: Genesis, Area workshop 2022 Winter (Online, Jan. 24, 2022).
- c) Hidenobu Yajima. “Radiative transfer simulations and machine learning for in-vivo bioimaging”. 13th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (Online, Oct. 8, 2021).
- d) 福島肇. “星団形成における輻射フィードバック”. 様々なスケールの衝突流による誘発的星形成～大質量星から超大質量星団まで～ (オンライン, July 7–9, 2021). 招待講演
- e) 福島肇 and 矢島秀伸. “低金属量星団形成”. 初代星・初代銀河研究会 2021 (東北大学 (東京分室), 京都大学 (東京分室), オンライン, Feb. 16–18, 2022). 招待講演
- f) 梅村雅之. “SMBH 形成に関する理論的課題：埋もれた AGN の役割について”. 第 5 回 FORCE 研究会「埋もれた AGN の宇宙論的進化」(Online, Dec. 3, 2021).
- g) 矢島秀伸. “初期宇宙の銀河形成：フィードバックと金属分布について”. 金属欠乏宇宙 2021 (Online, Sept. 27–30, 2021) 招待講演
- h) 矢島秀伸. “初期宇宙の銀河の活発な星形成：その内的要因と外内的要因について”. 銀河星形成研究会 2021 (Galactic Star Formation 2021) (Online, Dec. 2, 2021). 招待講演
- i) 安部牧人, 矢島秀伸, 梅村雅之, 高水裕一, and 星詳子. “生体光イメージングに向けた大規模輻射輸送数値計算コードの開発: 球面 wavelet 変換を用いた高速化”. 日本光学会年次学術講演会 2021 (オリンピックセンター, ハイブリッド開催, Oct. 26–29, 2021).

- j) 福島肇, 矢島秀伸, and 梅村雅之. “Circular polarization induced by aligned dust grains at UV wavelength”. JpGU-AGU Joint Meeting 2020 (オンライン, May 30–June 6, 2021).
- k) 福島肇. “Radiation hydrodynamics simulations of young massive star cluster formation”. 新学術領域重力波物理学・天文学: 創世記 A03 班夏の会合 (オンライン, July 19, 2021–July 20, 2020).
- l) 福島肇. “低金属量環境における大質量星団形成”. 金属欠乏宇宙 2021 (オンライン, Sept. 27–30, 2021).
- m) 福島肇. “輻射流体シミュレーションによる大質量星団形成”. 銀河星形成研究会 2021 (Galactic Star Formation 2021) (Online, Dec. 2, 2021).
- n) 福島肇. “星団形成における輻射フィードバックの金属量依存性”. 低金属量環境下における星・惑星形成(Online, Dec. 6–8, 2021).
- o) 福島肇, 井上茂樹, and 矢島秀伸. “低金属量銀河円盤シミュレーション”. 第 34 回理論懇シンポジウム(Online, Dec. 22–24, 2021).
- p) 福島肇 and 矢島秀伸. “星団形成における EUV/FUV 輻射フィードバック”. 日本天文学会秋季年会 (オンライン, Sept. 13–15, 2021).
- q) 福島肇 and 矢島秀伸. “星団形成における初期密度分布の影響”. 2021(令和 3) 年度国立天文台 CfCA ユーザーズミーティング (Online, Jan. 18–19, 2022).
- r) 福島肇 and 矢島秀伸. “Cloud-in-cloud simulations of star cluster formation”. 日本天文学会 2022 年春季年会 (オンライン, Mar. 2–5, 2022)
- s) 梅村雅之. “多重 AGN の理論的意義”. 多重 AGN サイエンスワークショップ (オンライン, July 30, 2021)
- t) 矢島秀伸. “原始銀河団領域におけるマルチスケール多重 AGN”. 多重 AGN サイエンスワークショップ (オンライン, July 30, 2021).

- u) 尾形絵梨花, 大須賀健, 矢島秀伸, and 福島肇. “Super-Eddington 天体に対する dusty-gas での Hoyle-Lyttleton 降着”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021).
- v) 武者野拓也, 小川拓未, 大須賀健, 矢島秀伸, and 大向一行. “超臨界ブラックホール降着流におけるライマンアルファ輝線の輻射力の計算”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021).
- w) 尾形絵梨花, 大須賀健, 矢島秀伸, and 福島肇. “Super-Eddington 天体に対する dusty-gas の Hoyle-Lyttleton 降着: 円盤面の傾きによる非軸対称性について”. 日本天文学会秋季年会 (オンライン, Sept. 13–15, 2021).
- x) 武者野拓也, 小川拓未, 大須賀健, 矢島秀伸, and 大向一行. “超臨界ブラックホール降着流におけるライマンアルファ輝線の輻射力の計算”. 日本天文学会秋季年会 (オンライン, Sept. 13–15, 2021).
- y) 尾形絵梨花, 大須賀健, 福島肇, and 矢島秀伸. “Dusty-gas 内を浮遊するブラックホール降着円盤への Bondi-Hoyle-Lyttleton 降着過程”. ブラックホールジェット・降着円盤・円盤風研究会 2022 (Online, Jan. 24–25, 2022).
- z) 高水裕一, 梅村雅之, 矢島秀伸, 安部牧人, and 星詳子. “深層学習によるガン細胞位置と形状の判定手法”. 日本光学会年次学術講演会 2021 (オリンピックセンター, ハイブリッド開催, Oct. 26–29, 2021).
- aa) 阿左美進也 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”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021).
- bb) 古賀実 and 梅村雅之. “ライマン α 光の円偏光生成とホモキラリティ問題”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021).
- cc) 岩本歩夢 and 梅村雅之. “原始惑星系円盤における乱流とダスト成長”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021).
- dd) 新井聡一, 矢島秀伸, and 福島肇. “スターバースト銀河における星形成について”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021).

- ee) 秋葉健志 and 矢島秀伸. “21cm signal simulation during the EoR”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021).
- ff) 佐藤大樹 and 矢島秀伸. “光音響波伝搬シミュレーションと機械学習によるヒト頭部の血管分布解析”. 天体形成研究会 2021 (Online, Oct. 22–23, 2021).
- gg) 矢島秀伸, 安部牧人, 梅村雅之, 高水裕一, and 星詳子. “生体光イメージングに向けた大規模輻射輸送数値計算コードの開発”. 日本光学会年次学術講演会 2021 (オリンピックセンター, ハイブリッド開催,).
- hh) 矢島秀伸. “高精度輻射輸送計算と機械学習との融合による近赤外光トモグラフィ-現状とこれから-”. 計算メディカルサイエンスワークショップ (オンライン, Sept. 6, 2021).

(3) その他

- a) 高水裕一. 宇宙人と出会う前に読む本. 講談社ブルーバックス, July 2021.
- b) 高水裕一. 物理学者、SF 映画にハマる. 光文社新書, Oct. 2021.

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	○	14400	0
Oakforest-PACS	○	239360	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。			