

令和 3 年 6 月 14 日現在

機関番号：82118

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2017～2020

課題番号：17H01084

研究課題名(和文)放射線シミュレータの革新

研究課題名(英文)A new radiation simulation software toolkit, MPEXS

研究代表者

佐々木 節 (SASAKI, TAKASHI)

大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構・計算科学センター・教授

研究者番号：50259983

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 33,400,000円

研究成果の概要(和文)：既存の放射線シミュレータは、放射線を扱う全ての分野に於いて、放射線の影響を定量的に評価するために用いられているが、実行時間が長大なことが問題である。計算時間の大幅な短縮を図るためにMPEXSと名付けたGPUを用いるソフトウェアツールキットの開発を継続して行ってきた。本研究においては、がんの陽子線治療のシミュレーションをMPEXSを用いて実装し、CPU200コア分以上の性能をGPU1基で得ることが出来た。放射線と細胞の影響を見積もるためにMPEXS-DNAを開発し、CPU9000コア相当の性能をGPU1基で実現することが出来、より複雑な生体系に対する放射線の影響を見積もることが可能となった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

放射線シミュレーションを超並列化し、高速化する試みは過去に何度も試されてきたが、実用化されたものはない。MPEXSは、GPUを用いて超並列計算を行うため、安価に超並列計算に必要な計算機環境の導入が行える。セキュリティなどの理由でクラウド環境が利用できず、オンプレミスで高速に放射線シミュレーションを利用する必要がある病院での利用が期待されており、実用的に利用される最初の超並列放射線シミュレータとなる。一方、GPUスパコンを用いることで、これまで不可能であった放射線と生体の影響に関する精緻な定量的な議論が行えるようになり、新しい科学の分野の開拓が期待される。

研究成果の概要(英文)：Radiation simulation is widely used to quantitatively evaluate the effects of radiation in all fields dealing with radiation. However, all of the existing code systems have a problem of the long execution time. We have started to develop a software toolkit named MPEXS to perform massively parallel calculations on GPUs, thereby significantly reducing the computation time. In this research, we have extended MPEXS to add new functionalities necessary for estimating nuclear reactions, neutron reactions, and the effects of radiation on cells making the software application to a wider range of cases.

As the results, the performance equivalent to more than 200 cores of CPU was obtained with a single GPU for proton therapy simulation already. MPEXS-DNA, a CUDA version of Geant4-DNA, achieved the performance equivalent to 9000 CPU cores in calculation time with a single GPU. MPEXS-DNA is expected to be applied as a tool for estimating the effects of radiation on more complex biological systems.

研究分野：計算科学

キーワード：放射線シミュレーション 超並列 GPGPU

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

モンテカルロ法を採用した放射線シミュレータは、放射線を扱うすべての分野で放射線の物質に対する影響を定量的に見積もるために利用されている。放射線と物質の相互作用は、理論的、実験的双方の研究により詳しく理解されており、シミュレーションの対象となる粒子や物質に依存する物理法則に則った確率過程として扱われる。粒子を物質中でステップという単位で移動させ、そのステップで起きた物理現象による物質や粒子に対する変化を記録し、次のステップに移る。各ステップ長は、何れかの物理過程が起きるまでの距離か、物質が変わるまでの距離の短い方を採用する。これを粒子が消滅するか、興味ある領域から出るまで繰り返す必要がある。電子が一回の散乱で失うエネルギーは、30eV ほどであり、30MeV の電子であれば、静止するまでに 100 万回散乱される。発生した二次粒子も同様に追跡しなければならず、膨大な計算が必要となる。モンテカルロ法のために最初のプログラム内蔵式電子計算機が 1940 年代に開発され、電子計算機の進歩に合わせ、より精緻にシミュレーションが行えるようになり、自然現象を計算機上で精度よく再現することが可能となったという歴史もある。

放射線は、物理学上は様々な粒子の総称であり、光子 (ガンマ線、X 線)、電子 (ベータ線)、中性子線、陽子線、イオン線 (アルファ線、炭素線など) が主として利用されている。物理学的な性質から分類すると、光子と電子は電磁相互作用を生じ、そのほかの粒子は原子核相互作用に加え、荷電粒子は電磁相互作用も生じる。電荷をもたない中性子も、相互作用の結果荷電粒子を二次粒子として発生させる。そのため、電磁相互作用が放射線を扱うためには、基本的に必要となる。放射線シミュレータは、古くから開発され、複数のコード体系の開発が継続的に続けられている。以下に世界的に広く利用されているコード体系を示す。

名称	開発主体	扱う物理現象	言語	ライセンス	開発開始年	論文数
Geant4	KEK, SLAC, CERN、国際協力	電磁相互作用、原子核相互作用	C++	オープンソース	1994	6,919
PHITS	RIST, JAEA	電磁相互作用、原子核相互作用	FORTRAN	契約による	2003	645
FLUKA	INFN	電磁相互作用、原子核相互作用	FORTRAN	ソースコード非公開	1962	2,159
EGS	KEK, SLAC	電磁相互作用	FORTRAN	オープンソース	1985	3,688
MCNP	Los Alamos	原子核相互作用、電磁相互作用	FORTRAN	米国外非公開	1977	6,739

論文数は、Scopus データベースを 2021 年 6 月に論文アブストラクトに対し名称で検索した結果である。どのコード体系に関しても、MPI などを用いた粒度の粗い並列計算は実現されている。これらは、精度よく放射線の物質中の振る舞いを再現することが可能であり、それぞれ様々な目的で利用されている。計算の実行時間は、同等のシミュレーションを行った場合には、大差がないことも確かめられている。本研究に参加する研究者の多くは、このうち Geant4 の開発に極初期から参加し、現在も開発と保守を続けており、その経験が本研究に生かされている。

これら既存のコード体系は、開発開始が古いこともあり、現代の他コアの計算機をより有効に利用するための粒度の細かい並列化に対応していない。現代の様々な課題に適用するためには、計算時間の短縮が大きな問題となっている。何れのコードも過去に HPC 計算機の環境に移植され計算時間の短縮を図ったことがあったが、HPC 計算機のアーキテクチャの寿命は、これらのコード体系よりも遥かに短く、異なるアーキテクチャ毎に対応が必要で、定着することはなかった。CUDA が 2007 年に提供が開始され、GPU 上で超並列計算を行う GPGPU の技術が進歩し、さらに長期的な提供が約束されると、これら既存のコード体系の移植が様々なグループの手で試みられたが、大きな成功を収めることはなかった。

我々は、Geant4 開発の経験を全面的に生かして、対象となる物体の構造定義と粒子追跡のアルゴリズムを研究と開発を根底から行い、MPEXS と名付けた初の GPU native な超並列放射線シミュレータの開発を新たに行った。Xeon Phi などと比較し、同じ計算時間を実現するために必要な計算機調達のコストを圧倒的に下げられることも分かった。(基盤研究(A)「次世代放射線シ

ミュレーション基盤の開発」2013 – 2016)

MPEXS に対し、改良を加え、計算時間のさらなる短縮を図るとともに、様々な応用事例に対応するために、物理過程の拡大が期待されていた。

2. 研究の目的

本研究では、さらに原子核相互作用と中性子相互作用を扱えるよう、MPEXS を拡張し、適用範囲の拡大を行う。原子核相互作用の一部は理論的に計算できずデータを用いたモデル計算が必要となり、電磁相互作用に比べて、メモリの要求量が多い。GPU で利用可能なメモリ量には制限が強いので、同時実行性を向上させるための研究と開発を実施する。並行して、計算アルゴリズムの改善のために必要な研究を実施し、計算時間の更なる改善と適用範囲の拡大を行うことが、主たる研究目的である。

フランスの CENBG(Centre d'Etudes Nucléaires de Bordeaux-Gradignan)が中心となって開発を行っている Geant4-DNA(<http://geant4-dna.org>)プロジェクトにも参加し、Geant4 を基に細胞レベルにおけるシミュレータの開発を行ってきた。計算時間の短縮が大きな課題となっているので、この全機能を CUDA で実現し、MPEXS の拡張である MPEXS-DNA として実現した。Geant4-DNA の拡張に追随し、MPEXS-DNA の開発を進め、より実用的な課題への挑戦を目指す。

中性子や陽子を用いたがん治療のシミュレーション時間の短縮が大きな課題となっており、今後のがん治療の高度化や、新たな装置の開発のために MPEXS を用いることが出来るよう、必要な開発を実施する。病院の院内システムは、インターネット接続されておらず、オンプレミスでの環境の構築が求められている。実社会への適用も目標の一つに研究を実施する。

3. 研究の方法

可能な限り汎用的な放射線シミュレータの新体系を樹立することを目指し、各分野の専門家の意見を取り入れて、ソフトウェアの設計と実装を実施する。本研究の主目標としては、陽子線治療および細胞レベルにおける放射線の影響の見積もりに必要なシミュレーションを行うために必要な研究と開発とし、より高速にかつ Geant4 と同程度の精度で計算が行えるよう MPEXS の実装を行う。

水中に電子や光子を入射した際の線量分布が最も基本的な量として放射線シミュレータにより再現されなければならない量であり、この計算時間が遅いとほかの計算も遅くなる。水中での放射線の振る舞いを検証し、計算時間の向上を目指し、MPEXS の改善を行う。

陽子線治療に関する要求要件は、本研究に参加している陽子線治療施設の医学物理士が解析を行い、将来的に病院で利用するために必要な機能、精度、計算時間を調査し、開発の目標とした。病院では、セキュリティの理由で、院内システムがインターネットから隔離されており、九ラウンド等の外部計算資源を利用することが制限されている。GPU を用いて、院内において、必要な計算処理が完結する必要がある。原子核相互作用を扱えるよう、MPEXS の拡張を行う。Geant4 から、必要なモデルとデータを抽出し、新たに CUDA 言語で実装を行う。

MPEXS-DNA に関しては、Geant4-DNA の開発と同期し、必要な機能の拡充と計算精度の向上を行う。フランス CENBG のグループとも緊密に連携しながら、開発を推し進めた。

GPU の新モデルがほぼ毎年リリースされるので、新型の GPU をより効率的に利用するために、最適化と調整を実施し、性能の評価を行う。

4. 研究成果

水中における電子と陽子による線量分布を MPEXS と Geant4 の両方で計算し、計算時間と計算精度に関する比較と検証を実施した。図 1 に、ベンチマークテストに用いた体系を示す。

一辺が 10cm の水のボリウムに対し 20MeV の電子または 6MV および 18MV 光子(X 線)を 100cm 離れた点から照射した際の深部線量分布と計算時間を Geant4 と MPEXS で比較した結果を図 2 と表 1 に示す。水のボリウムは、5mm, 5mm, 2mm のボクセルに分割し、それぞれのボクセルに対する線量の寄与を足し合わせることで、深度線量分布を得る。Geant4 は、Intel Xeon Gold 6132 を搭載した PC 上で実行した。このベンチマークテストに用いた GPU は、NVIDIA RTX3090 である。計算結果は、誤差の範囲で一致しており、GPU 一基で実行した MPEXS の計算時間は、Intel Xeon の 700 コア程度を用いた場合と同等という結果になった。

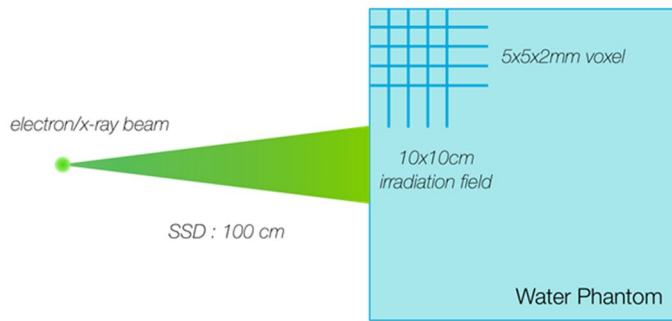


図 2 ベンチマークテストの体系

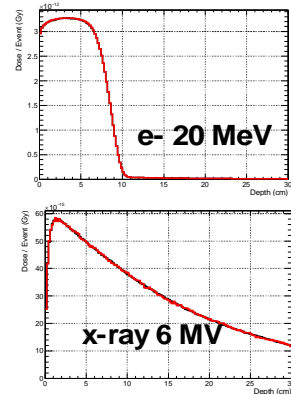


図 1 深部線量分布

Primary Particles	Geant4 10.2.3	MPEXS	Speedup (MPEXS/G4)
Electron 20 MeV	2.2276	1419.98	x637.4
X-ray 6 MV	5.4607	3826.94	x700.8
X-ray 18 MV	4.7363	3218.08	x679.5

表 1 計算時間の比較

名古屋陽子線治療センターにおける陽子線治療のシミュレーションを行うために、同様に水中に陽子を照射する基本的なベンチマークテストを実施した。

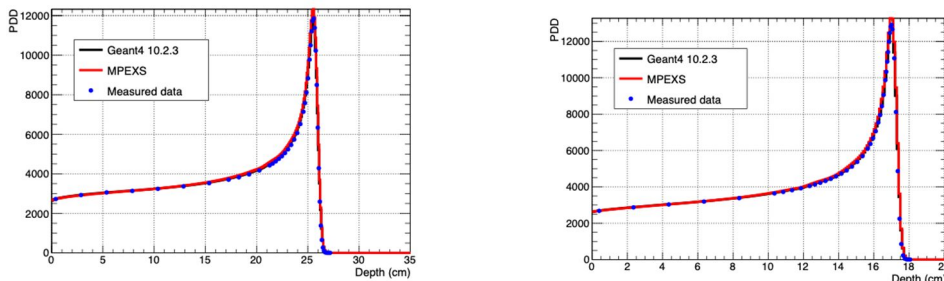


図 3 陽子 200MeV, 150MeV

計算時間は誤差の範囲で一致し、計算時間は GPU1 基で、Xeon CPUU の 230 コア分の性能を得られた。中性子についても、必要な物理過程を開発し、MPEXS で扱えるようになった。

MPEXS-DNA に関して、G-value と呼ばれる基本的な量を計算し、計算結果と計算時間の比較を Genat4-DNA に対して行った。G-value は、物質に対する放射線の作用（放射線分解）で生じる化学種の収率を表し、100eV の吸収エネルギーで生成または消滅する粒子数と定義される。計算結果は、誤差の範囲内で一致しており、計算速度は、GPU1 基で、Xeon CPUU の 9,300 コア分の性能を得られた。

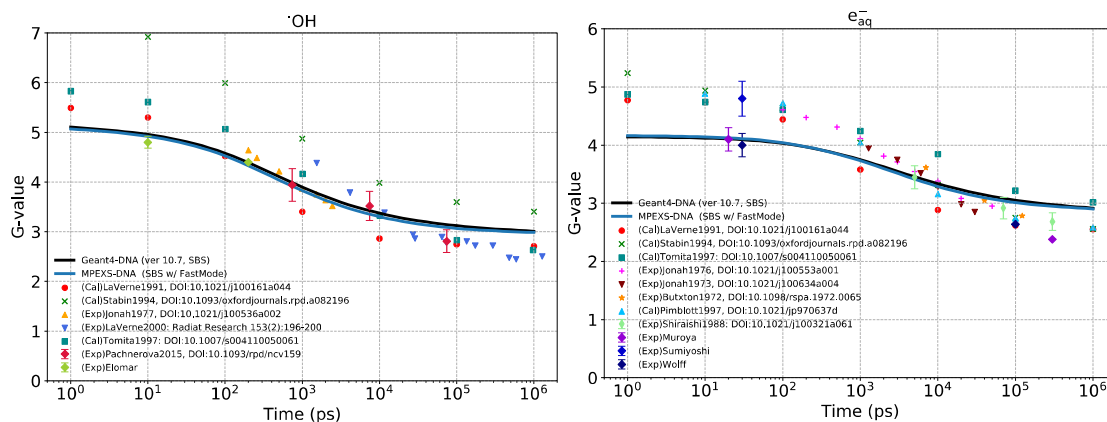


図 5 G-Value

	Geant4-DNA 10.7	MPEXS-DNA
Throughput (#histories / min.)	4.23	39432.6
Speedup Factor (MPEXS / Geant4)	-	x9,322

この結果は、Medical Physics 誌に発表され (<https://doi.org/10.1002/mp.13370>)、当該論文は Medical Physics 誌の Top Download Award 2018-2019 を得た。

既存の放射線シミュレータを CUDA 環境に移植するのではなく、新たに CUDA 言語で GPU native な放射線シミュレーションのための新たなコード体系である MPEXS の開発を行った。本研究において、MPEXS の圧倒的な計算性能が十分に示されており、さらに研究開発を行うことで、適用範囲を広げ、さらに計算時間を短縮できることが期待されている。実用化に向け、さらに研究にまい進したいと考えている。放射線生物学の新たな領域を切り拓くことも期待されており、広範な社会的ニーズに答えることが期待される。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 2件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Okada Shogo, Murakami Koichi, Incerti Sebastien, Amako Katsuya, Sasaki Takashi	4. 巻 46
2. 論文標題 MPEXS-DNA, a new GPU-based Monte Carlo simulator for track structures and radiation chemistry at subcellular scale	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Medical Physics	6. 最初と最後の頁 1483 ~ 1500
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/mp.13370	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 佐々木節、村上晃一他	4. 巻 43-2
2. 論文標題 放射線シミュレーションのためのツールキットGeant4	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 放射線	6. 最初と最後の頁 59-68
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計12件（うち招待講演 3件/うち国際学会 3件）

1. 発表者名 大町千尋
2. 発表標題 陽子線治療におけるGPUを用いたモンテカルロシミュレーションの臨床利用
3. 学会等名 第117回日本医学物理学学会学術大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 岡田勝吾
2. 発表標題 A GPU-based Monte Carlo simulator "MPEXS" and its extension (keynote)
3. 学会等名 The Third Geant4 International User Conference at the Physics-Medicine-Biology frontier (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 岡田勝吾
2. 発表標題 Geant4-DNAとその応用
3. 学会等名 医療放射線技術研究会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 歳藤利行
2. 発表標題 Design and expected performance of GPU-based full Monte Carlo dose calculation system for proton therapy
3. 学会等名 World Congress on Medical Physics and Biomedical Engineering 2018 (IUPESM2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 N. Henderson, S. Okada, et al.
2. 発表標題 Fast GPU Monte Carlo Simulation for Radiotherapy, DNA Ionization and Beyond
3. 学会等名 GPU Technology Conference Silicon Valley 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 S. Okada, et al.
2. 発表標題 放射線シミュレータ「MPEXS」のPascalアーキテクチャ上での性能
3. 学会等名 GPU Technology Conference Japan 2017
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 S. Okada, et al.
2. 発表標題 GPGPUによる細胞レベルの放射線シミュレータ「MPEXS-DNA」の開発
3. 学会等名 第65回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 C. Omachi, et al.
2. 発表標題 Clinical uses of Geant4 and a new GPU Monte Carlo simulation system in proton therapy
3. 学会等名 Particle Therapy Co-operative Group (PTCOG) 57th Annual Conference, Cincinnati, US, 2018 May
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 S. Okada et al.
2. 発表標題 Optimization of GPU-based Monte Carlo simulator for radiation physics at DNA scale
3. 学会等名 The 37th JSST Annual International Conference on Simulation Technology, Muroran Institute of Technology, 2018 September
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 S. Okada et al.
2. 発表標題 Quantitative estimation of biological effects after irradiation by MPEXS-DNA
3. 学会等名 4th Geant4 School & Monte Carlo Workshop for Radiotherapy, Imaging and Radiation Protection 2-8 December, 2019, Wollongong, Australia
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Chen et al.
2. 発表標題 GPU acceleration of Monte Carlo dose calculation for proton therapy
3. 学会等名 4th Geant4 School & Monte Carlo Workshop for Radiotherapy, Imaging and Radiation Protection 2-8 December, 2019, Wollongong, Australia
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 岡田勝吾
2. 発表標題 Geant4-DNAの紹介とその応用研究
3. 学会等名 応用物理学会放射線分科会・医療放射線技術研究会「医療分野におけるモンテカルロシミュレーションの現状と利用」(招待講演)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

MPEXS Project https://wiki.kek.jp/display/mpexs/MPEXS+Project
--

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	村上 晃一 (Murakami Koichi) (10353369)	大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構・計算科学センター・准教授 (82118)	

6. 研究組織 (つづき)

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	藏重 久弥 (Kurashige Hisaya) (20205181)	神戸大学・先端融合研究環・教授 (14501)	
研究分担者	山下 智弘 (Yamashita Tomohiro) (20567086)	神戸大学・医学研究科・医学研究員 (14501)	
研究分担者	大町 千尋 (Omachi Chihiro) (20588967)	名古屋市立大学・医薬学総合研究院(医学)・研究員 (23903)	
研究分担者	阿蘇 司 (Aso Tsukasa) (30290737)	富山高等専門学校・その他部局等・教授 (53203)	
研究分担者	歳藤 利行 (Toshito Toshiyuki) (30377965)	名古屋市立大学・医薬学総合研究院(医学)・研究員 (23903)	
研究分担者	岡田 勝吾 (Okada Shogo) (40731732)	大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構・計算科学センター・助教 (82118)	
研究分担者	田中 覚 (Tanaka Satoshi) (60251980)	立命館大学・情報理工学部・教授 (34315)	
研究分担者	木村 彰徳 (Kimura Akinori) (60373099)	足利大学・工学部・教授 (32201)	

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	小井 辰巳 (Koi Tatsumi) (60831774)	中部大学・工学部・准教授 (33910)	
研究分担者	尾崎 正伸 (Ozaki Masanobu) (90300699)	国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構・宇宙科学研究所・准教授 (82645)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関