様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ２９ 年　 ８ 月 １０ 日現在

機関番号：８２１１８
研究種目：基盤研究(A)（一般）
研究期間：2013～2016
課題番号：２５２４６０４４

研究課題名（和文）次世代放射線シミュレーション基盤の開発

研究課題名（英文）Development of a new generation radiation simulator

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）　　33,500,000円

研究成果の概要（和文）：1994年に開発が開始されたGeant4は、物理学、宇宙、医学、工学など放射線を扱う様々な分野で利用されているが、対象となる問題の複雑化のために、計算性能の改善が要求されれるようになった。Intel XeonおよびXeon Phiを用いるマルチスレッド化を実現し、性能の評価を行った。さらに、NVIDIA社のGPUを用い、超並列版(MPEXS)の放射線シミュレータの開発に挑んだ。K20c GPUでXeon 1コアの200倍以上の性能を得た。Geant4-DNAのCUDA版であるMPEXS-DNAの開発を行い、K40c GPUでXeon 1コアの250倍程度の性能を得た。

研究成果の概要（英文）：Geant4 has been widely used in many fields including physics, medicine, space, engineering and so on. The calculation speed became the key issue to perform more detailed and accurate study. Multi-threaded version of Geant4 was developed for answering such demands. However, the performance was not satisfactory in some areas such as radiotherapy simuation and DNA level simulation. We attmpted further improvements on the performance of MT-Geant4 and evaluated the performance of Xeon Phi in technically and also economilally.
MPEXS was developed based on Geant4 in the CUDA language to be used on NVIDIA GPU. We have achived more than 200 Xeon core equivalent performance on NVIDIA K20c for the case of LINAC treantment simulation. MPEXS-DNA, a CUDA version of Geant4-DNA, has been developed and the performance was almost 250 Xeon core equivalent on K40c. Toward further applications, the development will be contined to include more physics processes such as hadronic interactions.

研究分野：計算科学

キーワード：放射線シミュレーション　GPGPU　超並列

１．研究開始当初の背景

Geant4 は、1994 年から開発が続けられている放射線シミュレーションのためのソフトウエアツールキットである。物理学、宇宙、医学、工学など放射線を扱うほぼすべての分野で利用されており、Thomson Reuters の Web of Science によれば、Geant4 の主論文は 8000 件以上に及ぶ引用数がある。

放射線と物質の相互作用は多岐にわたり複雑なため、細部にわたり精度よく放射線の振る舞いと物質の反応をシミュレーションするためには、長い計算時間を要する例もある。例えば、放射線治療の手法の一つである粒子線治療の場合、20 台程度の CPU サーバを用いても、一人の患者の治療における線量分布を計算するためにおよそ一晩を要している。現状では、検証に用いられているが、計算時間を大幅に短縮しないと、治療計画に利用することが困難な状況となっている。

近年では、放射線の細胞に対する影響を定量的に見積もる必要性が求められており、シミュレーションソフトウエアの開発も進められている。Geant4-DNA と呼ばれる Geant4 を基にしたシミュレータもその一つである。細胞レベルにおいて、化学過程までシミュレーションできるレベルに達しており、生物学過程の開発が進められている。Geant4-DNA を用いたアプリケーションの中には、大規模な計算サーバを用いても、一週間程度計算時間を要するものもあり、計算時間の短縮が今後のこの分野の発展の鍵となっていた。

２．研究の目的

CPU の 1 コアあたりの性能は限界に達しており、以前のように年々著しい性能の向上が見られなくなった。このため、多数のコアを一つの CPU に内蔵し、並列処理を行うことによって、処理能力の向上を目指す方向に転換されている。Intel Xeon プロセッサの場合、1CPU あたり 22 コアを内蔵する物もある。並列処理用に新たに開発された Xeon Phi プロセッサは、72 コアを内蔵している。これらの多コアプロセッサを有効に利用するためには、アプリケーションのマルチスレッド化を行うことが必要となる。スレッド間で、メモリ空間を共有することで、多スレッドを同時に実行した場合の資源の有効利用が可能となる。

また、本来グラフィクス用に開発されたプロセッサを並列処理に利用することも近年一般化した。3000 以上のコアを有するが、コア単体の性能は、CPU に劣り、利用できるメモリ空間にも制限がある。プログラミング言語としては、事実上、CUDA のみのサポートとなっている。きわめて大きなコア数を一つにプロセッサ上に有していることから、アプリケーションを専用に開発すれば、CPU と比較し、計算時間の大幅な短縮が期待できる。本研究では、マルチスレッド化された Geant4 を Xeon Phi 上で実行し、性能の評価を行う。それと並行し、新たに GPU 用のコードを開発し、Xeon Phi と GPU の間で、計算能力の比較と、その経済性に関する考察を行う。

３．研究の方法

Geant4 のマルチスレッド化は既に実現しており、さらなる性能の向上を目指している。Geant4 を用いて開発されたシミュレータを Xeon Phi で実行し、性能の評価を行う。Geant4 のマルチスレッド化を共同で開発した SLAC 国立研究所の浅井慎氏と協力し、マルチスレッド化したアプリケーションの最適化を行う。

GPU 用に新たに CUDA 言語で放射線シミュレーションのためのツールキットの開発を行う。Geant4 開発の経験と知識を生かし、Geant4 と同じデータとアルゴリズムを用い、物理プロセスの実装を行う。Geant4 の開発に関して、コスト大きい要素は、ユーザ支援を除けば、結果の検証である。Geant4 で十分検証されているため、移植作業は難しくない。Geant4 は、C++言語で記述されており、C 言語の方言と言える CUDA 言語との親和性も高い。

CUDA 版の開発は、Stanford 大学 ICME (Institute of Mathematical Engineering)の Margot Gerritsen 教授のグループとの共同研究として実施する。ICME は、NNVIDA 社の CEO である Jensen Huang 氏の寄付によって運営されており、建物には、氏の名前が付けられている。NVIDIA 社とは密接な関係にあり、GPU 用のアプリケーション開発に関しての情報をいち早く得られ、協力を仰げる立場にある。Gerritsen 教授のグループから、Nick Henderson 研究員が共同研究に参加し、同時に多数のスレッドが実行状態になるよう(thread divergence)最適化を行う。多数の粒子を同時に処理するためのアルゴリズムを開発し、data race(データ競合)および race condition(競合状態)を回避するための処方の開発を実施する。

GPU 上におけるシミュレーション結果と CPU で実行した Geant4 を基にしたシミュレーション結果を可能な限り同じ条件で比較できるよう、単純化した例題として、水中における電子及び光子の相互作用をシミュレーションするためのアプリケーションを独立に開発し、両者の性能の比較を行う。Thread divergence の改善を GPU 用アプリケーションに行い、性能の最適化を行う。

細胞レベルにおける放射線の影響を見積もるために Geant4 を拡張した Geant4-DNA を CUDA 言語に移植し、性能の評価を行う。細胞レベルのシミュレーションは、低いエネルギーの多数の粒子を扱う必要があり、非常に長い計算時間を必要としている。Geant4 のアプリケーションとして、実施時間の短縮が強く求められている応用例の一つである。

４．研究成果

マルチスレッド化された Geant4 の効率を改善する努力を重ね、スレッド数に対して必要なメモリの総量を削減することに成功した。図 1 に示すように、バージョンが新しくなるほど、メモリの消費量が抑えられている。

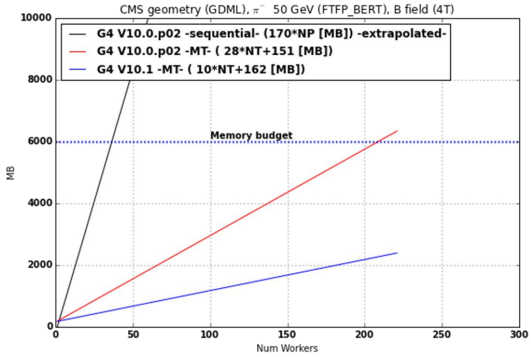


図 1　スレッド数に対するメモリ消費量

Xeon Phi 3120A を 2 式有するシステムでベンチマークテストをした結果を図 3 に示す。Xeon Phi 3120 は、1.1GHz で駆動する 57 コアを有しており、同時に 228 スレッドの実行が可能となっている。このシステムは、2.2GHz で駆動する Intel Xeon E5-2600 プロセッサ一式を有している。このプロセッサは、8 コアを有しており、16 スレッドを同時に実行可能である。双方とも、最大のスレッド数を実行し、性能の比較を行った。図 3 に示されるように、Xeon プロセッサ 1 台と Xeon Phi 3120A 一式は、ほぼ同等の性能を有していることになる。双方の駆動クロックを考慮して

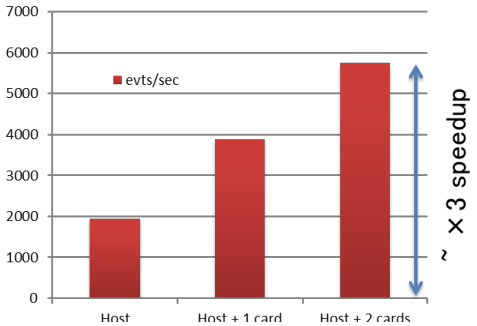


図 3　Xeon と Xeon Phi の性能比較

も、Xeon Phi 性能は期待通りではなかった。Geant4 は、衝突型加速器実験に測定器シミュレーションを第一のアプリケーションとして設計されているため、処理の単位に一回のビーム同士の衝突による事象が単位となっている。このマルチスレッド化のアプローチにおいては、事象単位の並列処理を行っている。事象は統計学的に独立事象であるが、一部の入力データは共有している。Xeon Phi に搭載されているコアの設計は、Xeon にものに比べ単純化されていること、入力データに対する同時アクセスによる I/O ボトルネックの顕在化が理由として考えられる。

現時点での最新型 Xeon Phi に搭載されるコア数は 72 であり、最大駆動クロックは 1.7GHz であることを鑑み、Xeon Phi に搭載されているコアの性能が改善しない限りは、Xeon CPU を利用した方が経済効率は良いと推測される。Xeon CPU には、22 コアを有する製品もあり、Xeon Phi に優位性を認めることが現時点は、困難である。事象を構成する粒子を並列に処理し、1 事象の実行時間を短縮するアプローチも考えられるが、ソフトウエアの大改造を必要とする。一方で、GPU は、Xeon Phi と比較して 40 倍以上のコア数を有しているので、GPU 向けに新たなコードを開発する方が有効であると推論された。

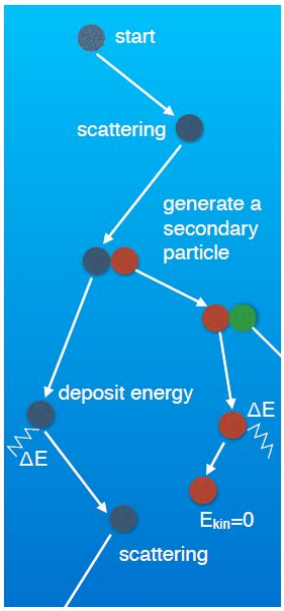
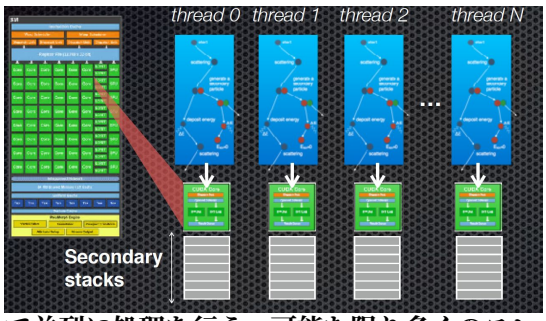


図 2　粒子の相互作用

NVIDIA 社の GPU は、CUDA 言語でプログラムを記述する。プロトタイプとして、Geant4 から、水中で電子および光子の電磁相互をシミュレーションするために必要な機能を抽出し、CUDA 言語で実装した。このプロトタイプは、MPEXS(Massive Parallel EXascale Simulator)と命名された。MPEXS は、Geant4 と異なり、粒子ごとに並列に実行できるように設計されている。物質中に入射した粒子は、物質を構成する原子と相互作用する。電子の場合、原資の電場との相互作用により弾性散乱を行い、方向が変更され、原子核と取り巻く電子との相互作用により、電子を弾き出すなどの相互作用を行う。光子の場合には、電子・陽電子対生成反応で電子と陽電子を生成したり、光電効果やコンプトン散乱を起こし、原子の軌道電子を弾き出す反応を起こしたりする。発生した 2 次粒子は、スタックに記録し、入射粒子が消滅または停止する、あるいは、興味ある領域から出るまで追跡を続けなければならない。30MeV の電子であれば、制止するまでに 100 万回以上の散乱を起こすので、計算時間短縮のために様々な工夫が必要となる。

Geant4 では、入射粒子のグループを 1 事象とし、事象毎に一つのスタックを用いる設計となっている。1 スレッド毎に 1 事象を処理するので、スタックの中身が空になるまで、処理を繰り返す。

一方、MPEXS は、処理している粒子に対して、専用の 2 次粒子スタックを用意した。追跡中の粒子が静止する、消滅する、決められた領域から出るなどの打ち切り条件に達すると、スタック中の粒子の処理を別々のスレッド



で並列に処理を行う。可能な限り多くのスレッドを同時に実行することで、計算時間の短縮を図る必要があり、データ競合や、競合条件の回避のための工夫がなされた。

シミュレーション結果の検証のために、水を入れた箱の中に異なる電子や光子を入射し、線量分布がどうなるか MPEXS と Geant4 の間

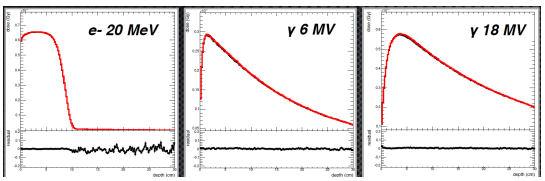


図 5 水中の線量分布 赤:MPEXS, 黒:Geant4

で比較を行った。これは、LINAC 治療のシミュレーションに相当する。図5に示すように、MPEXS と Geant4 の結果は良く一致している。計算速度の比較は、Intel Xeon E5-2643 v2 3.50 GHz で Geant4 を実行した場合と、NVIDIA Tesla K20c で MPEXS を実行した場合に関して行った。図 7 に結果を示す。Geant4 は、上記の Xeon CPU 上で 1 スレッドで処理を行った場合に要した時間を示している。この結果から、NVIDIA K20c は、上記 Xeon CPU の 200 コ

Water phantom	e- 20 MeV	γ 6 MV	γ 18 MV
Geant4 (CPU) [msec/particle]	1.84	0.780	0.803
MPEXS (GPU) [msec/particle]	8.81×10^{-3}	3.36×10^{-3}	4.33×10^{-3}
Speedup factor (= G4 / MPEXS)	*208*	*232*	*185*

図 6 MPEXS vs Geant4 性能比較

ア分の性能があると言える。後日、K40, K80 でも、ベンチマークテストを行った結果、K20c と比較し、20 パーセント以上高い性能を得た。さらに、PASCAL 世代の GPU である Titan-X および Tesla P100 では、K20c と比較し、2.5 倍、3.5 倍の処理速度を得たが、本研究終了後の成果なので、詳細は控える。この結果は、GPU の潜在能力を証明するものであり、さらに複雑なアプリケーションに対しても、計算時間の短縮が約束されている。そこで、Geant4 を細胞レベルでの相互作用に拡張した Geant4 を CUDA 言語に移植することとした。
放射線による細胞レベルの影響は、物理過程、

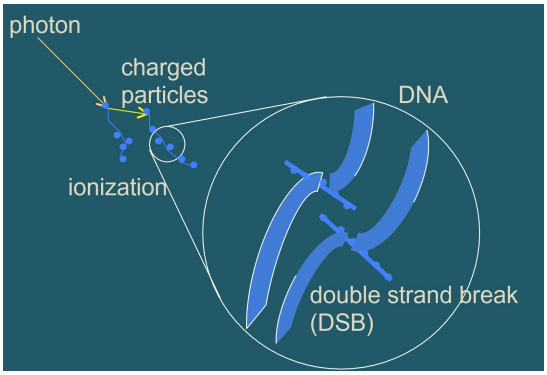


図 4 放射線による細胞への影響

化学過程、生物学的過程に分けて考えることが出来る。DNA の 2 重らせんを直接放射線が切断する場合もある。また、相互作用の結果、物質の放射性分解を起こし、様々な生成物を生じ、それらが DNA の 2 重らせんを切断する場合もある。片方だけが切断された場合には、修復過程があり、細胞は生き残り、双方とも切断されると、修復過程が働かない場合があることが知られている。現状の Geant4-DNA では、化学過程までを扱っており、細胞の死滅確率の予言に向けた生物課程の研究が進められている。
MPEXS-DNA は、Geant4-DNA の全機能を CUDA 言語に移植し、スレッド同時実行数を改善し、計算速度向上のためにアルゴリズの改善を行った。図 6 に MPEXS-DNA と Geant4-DNA の

Incident particle	Initial energy	MPEXS-DNA		Geant4-DNA 10.02 p01	Speedup factor (= G4 / MPEXS)
		Total thread numbers (N_{blk} x $N_{thr/blk}$)	Process time (sec/particle)	Process time (sec/particle)	
e^-	100 keV	1,048,576 (4,096 x 256)	2.38×10^{-3}	0.584	*248x*
p	1 MeV	1,048,576 (4,096 x 256)	3.98×10^{-2}	9.30	*233x*
He^{++}	1 MeV	1,048,576 (4,096 x 256)	4.11×10^{-2}	9.40	*228x*

図 8 MPEXS-DNA vs Geant4-DNA

計算時間の比較を示す。Geant4-DNA を、Intel, Xeon E5-2643 v2, 3.50 GHz 上で 1 スレッドを実行した場合、MPEXS を NVIDIA, Tesla K40c を最大限に利用した場合の計算時間の比較である。K40c は、Xeon CPU の 200 コア～250

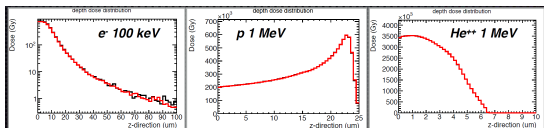


図 7 線量分布の比較 MPEXS-DNA vs Geant4-DNA

コア程度相当の性能を有している。本研究終了後、Tesla P100 を用いてベンチマークテストを行ったところ、Xeon CPU 1000 コア以上の性能を得ることが出来た。
計算結果の検証を物理過程と化学過程を別途行った結果を以下に示す。図 7 は、物理過程の結果として、各粒子の線量分布を比較したものである。図 9 は、化学過程の結果として G Value を比較した。MPEXS-DNA と Geant4-DNA の結果は良く一致している。

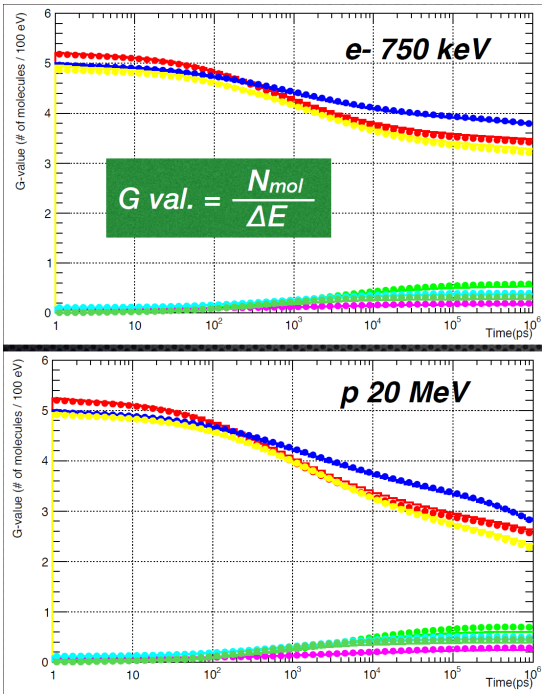


図 9 G value: MPEXS-DNA vs Geant4-DNA

Geant4-DNAを開発しているフランスCENBGのSebastien Incerti 氏との共同研究として、GNP(Gold Nano Particle)療法のシミュレーションに取り組んでおり、計算時間の問題で進捗が思わしく無かった課題が、MPEXS-DNAを P100 上で実行することで著しい進展を見ている。 研究をさらに推進し、論文を公表する準備を進めている。
会議での発表や論文の出版により、複数の応用例に関して問い合わせを受けており、共同研究を展開するための準備を行っている。さらに多くの物理過程を実装し、可能な限り多くの応用例に適用出来るよう準備を行っている。

<参考文献>

1. Geant4-a simulation toolkit. S. Agostinelli, et. al. 2003, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, Vol. 506, pp. 250–303.
2. Geant4 developments and applications . J. Allison, et. al. 2006, IEEE Transactions on Nuclear Science , Vol. 53, pp. 270-278.
3. Recent developments in Geant4. Geant4 Collaboration. 2016, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, Vol. Volume 835, pp. 186-225.
4. Steven Farrell, Andrea Dotti, Makoto Asai, Paolo Calafiura, Romain MonnardAndrea. Multi-threaded Geant4 on the Xeon-Phi with Complex High-Energy Physics Geometry. 2016, https://arxiv.org/abs/1605.08371.

５．主な発表論文等
（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計 4 件）

1.Tran, H.N., Karamitros, M., Ivanchenko, V.N., Guatelli, S., McKinnon, S., Murakami, K., Sasaki, T., Okada, S., Bordage, M.C., Francis, Z., El Bitar, Z., Bernal, M.A., Shin, J.I., Lee, S.B., Barberet, P., Tran, T.T., Brown, J.M.C., Nhan Hao, T.V., Incerti, S.,"Geant4 Monte Carlo simulation of absorbed dose and radiolysis yields enhancement from a gold nanoparticle under MeV proton irradiation",2016,Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms,373, 126-139 査読有
2. Allison, J., Aso, T., Kimura, A., Koi, T., Kurashige, H., Murakami, K., Sasaki, T., Tanaka, S., Toshito, T., Yamashita, T., Yoshida, H.他 87 名, " Recent developments in Geant4 ", 2016,Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 査読有
3. Bernal, M.A., Bordage, M.C., Brown, J.M.C., Davídková, M., Delage, E., El Bitar, Z., Enger, S.A., Francis, Z., Guatelli, S., Ivanchenko, V.N., Karamitros, M., Kyriakou, I., Maigne, L., Meylan, S., Murakami, K., Okada, S., Payno, H., Perrot, Y., Petrovic, I., Pham, Q.T., Ristic-Fira, A., Sasaki, T., Štěpán, V., Tran, H.N., Villagrasa, C., Incerti, S.,"Track structure modeling in liquid water: A review of the Geant4-DNA very low energy extension of the Geant4 Monte Carlo simulation toolkit",2015,Physica Medica,31,8,861-874 査読有
4. Incerti, S., Psaltaki, M., Gillet, P., Barberet, P., Bardiès, M., Bernal, M.A., Bordage, M.-C., Breton, V., Davidkova, M., Delage, E., El Bitar, Z., Francis, Z., Guatelli, S., Ivanchenko, A., Ivanchenko, V., Karamitros, M., Lee, S.B., Maigne, L., Meylan, S., Murakami, K., Nieminen, P., Payno, H., Perrot, Y., Petrovic, I., Pham, Q.T., Ristic-Fira, A., Santin, G., Sasaki, T., Seznec, H., Shin, J.I., Stepan, V., Tran, H.N., Villagrasa, C.,"Simulating radial dose of ion tracks in liquid water simulated with Geant4-DNA: A comparative study ",2014,Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B:

Beam Interactions with Materials and and Atoms, 333,92-98 査読有

〔学会発表〕(計 6 件)
1.岡田勝吾、村上晃一、尼子勝也、佐々木節, GPU による細胞レベルの放射線シミュレーションの高速化, GTC Japan 2016, 2016 年 10 月 5 日、査読あり, NVIDIA Award 受賞
2. Shogo Okada, Koichi Murakami, Katsuya Amako, Takashi Sasaki, Sébastien Incerti, Mathieu Karamitros, Nick Henderson, Margot Gerritsen, Makoto Asai, Andrea Dotti., GPU acceleration of Monte Carlo simulation at the cellular and DNA levels. Innovation in medicine and healthcare 2015.10
3.gMocren: Visualization software for Monte Carlo simulators for radiotherapy, A.Kimura, H. Hasegawa, A. Saitoh, S. Tanaka, The 35th JSST Annual Conference, International Conference on Simulation Technology, 招待講演, 2015.10
4. Okada, S., Murakami, K., Amako, K., Sasaki, T., Incerti, S., Karamitros, M., Henderson, N., Gerritsen, M., Asai, M., Dotti, A.,"Acceleration of Geant4-DNA physics models performance using graphics processing unit",2015,Mathematics and Computations, Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo International Conference, M and C+SNA+MC,2015,3,2105-2116 査読有
5.A CUDA Monte Carlo simulator for radiation therapy dosimetry based on Geant4.,Henderson, N.; Murakami, K.; Amako, K.; Asai, M.; Aso, T.; Dotti, A.; Kimura, A.; Gerritsen, M.; Kurashige, H.; Perl, J.; Sasaki, T. . Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo 2013 (SNA + MC 2013).
6. Murakami, K., Henderson, N., Amako, K., Asai, M., Aso, T., Dotti, A., Kimura, A., Gerritsen, M., Kurashige, H., Perl, J., Sasaki, T. Geant4 based simulation of radiation dosimetry in CUDA 2013 IEEE Nuclear Science Symposium Conference Record,6829452 査読有

６．研究組織
(1) 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

(2) 研究分担者
村上 晃一 (MURAKAMI, Koichi)
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・研究機関講師
研究者番号：10353369

(3) 研究分担者
藏重 久弥 (KURASHIGE, Hisaya)
神戸大学・先端融合研究環・教授
研究者番号：20205181

(4) 研究分担者
山下 智弘 (YAMASHITA, Tomohiro)
神戸大学・医学研究科・医学研究員
研究者番号：20567086

(5) 研究分担者
大町 千尋 (OMACHI, Chihiro)
名古屋市立大学・大学院医学研究科・研究員
研究者番号：20588967

(6) 研究分担者
阿蘇 司 (ASO, Tsukasa)
富山高等専門学校・その他部局等・教授
研究者番号：30290737

(7) 研究分担者
歳藤 利行 (TOSHITO, Toshiyuki)
名古屋市立大学・大学院医学研究科・研究員
研究者番号：30377965

(8) 研究分担者
田中 覚 (TANAKA, Satoshi)
立命館大学・情報理工学部・教授
研究者番号：60251980

(9) 研究分担者
木村 彰徳 (KIMURA, Akinori)
足利工業大学・工学部・教授
研究者番号：60373099

(10)研究分担者
尾崎 正伸 (OZAKI, Masanobu)
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
研究者番号：90300699

(11)研究協力者
浅井 慎 (ASAI, Makoto)
SLAC National Laboratory・SLAC Geant4 プロジェクトリーダー

(12)研究協力者
Margot Gerritsen
Stanford University ・ICME・教授

(13)研究協力者
Nick Henderson
Stanford University ・ICME・研究員

(14)研究協力者
Sebastien Incerti
CERNBG, France・研究員