

太陽系外惑星をマッピングする

河原 創

〈東京大学大学院 〒113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1〉

e-mail: divrot@gmail.com



太陽系外惑星は直接赴いて観測することは困難であるため、生命を宿しうる惑星の天文学的な探査手法を独自開発する必要がある。例えば惑星表面の空間分布を知るには、100 km クラスの口径の望遠鏡がないと、直接空間分解することができない。これに比べ、反射光の時間変動から惑星表面の二次元マップを再生する Spin-Orbit Tomography (SOT) は、10 m クラスの宇宙望遠鏡を用いたより実現性の高い手法である。SOT が提案されて約10年たつが、この間、スパースモデリングやニューラルネットを用いた正則化手法の改善、逆問題のベイズ化による誤差推定法の確立、さらにマッピングと表面組成スペクトル脱混合の統一などの様々な理論的な進展があった。また、地球観測衛星 DSCOVR に代表される、実際の地球反射光データを用いた検証も進んできた。このように、SOT はアストロバイオロジー分野の中でも機械学習や情報科学の諸問題に直結する数理的に面白い課題である。本稿では SOT の最近の発展について概観し、今後解決が望まれる課題について整理したい。

1. 系外惑星のマッピング

太陽系外惑星は太陽系内惑星に比べ、パーセク／au〜約10万倍遠いところにある。つまり見かけのサイズも10万倍小さい。空間分解能を波長／望遠鏡口径でみつめると、10パーセクにある地球半径の惑星を分解するには100 km (@1 ミクロン) 以上の望遠鏡が必要になる。ハビタブルゾーンに惑星が見つかったとしても、その姿を知るには、このような超巨大な望遠鏡を待たなければならないのだろうか？ この問いに対する一つの回答は、直接撮像を用いて系外惑星から光の時系列データ（光度変動）を取得できれば、これを復号して表面分布や表面スペクトルを再構成することができるというものである。光度変動からの惑星表面の推定問題は、宇宙からの直接撮像計画 Terrestrial Planet Finder が盛り上がっていた2000年代初頭より研究が始まった。

表面に不均一性を持つ系外惑星が自転すれば光

度変動を引き起こす。これは恒星が自転により黒点を持った表面が見えたり隠れたりするのによって光度変動が引き起こされるのと同じである。例えば、地球ならば大陸や雲、海洋の反射特性の違いがあり、惑星の自転に伴って、それらの反射光全体への混合率が変化することにより光度変動が引き起こされる。恒星の場合、自らが光っているため、常に球面全体が光っており、黒点の分布が変化しなければ、一周目も二周目も同じ光度曲線となる。一方、可視光域で観測される惑星光は、惑星自らが放つ光ではなく、恒星の光が惑星にあたって反射してくる光、すなわち反射光である。このように光源が対象と別のところにあると、光源と対象と観測者、すなわち恒星と惑星表面と観測者の相対的な位置関係が変われば、光度変動を引き起こす表面の領域も変化する。この場合、自転運動のみならず公転運動によっても相対位置が変化する。こうして惑星二次元表面の情報が光度曲線の中に埋め込まれることとなる。この二次元

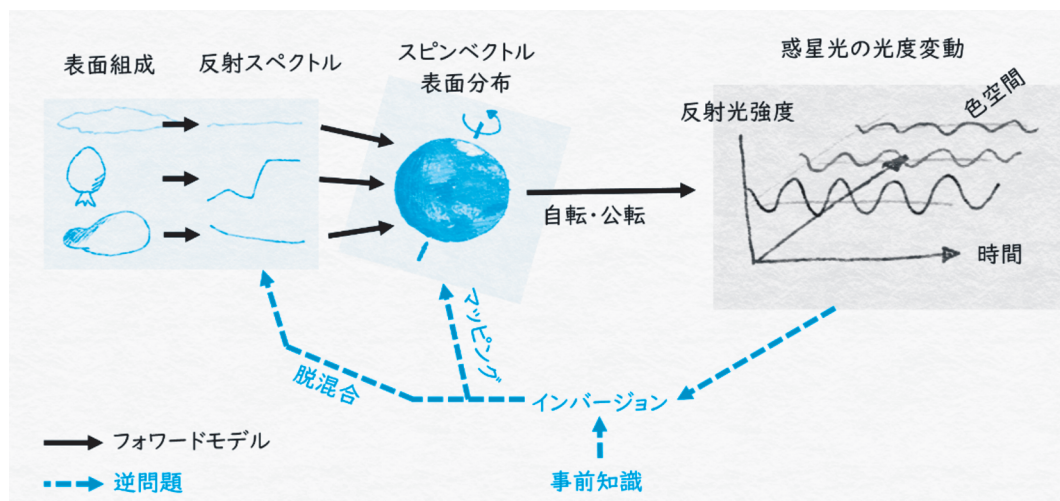


図1 惑星の反射光の時間変化を用いて表面情報を推定する仕組み。惑星表面からは、例えば地球であれば、雲や木、海といった表面組成がおおの異なる反射特性を持ち、それらの固有の反射スペクトルが混合されて惑星全体の反射スペクトルを構成する。この混合の割合は、惑星の自転や公転に従って昼面や見える面が変化し、それが惑星の光度変動となって観測される。直接、空間分解できない系外惑星にあっては、この光度変動から惑星表面の情報を推定しなければならない。表面の二次元分布を再生する推定を「マッピング」(mapping)、固有の反射スペクトルの推定をスペクトルの「脱混合」(unmixing)と呼ぶ。系外惑星の場合、一般にどのような表面組成を持つか事前にほとんど情報が無いことに注意が必要である。そのためマッピングや脱混合に過剰な事前知識（例えば地球に似た表面組成を持つ等）を要求しない定式化が必要である。

情報を再生する推定を「マッピング」と呼ぶ。一方、観測されるスペクトルは、それぞれの表面組成に固有の反射スペクトルの混合からなっているが、これらを推定する問題を「脱混合」と呼ぶ(図1)。

まずは単色もしくは単一成分の場合のマッピングを考えよう。数学的には、光度曲線は二次元表面の重み付き和の時間変化である。重みは相対位置関係によるが、仮にこれがわかっているとすると、光度曲線と二次元表面分布は線形関係、 $\mathbf{d} = \mathbf{W} \mathbf{a}$ の形に描ける^{*1}。 $\mathbf{d}$ が単色光フラックスの場合、求めるモデルは惑星表面のアルベド（反射率）分布に対応するので、ここでは $\mathbf{a}$ (lbedo) という記号を採用しているが、モデルの構成上、

$\mathbf{d}$ は単一成分なら何でも良く、例えば雲の影響を差し引くために二色の差を用いたり、任意の成分を再現するために主成分のどれかの成分を用いたりする。実際の光度曲線 $\mathbf{d}_{\text{obs}}$ は観測ノイズ $\mathbf{e}$ を含んでいるので $\mathbf{d}_{\text{obs}} = \mathbf{W} \mathbf{a} + \mathbf{e}$ の形になる。 $\mathbf{d}_{\text{obs}}$ から $\mathbf{a}$ を推定する問題は線形逆問題と呼ばれ、古くはEliakim H. Moore, Roger Penrose（ムーア・ペンローズ逆行列）やAndrey N. Tikhonov^{*2}（チコノフ正則化）により研究された美しい構造をしているので少し解説したい。線形逆問題は $\mathbf{W}$ を特異値分解することによりその構造が解明される。特異値分解とは $\mathbf{W}$ を直交行列 $\mathbf{U}$, $\mathbf{V}$ と対角行列と零行列をくっつけた行列 $\mathbf{\Lambda}$ ^{*3}を用いて $\mathbf{W} = \mathbf{U} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}^T$ の形に分解することである。これは行列の対角化

^{*1} 本稿では太字アルファベットはベクトルを意味する。例えば $\mathbf{d}$ は時系列データをベクトル化したもの、 $\mathbf{a}$ は空間マップをピクセル化した上でベクトル化したものである。 $\mathbf{W}$ はデザイン行列とも呼ばれる。

^{*2} ソビエト連邦およびロシアの数学者。

^{*3} 通常は大きい対角成分=特異値から並べていく。

に毛が生えたようなものである。ここで行列 V の各列 $\mathbf{v}_i$ から構成されるベクトル空間は正規直交基底を構成するので、 $\mathbf{a}$ をこの基底を使って分解することができる。すなわち $\mathbf{a} = \sum c_i \mathbf{v}_i$ とすると $\mathbf{d} = W \mathbf{a} = U \Lambda (c_0, c_1, \dots, c_N)^T$ となるので、 Λ の対応する i 番目の特異値を介して左辺に影響するといえることがわかる。つまり特異値が小さいような i に対応する基底の成分は左辺に影響しにくい。極端な場合は特異値がゼロとなり、この場合はこの基底の成分は左辺に影響できない。逆に言うところのような成分は、左辺に全く影響させることなくいくらでも変更することができることを意味し、つまり左辺の値から $\mathbf{a}$ のこの基底方向の成分を制約することはできない。以上の解析からわかることは、線形逆問題はその特異値を見ることにより、モデルの中のデータからは推定できない成分、もしくは推定が難しい成分を知ることとなる。

逆に $\mathbf{d}_{\text{obs}}$ を U の列ベクトルで分解すると同じことが起こる。特異値が小さいものに対応する基底の成分は $\mathbf{a}$ に影響しづらく、特異値がゼロに対応する成分は $\mathbf{a}$ をいくら変えても作ることはできない。 $\mathbf{d}_{\text{obs}}$ は $\mathbf{d}$ とは誤差分だけ異なるので、 $\mathbf{d}_{\text{obs}} = W \mathbf{a}$ となる $\mathbf{a}$ を選ぶことは一般的にはできないわけだが、仮に $\mathbf{d}_{\text{obs}}$ に非常に近い $\mathbf{d}$ を予言する $\mathbf{a}$ を選ぼうとすると問題が起きることをこの事実は意味している。すなわち、特異値が小さいものに対応する基底の成分を合わせようとするために推定する $\mathbf{a}$ に無理がかかり、不安定化してしまう。これがオーバーフィットとか過学習と呼ばれる事態である。これらの問題を解決する手法が正則化である。正則化は、古くは電波天文学の像再生に、近年はスパース正則化などを通じて、広く天文学

で用いられるようになった。正則化はなんらかの制約条件やペナルティ（正則化項）、もしくはアルゴリズム自体に内在する性質（ニューラルネットなど）でモデルの不安定化を抑える。またモデルの中の推定できない成分や推定が難しい成分にアプリアリな解を与えて問題をさもなかったかのようにしてしまう^{*4}。

かなり脱線してしまったが、反射光の場合、小さい特異値の成分は少なく、原理的にはかなり良く表面分布が推定できることが知られている。一方、輻射光の場合は、特異値が小さいもしくはゼロの成分が非常に多く、推定できない基底成分が非常に多いため、満足できる表面分布とはならない。

さて2010年から2012年にかけて、私と藤井友香さんは、モデルの非負性を使った正則化やチコノフ正則化（L2正則化）を用いた惑星マッピングの定式化を行い、系外惑星の反射光の光度曲線から惑星の二次元分布を再構成できることを理論面、および放射伝達シミュレーションを用いて検証し、Spin-Orbit Tomography^{*5}と名付けた[1-3]。この手法は装置的には10 m超の可視宇宙直接撮像衛星で実現可能になるため、Large UV/Optical/IR Surveyor (LUVOIR) クラスのミッションから実現の射程に入る。一連の定式化後の当初、本稿最初に提示した問題については一応の回答を得たと個人的に満足していた。しかし、2018年くらいからこの問題系の様々な側面に対し、異なる著者らから新たな視点やアプローチが出されるようになり、再び問題系自体の面白さがよみがえってきたように思う。以下ではそれらについて、私のその後の研究や感想を交えながら紹介したい。

^{*4} 数式が少ないため伝わりにくいかもしいないと思ひ参考までに<https://github.com/HajimeKawahara/pinvprob>に数式入りテキストおよびコードをおいた。

^{*5} 同様の方法論であるComputer Tomography (CT) のアナロジーであるが、切断を意味するTomoは今から考えるとの外れかもしれない。この論文を書いている時分、自転車に轢かれ緊急搬送先で脳のCTを撮られたことと関係しているかもしれないがよく覚えていない。そのためSpin-Orbit Mappingとも呼ばれる。

2. 自転軸はどのように推定されるか

最近の進展を紹介する前に、反射光の光度曲線が、惑星表面の分布だけではなく、自転軸傾斜角^{*6}や惑星の自転周期の情報も含んでいることを説明したい。線形問題で定式化される惑星表面の分布推定と異なり、これらのパラメータは非線形に問題系に含まれる。より具体的にはWの中のパラメータとして定式化され、

$$\mathbf{d} = \mathbf{W}(\mathbf{g})\mathbf{a}$$

の形をとることから、非線形パラメータベクトル $\mathbf{g}$ とまとめて考える。つまりこれらのパラメータを固定しない限り、問題系は非線形逆問題となる。当初の Spin-Orbit Tomography では、 $\mathbf{g}$ をグリッドサーチし目的関数の最小付近で正しい値をとることから、確かに反射光強度曲線が $\mathbf{g}$ の情報を含んでいることを確認していた。その後 Joel Schwartz らにより $\mathbf{g}$ が推定されるメカニズムが詳細に解析されたが、これまた複雑なのでこの紙面では紹介できない [4]。この論文を読むと、非線形推定がいかに厄介か、というよりは線形問題がいかに美しいかが再確認される。さて本稿ではもう少し直感的な説明をしたい。実は自転軸傾斜角が変わると、光度曲線変動の周波数が変調されるという効果がある。そもそも自転に対応して光度曲線は日変化するわけだが、この周期を惑星の自転周期と考えるのは、若干正確ではない。

古代バビロニアの天文学では、星の一周する周期（恒星日^{*7}）に比べ太陽の一周する周期（太陽日）が微妙に長いことが知られていた。この原因は地球が太陽の周りを公転していることと、地球の自転軸傾斜角が公転軸にほぼ（23.4度）そろっているという事実に起因している。すなわち、地

球の背景宇宙に対する自転周期が恒星日としてあらわれるのに対し、地球が一周自転する間に公転運動により太陽との位置関係が微妙に変わるため、見かけ上、地球から見て太陽が昇って再び同じ位置に戻ってくるには、自転周期より約 1/365 日分余計に時間がかかるということである。ここで仮想的な地球、すなわち自転軸が公転軸に対し 180度傾いている逆行地球を考えてみよう。この場合、太陽日は恒星日に対し、逆に 1/365 日分早くなる。これは、恒星日と太陽日の違いが自転軸傾斜角の情報を含んでいることを意味する。

さて系外惑星の反射光の場合は、恒星・惑星・観測者の相対的な位置関係により決まる見かけの光度変動であるため、この変動周期は惑星の自転周期に厳密に対応するのではなく、太陽日のようなものに対応することになる。すなわち順行ならば自転周期より 1/公転周期の分だけ長く、逆行ならば短い変動周期が観測される。では、中途半端な自転軸傾斜角の場合はどうなるだろうか？この場合は、公転運動の位置、すなわち季節によって異なる周波数を示すことになる。すなわち惑星一年間の中で、光度曲線の周波数が変化するということになる。この周波数変調のパターンは、自転軸ベクトルの向き、および観測者から見た公転運動の軌道傾斜角の両方に依存し、完全に順行と逆行の場合を除くと全く縮退しない。すなわち、反射光の光度曲線には自転軸ベクトルの情報が完全に含まれていることがわかる [5]。以上の議論では、惑星表面の不均一性のパターン違いを無視しているのだが、このおおざっぱな推定法は全球気候モデルを用いた模擬観測でもだいたい機能することがわかっている [6]。このように反射光の光度曲線を用いると、惑星表面分布だけではなく、自転軸傾斜角や自転周期を含めた非線形パ

^{*6} より正確には自転軸ベクトル。

^{*7} Sidereal day のこと。Sidereal はラテン語 *sidereus*（星空の、もしくは星に所属するの意）に由来し、つまり星の一日という意味となる。

は凍結され、衛星本体はロッキード・マーティン社内に塩漬けされたようである。そしてオバマ政権となり、晴れて太陽と地球の間のラグランジュ点に打ち上げられ、地球の昼面を常時観測し続け既に6年が経つ。ラグランジュ点1 (L_1) に位置するため、系外惑星観測の時の位置関係とは若干異なるが、理論上は全く同様に方法論を適用できる。このデータはその後の理論的な発展を検証する貴重な試験データとして活用され始めた。

4. 正則化を再考する

Fanらによる実際の地球データのマップはチコノフ正則化を用いたものであるが、この論文が発表された頃、逢澤正嵩さんと私はSpin-Orbit Tomographyをスパース化する試みを始めていた。スパースモデリングは、推定パラメタ $\mathbf{a}$ に期待される疎性を仮定してモデリングすることで、より望ましい推定を得る手法であり、具体的には正則化手法を通じて実装される。ここで全く科学的ではない「望ましい」という用語を用いていることについては、私の留保的な態度を表しているが、これについては後述する。ともあれ、ここで導入されたのはブラックホールシャドウの像再生にも用いられているL1+Total Square Variation (TSV)という正則化である。詳細は省くが、このスパースモデリングでは、不均一性をコンパクトにまとめ、かつ、境界をくっきりさせる効果がある。L1+TSVをDSCOVrデータに適用すると、チコノフ正則化より実際の大陸分布に近い形で再現されることが示された[9]。これは地球の大陸と海洋が明確な境界を持ち不連続であることを、L1+TSV正則化がうまく捉えられたことを意味している。

ほどなくして、さらに異なるタイプの正則化が A. Asensio Ramos と Enric Pallé により提案された [10]。これはいかにも機械学習全盛の時代的な

第114卷 第8号

手法であり、ニューラルネットを通じて正則化自体を学習するという斬新なものである。Learned denoiserと呼ばれるこの手法は、教師付き学習であり、仮想的な大陸分布を持つイメージを大量に作成し、これをニューラルネットに学習させることで、学習データの持つ統計的性質が事前知識としてマップの再構成に使われる。この手法の良いところはチコノフ正則化やL1+TSVのように明示的に正則化項に書き下せるような事前知識を超えて、学習データさえ用意できれば、どのような統計的性質を持つ分布でも正則化に取り込めるところである。

5. 逆問題をベイズ化する

逆問題を実際のデータに適用して画像復元を行ったものが、どの程度実際の分布を再現しているか評価するのは一般的に言って難しい。幸か不幸かSpin-Orbit Tomographyを適用できる実際の系外惑星データはまだ得られていないので、現在は深刻な問題になってはいないが、実際に推定結果が出たら、その結果は疑われ検証されるべきである。その際、誤差評価というのが重要になってくる。例えばCTスキャンのように多数の患者のイメージでテストできるならば、再現イメージのクオリティを統計的に知ることができるが、天文学のように一点物の再現では評価が非常に難しい。一点物という意味では、宇宙論パラメータではベイズ推定を早くから活用している^{*9}。では逆問題をベイズ化するにはどうすれば良いだろうか？

線形の場合、 $\mathbf{d} = \mathbf{W} \mathbf{a}$ に対して、 $P(\mathbf{a}|\mathbf{d})$ を求めるにはどうすれば良いかという問題となる。尤度 $P(\mathbf{d}|\mathbf{a})$ は、ノイズが独立ガウシアンだと思えば $P(\mathbf{d}|\mathbf{a}) \propto \exp(-|\mathbf{d} - \mathbf{W} \mathbf{a}|^2 / 2\sigma^2)$ と書ける。問題は逆問題の枠組みで考えていた正則化をどう取り込むかということである。チコノフ正則化の場合、 $P(\mathbf{a})$

$= \exp(\lambda^2 |\mathbf{a}|^2)$ のような形で事前分布を導入すると、事後分布の最大化(MAP)がコスト関数最小化に対応することがわかる。この場合は、MAPとチコノフ正則化が一致する。 $P(\mathbf{a}|\mathbf{d}) \propto P(\mathbf{d}|\mathbf{a})P(\mathbf{a})$ であるため、 $P(\mathbf{a}|\mathbf{d})$ はやはりガウシアンになる。結局、 $\mathbf{a}$ の事後分布はハイパーパラメータ λ の取り方に大きくよることになる。これでは困るので、ハイパーパラメータ λ についても同時事後分布を計算し、 λ について周辺化すれば、形式上 λ を選ぶ必要はなくなるだろう。しかし、このようにモデルを階層的ベイズ化した時に、 λ とはいったいどういうモデル化に対応しているのか考え直すにはいられない。そこで2018年にBen Farrらは、地形の典型的角度スケール γ を導入し、 $P(\mathbf{a})$ をガウス過程でモデル化する手法を提案した[11]。例えば地球の大陸の典型的スケールは、外周の10-20%くらいであるので1ラジアン程度である。このように事前分布自体をモデル化して、ハイパーパラメータについて積分し周辺化することで、ハイパーパラメータ選択の恣意性を排除することができる。さらにベイズ推定のご利益がありそうなのは、非線形パラメータ $\mathbf{g}$ の推定を伴う時であろう。この $\mathbf{g}$ に含まれる自転傾斜角や自転周期といったエクソパラメータ^{*10}の推定問題とベイズ推定は相性が良い。Farrらの論文をもってSpin-Orbit Tomographyのベイズ化がなされたと言って良いと思う。

ところで定式化と実際の推定法は別問題である。Farrらは $\mathbf{a}$, $\mathbf{g}$ をすべて推定パラメータとしてマルコフ鎖モンテカルロ(MCMC)に突っ込むという方法をテストした。 $\mathbf{a}$ というのはマップを表現するベクトルなので、惑星表面を分割した数だけパラメータがある。そこで現実的にMCMC計算できるくらいにマップの解像度を下げなければならない。また以下で紹介する時間発展するマップ

^{*9} 系統誤差はベイズ推定でも必ずしも解決されないことは付記しておきたい。

^{*10} 宇宙論パラメータのアナロジーである。

ではMCMC計算では計算コスト上、推定がほぼ不可能となる。なによりMCMCに突っ込むことで線形逆問題の美しさが損なわれるという欠点もある。この問題の回避法を次章で述べたい。

6. 時間発展するマップ

TESSデータを用いたマッピングでは、雲は大陸と異なり時間変化する。Lugerらは、時間の多項式展開で表現した時間変動するマップも求めている。この場合、求めるパラメタ数はマップのピクセル数×多項式の次数程度ということになり、計算上は静的なマップと大差ない。さて、本来、時間発展するような二次元分布を一般的に表現する手法は動画である。つまり三次元空間の各点を離散化して推定することに対応する。このようなやり方でSpin-Orbit Tomographyを再構成できるであろうか？ 実は形式的には時間方向を入れたとしても、問題系は線形逆問題

$$\mathbf{d} = \mathbf{W}' \mathbf{a}'$$

の形で書ける。ただし、この場合 $\mathbf{a}'$ というのは空間方向+時間方向の三次元分をベクトル化したものだから膨大なパラメタ数となる。例えばマップを1000ピクセル（それでも30×30程度である）、時間方向を1000分割（1年間に對して8時間程度の時間分解能）としてもパラメタ数は100万あることになる。一方 $\mathbf{d}$ は同じ時系列データなので、例えば時間分解能と同じ1000程度になる。つまり1000のデータから100万パラメタを推定する究極の劣問題と言ってもいい。線形逆問題を解くには、チコノフ正則化であっても逆行列計算に近い計算が必要である。例えばムーア・ペンローズ逆行列を求めるには特異値分解が必要であり、これは逆行列計算と同じ $O(N^3)$ の計算量である。100万パラメタでは全く太刀打ちできない。さらにFarrらがやったようなベイズ化を

100万パラメタのMCMCで行うとすると気が遠くなるような時間がかかるだろう。

さて計算可能なやり方は以下の通りである。100万×100万の共分散行列、すなわちカーネルの逆行列が必要となるがこれは計算を実行できない。そこで、空間方向と時間方向の相関はおのの独立のガウス過程の積で書けると仮定する。するとカーネルは空間方向1000×1000と時間方向1000×1000の個別カーネルのクロネッカー積で書かれる。非線形パラメタを無視すると線形逆問題の事後分布は解析的に書ける。この解析解を、先ほどの時間・空間方向に分離したカーネルを用いて、ベクトルを行列に折り畳んだりしながら、1000×1000の（逆）行列だけで書き直す（もう少し正確に言うと同相写像を使って書き直す）。これで計算可能となった。さて、非線形パラメタ $\mathbf{g}$ ^{*11}を導入するにはどうすればいいか。出てくる分布がすべてガウス分布、かつ、非線形パラメタは固定し変換がすべて線形なため、線形パラメタについて周辺化した事後分布 $p(\mathbf{d}|\mathbf{g})$ の解析解を求めることができる。これを最大化するような $\mathbf{g}$ を選ぶということもできる。実際にガウス過程の教科書にはそのように書かれていたりするが、これは最尤法的なやり方であり思想の一貫性に欠ける。増田賢人さんが提案した以下の方法は、ベイズアンを徹底した考えに基づいている。今、 $\mathbf{g}$ はたかだか10個以下なので、 $p(\mathbf{g}|\mathbf{d}) \propto p(\mathbf{d}|\mathbf{g})p(\mathbf{g})$ としMCMCにかけて $\mathbf{g}$ をサンプリングしてしまふ。そしてこのサンプリングされた $\mathbf{g}$ の集合を、先ほどの $\mathbf{g}$ を固定した $\mathbf{a}$ の事後分布の解析解におのおの入れて平均すれば $\mathbf{g}$ 方向に積分した $\mathbf{a}$ の周辺事後分布が求まる、というわけである。これを採用し、DSCOVERデータの最も変動する第一主成分（PC1）に適用してみると、まずまず、雲の動きを再現できることを確認した（図2）。こうして、系外惑星の動画を事後分布の形で計算

*11 ここではガウス過程のハイパーパラメタも含める。

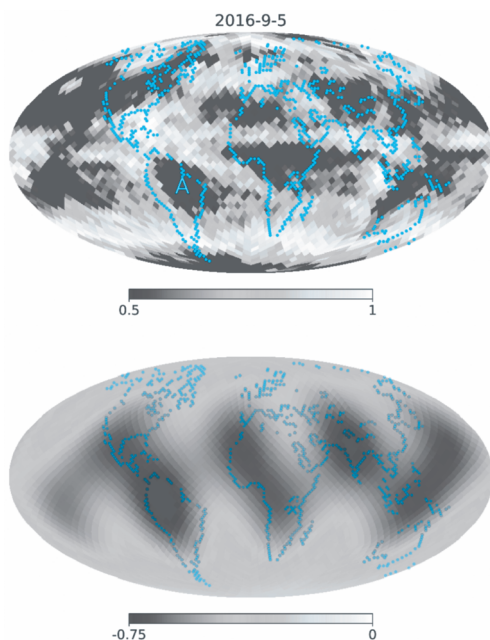


図2 地球観測衛星 DSCOVR による時系列データに対し、最も変動する主成分 PC1 から再生された系外惑星 Sol d (地球) の変動表面分布の例 (下) [12]. 変動のタイムスケールを表すパラメータは事後分布の形で推定され 20 日程度である。この図は 2016 年 9 月前後の推定マップである。上はリモートセンシング衛星により測定された同時期の雲の割合分布 (8 日平均)。PC1 の動的マップはおおよそ雲分布を反映していることがわかる。

することができるようになった [12].

7. スペクトルのエンドメンバー

本稿では、これまで単一成分のマッピングを考えてきた。例えば、白い雲の成分を差し引くために二色の差や主成分の第 2 成分をマッピングすると大陸・海洋分布が再現できる。しかしこれはよく考えると我々が地球の表面組成についてよく知っているの、このような解釈が可能になるわけである。何も知らない系外惑星に適用していいかどうかはわからない。そこで混合されたスペクトルから元々の表面のスペクトルを推定すること

が必要である。このように混合されたスペクトルからもとのスペクトルを推定することを、スペクトルの脱混合と呼ぶ。脱混合は、光合成生物の探查指標であるレッドエッジ検出のためにも重要である。レッドエッジとは、植物の反射率が 680 nm 付近で急激に上昇することを意味するが、これはクロロフィルの光子の吸収エネルギーに対応している。光合成に電子遷移を用いる場合、似たような特徴が生じるだろうという意味で、バイオシグニチャーであると考えられる^{*12}。しかし、地球の場合、植物の表面積に占める割合は 10% オーダーであり、混合されたスペクトルのみからはレッドエッジの検出は困難である。

脱混合を、ジャクソン・ポロックの絵を想像して考えてみよう。ポロックの絵には様々な色が混ざっているが、この絵からポロックが使った絵の具を推定するにはどうすればいいだろうか。もちろんエンドメンバー、すなわち使った絵の具の混ざっていない部分があればそれを利用すれば良い。しかしそのような純度 100% の部分がなかったらどうするだろうか？ 混合された色の変動から表面成分を推定する手法は、主成分分析を用いて試されてきたが、ある瞬間の惑星光は惑星表面のかんりの割合の混合が起きているためこの方法では分離が難しい。そこで Nicolas B. Cowan らは経度方向の一次元マップの分離と同時に表面成分を同時推定する手法を提案した。ここで、独立成分の数を K とすると、マップの数はそれぞれ K 個、表面成分のスペクトルの個数も K 個であるため、空間成分を持つマップ、波長成分を持つ各成分のスペクトルはそれぞれ行列 A , X となる。またインプットの多波長の時系列データも行列 D となるためモデルとしては $D = W A X$ の形をとる。この形式のようにデータが各成分のスペクトル行列 X とその割合の行列 (混合行列) A の行列積で書ける場合を線形混合モデルと呼ぶ。求めるパラ

^{*12} 詳細は拙著 [13] を参照のこと。

メタは行列AとX両方である．これは形式的には行列DをAとXに分解する操作，行列分解 $D=AX$ に重み行列Wが付加されたものとみなすことができる．2013年にCowanとTalia E. Straitは行列の最小二乗法に対応する $|D-WAX|_F$ を，MCMCを用いて最小化することでA, Xを推定したが^{*13}，満足のいく推定にはならなかった[14, 15]．これは今から考えると適切な正則化がなされていないからであると考えられる．

ところで行列分解には，良く知られたある不定性が存在する．それは任意の正則行列Gを導入すると $AX=(AG)(G^{-1}X)$ となってしまうため， $A'=AG, X'=G^{-1}X$ を新たに定義すれば， $AX=A'X'$ となってしまう同じ予測を出してしまうという不定性である．予測が同じということは，この不定性を取り除くには原理的に事前知識を導入するしかない．例えば最も簡単な行列分解の一つである主成分分解は，行列が直交している，すなわち推定される各ベクトルが直交しているという極めて強い制約条件が付いているため一意性が確保される．しかし惑星表面の各成分のスペクトルがたまたま直交している可能性は低そうなので，主成分分解では一般的な推定は期待できないであろう．

さて脱混合の合理的な事前知識とは何であろうか？ まず反射率は非負なので，非負条件は良さそうな事前知識であろう．次に混合について考えてみよう．例えば赤と黄の絵の具を混ぜると様々な色を作ることができるが，緑や青に近い色は作れないであろう．これは混合されたものは，エンドメンバーを頂点とする多面体の中に含まれるという形で理解される．混合された絵の具の中には混合の度合いが高いものもあれば低いものもあるだろう．例えば，赤，黄，青の絵の具を使っても，赤と黄だけで混合されたものや，黄と青だけで混合されたものも含まれているかもしれな

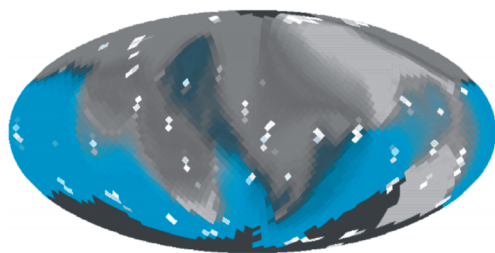


図3 地球観測衛星DSCOVRによる時系列データから再生された系外惑星Sol d (地球)の表面分布[17]．本手法では四種類の表面成分マップがそれぞれ推定されるが，図はそれらを合成したもの．5大陸が分解して見て取れる．雲に対応すると考えられる平坦なスペクトル成分の空間成分はパッチ上に散らばっているが，これは動的な雲の分布を表現できないためであると考えられる．

い．するとこれらの混合色は多面体の辺に位置するだろう．というわけで，様々な混合物の点を含む最小体積の多面体を選び，その頂点をエンドメンバーとすれば良さそうである．これはリモートセンシングの分野でM. D. Craigが1994年に提案した指針[16]であり，これを実現するための様々な実装が提案されている^{*14}．正則化項の形でこの指針を導入する場合は，体積を最小化したいわけだから行列式を正則化項に持ってくれば良いことがわかる．というわけで，Aについては例えばチコノフ正則化，Xについては体積正則化を用いてかつ非負条件を課して推定をすると，先述の不定性の問題を回避して推定できることがわかった[17]．これが唯一の方法ではなく，例えば非負条件がどの程度必要なのか，チコノフ正則化ではなくスパースにするとうなるかといったことも今後調べるのが良いと思うが，とにかくXについての体積正則化で行列分解の不定性の問題を回避でき，表面スペクトルとマップが同時推定できるということは確かである．これまたDSCOVRのデータを用いて推定したマップも海洋・大陸の

^{*13} 下付きFはフロベニウスノルムの意．

^{*14} 例えば $\det(XX^T)$ といった形の正則化項で実装される．

マップを個別に推定でき、かつ植生と思しき成分も抽出できている (図3)。

8. 課 題

DSCOVERのデータを用いて脱混合されたスペクトルを見ると、雲の成分と思われるフラットな成分が推定できているが、この空間分布はうまく推定されず、パッチ状に局在化してしまっている。これは雲が時間変動をすることに起因していると考えられる。そこで、前節の動的マッピングを組み合わせれば良いように思うが、動的マップと脱混合の統一は実現できていない。また脱混合の問題は、行列分解を含むためにベイズ的な定式化が難しく、これもまだ手が付けられていない。表1に上記の到達状況を整理した。多色の光度曲線から、脱混合された惑星表面成分の動画を、事後分布の形で再生できるようになれば、この光度曲線を用いた惑星表面推定問題は一区切りつくのではないだろうか考えている。

表1 Spin-Orbit Tomographyの理論的課題と到達状況

	単成分	脱混合 (多色)
静的マップ	点推定・ベイズ	点推定のみ解決
動的マップ	点推定・ベイズ	未解決

9. さいごに：逆問題の不安と深淵

遡ってL2によるSpin-Orbit Tomographyを完成したばかりの2012年、国立天文台のセミナーにて発表を行った時のことである。質問や応答も一通りなされた発表の終盤、突如、前に座っていた誰か^{*15}が以下のようなコメントをした。

「それってフィットしただけでしょ」(下線筆者)

どのような意図であったのか今となっては知ることはできないが、この一見、素朴なコメントについて、その後も考え続けている。天文学の古典

的な意味でのフィットとは、つまるところ最小二乗法であり、モデルが予測するデータ (予測データ) と実データの差の二乗ノルム (もしくは観測エラーも含んで平均対数尤度) 最小化のことである。逆問題において正則化項の形で陽に導入された正則化は、ベイズ的な解釈では直接、特定の事前分布に翻訳される。この観点からは、(正則化項なしの) 最小二乗法の場合は、一様な事前分布を仮定しているとみなすことも可能だ^{*16}。また、ニューラルネットを用いた正則化では、陽にその事前分布を知るのは難しいが、やはり事前知識をインプットしている。近年、話題のニューラルネットやその他機械学習手法による推定も、事前知識をどういう形でモデルに含ませるか、すなわちどのように学習させるか、ということが焦点となる。つまり「フィットするだけ」という操作は、非常に自由度が高く、豊かな学問的な内容を持っていると考えられる。もちろん完全な自由というわけではなく、だからこそ予測も可能となるわけだ。しかし、このような自由度があるからこそ、推定されたモデルの誤差評価は重要になってくる。データにノイズが多く情報が少ないと、結果が事前分布に似てくることは良く知られている通りである。その意味で、Spin-Orbit Tomographyとその拡張もすべてベイズ化して事後分布を求められる形に定式化されることが望ましい。しかしガウシアンによる正則化の場合を除いて、これはなかなか難しい問題であり、今後の課題の一つである。

また、どのように我々は逆問題の構成を選ぶべきかという問題もある。様々な正則手法で多種多様なマップが推定されたとして、我々はどれを最適なものとして選ぶのだろうか。これは何もSpin-Orbit Tomographyにのみ存在する問題ではなく、例えばブラックホールシャドウの再生イ

^{*15} 誰だったかは覚えていない。

^{*16} 有限でない領域で一様な確率を定義することはできないが、ここでは十分広い幅を持った有限の領域の事前分布が実質的に対応すると考えている。

メージ、CTスキンの脳画像、石油探査の位置推定といった推定に関してどのような事前知識を選ぶべきなのだろうか？ そもそも何をもって良い再生イメージ、推定パラメタなのかという問題がある。機械学習の分野では、汎化誤差最小が一つの指針であり、平たく言うと、将来のデータをより良く推定できる事前知識が善である。しかし、正則化に非常に敏感な逆問題の場合どうなのだろうか？ 我々は次のデータ点をより良く推定するモデルを本当に欲しているのだろうか？ それは一つの基準にはなりうるが、目的と手段が逆転している感が否めない。これは形而上学的な問いではなく、画像復元のコンテキストでは以下の形で具体的問題としてあらわれる。汎化誤差を最小にするモデル選択では、例えば交差検証^{*17}や情報量基準のような方法で正則化手法を選ぶことができる。こうして選ばれたマップは汎化誤差が最小かもしれないが、例えば選択されたマップにある大陸が正しく表れているか、もしくはノイズで偽の大陸が表れていないかどうかということと汎化誤差最小とは直接は関係しない。大陸ぐらいだったら良いが、CTスキンの場合、偽の血管が写ってしまうようでは困る。この場合は、未来のデータの予測精度を最適化したいのではなく、再構成したモデルそのものをなんらかの意味で良くしたいという目的がある。この場合は、汎化誤差最小が良い基準とも思えない。逆問題は正則化が肝であるだけに、この辺りをもう少しはっきりさせたいものである。

本稿は月報編集委員の福井暁彦さんの依頼により、私の単著による結果のほか、主に逢澤正嵩さん・Siteng Fanさん・藤井友香さん・増田賢人さんと執筆した論文、また一人一人名前は挙げませんが周囲の皆さんとの共同研究や楽しい議論に基づいて書き下したものです。皆さんには日ごろから大変お世話になっており、この場を借りて深く

感謝いたします。また、同じ課題に取り組む海外の研究者の論文も多く紹介しました。自分が考えている問題について、考えてもみなかったアイデアを知った時の興奮は研究者冥利に尽きると思います。

参考文献

- [1] Kawahara, H., & Fujii, Y., 2010, ApJ, 720, 1333
- [2] Kawahara, H., & Fujii, Y., 2011, ApJ, 739, L62
- [3] Fujii, Y., & Kawahara, H., 2012, ApJ, 755, 101
- [4] Schwartz, J. C., et al., 2016, MNRAS, 457, 926
- [5] Kawahara, H., 2016, ApJ, 822, 112
- [6] Nakagawa, Y., et al., 2020, AJ, 898, 95
- [7] Luger, R., et al., 2018, arXiv:1903.12182
- [8] Fan, S., et al., 2019, ApJ, 882, L1
- [9] Aizawa, M., et al., 2020, ApJ, 896, 22
- [10] Asensio-Ramos, A., & Pallé, E., 2021, A&A, 646, A4
- [11] Farr, B., et al., 2018, AJ, 156, 146
- [12] Kawahara, H., & Masuda, K. 2020, ApJ, 900, 48
- [13] 河原創, 2018, 系外惑星探査 (東京大学出版会)
- [14] Cowan, N. B., & Strait, T. E., 2013, ApJ, 765, L17
- [15] Fujii, Y., et al., 2017, AJ, 154, 189
- [16] Craig, M. D., 1994, IEEE TGRS, 32, 542
- [17] Kawahara, H., 2020, ApJ, 894, 58

Mapping a Second Earth

Hajime Kawahara¹

¹ The University of Tokyo, 7-3-1 Bunkyo-ku, Hongo, Tokyo 113-0033, Japan

Spin-Orbit Tomography (SOT) reproduces a two-dimensional map of a planetary surface from the time variability of reflected light. It has been about ten years since SOT was proposed, and during this period, various theoretical advances have been made, such as improvements of regularization methods using sparse modeling and neural nets, a Bayesian interpretation, and a mapping with spectral unmixing of surface compositions. In addition, verification using actual reflected light curves of Earth, as observed by the DSCOVR satellite, has been progressed. In this article, I review the recent progress in SOT and discuss several issues to be solved in the future.

*17 データを適当に間引いて、そのデータを最も良く予言するものを選ぶ手法。