

敵対的生成モデルを用いた輝線強度 マッピングデータからのシグナル抽出



森 脇 可 奈

〈東京大学ビッグバン宇宙国際研究センター 〒113-0033 東京都文京区本郷 7-3-1〉
e-mail: kana.moriwaki@phys.s.u-tokyo.ac.jp

将来の輝線強度マッピング観測では、これまで以上に大領域にわたって銀河の三次元分布が得られる。しかし、こうした観測では異なる赤方偏移から来る異なる種類の輝線が混在してしまうという重大な問題がある。本稿では、敵対的生成モデルを観測データに適用することで特定のシグナルのみを抽出する手法を紹介する。ここで用いる条件付き生成モデルは、輝線強度マッピングデータだけでなく様々な天文データに適用することができる。

1. はじめに

宇宙初期の微小な物質密度のゆらぎは、重力成長することで物質や銀河の特徴的な分布、宇宙大規模構造を形成する。宇宙大規模構造の観測は、宇宙の初期状態や宇宙の膨張史を詳細に探る重要なプローブとなる。さらに、こうした観測は銀河の形成・進化過程を明らかにすることもできる。将来の観測では、これまで以上に広い領域にわたる大規模構造データが得られる。そのため、こうしたデータを適切に解析することが非常に重要となる。今後得られる膨大な観測データを適切に解析するに当たって、データ科学の手法が重要な役割を果たす。中でも特に、GPUの登場によってここ10年で急速に発展してきた深層学習モデルは、従来の解析手法よりも多くの情報を観測データから得ることができると期待される。

本稿では、機械学習特集の記事として、特に輝線強度マッピング観測と呼ばれる観測によって得られるデータから深層学習を用いて大規模構造シグナルの抽出を行う手法について紹介する。以下ではまずこの観測手法とその問題点について第2章で述べ、本稿で想定する問題設定を示す。次に

第3章で、本研究で用いる「条件付き敵対的生成モデル (conditional Generative Adversarial Network; cGAN) [1]」を紹介する。第4章で模擬輝線強度マッピング観測データにcGANを適用した場合の結果を示したのち、第5章で今後の展望について述べる。ここで紹介するシグナルの分離・抽出手法は他の天文データへ適用することもできる [2]。

2. 輝線強度マッピング

銀河の三次元的な分布を調べるには、天球面上での二次元的な分布に加えて奥行き方向の位置を特定することが必要となる。銀河赤方偏移サーベイでは、個々の銀河を分光観測して銀河内の原子や分子から放出される輝線を同定することで赤方偏移を測り、銀河の奥行き方向の位置を決定する。この場合、ひとつひとつの銀河を詳細に分光観測する必要があることから、大領域を探索するには多くのコストがかかる。こうした従来の銀河サーベイ手法と相補的な役割を果たすのが、近年注目されてきている輝線強度マッピングと呼ばれる観測手法である。この観測手法では、個々の輝線を同定する代わりに天球面上の広領域にわたっ

て粗い空間解像度・粗い波長分解能で網羅的に分光観測を行う。様々な銀河からの輝線放射の重ね合わせは、スペクトル中の「ゆらぎ」として観測される。観測スペクトルからこのゆらぎ成分だけを取り出すことで、大領域にわたる輝線銀河の三次元分布を得ることができる。これによって効率的に広領域を探索することが可能となる。

現在、多くの輝線強度マッピング観測が計画・実行されている [3]。SKA (Square Kilometre Array) などによる中性水素からの 21 cm 線だけでなく、 $H\alpha$, $[OIII]$, $Ly\alpha$ などの可視・紫外輝線や CO, $[CII]$ などの電波・遠赤外輝線といった様々な波長帯における輝線を用いたマッピング観測も考えられてきている。例えば、2025年に観測を開始する NASA の SPHEREx 衛星 [4] では、近赤外波長における輝線マッピングが行われ、200 平方度 (deep 領域) にわたる赤方偏移 2-6 程度の可視輝線銀河の分布の探索が予定されている。

輝線強度マッピングは有用な観測手法である一方、「輝線の混在」と呼ばれる重大な問題が存在する。図1のように、天球面上のとある一点においてスペクトルに揺らぎがみられたとする。仮に一種類の輝線しか考えなくてよいような場合にはその観測波長はそのまま赤方偏移と一対一対応する。しかし、図1下部に示すように、その波長帯において明るい輝線が複数あるような場合には、観測されたゆらぎがどの輝線 (どの赤方偏移) のものなのかを判別することができない。その結果、ある観測波長で得られる輝線強度マップは複数の時代における大規模構造マップを重ね合わせたようなものとなる。例えば、観測波長 $\lambda_{obs} = 1.5 \mu m$ では、図2上段に示すように、赤方偏移 $z=1.3$ (宇宙年齢約 50 億年) からの水素輝線 ($H\alpha$, 静止波長 6563 Å) と赤方偏移 $z=2.0$ (宇宙年齢約 30 億年) からの酸素輝線 ($[OIII]$, 静止波長 5007 Å) を足し合わせたものが観測される。

こうした輝線の混在問題は多くの観測波長帯で問題となり [5], 得られたデータから宇宙論や天

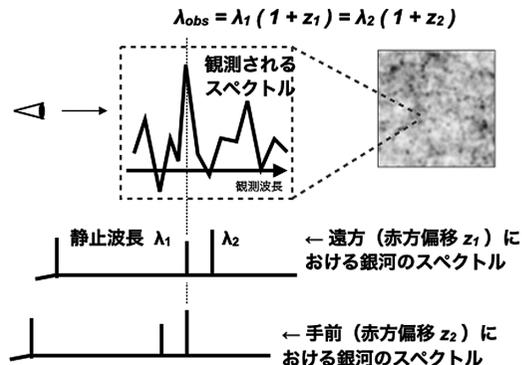


図1 輝線強度マッピングでは解像度を犠牲にして、大領域を網羅的に分光観測する。遠方銀河からの輝線放射は、スペクトル中の揺らぎとして観測される。明るい輝線が複数ある場合には異なる赤方偏移からの寄与が同じ波長で観測されてしまう。

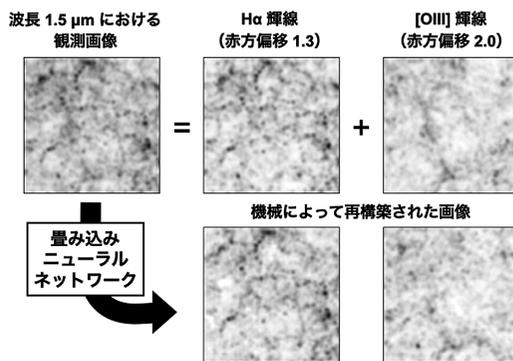


図2 波長 1.5 μm における観測マップには赤方偏移 1.3 からの $H\alpha$ 輝線と赤方偏移 2.0 からの $[OIII]$ 輝線がいずれも寄与する。我々は、これを機械学習によって分離する手法を提案する。図はシミュレーションによって得られた角度方向の二次元大規模構造 (一辺 1.7 deg) を示す。また、黒い領域ほど放射強度が大きい。

文現象について制限を与える際の系統的な誤差の要因となりうる。これまで主に、相互パワースペクトルを用いた手法などの統計的なシグナル分離方法が考えられてきた [6]。しかし、例えば大規模構造の非ガウスの性質を用いた解析や、銀河の環境に関する研究を行う場合には、特定の時代における輝線シグナル分布そのものを分離することが重要となる。そこで、本稿では深層学習を用

いてシグナルが混在した観測データから特定の時代における輝線分布のみを抽出する手法について考える。

3. 機械学習モデル

3.1 畳み込みニューラルネットワーク

本稿では、機械学習モデルのうち画像の解析に最もよく利用される畳み込みニューラルネットワーク (Convolutional Neural Network; CNN) を用いたモデルを考える。畳み込みとは、畳み込みフィルター (重み/カーネル) を画像の端から端まで少しずつずらしながら画像にかけ合わせる操作のことを指す。多数の畳み込み操作 (畳み込み層) を何度も繰り返したものがCNNである。一度にフィルターをどれだけずらすかを表すパラメータはストライドと呼ばれ、例えばストライドが2の場合には元の画像データの一边のピクセル数がおよそ半分になったものが出力される。学習においては、CNNが課題 (例えば画像の分類や特徴量抽出など) を適切に解決できるようにフィルターなどのパラメータが随時更新されていく。

図3に、とある模擬観測データに対するCNNの第一層の出力 (特徴マップ) の例を示す。ここでは、5×5のフィルターを採用しており、それぞれに対してひとつずつ特徴マップが得られる。

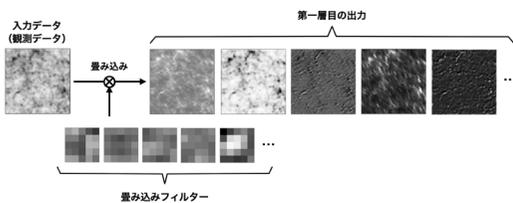


図3 我々の構築したCNNの第一層における畳み込みフィルター。入力データ (観測データ) に5×5のフィルターを畳み込むことで、それぞれのフィルターに対してひとつずつ出力が得られる。本研究では第一層において64枚のフィルターを用いたが、ここではそのうちの5つを示している。

一般に、畳み込みによって画像内のさまざまな特徴を抽出することができる。一回の畳み込み操作でフィルターのサイズに対応するスケールの特徴を捉えることができ、これを繰り返すことでより大スケールの情報を取り出すことが可能となる。CNNでは数多くのフィルターを用いて画像が処理されるため、入力画像内の複雑な情報を取り出すことができる。

3.2 条件付き生成モデル

観測データからシグナルのみを生成する機械学習モデルは、条件付き生成モデルと呼ばれるものの一つである。こうしたモデルの構造の一例を図4に示す。ここでは、畳み込みのストライドを2以上にとって中間層*1において得られる画像サイ

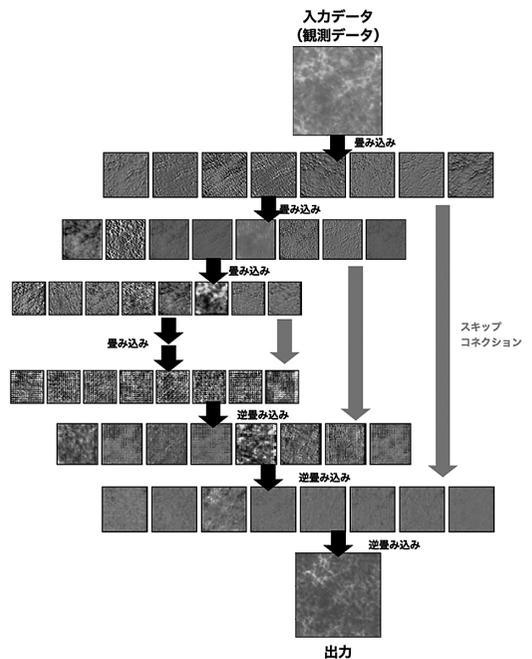


図4 条件付き生成モデルの構造。より手前の層において得られた情報は、次の畳み込み層に送られるだけでなく後の層にも直接渡される。これによって手前で得られた小スケールの情報を取り逃がすことなく画像生成を行うことが可能となる。

*1 深層学習ネットワークにおいて、第一層 (入力層) と最後の層 (出力層) を除く層を中間層 (もしくは隠れ層) と呼ぶ。

ズを減らしている。ある程度深層まで辿り着いたのち、入力データと同じサイズの画像が最終的に得られるよう今度は逆に画像サイズを増やすような畳み込み操作（逆畳み込み／deconvolution）を行う。前半の畳み込み層からなる部分をエンコーダー、後半の逆畳み込みからなる部分をデコーダーと呼ぶ。このようなネットワーク構造の場合、必要となる計算コストを抑えることができる一方、エンコーダーの手前の層で得られる小スケールの情報が伝わりにくくなってしまふ。そこで、手前の層で得られた出力をデコーダーの対応する層に直接送るという手法がしばしば用いられる。これをスキップコネクションと呼び、こうしたネットワーク構造はU-ネット構造と呼ばれる [7]。

生成モデルの学習可能なパラメータ^{*2}を $\{\theta_i\}$ と表す。CNNの場合には、 $\{\theta_i\}$ には畳み込みフィルターの各ピクセルの値が含まれる。こうしたパラメータ群によって定義される関数として生成モデルを G_θ と表す。このとき、観測画像 X_{obs} に対して、生成される画像は $G_\theta(X_{\text{obs}})$ と表される。機械学習では、目的に応じて適切な損失関数を設定し、ネットワークはこれをできるだけ小さくするように学習を行う。我々の問題設定では、真のマップ (X_{true}) にできるだけ近い画像を生成することが目的である。例えば、生成器によって生成される画像のピクセルごとの差の絶対値の平均を取ったもの (L1 ノルム)

$$L_{L1} = |G_\theta(X_{\text{obs}}) - X_{\text{true}}| \quad (1)$$

を損失関数として与えることでこの目的が達成されると期待される^{*3}。学習は、パラメータ $\{\theta_i\}$

に対する損失関数の勾配

$$g = \nabla_{\theta} L[G_\theta] \quad (2)$$

が下がる方向にパラメータを更新することで行われる。最も単純には一回の学習ごとに

$$\theta_i \rightarrow \theta_i - \alpha g_i \quad (3)$$

のように、各パラメータ θ_i は勾配に比例する量 (比例係数 α) だけアップデートされる。これによって損失関数が少しずつ小さくなっていく。

目的に応じて用いるべき損失関数は異なる。我々のシグナル分離の課題の場合、後述するようにL1ノルムのような単純な損失関数を用いるだけではうまく分離が行えないことがわかった。一般に、個々の課題設定に応じて適切な損失関数を見つけ出すには多くの労力が必要となる。損失関数も含めて機械に学習させてしまうことでこの課題を解決するのが、次で述べる敵対的生成モデルである。

3.3 敵対的生成モデル

敵対的生成モデルとは、画像生成器 G と画像判別器 D と呼ばれる二つのネットワークが敵対的に学習を行うことでより高性能な画像生成器を得る手法である^{*4}。敵対的生成モデルは元々、ノイズを入力としてランダムな画像を生成するモデルとして開発されたが、条件付き生成課題に対しても同様に用いることができる [1]。

本稿で扱う条件付き敵対的生成モデルの概要を図5に示す。生成器は先ほどと同様に観測画像 X_{obs} から画像 $G(X_{\text{obs}})$ を生成する。画像判別器は、その名の通り真の画像 X_{true} と画像生成器の生成

^{*2} 学習によって随時更新されていくパラメータを指す。これとは逆に、予め固定され、学習によって変更されないようなパラメータをハイパーパラメータと呼ぶ。例えば、畳み込みにおけるフィルターのサイズやストライドなどはハイパーパラメータとすることが一般的である。

^{*3} 実際には、一回の学習はいくつかのデータ (ミニバッチ) の損失関数の平均 $\sum_{i=0} L_i$ をとって行われる。

^{*4} 敵対的生成モデルとは、特定のネットワーク構造を指すというよりは特定の学習方法を指すものであると考えるべきである。最初に提案された敵対的生成モデルはCNNを用いたものであったが [8]、他のネットワークを用いたものも存在する [9]。

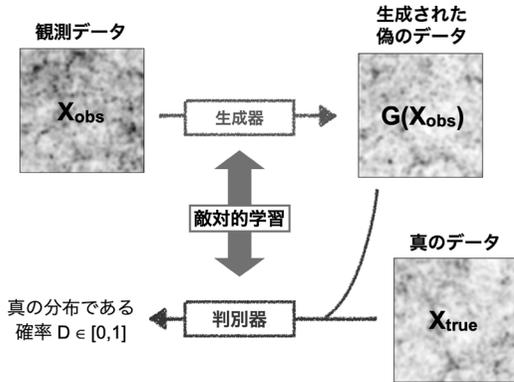


図5 敵対的生成モデルでは、画像生成器と判別器と呼ばれるCNNが互いに敵対しながら学習を行う。本研究では、生成器は観測データ(X_{obs})から特定の赤方偏移における輝線シグナル分布 $G(X_{obs})$ のみを抽出し、判別器は入力されたデータが偽のデータ(生成器によって生成されたデータ)か真のデータ(X_{true})かを判別する。生成器は判別器をできるだけ騙すように学習を行う。

した「偽」の画像 $G(X_{obs})$ を見分ける役割を担う。実際には、画像判別器 D は入力画像に対して0から1の間の数字を返すようなCNNとなっていて、真の画像が入力された場合にはできるだけ1を、偽の画像が入力された場合にはできるだけ0を返すように学習する。条件つきモデルの場合、判別器は判別対象の画像(X_{true} か $G(X_{obs})$)に加え観測データ X_{obs} も入力データとして与えられ、それらを照らし合わせるようにして判別処理を行うが、図5ではこれは省略されている。具体的には、毎回の学習で真のデータと偽のデータがそれぞれ同量ずつ与えられ、損失関数

$$L_{GAN} = \log D(X_{obs}, X_{true}) + \log [1 - D(X_{obs}, G(X_{obs}))] \quad (4)$$

をできるだけ大きくするように学習する。これは二値分類で一般に使われるバイナリ交差エントロピーと呼ばれる損失関数である。画像判別器は(4)式の損失関数を最大化するよう最適化される一方、画像生成器はこの損失関数をできるだけ

小さくするように学習を行う。つまり、生成器は画像判別器を騙して $D(G(X_{obs}))$ ができるだけ1に近づく(本物と判定される)ようにアップデートされていく。このような敵対的学習によって、画像生成器が真の画像の複雑な特徴を捉え、より適切に画像生成を行うことが可能となる。

4. 輝線強度マッピングデータへの応用

4.1 機械学習を用いたシグナル分離

以上で述べたような条件付き敵対的生成モデルを輝線強度マッピング観測データに適用することで、特定の時代における輝線シグナルの分布を抽出する手法について述べる。ここではまず、ある特定の波長における観測データ(二次元画像データ)を用いた解析手法を考える。特に、SPHERExなどで将来観測される $1.5 \mu\text{m}$ のデータを想定する。この観測波長では、 $\text{H}\alpha$ 輝線と $[\text{OIII}]5007 \text{ \AA}$ 輝線が主な輝線シグナルとなる。これら以外の輝線の寄与や観測ノイズはここでは無視する。

ネットワークの学習に必要なのが、大量の学習データである。我々は、準解析的手法[10]と宇宙論的流体シミュレーション[11]に基づき、SPHERExによる観測を想定して計3万枚の模擬観測データを生成した。与えられた観測データに対して $\text{H}\alpha$, $[\text{OIII}]$ それぞれの輝線分布を返すような生成器とそれらに敵対する判別器をそれぞれ二つ用意し、これらを同時に最適化した。

図2下段に生成器によって生成された結果の一例を示す。上段における真の輝線強度分布と比べると、 $\text{H}\alpha$, $[\text{OIII}]$ いずれの輝線に対しても輝線強度のピーク位置の分布やそのほかの特徴的な構造が適切に再現できていることがわかる。明るいピークの検出率を調べたところ、1,000枚のテストデータに対して適合率(機械によって検出されたピークのうち実際にピークであるものの割合、precision)は $\text{H}\alpha$, $[\text{OIII}]$ に対してそれぞれ76, 27%, 再現性(実際のピークのうち機械によ

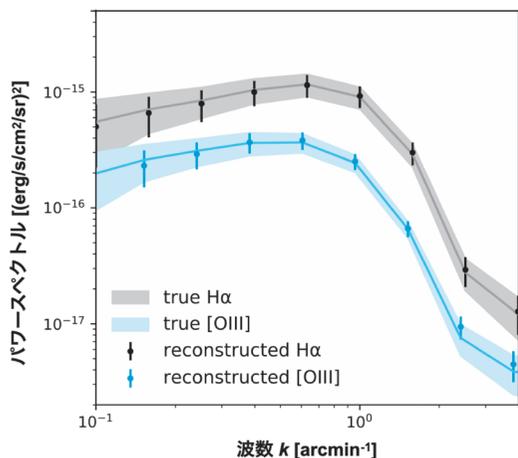


図6 敵対的学習の結果二次元パワースペクトルがいずれの輝線に対しても適切に再現された。影部とエラーバーは、テストデータ1,000枚に対する真のマップと再構築されたマップの分散を表す。図は [14] を改変。



図7 L1 ノルム (式1) のみを生成器の学習に用いた場合の結果。真のシグナル分布に比べてぼやけた分布となっている。

て検出されたものの割合, recall) は74, 29%を達成していることがわかった。さらに, 学習において損失関数として明示的に与えていないパワースペクトルなどの統計量も適切に再現できることがわかった (図6)。

ここで, 単純なL1 ノルムのみを学習に用いた場合の結果を見てみよう。図7に同じく1.5 μm の模擬観測データを用いた場合の [OIII] シグナルの再現結果を示す。これを実際の輝線分布 (右図) と比較すると, 非常にぼやけた分布 (中央) となっていることがわかる。これはL1 ノルムを用いた場合ピクセルごとに大きく間違えることに対して重いペナルティが与えられるためである。この場合, 各赤方偏移で銀河が密集する場所を明確に特定することができないだけでなく, パワースペクトルや一点分布関数などの統計量を再現することもできない。このことから, 敵対的生成モデルを用いたことによって (詳細な損失関数のチューニングをなくして) シグナル分離が成功したということが確かめられる。

4.2 三次元輝線強度マッピングデータの解析

最後に, 三次元データへの敵対的生成モデルの適用結果についても紹介する。ここまでは単一の波長におけるデータのみを用いて二次元画像の解析を考えたが, 実際には分光観測によって波長方

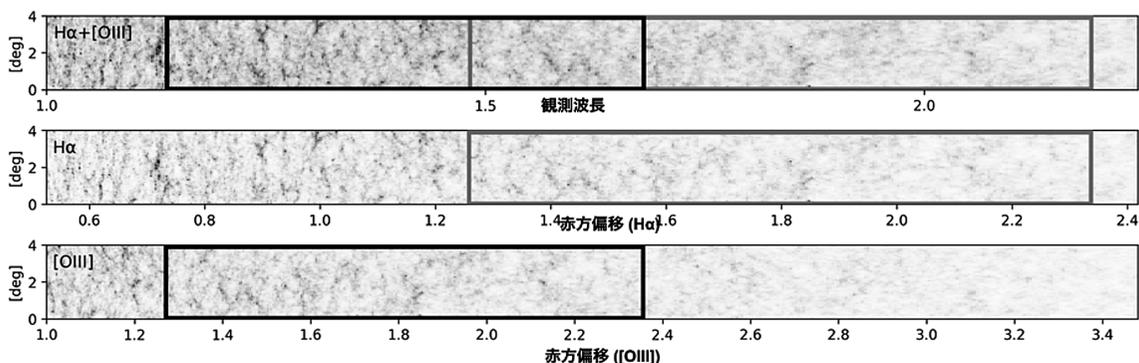


図8 シミュレーションを用いて生成した, 観測波長1-2.3 μm において観測される輝線強度マップ。特定の観測波長に着目すると異なる赤方偏移からのH α , [OIII] 輝線が重なったものが観測される。観測データのうち, 枠で囲われた二つの部分を生成器への入力とする。

向の情報も得られる。ここでは、三次元CNNを用いて三次元観測データからシグナルの抽出を行う手法を考える。実は、単純な構造の三次元CNNを用いて学習を行った場合、二次元データを用いた場合と同程度かそれ以下の精度しか得られないことがわかった。そこで、ここでは同じ赤方偏移からの輝線シグナルが波長方向に複数回現れるということに注目する。例えば、赤方偏移2にある銀河から放出されるH α 輝線と[OIII]輝線はそれぞれ2 μm , 1.5 μm あたりで観測される。輝線種は異なるものの、いずれのシグナル分布も同じ大規模構造をトレースする。もしも、多波長で「シンクロ」しているような複数のシグナルの存在をネットワークが学習できれば、より高い精度でシグナル抽出を行うことができると考えられる。

我々は、そうしたシグナルの抽出を容易にするようなネットワークを構築した。このネットワークは、図8上段で囲われた二つの波長範囲のデータを生成器への入力として用いる。この二つの観測データには、それぞれ特定の赤方偏移範囲($z=1.3-2.4$)におけるH α , [OIII]輝線シグナルが含まれる。生成器の第一層ではこれら二つの三次元マップにそれぞれ別の三次元畳み込みフィルターを用いた畳み込みが施され、それによって得られる二つの三次元データが足し合わされたものが次の層への出力となる^{*5}。元の観測データ上では波長方向に離れたところに存在していた二つの「シンクロ」したシグナルが入力データ上で重なって現れるようにすることで、機械にとってそれらを取り出しやすくなることが期待できる。

このようなネットワークを用いて、特定の輝線放射の三次元分布を出力するように学習を行った。また、ここではSPHERExで想定されている観測ノイズも取り入れてより現実的な条件のもとでシグナル分離を行った。図9に、[OIII]シグナ

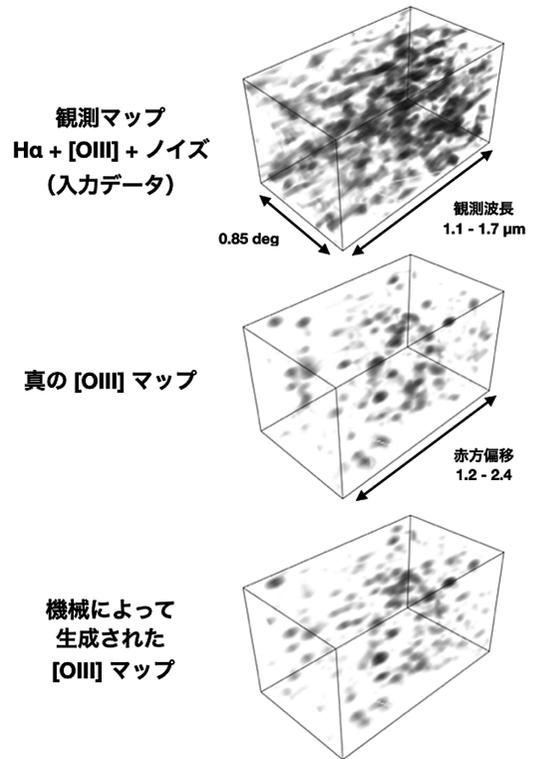


図9 (上) 観測波長1.1-1.7 μm にわたる三次元模擬観測マップ (H α + [OIII]+ノイズ). 機械はこれともう一つの観測波長帯における三次元マップを入力としてシグナル抽出を行う。(中) 赤方偏移1.2-2.4における真の [OIII] 輝線分布. 上図と同じ観測波長範囲に対応する。(下) 機械によって生成された赤方偏移1.2-2.4における [OIII] 輝線分布. 大規模分布がよく再現されていることがわかる. 図はいずれも0.85 deg \times 0.85 degの範囲を示す.

ル分布の再構築の結果を示す。模擬観測データはノイズやH α シグナルが支配しているにもかかわらず、ピークの位置やシグナルの強度は適切に再現されている。明るい放射源の位置はH α , [OIII]それぞれで適合率84, 68%, 再現性78, 67%と、いずれの輝線に対しても高い精度で再現された。こうした高い再現性は我々の考案したネットワー

*5 このように、複数の入力に対する畳み込みを行う場合には複数のフィルターが用いられる。例えば、一般的なカラー画像の場合も同様に、RGBの三つのデータに対して三つ一組の畳み込みフィルターを用いて畳み込みがなされる。

ク構造に起因するものであると考えられる。

5. 今後の展望

本稿では、敵対的生成モデルを用いて観測データからシグナルを抽出する手法を紹介した。今後、SPHERExなどで得られる観測データに実際にこの手法を適用することで、宇宙論の制限や銀河形成の理解につながるだろう。さらに、本稿で紹介したモデルは宇宙再電離期からの微弱な放射の検出にも重要な役割を果たすと考えられる。また、敵対的生成モデルは、このほかにも様々な課題に適用することができる。例えば、すばるHSCによって得られた重力レンズマップにおけるノイズ除去にもすでに用いられている [2]。深層学習を用いた手法は、膨大な観測データに埋もれた情報を最大限引き出して解析を行うことを可能とするだろう。

機械学習を用いた解析を行うにあたっては、いくつかの解決すべき課題が存在する。例えば、事前に全く予想していなかったような観測データがネットワークに入力された場合、それを感知できるような仕組みを用意しておく必要がある。また、特に深層学習の場合、ネットワーク中でどのような解析が行われているかが不明であることも実用上の問題となりうる。データ科学の分野では、こうした課題を解決するにあたって近年多くの手法が研究されており、少しずつ解決の道筋が見えてきている [12, 13]。機械学習の手法を用いて天文学における課題を解決するためには、今後一層、データ科学の専門家と協力しながら手法の検討を行っていくことが重要となる。

謝辞

本稿の内容は主に白崎正人氏、吉田直紀氏、Nina Fillipova氏との共同研究 [14, 15] に基づいています。執筆の機会をくださった西澤淳氏に感謝いたします。

参考文献

- [1] Isola, P., et al., 2016, CoRR, abs/1611.07004
- [2] Shirasaki, M., et al., 2021, MNRAS, 504, 1825
- [3] Kovetz, E. D., et al., 2017, arXiv e-prints, arXiv:1709.09066
- [4] Doré, O., et al., 2018, arXiv e-prints, arXiv:1805.05489
- [5] Fonseca, J., et al., 2017, MNRAS, 464, 1948
- [6] Visbal, E., & Loeb, A., 2010, J. Cosmol. Astropart. Phys., 11, 016
- [7] Ronneberger, O., et al., 2015, arXiv e-prints, arXiv:1505.04597
- [8] Goodfellow, I. J., et al., 2014, arXiv e-prints, arXiv:1406.2661
- [9] Jiang, Y., et al., 2021, arXiv e-prints, arXiv:2102.07074
- [10] Monaco, P., et al., 2013, MNRAS, 433, 2389
- [11] Nelson, D., et al., 2019, Computat. Astrophys. Cosmol., 6, 2
- [12] Kendall, A., & Gal, Y., 2017, arXiv e-prints, arXiv:1703.04977
- [13] Samek, W., et al., eds. 2019, Explainable AI: Interpreting, Explaining and Visualizing Deep Learning (Springer International Publishing)
- [14] Moriwaki, K., et al., 2020, MNRAS, 496, L54
- [15] Moriwaki, K., & Yoshida, N., 2021, ApJ, 923, L7

Extracting Signals from Line Intensity Maps with Generative Adversarial Models

Kana MORIWAKI

Research Center for the Early Universe, The University of Tokyo, 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-0033, Japan

Abstract: Future line intensity mapping observations will provide three-dimensional distributions of galaxies over larger volumes than ever before. However, there is a serious problem that multiple emission line signals are confused in the observed maps. In this article, we introduce a method to extract designated signals by using a generative adversarial model. The conditional generative model that we use here can be applied not only the line intensity mapping data but also to various astronomical data.