

研究報告書

「岩石からのプロセス抽出：究極の逆問題に挑むベイズ計測」

研究タイプ：通常型

研究期間：2016年10月～2020年3月

研究者：桑谷立

1. 研究のねらい

固体地球のダイナミックな営み、たとえば、大陸－島弧沈み込みシステムの造山運動、地震・火山の発生メカニズム、資源の形成メカニズムを解明するには、対象とする地質システムの熱史および物質移動の詳細の理解が必須となる。このような地球内部の物質・エネルギー循環を実証的・物質科学的に解明する学問が岩石学である。

岩石学の数理的本質は、最終状態である岩石という「結果」から、岩石形成に関わる地球科学現象（プロセス）に相当する「原因」を推定する逆問題である。しかしながら、この逆問題を解くことは容易ではない。この問題は例えてみると、1枚もしくは少数のスナップショット写真だけから、被写対象の人物の半生を語るようなものである。このようないわば「究極の逆問題」に挑戦するためには、計測・分析により対象から最大限の定量的データを抽出するとともに、得られたデータから本質的な情報を最大限に引き出す必要がある。

本研究の目的は、ベイズ推論を基にした情報×計測融合技術（ベイズ計測）により、電子プローブマイクロアナライザ（Electron Probe Micro Analyzer: EPMA）分析から高精度・高解像度な鉱物組成定量画像を取得するとともに、これらの化学組成データ群から岩石形成に関わるプロセスを直接的に抽出することである。これにより、従来手法では実現し得なかった高精度・客観性・次元の推定を可能にし、岩石薄片1枚から、関連する地球内部プロセスを解読するという究極の逆問題に挑戦する。具体的には、岩石組織として残された化学組成データから、岩石自身の経験した物理化学条件の履歴を復元するとともに、その過程における物質移動（元素の増減）を明らかにする問題に取り組む。本研究は、地球物質科学分野に限らず、計測から本質的な情報を抽出するための次世代情報×計測融合技術開発のさきがけをなすものと確信する。

2. 研究成果

(1) 概要

岩石プロセス抽出の困難さの原因は、①岩石組織という空間データのみから過去の時間履歴を復元する必要があること、さらに、②過去の状態が上書きされていて、現在の状態のみしか得られない場合があること、の2つに大きく起因する。本研究では、岩石プロセス抽出を阻むこれらの根本的な壁を解決するために、最もわかりやすく本質的かつ基盤的な研究テーマに取り組み、情報計測融合アプローチにより多数の問題を解決した。

【研究テーマA】では、あらゆる岩石プロセス抽出の基盤となる化学組成データ取得に関して、確率論的クラスタリングなどを用いることで、電子プローブマイクロアナライザ（EPMA）分析から定量的な組成画像データを高精度・高速に得る方法を開発した。本手法により、これ

までの数万倍のデータ量かつ2次元としての定量組成データを活用できるため、岩石プロセス抽出のゲームチェンジにつながるものである。[関連成果:論文 4]

【研究テーマ B】では、変成岩岩石学の最重要問題である温度圧力(時間)履歴の高精度な推定をベイズ推論により実現した。この過程において、データ同化技術の拡張により、岩石プロセス抽出に関する最大の困難の原因である「①空間データからの過去の履歴情報の抽出」を可能にする数理科学的方法を新たに開発した。[関連成果:論文 2、3]

【研究テーマ C】では、スパースモデリングを応用することで、高次元化学元素データを活用し、物質移動量を定量的に推定する画期的な方法を新たに開発した。この問題は、岩石試料の過去における体積が未知であるために原理的に推定不可能な難問とされており、岩石プロセス抽出の困難の原因である「②過去の情報が上書きされている場合」の問題解決に対応している。[関連成果:論文 1、5]

上で挙げた三つのテーマの他にも、岩石学プロセス抽出に関連して、地球物理学・地質学・環境科学なども含む多様なアプローチに関して、領域内外の様々な研究者とともに情報計測融合研究を展開した。[関連成果:特許出願 1、その他の成果 1-5]

以上に示したように、数理・情報科学的手法により、岩石プロセス抽出技術を高度化する多様な研究成果を得た。これらの手法は、限られた岩石データから地球内部プロセスを抽出する基盤的技術であり、地球物質科学分野の情報計測融合のさきがけとして、今後、様々な領域に展開され固体地球科学現象の理解に大きく貢献するものと期待できる。

(2) 詳細

【研究テーマ A】「確率論的クラスタリングなどを用いた EPMA 定性分析画像の高精度定量組成画像データ化」

岩石プロセス抽出において、これまでは数~数十点ほどの化学組成定量スポットデータのみが定量解析に用いられることがほとんどであった。本テーマでは EPMA で取得できる定性面分析データと定量点分析データを統計的に統合することで、定量的鉱物組成画像データを作成する系統的手法を開発した。本手法の特徴として、1ピクセル内の鉱物種の存在比を決定するソフトクラスタ分析と特性X線強度の理論式を用いることで、広範囲・高速測定を可能にした[論文 4]。本手法により、数理解析に資する定量データについて、数十万点ほどの膨大な2次元組成データが得られることになる。これは、EPMA の能力を最大限に活用していることを意味し今後の岩石組織解析のゲームチェンジを促すものである。現在、使いやすい GUI を搭載したうえで、オープンソースソフトウェア「qntmap」として公開している。

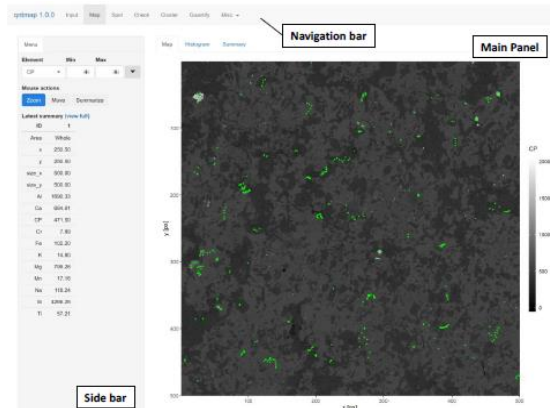


図 1 : EPMA 組成分析ソフトウェア「qntmap」(GitHub で公開)

【研究テーマ B】 ベイズ推論による鉱物組成累帯構造からの温度圧力履歴推定法の開発

岩石プロセス抽出において最も重要な推定対象は温度圧力履歴(P-T path)である。温度圧力履歴の正確な推定は、地下深部の熱史や造山運動のダイナミクスの直接的な理解につながる(図 2)。本研究テーマでは、変成岩中に含まれる組成累帯構造を持つ鉱物粒子から、ベイズ推論を用いて温度圧力(+時間)履歴を定量的に推定する方法論を新たに開発した。

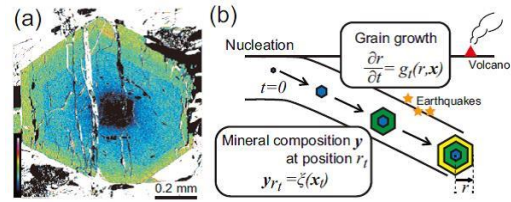


図 2 : ザクロ石の Mg 組成累帯構造

はじめに、ベイズ推論的画像解析手法であるマルコフ確率場(MRF)モデルを利用することで、包有物を用いた汎用性の高い温度圧力履歴推定法を開発した[論文 3]。

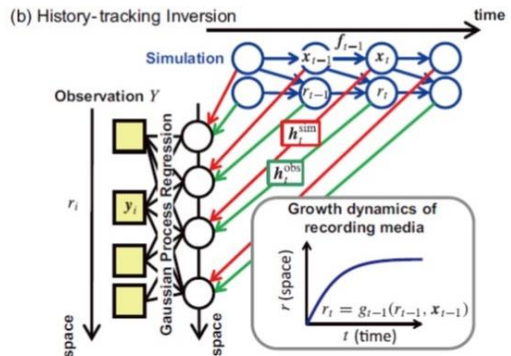


図 3 : 新たに開発した空間 (非時系列) データのデータ同化手法

さらに、解析に鉱物成長則を導入することで、組成累帯構造から温度圧力履歴を時間軸付きで推定する手法を新たに開発した[論文 2]。この手法では、通常は時系列データを対象とするデータ同化技術を拡張することで、空間データのみから最大限に過去の情報を抽出することが可能である(図 3)。現在は、材料科学や環境科学などへの応用も視野に入れて、新たな手法開発を続けている。

【研究テーマ C】「スパースモデリングを用いた物質移動量推定法の開発」

岩石試料の元素増減の推定は、地球科学現象の解明に必須である。しかしながら、化学組成データのみから物質の増減量を推定することは原理的に不可能である。これは、化学組成データが相対量であることに起因している。そこで従来は、研究者が地球化学的知識を基に経験と勘により、試料相互の比較基準となる絶対量(たとえば不動元素など)を仮定することで元素の増減量を推定してきた。

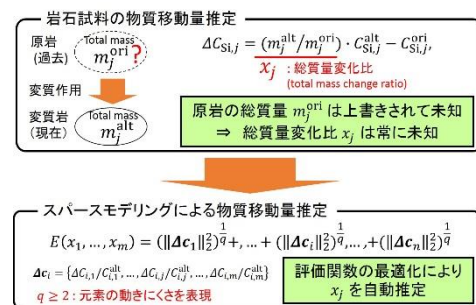


図 4 : スパースアイソコン解析の概要

本研究では、複数試料の元素組成データから、適切に不動元素を自動決定し、物質移動量を推定する方法を新たに提案した(図 4)。提案手法は、スパースモデリング(自然界に内在するスパース性に基づいて、高次元データセットから少数の重要な次元を抽出する数理的枠組み)を活用することで、物質移動量がほぼゼロになる不動元素を自動的に決定することが可能である。ここでは、サンプルごとの総質量変化比を推定するための評価関数を、L1 最適化の拡張である Group Lasso の考え方に基づいて設計した。この評価関数は、全サンプル・全元素に関する物質移動の総量に関連するが、スパース性の強さを示すパラメータ

q の効果により、個別元素の動きにくさの効果を解析に導入している。本研究では、人工データセットおよび天然サンプルデータセットを使用した逆解析テストを実施することで、本手法の有効性を確認している(論文 1)。また、典型的な沈み込みプレート境界岩である三波川変成帯に適用したところ、変成帯全体における大規模な物質移動を示唆する結果が得られている。本手法は、従来の研究者の経験と直感に頼っていた方法論を、高次元の元素データに基づく客観的な方法論に塗り替えるものであり、今後の物質移動推定研究のスタンダードになるものと期待されている。

【その他の研究テーマ】「地球科学分野における情報計測融合研究」

地球科学プロセスの理解に向けて、多様な分野の研究者と協働することで、情報計測融合によるデータ駆動科学的アプローチにより、様々な研究課題に取り組んだ。

岩石学分野においては、逆解析の基礎となるフォワードモデル構築を実施するとともに(Kuwatani & Toriumi, 2017 *Earth Planet Space*; 2020 *Earth Planet Space*)、【研究テーマ A】のソフトクラスタリング手法を応用して、岩石の分類手法を開発した(Yoshida et al, 2018 *J Mineral Petrol Sci*)。また、構造岩石学の立場から、過去の地球内部の応力状態を推定する研究を実施した(Matsumura et al. 2017 *J Mineral Petrol Sci*; 2017 *Earth Planet Space*; 2018 *J Struct Geol*)。地球化学分野においては、LA-ICP-MS 質量分析法の超解像逆解析手法の開発(特許 1; Aonishi et al. 2018 *J Anal Atom Spectro*)、機械学習手法を用いたグローバルテクトニクス場の地球化学判別(Ueki et al. 2018 *Geochem Geophys Geosys*)、地球物理学分野においては、スパースモデリングを用いたプレート境界ゆっくり滑りの空間分布を推定(Nakata et al. 2017 *Sci Rep*)、深層学習を用いた低周波微動の検出(Nakano et al 2019 *Seism Res Lett*)などに貢献した。また、環境科学分野でも土壌の汚染メカニズムの予測などの研究を実施した(Nakamura et al., 2017 *Chemosph*)。

これらの研究成果に関する総説(桑谷 2018, *情報地質*; 岡本・桑谷 2017, *地質学雑誌*)や解説記事(Kuwatani 2019, *Elements*)の執筆を通して、情報計測融合の地球科学分野全体への浸透・定着を目指して活発的に紹介を行った(受賞 1, 2)。

3. 今後の展開

さきがけ研究期間内に開発した基盤的情報計測融合手法群を様々な岩石学の問題に応用展開する。まずは、天然の岩石形成プロセスを模擬できる水熱実験システムの実験試料である。これらの自らが生成するサンプルに適用することで、開発手法の有効性を再検討するとともに、岩石形成の素過程について、新たな知見を得る。また、沈み込みプレート境界岩の典型である三波川変成帯の天然試料群に適用することで、プレート境界の物質循環を時空間的に高精度に解明する。また、多様な分野の研究者と協働することで、断層岩・火山岩・鉱石・土壌試料などに適用し、地震・火山・資源形成のメカニズムの解明や環境評価などにつなげる。下記に各研究テーマについて計画を述べる。

【研究テーマ A】に関しては、新たな機能を充実させるとともに、自身や周囲の研究グループで多数利用することで、岩石学分野におけるソフトウェアの標準化を目指す。【研究テーマ B】に関しては、現在の1粒子・1次元データの解析であったものを、多数粒子・2次元データの解析ができるように拡張し、より高精度な温度圧力時間履歴の解析を可能にする。また、本手法をプレート境

界岩の様々な地域に適用することで、プレート沈み込みおよび変成岩上昇時の挙動を明らかにする。また、非時系列データ同化解析の理論として、岩石に限らず、地球環境試料や物質材料など様々な分野の空間データ解析に応用する。【研究テーマ C】で開発したスパースアイコン法は、様々な地球科学的問題への応用が即座に可能である。断層岩の活動度評価やすべり現象のメカニズム解明、土壌・環境試料の元素移動・汚染メカニズム評価などに応用する。

上で述べた岩石学に限らず、地球物質科学分野全体に情報計測融合の浸透・定着を目指して、領域内外の研究者・研究団体と協働して研究を推進していく。

4. 自己評価

情報計測融合により岩石プロセス抽出を実現する多数の基盤技術を構築し学術論文として公表できたことから、当初の研究目的を概ね達成できたものと自己評価する。岩石から定量的・客観的に過去のダイナミクスを抽出することは、研究課題タイトルにもあるように挑戦的なテーマであったが、研究の中で開発した手法群は、情報計測融合の観点がなければ実現しなかったイノベーションである。

特に【研究テーマ B】で開発した「空間データからの時間ダイナミクス抽出法」(論文 2)は、岩石学分野のニーズを基にデータ同化を改良して新たに生まれた数理科学的手法であり、将来的には、物質材料科学や環境科学などにも応用されるものと期待している。また、【研究テーマ C】で開発した「スパースモデリングによる物質移動量推定手法」(論文 1)は、地球物質科学分野の標準的手法になるとともに、高次元の地球化学データを最大限活用するデータ駆動型解析の嚆矢となるものと期待している。

研究目的を概ね達成できた一方で、天然データや実験データなどの実データへの応用に関して、研究期間内の成果発表が限定的であったことは大きな反省点である。今後、岩石学分野の若手研究者や学生とも連携し、研究を加速させることで成果を早期に公表していくつもりである。

研究実施体制について、地球科学分野および数理・情報科学分野の様々な研究者と協働したことが多数の研究成果につながったものと評価している。研究費執行状況については、研究期間後半から水熱実験の導入のため、比較的大きな額を執行した。現在、実験データが得られつつあるが、研究を加速させ成果発表につなげていきたい。

本研究期間に、岩石学・地球化学・地球物理学・環境科学などの多様な分野で、様々な解析手法を開発できた。これらは、各分野における情報計測融合型・データ駆動型のさきがけであると自負している。今後、各分野でこの流れが大きく波及していくものと予想している。特に、防災・資源エネルギー・環境などで社会貢献できるよう、自身も研究を加速させていくつもりである。

本領域の融合活動を通じて、データ同化技術や岩石実験アプローチを自身の研究に取り入れるなど、新たな挑戦ができた点は大きな収穫であった。今後も、多学問融合の情報計測領域ならではの分野普遍・分野横断の研究に邁進していく所存である。

5. 主な研究成果リスト

(1) 論文(原著論文)発表

1. T. Kuwatani , K. Yoshida, K. Ueki R Oyanagi, M. Uno, S. Akaho, “Sparse isocon analysis: a data-driven approach for material transfer estimation”, <i>Chemical Geology</i> , 532, 119345:1–8 (2020)
2. T. Kuwatani , H. Nagao, S. Ito, A. Okamoto, K. Yoshida, T. Okudaira, “Recovering the past history of natural recording media by Bayesian inversion”, <i>Physical Review E</i> , 98, 043311:1–11, (2018)
3. T. Kuwatani , K. Nagata, K. Yoshida, M. Okada, M. Toriumi, “Bayesian probabilistic reconstruction of metamorphic P - T paths using inclusion geothermobarometry”, <i>Journal of Mineralogical and Petrological Sciences</i> , 113, 82–95 (2018)
4. A. Yasumoto, K. Yoshida, T. Kuwatani , D. Nakamura, M. Svojtka, T. Hirajima, “Fast and precise quantitative electron probe chemical mapping technique and its application to ultrahigh-pressure eclogite from the Moldanubian Zone of the Bohemian Massif (Nové Dvory, Czech Republic)”, <i>American Mineralogist</i> , 103, 1690–1698 (2018)
5. K. Yoshida, T. Kuwatani , T. Hirajima, H. Iwamori, S. Akaho, “Progressive evolution of whole-rock composition during metamorphism revealed by multivariate statistical analyses”, <i>Journal of Metamorphic Geology</i> , 36, 41–54 (2018)

(2)特許出願

研究期間累積件数:1件(公開前の出願件名については件数のみ記載)

1.

発 明 者:青西亨、木村純一、桑谷立、平田岳史、

発明の名称 :質量分析計、質量分析計の信号処理方法及びプログラム

出 願 人:東京工業大学・海洋研究開発機構・東京大学

出 願 日:2017/4/21

出 願 番 号: 2017-084599

(3)その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

1. [受賞] 2019年度日本情報地質学会論文賞, 日本情報地質学会, 2019/6/27, (受賞対象論文: **桑谷立**, “地球科学プロセス解明のためのデータ駆動型解析— 地質学分野における応用例—”, *情報地質*, 29, 49–60 (2018))
2. [受賞] 平成30年度 JAMSTEC 研究開発功績賞, 海洋研究開発機構, 2019/4/1, 地球科学と数理・情報科学の学融合により様々な研究課題を解決したほか、データ駆動科学と呼ぶべき新学術領域の創成に置いて主導的な役割を果たした。
3. [解説記事] **T. Kuwatani**, Earth materials science in a data-driven paradigm, *Elements*, 15, 280–281 (2019)
4. [著作物(分担執筆)] **桑谷立**, ビッグデータ解析, 「図説 地球科学の事典」, p108–109, 朝倉書店
5. [依頼講演] **桑谷立**, 数理情報科学による地球科学逆問題への挑戦, 第21回情報論的学習理論ワークショップ(IBIS2018), 札幌, 2018/11/7