

令和元年6月21日現在

機関番号：82706

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2015～2018

課題番号：15K20864

研究課題名(和文)次世代岩石学へのデータ駆動型アプローチ

研究課題名(英文)Data-driven approach for new-generation petrology

研究代表者

桑谷 立 (KUWATANI, Tatsu)

国立研究開発法人海洋研究開発機構・地球内部物質循環研究分野・研究員

研究者番号：60646785

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,900,000円

研究成果の概要(和文)：化学組成や岩石組織に関する様々な岩石学データから、潜在構造・プロセスを正確に抽出するデータ駆動型の解析技術基盤を構築した。ベイズ推論とスパースモデリングに基づく機械学習手法・データ同化手法などを用いることで、鉱物組成データから温度圧力履歴を推定する手法や、全岩組成・岩石組織データから岩石の起源や物質移動量、反応拡散方程式を抽出する手法を開発した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

データ駆動科学は第4の科学とも称され、今後の科学研究原理の主流となる可能性を秘めている。本研究では、データ駆動科学に関する新しい概念や、機械学習・データ同化などの先端的な数理解析手法を岩石学・地球化学分野にはじめて浸透させることに貢献した。データ駆動型解析を用いて地下の情報を客観的・確率論的に解読することは、地震・火山現象や地下資源形成メカニズムの正確な理解につながり、将来的に防災・減災や資源・エネルギー問題などに貢献する可能性がある。

研究成果の概要(英文)：We constructed a framework of data-driven analysis to accurately extract latent structures and processes from various petrological data such as chemical composition and rock textures. By using machine-learning techniques, we developed various inversion methods which estimate rock origin, mass transfer, and kinetics from whole rock composition and rock textures. We also developed an inversion method which estimates temperature and pressure history from mineral composition data by extending data assimilation.

研究分野：変成岩岩石学，数理地球科学

キーワード：変成岩 データ駆動科学 ベイズ推論 スパースモデリング 化学組成データ

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

岩石はその空間組織と化学組成に過去の情報を保存している。岩石学では、岩石試料を計測・分析した化学組成データをもとに、岩石形成時の物理化学条件や起源・物質移動量を推定する。しかし、データに常に含まれる誤差・不確定性や、未知変数が多数存在する不定問題性などにより、客観的・定量的な推定は、未だに困難である。また、対象とする系に関するモデルが完全に未知であるようなときは、データからどのように潜在的なモデルや構造を抽出すればよいのか、系統的な手法は未だに存在しない。来るべき次世代の新しい岩石学の創設に向けて、岩石学データから最大限に情報を抽出する普遍的なデータ解析の方法論を確立することが重要である。

2. 研究の目的

岩石学データに潜む本質的な物理化学プロセスや構造をデータ駆動で抽出する枠組みを構築する。以下に示す3課題の解決を目標に掲げた。

(1) ベイズ推論を用いた普遍的な温度圧力履歴推定法の開発

様々な事前知識や物理化学制約条件を確率的に熱力学解析に導入することで、普遍的に岩石の温度圧力履歴が推定できる方法を開発する。

(2) スパースモデリングを用いた全岩組成データからの物理化学プロセス抽出

スパースモデリングにより、高次元データを有効に扱うことで、従来の特定元素に注目した限定的な議論からの脱却を可能にする。

(3) ベイズ推論とスパースモデリングを用いた岩石組織からのダイナミクス抽出

岩石組織データと数値計算データを統合することで、従来は発見困難だった時空間ダイナミクスの抽出（反応輸送方程式の特定など）を可能にする。

3. 研究の方法

ベイズ推論とスパースモデリングを基礎とする機械学習技術などの数理解析手法と活用することで、以下の3つの具体的課題に取り組んだ。(1) 普遍的な温度圧力履歴推定法の開発、(2) 全岩組成データからの物理化学モデル抽出、(3) 岩石組織からのダイナミクス抽出、である。研究体制は、研究代表者・桑谷を中心として、岩石学・物理学・脳科学・機械学習の幅広い分野の専門家と協働して実施する。それぞれの課題に関して、様々な自然科学分野の知見を導入したモデルの開発、実データ解析に耐えうるモデルの実装、人工データや単純なデータを用いたモデルの評価、実データ（三波川変成岩など）への適用、解析結果の地球科学的インプリケーション、という段階を踏み、汎用性のあるデータ駆動型解析の方法論を構築した。

4. 研究成果

岩石学分野を対象とする多数のデータ駆動型解析手法を開発した。代表的な研究成果例を以下に示す。記載外の研究成果や詳細については、岡本・桑谷(2017)と桑谷(2018)の総説論文、および個々の原著論文を参照いただきたい。

(1) ベイズ推論を用いた普遍的な温度圧力履歴推定法の開発

ベイズ推論手法の一種であるマルコフ確率場(MRF: Markov Random Field)モデルを応用することで、鉱物組成累帯構造から温度圧力履歴を推定する新たな方法を開発した。MRFモデルとは画像処理などによく用いられる方法であり、知りたい物理量の空間(時間)分布についてある程度の連続性を仮定することで、観測データより未知変数の方が多様な不定問題や、観測データに大きな誤差が含まれるような問題に対して、最適な推定を可能にする。確率論的手法であることから、復元と同時に適切な誤差評価も可能である。Kuwatani et al. (2012, Contributions to Mineralogy and Petrology)では、既に、組成累帯構造を持つ鉱物の化学組成のみを用いるギブス法的手法に対してMRF手法を適用することにより、精密な温度圧力履歴を復元することに成功している。

本研究では、これまでに開発した手法を拡張することで、ホスト鉱物と包有物の熱力学平衡に基づく地質学的温度圧力計を利用した温度圧力履歴推定法を開発した。開発した手法の妥当性を調べるために、St-Onge (1987, Journal of Petrology)により得られたザクロ石中の黒雲母包有物および斜長石包有物のデータセットを用いることで、温度圧力履歴の復元を行った。解析の結果、包有物の存在密度に応じて詳細な復元が可能であることが明らかになった(Kuwatani et al., 2018, Journal of Mineralogical and Petrological Science)。

(2) スパースモデリングを用いた全岩組成データからの物理化学プロセス抽出

様々な対象に関する地球化学データにデータ駆動型解析・情報計測融合的解析を適用した。

Yoshida et al. (2018, Journal of Metamorphic Geology)では、非負値行列分解 (NMF: Nonnegative Matrix Factorization) および k-means クラスタ分析 (KCA: K-means Cluster Analysis)を用いて、主要・微量元素全岩組成データから変成作用中の物質移動プロセスの定量化を行った。本研究では、トピックモデルと呼ばれるニュース記事内容の解析にも用いられる NMF 手法を用いることで、組成データを構成する複数の端成分の推定を試みている。三波川変成帯四国中央部に分布する泥質変成岩の試料群に対して解析を行った結果、原岩のもともとの化学組成バリエーション由来と考えられる成分と、変成度の上昇に伴って系統的に増加する成分を分離できた。変成作用の熱力学的なモデリングと比較して考察を行った結果、脱水反応の進行に伴い、選択的に元素が物質移動する新たなメカニズムの存在が示唆された。

Ueki et al. (2018)では、全地球の火成岩化学組成データセットを用いたテクトニクス場判別の問題に複数の機械学習手法を適用した。具体的には、サポートベクトルマシン (SVM: Support Vector Machine)と呼ばれる機械学習の代表的な判別手法、乱数決定木 (RF: Random Forest)およびスパース多項式ロジスティック回帰 (SMR: Sparse Multinomial Regression)などの先進的な判別手法を適用した。RF や SMR を利用することで、単に予測性能の高い判別を行うのみではなく、テクトニクス場判別に重要な元素やその組み合わせを知ることができ、地球科学プロセスの解釈にも貢献できる。Ueki et al. (2018)では、それぞれのテクトニクス場を最も代表するような玄武岩マグマ化学組成を決定したほか、テクトニクス場とマグマ生成プロセスの関連性について詳細に議論した。

Iwamori et al. (2017)では、k-means クラスタ分析 (KCA: K-means Cluster Analysis)の解析結果がデータの前処理法に依存して PCA もしくは ICA の解析結果と対応することを示すとともに、それぞれの分析手法の相違点と有用性について議論している。

(3) ベイズ推論とスパースモデリングを用いた岩石組織からのダイナミクス抽出

順モデルによる数値計算と観測を統合するデータ同化の枠組みを、はじめて岩石学分野に導入した。岩石組織空間データ解析の前段階として、実験系の時系列化学分析データから非線形反応ダイナミクスを抽出する基礎的な数理的方法論を構築した。固相の表面積に反応速度が依存するような不均質反応について、化学組成の時系列データから状態空間モデルを用いて、反応係数を推定するベイズ逆解析法を開発した (Omori et al., 2016)。さらに、データ同化を空間データ解析に拡張することで、ザクロ石の組成累帯構造から温度圧力時間履歴を推定する方法を開発した (Kuwatani et al., 2018, Physical Review E)。現在は、対象を時空間データに拡張し、分析データから、反応係数と拡散係数の両方を同時推定する手法を開発している。さらに、複雑な化学反応系への適用を実施するとともに、反応速度を支配する表面積幾何モデルを自動的に選択する手法なども開発中である。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 16 件)

Yasumoto Atsushi, Yoshida Kenta, [Kuwatani Tatsu](#), Nakamura Daisuke, Svojtka Martin, Hirajima Takao, A rapid and precise quantitative electron probe chemical mapping technique and its application to an ultrahigh-pressure eclogite from the Moldanubian Zone of the Bohemian Massif (Nove Dvory, Czech Republic), *American Mineralogist*, 査読有, Vol.103, 2018, 1690 - 1698

DOI:10.2138/am-2018-6323CCBY

Aonishi Toru, Hirata Takafumi, [Kuwatani Tatsu](#), Fujimoto Masuto, Chang Qing, Kimura Jun-Ichi, A numerical inversion method for improving the spatial resolution of elemental imaging by laser ablation-inductively coupled plasma-mass spectrometry *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, 査読有, Vol.33, 2018, 2210 - 2218, DOI:10.1039/c7ja00334j

Yoshida Kenta, [Kuwatani Tatsu](#), Yasumoto Atsushi, Haraguchi Satoru, Ueki Kenta, Iwamori Hikaru, GEOFCM: a new method for statistical classification of geochemical data using spatial contextual information, *Journal of Mineralogical and Petrological Sciences* 査読有, Vol.113, 2018, 159 - 169, DOI:10.2465/jmps.171127

[Kuwatani Tatsu](#), Nagao Hiromichi, Ito Shin-ichi, Okamoto Atsushi, Yoshida Kenta, Okudaira Takamoto, Recovering the past history of natural recording media by Bayesian inversion, *Physical Review E*, 査読有, Vol.98, 2018, 43311, DOI: 10.1103/PhysRevE.98.043311

Matsumura Tarojiro, [Kuwatani Tatsu](#), Ando Yasunobu, Masuda Toshiaki, Application of the inverse Batschelet distribution to measuring the preferred orientation of tourmaline grains, *Journal of Structural Geology*, 査読有, Vol.114, 2018, 288 - 293, DOI:10.1016/j.jsg.2017.12.011

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、査読有、29巻、2018、49 - 60、DOI:10.6010/geoinformatics.29.2_4
Kuwatani Tatsu, Nagata Kenji, Yoshida Kenta, Okada Masato, Toriumi Mitsuhiro
 Bayesian probabilistic reconstruction of metamorphic P-Tpaths using inclusion
 geothermobarometry, Journal of Mineralogical and Petrological Science、査読有、Vol.113
 2018、82 - 95、DOI:10.2465/jmps.170923
Ueki Kenta, Hino Hideitsu, Kuwatani Tatsu、Geochemical discrimination and
 characteristics of magmatic tectonic settings; a machine learning approach
 Geochemistry, Geophysics, Geosystems、査読有、Vol.19、2018、DOI:10.1029/2017GC007401
Yoshida Kenta, Kuwatani Tatsu, Hirajima Takao, Iwamori Hikaru, Akaho Shotaro、
 Progressive evolution of whole-rock composition during metamorphism revealed by
 multivariate statistical analyses, Journal of Metamorphic Geology、査読有、Vol.36
 2018、41 - 54、DOI:10.1111/jmg.12282
Matsumura Tarojiro, Kuwatani Tatsu, Ando Yasunobu, Masuda Toshiaki、Application of
 the inverse Batschelet distribution to measuring the preferred orientation of
 tourmaline grains, Journal of Structural Geology、査読有、2017、
 DOI:10.1016/j.jsg.2017.12.011
岡本 敦, 桑谷 立、変成岩組織と鉱物組成累帯構造からの情報抽出：フォワードモデルと
 逆解析、地質学雑誌、査読有、Vol.123、2017、733 - 745、DOI:10.5575/geosoc.2017.0034
Matsumura Tarojiro, Kuwatani Tatsu, Masuda Toshiaki、Statistical model selection
 between elastic and Newtonian viscous matrix models for the microboudin
 palaeopiezometer, Earth, Planets and Space、査読有、Vol.69、2017、
 DOI:10.1186/s40623-017-0669-4
Iwamori Hikaru, Yoshida Kenta, Nakamura Hitomi, Kuwatani Tatsu, Hamada Morihisa,
 Haraguchi Satoru, Ueki Kenta、Classification of geochemical data based on multivariate
 statistical analyses: Complementary roles of cluster, principal component, and
 independent component analyses, Geochemistry, Geophysics, Geosystems、査読有、Vol.18
 2017、1 - 19、DOI:10.1002/2016GC006663
Kuwatani Tatsu, Toriumi Mitsuhiro、Thermodynamic forward modeling of retrogressive
 hydration reactions induced by geofluid infiltration, Earth, Planets and Space
 査読有、Vol.69、2017、1 - 18、DOI:10.1186/s40623-017-0607-5
Matsumura Tarojiro, Kuwatani Tatsu, Masuda Toshiaki、The relationship between the
 proportion of microboudinaged columnar grains and far-field differential stress: A
 numerical model for analysing palaeodifferential stress, Journal of Mineralogical
 and Petrological Sciences、査読有、Vol.112、2017、25 - 30、DOI:10.2465/jmps.160711
Omori Toshiaki, Kuwatani Tatsu, Okamoto Atsushi, Hukushima Koji、Bayesian inversion
 analysis of nonlinear dynamics in heterogeneous reactions, Physical Review E、査
 読有、Vol.94、2016、03305-1 - 11、DOI:10.1103/PhysRevE.94.033305

〔学会発表〕(計 19 件)

桑谷 立、赤穂 昭太郎、吉田 健太、上木 賢太、大柳 良介、疎性モデリングによる元素移
 動量の定量化、資源・素材学会 2019 年春季大会、2019
桑谷 立、岡本 敦、吉田 健太、中村 謙吾、土屋 範芳、駒井 武、固体地球科学分野にお
 けるデータ駆動型解析の進展と今後の展望、日本地球惑星科学連合 2018 年大会、2018
Kuwatani Tatsu, Nagao Hiromichi, Okamoto Atsushi, Yoshida Kenta, Ito Shin-ichi,
 Okudaira Takamoto、Pressure-Temperature-Time Path Inversion from Zoned Minerals
 Using Data Assimilation, Asia Oceania Geoscience Society 15th Annual Meeting、2018
桑谷 立、地球科学へのスパースモデリングの適用、電子情報通信学会信号処理研究会(SIP)
 2018
桑谷 立、EPMA 化学組成データからの岩石プロセス情報抽出、日本分析化学会第 67 年会
 2018
桑谷 立、赤穂 昭太郎、岩石風化プロセスのフォワードモデリングと逆解析、資源・素
 材 2018
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
 ショップ(IBIS2018)、2018
Kuwatani Tatsu、Geochemical Data-processing for extracting geological processes
 15th International Symposium of Mineral Exploration (ISME-XV)、2018
桑谷 立、地球化学におけるデータ駆動プロセッシング、資源・素材学会 平成 30(2018)年
 度春季大会、2018
桑谷 立、地球科学におけるデータ駆動型解析、日本情報地質学会・地質情報整備活用機構
 共催シンポジウム、2017
桑谷 立、インフォマティクスで解き明かす岩石の歴史、海洋地球インフォマティクス

2017

桑谷 立、岩石学分野におけるデータ駆動型解析の現状と展望、日本地質学会第 124 年学術大会 (2017 愛媛大会)、2017

桑谷 立、永田 賢二、赤穂 昭太郎、岩森 光、MORB 全岩組成からの溶融度とマントル原岩組成の同時推定:地球化学へのデータ駆動型解析の応用、日本地球惑星科学連合 2016 年大会、2016

Kuwatani Tatsu, Nagata Kenji, Okada Masato, Komai Takeshi, Data-driven geoscience: concept and applications, Goldschmidt, 2016

Kuwatani Tatsu, Nagata Kenji, Iwamori Hikaru, Akaho Shotaro, Simultaneous estimation of melting degree and source composition of MORB using Markov chain Monte Carlo (MCMC) method, Asia Oceania Geosciences Society (AOGS)、2016

桑谷 立、岡本 敦、吉田 健太、奥平 敬元、ベイズ推論による鉱物組成累帯構造からの温度 - 圧力 - 時間履歴推定の試み、日本地質学会第 123 年学術大会、2016

桑谷 立、永田 賢二、赤穂 昭太郎、岩森 光、マルコフ連鎖モンテカルロ法による化学組成データプロセッシング、資源・素材学会 平成 28 (2016) 年度 春季大会、2016

Kuwatani Tatsu, Nagata Kenji, Okada Masato, Komai Takeshi, Data-Driven Modeling for Geochemical Processes, Asia Oceania Geosciences Society (AOGS) 2015 Annual meeting, 2015

桑谷 立、永田 賢二、赤穂 昭太郎、岩森 光、化学組成分布データからの地球科学プロセス逆推定、資源・素材、2015

〔図書〕(計 1 件)

桑谷立・岩森光、朝倉書店、「図説地球科学の事典」ビッグデータ解析、2018、108-109

〔産業財産権〕

出願状況 (計 1 件)

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

発明者：青西亨、木村純一、桑谷立、平田岳史

権利者：国立大学法人東京工業大学、国立研究開発法人海洋研究開発機構、国立大学法人東京大学

種類：特許

番号：特願 2017-084599

出願年：平成 29 年

国内外の別：国内

〔その他〕

ホームページ：<http://dsap.jamstec.go.jp/>

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。