

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 4 年 6 月 20 日現在

機関番号：82706

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2019～2021

課題番号：19K04027

研究課題名(和文) データ駆動科学で解き明かす固体地球物質循環

研究課題名(英文) Data-driven science and solid-earth geochemistry

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・海域地震火山部門(火山・地球内部研究センター)・主任研究員

研究者番号：60646785

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：本研究は、先進的な数理解析技術を用いて、多様な地球科学データから固体地球プロセス・構造を定量的に解明する系統的な方法論基盤を構築することを目的とする。研究計画当初に設定した具体的三課題(中央海嶺玄武岩からの原岩組成と溶融度の同時推定、高次元地球化学データセットからの未知プロセス自動抽出、複数・複雑プロセスの定量的抽出)の遂行および関連研究により、固体地球科学におけるデータ駆動型解析の有効性が明らかになった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究遂行により開発されたデータ駆動型の解析手法群は、地球化学データのみならず、地球物理学観測データ・室内実験データなども含む様々な研究対象に応用可能である。今後、固体地球科学においてデータ駆動型解析の重要性は加速度的に増大するものと考えられており、本研究は今後のデータ駆動型解析研究の一つのロールモデルになる可能性がある。先端的な解析技術の導入は、地球内部の情報を客観的な抽出を可能にするものであり、将来的には、防災・減災や資源・エネルギー問題への貢献につながるものと考えられる。

研究成果の概要(英文)：The purpose of this study is to construct a systematic methodological basis for quantitatively elucidating solid-earth processes and structures from various geoscientific data using advanced mathematical analysis techniques. Execution of three specific tasks set at the beginning of the research plan (simultaneous estimation of bulk-rock composition and melting ratio from MORB, automatic extraction of unknown processes from high-dimensional geochemical data sets, and quantitative extraction of multiple / complex processes) and related studies have revealed the effectiveness of data-driven analysis in solid-earth science.

研究分野：数理地球科学

キーワード：データ駆動 スパースモデリング ベイズ推論 機械学習 地球化学

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、研究者個人に帰属します。

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

岩石は、固体地球の歴史を実証的に探る貴重な物質的情報源であり、地震・火山・流体移動・マントル対流などのダイナミックな地球内部現象に関する物理化学プロセスを保存している可能性がある。一方、我々が手にできる岩石は、地下深部の様々なプロセスを経た後の最終状態のみであり、この最終状態のみから、未知かつ複雑な物理化学プロセスの変遷に関する情報を抽出することは容易ではない。

その一方で、化学分析技術の向上および情報通信環境基盤の整備を背景に、地球化学に関する多元素多数試料のビッグデータが生産・蓄積されつつあり、それらを統合した汎用データベースも登場している。また、計算機能力の著しい向上と情報科学的手法の洗練は、機械学習や人工知能といったデータ駆動型の新たな情報処理技術を生み出した。その有効性は、産業・学術・社会などのあらゆる場面で証明されつつあり、今後もこの流れはさらに加速されると予想される。

このような現状において、今後来るべきパラダイム「データ中心科学」時代における、新たな地球物質科学の方法論はどのようなものか？ また、少数のデータを対象にし、研究者の経験と直感に頼ってきた従来型の方法論を脱却した場合、つまり、地球科学ビッグデータに対して最先端の情報処理技術を適用した場合、これまでの地球内部ダイナミクスの描像はどのように変化するのだろうか？などの学問的問いに部分的にでも答えることは、今後の固体地球科学の発展のためにも重要である。

2. 研究の目的

本研究は、先進的な数理解析技術を用いて、多様な地球科学データから固体地球プロセス・構造を定量的に解明する系統的な方法論基盤を構築することを目的とする。また、開発した手法を様々な地球科学ビッグデータセットに適用することで、地球内部のダイナミクス・構造・物質循環を、データのみから解明することである。特に、高精度多数の主要・微量・同位体元素からなる様々な全岩化学組成データなどの高次元データを最大限に活用することに主眼の一つを置く。

3. 研究の方法

上述の目的を達成するために、データ駆動型解析のキーテクノロジーである、ベイズ推論とスパースモデリングを利用し、下記の三つの研究課題を研究期間当初に設定した。

- (1) ベイズ推論による中央海嶺玄武岩 (MORB) からの原岩組成と溶融度の同時推定
- (2) スパースモデリングによる高次元地球化学データセットからの未知プロセス抽出
- (3) ベイズ推論とスパースモデリングの融合による複数・複雑プロセスの抽出

研究期間の前半は、上述の三課題を中心に地球化学データ解析にフォーカスした研究推進を実施したが、研究期間の後半は、開発している研究手法の普遍性により、地球物理観測データや地球物質科学実験データも含む多様な固体地球科学データの解析へと研究テーマを発展させている。

研究代表者を中心として、解析手法面に詳しい情報科学者や個々の研究対象を専門とする地球科学などとの広範囲かつ密な連携により、多数の研究を並行して実施した。各研究課題は、以下に最適化された以下の研究ステップから構成した。すなわち、A. 様々な自然科学の知見を導入した新規解析モデルの提案とアルゴリズム実装、B. 人工データを用いたモデルの評価、C. 実データセットへの適用、D. 結果の地球科学的解釈、の4段階である。

4. 研究成果

固体地球科学を対象として、多数のデータ駆動型解析手法を開発した。研究成果を以下に示す。

- (1) 中央海嶺玄武岩からの原岩組成と溶融度の同時推定、に関して、マルコフ連鎖モンテカルロ法に基づく逆推定解析法の有効性について再検討を行った。ノイズの大きさ、解析に利用する試料数、元素数など、様々な解析条件を想定した人工データ解析テストを実施した結果、実データ解析に資する高精度な推定が可能であることがわかった。一方、稀に推定に失敗するケースも確認できており、ロバストな解析のためには、より洗練されたサンプリングアルゴリズムの導入の必要性を示しているものと考えられる。

(2) 高次元地球化学データセットからの未知プロセス自動抽出, において, スパースモデリングを用いることで, 化学組成データから現象前後の物質移動量を定量的に推定するスパースアイソコン法(図1)を開発した(Kuwatani et al., 2020). 開発した手法について, 人工データ解析および鉬物脈周囲の変質岩を用いた実データ解析により, 手法の有効性を検証した. 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)の考え方を活用することで, 個別元素の動きにくさをデータから自動的に学習する. これにより, 参照保存量が不明でないようなプロセスやデータセットについても, 客観的・定量的に物質移動量を推定可能である. さらに, スパースアイソコン法(化学組成データから現象前後の物質移動量を定量的に推定する手法)の手法拡張を行い, 実データへの適用可能性の拡大を行った.

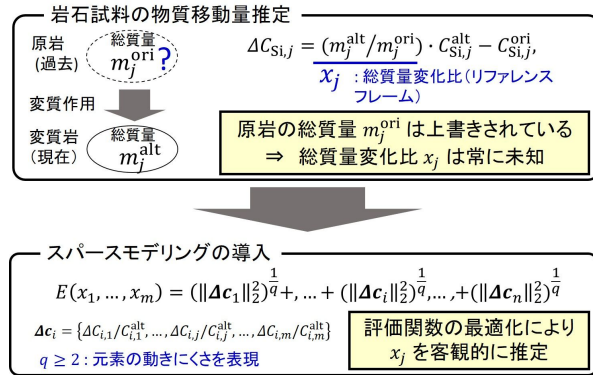


図1 スパースアイソコン法(Kuwatani et al., 2020)の概要(桑谷, 2020).

(3) 複数・複雑プロセスの定量的抽出, において, 複数の物理化学プロセスを被った岩石の化学組成データセットから, プロセスを分離・抽出する手法の開発を実施した. 現在までに, 解析手法の基盤として, 主成分分析(PCA: Principal Component Analysis)や(ICA: Independent Component Analysis)などの行列分解を用いたプロセス推定方法の枠組みを整備した. 特に, 組成データ解析の概念を導入し, 等長対数比変換を行列分解の前処理に組み込むことで, 高精度なプロセス抽出が可能であることを人工データ解析によって示すことができた(図2). また, 開発した手法について, 岩石や表層堆積物試料を用いた実データ解析も実施し, 有効性を明らかにした. さらに, これまでに開発してきた地球科学プロセス抽出のための行列分解解析のプロトコルを一般化することにより, データ駆動とモデル駆動の両アプローチを人工データ解析を介して統合するパイラテラルなモデリングの概念的枠組みの構築につなげている.

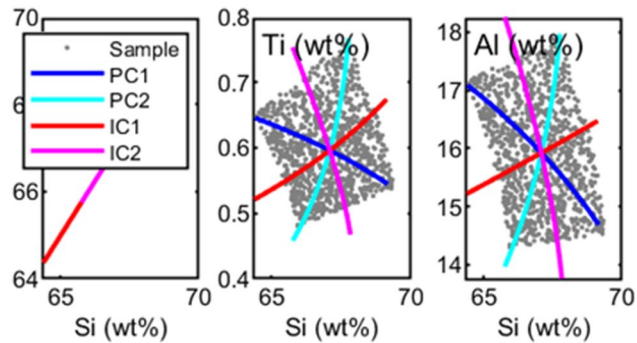


図2 ハーカー図上にプロットした抽出された主成分(PC)および独立成分(IC)。組成データ解析の概念の導入により, 元素組成データのトレンド成分を正確に抽出できる。

(4) 研究計画当初に設定した上述の具体的三研究課題の他に, 関連研究により, 固体地球科学におけるデータ駆動型解析に関して以下に示すような様々な成果が創出された. 具体的な例として, 以下に三つに分けて研究成果を示す. 一つ目は, (1)で利用したベイズ推論およびマルコフ連鎖モンテカルロ法による実装により, 地球外核中に存在する液体鉄の状態方程式を確率的に制約した研究(Matsumura et al., 2021)であり, これらの研究は, 蛇紋岩化における反応経路特定のための空間データ解析手法の開発(Oyanagi et al., 2021)とも関連している. 二つ目は, (2)や(3)などで利用しているスパースモデリングの概念を利用した共同研究である. 具体的研究例として, 小笠原諸島西之島火山の空中磁気データ解析に導入することで, 火山島内部の詳細な三次元磁化構造の解明に貢献した研究(Tada et al., 2021)や, パラメータ全数探索法に基づいて, 碎屑性モナザイトの起源岩の地球化学判別を実施した研究(Itano et al., 2020)や岩石溶融実験に関するデータセットから含水メルトの熱力学非理想性をモデル化した研究(Ueki et al., 2020)などが挙げられる. 三つ目は, (3)などで目的とする複数・複雑プロセスの定量的抽出に関して, ベイズ推論とスパースモデリングの融合により, 水熱実験反応を模した時系列データから, 予想される多数の反応項の候補の中から実際に起きている反応を特定する方法論の構築などに成功している(Ito et al., 2021).

以上に示したように、本研究で開発した多様なデータ駆動型解析手法群は、地球化学データの
みならず、地球物理学観測データ・室内実験データを含む様々な対象に応用可能であることが改
めて明らかとなった。今後、固体地球科学におけるデータ駆動型解析の重要性は加速度的に増大
するものと考えられており、更に洗練した解析手法群の開発と応用が望まれる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計13件（うち査読付論文 9件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 10件）

1. 著者名 Ito Masaki, Kuwatani Tatsu, Oyanagi Ryosuke, Omori Toshiaki	4. 巻 23
2. 論文標題 Data-Driven Analysis of Nonlinear Heterogeneous Reactions through Sparse Modeling and Bayesian Statistical Approaches	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Entropy	6. 最初と最後の頁 824 ~ 824
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/e23070824	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Iwamori Hikaru, Ueki Kenta, Hoshide Takashi, Sakuma Hiroshi, Ichiki Masahiro, Watanabe Tohru, Nakamura Michihiko, Nakamura Hitomi, Nishizawa Tatsuji, Nakao Atsushi, Ogawa Yasuo, Kuwatani Tatsu, Nagata Kenji, Okada Tomomi, Takahashi Eiichi	4. 巻 126
2. 論文標題 Simultaneous Analysis of Seismic Velocity and Electrical Conductivity in the Crust and the Uppermost Mantle: A Forward Model and Inversion Test Based on Grid Search	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Geophysical Research: Solid Earth	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1029/2021JB022307	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Matsumura T., Kuwayama Y., Ueki K., Kuwatani T., Ando Y., Nagata K., Ito S., Nagao H.	4. 巻 126
2. 論文標題 Bayesian Modeling of the Equation of State for Liquid Iron in Earth's Outer Core	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Geophysical Research: Solid Earth	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1029/2021JB023062	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Yutani Taku, Yono Oak, Kuwatani Tatsu, Matsuoka Daisuke, Kaneko Junji, Hidaka Mitsuko, Kasaya Takafumi, Kido Yukari, Ishikawa Yoichi, Ueki Toshiaki, Kikawa Eiichi	4. 巻 22
2. 論文標題 Super-Resolution and Feature Extraction for Ocean Bathymetric Maps Using Sparse Coding	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Sensors	6. 最初と最後の頁 3198 ~ 3198
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/s22093198	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Tada Noriko, Ichihara Hiroshi, Nakano Masaru, Utsugi Mitsuru, Koyama Takao, Kuwatani Tatsu, Baba Kiyoshi, Maeno Fukashi, Takagi Akimichi, Takeo Minoru	4. 巻 419
2. 論文標題 Magnetization structure of Nishinoshima volcano, Ogasawara island arc, obtained from magnetic surveys using an unmanned aerial vehicle	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Volcanology and Geothermal Research	6. 最初と最後の頁 107349 ~ 107349
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jvolgeores.2021.107349	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 桑谷立	4. 巻 31
2. 論文標題 海洋研究開発機構海域地震火山部門における情報地質関連研究	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 情報地質	6. 最初と最後の頁 53-55
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 桑谷立	4. 巻 40
2. 論文標題 岩石形成プロセス抽出のための可視化情報計測	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 可視化情報学会誌	6. 最初と最後の頁 17-20
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 T. Kuwatani, K. Yoshida, K. Ueki R Oyanagi, M. Uno, S. Akaho	4. 巻 532
2. 論文標題 Sparse isocon analysis: a data-driven approach for material transfer estimation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Geology	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chemgeo.2019.119345	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 T. Kuwatani, M. Toriumi	4. 巻 72
2. 論文標題 Simple kinetic model for replacement reactions involving solid solutions: the significant role of geofluids	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Earth, Planets and Space	6. 最初と最後の頁 8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1186/s40623-020-1135-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 K. Ueki, T. Kuwatani, A. Okamoto, S. Akaho, H. Iwamori	4. 巻 300
2. 論文標題 Thermodynamic modeling of hydrous-melt-olivine equilibrium using exhaustive variable selection	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physics of the Earth and Planetary Interiors	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.pepi.2020.106430	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 K. Itano, K. Ueki, T. Iizuka and T. Kuwatan	4. 巻 10
2. 論文標題 Geochemical Discrimination of Monazite Source Rock Based on Machine Learning Techniques and Multinomial Logistic Regression Analysis	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Geosciences	6. 最初と最後の頁 63
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/geosciences10020063	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 T Kuwatani	4. 巻 15
2. 論文標題 Earth materials science in a data-driven paradigm	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Elements	6. 最初と最後の頁 280-281
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2138/gselements.15.4.280	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Oyanagi Ryosuke X., Kuwatani Tatsu, Omori Toshiaki	4. 巻 94
2. 論文標題 Exploration of nonlinear parallel heterogeneous reaction pathways through Bayesian variable selection	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The European Physical Journal B	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1140/epjb/s10051-021-00053-7	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計14件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 1件)

1. 発表者名 桑谷 立、日野 英逸、永田 賢二、川島 貴大、鳥海 光弘、岡田 真人
2. 発表標題 ベイズ計測の空間解像度
3. 学会等名 JpGU2021
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 油谷 拓、桑谷 立、吉田 健太、上木 賢太、中尾 篤史、鳥海 光弘、平野 直人
2. 発表標題 教師なし学習を用いた珪長質火成岩微量元素組成データのソフトクラスタリング
3. 学会等名 日本地質学会第128年学術大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 桑谷 立、鳥海 光弘
2. 発表標題 固溶体を含む鉱物量増減反応の速度論
3. 学会等名 日本地質学会第128年学術大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 桑谷立
2. 発表標題 情報計測融合と資源・素材学への応用(I)
3. 学会等名 資源・素材2021(札幌)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 桑谷立
2. 発表標題 情報計測融合と資源・素材学への応用(II)
3. 学会等名 一般社団法人資源・素材学会 2022年度 春季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 桑谷 立、中村 謙吾、赤穂 昭太郎、駒井 武
2. 発表標題 茨城県表層土壌の全岩化学組成データ解析
3. 学会等名 資源・素材2020(仙台)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 桑谷立
2. 発表標題 地球科学分野における辞書学習法の活用
3. 学会等名 一般社団法人資源・素材学会2021年度 春季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 桑谷 立、中村 謙吾、赤穂 昭太郎、駒井 武
2. 発表標題 地球化学プロセス抽出のためのフォーワードモデリングと逆解析：茨城県表層土壌 の化学組成への適用
3. 学会等名 JpGU-AGU2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 T. Kuwatani, K. Yoshida, K. Ueki R Oyanagi, M. Uno, S. Akaho
2. 発表標題 Estimation of material transfer from compositional datasets using sparse modeling
3. 学会等名 Asia Oceania Geosciences Society 16th Annual Meeting (AOGS2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 桑谷立・赤穂昭太郎
2. 発表標題 スパースアイソコン法の資源探査分野への応用
3. 学会等名 資源・素材学会秋季大会2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 桑谷立・赤穂昭太郎・吉田健太・上木賢太・宇野正起・大柳良介
2. 発表標題 スパースアイソコン解析：リファレンスフレームの自動決定
3. 学会等名 日本地質学会第126年学術大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 桑谷立・赤穂昭太郎・吉田健太・上木賢太・宇野正起・大柳良介
2. 発表標題 全岩組成を用いた物質移動量のデータ駆動型解析
3. 学会等名 日本地球惑星科学連合大会2019年大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 吉田健太, 桑谷 立, 上木 賢太, 大柳 良介, 赤穂 昭太郎
2. 発表標題 スパースモデリングにより捉えた沈み込みスラブの発展的組成変化
3. 学会等名 日本地球惑星科学連合大会2019年大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 UEKI KENTA, HINO HIDEITSU KUWATANI TATSU
2. 発表標題 Feature Selection of Magmatic Tectonic Settings Based on Sparse Multinomial Regression
3. 学会等名 Asia Oceania Geosciences Society 16th Annual Meeting (AOGS2019)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------