岩石形成プロセス抽出のための可視化情報計測*

桑谷 立¹

Rock-forming-process Extraction through the Integration of Visualization, Informatics and Measurement

Tatsu KUWATANI

1. はじめに

岩石は、固体地球のダイナミクス、たとえば、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などを実証的・物質科学的に解明する唯一の貴重な手がかりである。岩石学の本質は、採取した岩石という「結果」から、岩石形成に関する物理化学的過程（プロセス）に相当する「原因」を推定する逆問題といえる。しかしながら、得られる情報は常に断片的不完全であり、この逆問題を解くことは容易ではない。よって、計測・分析対象から有効に定量的データを抽出し、かつ、取得データからプロセスに関する本質的な情報を最大限に引き出す必要がある¹⁾。

近年、自然科学の計測・観測データを高度な数理・情報科学技術で解析することで、データの背後に潜む本質的な情報を抽出する試みがなされており、データ駆動型アプローチもしくは情報・計測融合アプローチなどと呼ばれている。著者のグループは、2010 年ごろからこのようなアプローチを導入し、数理・情報科学者と連携することで、地球物理学や地質学、環境科学などを含む幅広い地球科学分野の様々な問題に取り組んできた²⁾。

本稿では、著者らの行った情報・計測融合型アプローチによる岩石学的研究について、それぞれの研究における可視化の役割とともに簡単に紹介する。次節では、岩石組織からのプロセス抽出について、化学組成空間分布の定量可視化と、岩石の経験した温度圧力履歴推定の話題を取り上げる。続く 3 節においては、多数の地球物質試料の高次元化学組成データを次元圧縮により可視化し、地球科学プロセスを抽出および定量化する研究の枠組みについて、岩石の風化（物質移動）プロセスの抽出を例に紹介する。最後に、岩石プロセス抽出に関して、情報・計測融合および可視化の側面から今後の研究の方向性などについて議論する。

2. 岩石組織からのプロセス抽出

岩石形成のプロセスを知るための最も基礎的な方法は、単一の岩石試料に注目した 1 mm から数 cm スケールの範囲における、光学および電子顕微鏡を利用した岩石組織の観察・記載である。岩石中に含まれる複数種類の鉱物の同定や微細構造の記載から、岩石の形成温度圧力条件やその際に進行した化学反応や変形過程などを推定することが可能である。これらの記載を正確かつ詳細に行い、プロセスの詳細を定量的に推定するためには、各構成鉱物の化学組成の測定も必須となる。これを可能にする岩石学の基礎分析装置が電子プローブマイクロアナライザ（Electron Probe MicroAnalyzer: EPMA）である。本節では、EPMA を用いた岩石組織の定量可視化およびプロセス推定の試みを紹介する。

2.1 X 線元素マップの定量可視化

EPMA とは、対象物への電子線の照射により発生する特性 X 線の波長と強度から、構成元素を分析する走査型電子顕微鏡装置である。EPMA の多様な機能の中で、点分析は、数 μm 径の電子線を一点に一分間以上にわたり照射することで、局所的な元素組成を定量測定する。一方、面分析では、電子線を広範囲・高速（たとえば、一点あたり数十から数百ミリ秒）に走査することで、各元素の相対的な多寡の空間分布を可視化する（Fig. 1）。

面分析により、岩石組織と元素の組成分布の関係性が可視化され、より詳細な岩石組織プロセスの推定が可能となった。その一方で、面分析で得られるデータはあくまで相対値であり、定量的な数理解析は難しい。そのため、大量の画像データが得られても、岩石形成プロセスについて、それを見る研究者の直感的理解と定性的な解釈に留まっているのが実際であった。

そこで、著者らのグループでは、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³⁾。具体的には、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、定量的な組成画像データを作成する系統的手法を開発した。最近、世界的にも同様の研究が盛んになっている

* 原稿受付 2020 年 7 月 20 日

¹ 国立研究開発法人海洋研究開発機構 海域地震火山部門
(〒 237-0061 神奈川県横須賀市夏島町 2-15,
E-mail: kuwatani@jamstec.go.jp)

Fig. 1 Quantitative compositional imaging of rock texture.

が⁴⁾、提案手法では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線強度の理論式を活用することにより、従来手法と比較して高精度・高速測定を可能にした (Fig. 1)。これまでの岩石学研究では、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。本研究により、数十万点ほどの膨大な2次元組成データが数理解析に資する定量データとして得られることになる。これは、今後の岩石組織解析の方法論を変えうるポテンシャルを持つものといえよう。

2.2 温度圧力履歴の推定

ここでは、鉱物の化学組成からプロセスを抽出する研究例について簡単に紹介する。岩石中には、しばしば、鉱物粒子の中心から縁辺にかけて、化学組成が同心円状に変化する組成累帯構造と呼ばれる特徴的な組織がみられる。これは、鉱物粒子成長時の物理化学的外場の状態変化の様子を反映したものであることが多く、理想的な条件が揃った場合、熱力学相平衡論を用いて化学組成データから温度および圧力の履歴 (P - T path) を推定することが可能である⁵⁾。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り、変成岩岩石学において最も重要な課題とされている。

著者らのグループでは、組成累帯構造を持つ鉱物粒子から、ベイズ推論を基礎とする数理的枠組みにより、温度圧力履歴を高精度に推定する方法論の開発を続けている。最近では、ベイズ推論の画像解析手法であるマルコフ確率場 (Markov Random Field: MRF) モデルにより、鉱物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⁶⁾。また、鉱物粒子成長の時間発展則を仮定することで、組成累帯構造から温度圧力履歴の時間的推移を推定する手法を新たに開発した⁷⁾ (Fig. 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・一般化することで、空間データのみから過去の時間的な情報を抽出している。現時点では、1次元の化学組成データしか扱えないが、今後、モデルを発展させることで、前小節で述べたような2次元組成データの解析も可能になる。これにより、詳細かつ信頼性の高い温度圧力履歴の推定や、これまで無視していた粒内元素拡散の効果を考慮したモデリングなど、様々な応用が期待

 Fig. 2 P - T path estimation from compositional zoning.

できる。

3. 全岩組成データからのプロセス抽出

前節までは、単一の岩石試料に注目し、その微細組織の可視化を通じてプロセスを推定する場合を考えてきた。一方、本節では複数の岩石試料に関する計測データを集団の性質として可視化し、全体および個々の岩石に働いたプロセスを推定する試みを紹介する。

3.1 高次元元素組成データの次元圧縮による可視化

注目する岩石を特徴づけるための最も重要なデータが全岩化学組成であり、玄武岩・安山岩・カコウ岩など、岩石の分類基準としても利用されている。全岩化学組成とは、岩石を数 cm 程度の大きさ、もしくはそれ以上の大きさで平均化した多元素の含有量のことであり、重量パーセント濃度 (wt.%) や mg/kg (あるいは ppm) などの単位で表現される。岩石を粉末状もしくはビード状に成形したものを蛍光 X 線分析 (XRF) などの計測により取得できるデータである。

こうして得られた全岩化学組成データは2次元のグラフ上に可視化される。研究者は、その分布の様子を試料の産地や属性と照らし合わせながら、地球科学の専門知を総動員させることでプロセスを推定していく⁸⁾。最も古典的な可視化方法である Harker diagram は、主要元素 (主に地球全体で酸化物としておよそ 1 wt.% 以上含まれるとされる Si, Ti, Al, Fe, Mg, Ca, Na, K などの総称) について、縦軸に各元素、横軸に SiO_2 をとったものである。また、岩石の種類や注目したいプロセスにあわせて、プロセスを反映していると考えられる重要な元素を経験的に選択し、2次元図上で分布を可視化することも多い。例として、茨城県の表層土壌試料⁹⁾を $\text{Al}-(\text{Ca} + \text{Na})-\text{K}$ の三角プロットに示した (Fig. 3)。このグラフは風化プロセスを確認する際にしばしば用いられ¹⁰⁾、グラフの上部に近づくほど、風化の影響を強く受けていることを示している。

上述のような古典的な全岩化学組成の可視化方法に対して、著者らのグループでは、多元素のデータを活かすデータ駆動型の可視化およびプロセス抽出を提唱している¹¹⁾。これは、以下で示されるような、全岩化学組成データセット $\mathbf{Y}$ の行列分解により実現される。

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{X} \quad (1)$$

Fig. 3 Chemical composition of surface soils in Ibaraki Prefecture⁹⁾ plotted on Harker diagrams.

ここで、行列 A は基底ベクトルを並べたもの、行列 X はそれぞれのサンプルに対する基底ベクトルの強度から構成されるスコアベクトルを並べたものである。また、行列 Y はなんらかの前処理を施したものとする。行列分解の方法は無数に存在するが、代表的なものは、主成分分析や因子分析・独立成分分析などとも対応し、多変量解析として頻繁に利用されている。得られた各基底ベクトルを、化学組成を変動させる要因となる個々のプロセスとみなすことで、岩石形成のプロセス抽出に利用できる。この方法は、従来手法とは異なり、多元素の情報を活用できる点、および、プロセスを分離できる点が大きな利点といえるだろう。

Fig. 4 は、分散共分散行列の固有値分解に対応する主成分分析を用いて、前述の表層土壌の化学組成データ⁹⁾の可視化を行った結果である。(a)は固有（主成分）ベクトルを示しており、それぞれのベクトル形状は対応するプロセスに由来する組成変動に関する元素の相関関係を反映している。この場合は、元素の移動性や鉱物組成に関する地球化学的先験的知識から、PC1 および PC2 はそれぞれ、元素溶脱に伴う化学風化、および、原岩組成バリエーションを示しているものと推定される。また、(b)は PC1, PC2 のスコアを 2 次元散布図で示したものであり、個々のサンプルが被った各プロセスの強度を評価できる。

実際は、プロセスの非線形性や組成データの定数制約に由来する問題などがあり、正確にプロセスを抽出できているかどうかの評価には、慎重な検討が必要である。また、対象とするプロセスやデータセットに応じて、適

Fig. 4 Results of PCA for the dataset shown in Fig. 3. (a) Eigen vectors (b) Score plots for PC1 and PC2.

切な行列分解や前処理方法を選択しなければならない。研究の一例として、著者らのグループでは、組成データの定数条件を考慮した非負値行列分解を用いることで、四国中央部に露出する変成岩の全岩組成データから、海洋プレートの沈み込みに伴う化学反応プロセスの抽出に成功している¹²⁾。

3.2 参照保存量の自動決定とプロセス定量化

全岩化学組成のバリエーションを生み出す原因となった岩石形成プロセスをおおよそ特定できたとしても、プロセスの詳細を定量化することは実は容易ではない。ここでは、プロセスを被っている岩石試料と被っていない岩石試料の化学組成データセットから、プロセスにより岩石中の元素が移動した際の増減量を定量的に推定する問題を考えたい。

一見すると、この問題は、両者の差分をとればよいだけの簡単な問題のように考えられるが、化学組成データが絶対量ではなく相対量であるために、両者は単純に比較できず、組成データの情報のみでは原理的に推定不可能な難問とされている。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参照保存量（reference frame: プロセス前後に絶対量として不変となる量）を仮定する（たとえば、体積や全質量、もしくは特定の元素の含有量を一定とみなす）ことで、元素の増減量を推定してきた^{13,14)}。

最近、著者らは、複数試料の化学組成データから、適切に参照保存量を自動決定し、物質移動量を定量的に推定する方法を新たに提案した¹⁵⁾。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、参照保存量が自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。本手法と、前小節で示した行列分解手法を組み合わせることで、全岩化学組成データセットから系統的・定量的に複数の岩石形成プロセスを分離・抽出する枠組みが構築できるものと期待されている。

4. おわりに

以上、岩石形成プロセスの抽出について、単一試料の岩石組織に注目する場合と複数試料の全岩組成データの集団的性質に注目する場合の二つの典型的な問題設定における研究例を簡単に紹介した。両方のケースにおいて、計測データを情報処理により適切に可視化し、解析者の専門知を駆使してプロセスを解釈する必要があった。また、定性的なプロセス解釈に留まらず、定量的なプロセス抽出を実現するためには、ベイズ推論を用いた時空間のモデリングや、スパースモデリングなどを用いた高次元データ解析により、系統的なプロセスモデリングをする必要があることもみてきた。つまり、岩石からのプロ

セス抽出のためには、計測データの取得から始まり、計測データの適切な可視化、専門知を駆使した岩石形成プロセスの解釈、それに伴う定量的なモデリングという一連の研究過程が存在する。

本稿の冒頭において、岩石学の数理的本質は非常に難解な逆問題であることを強調した。このような非適切な逆問題では、入手可能な計測データのみでは、唯一解を導き出すことは難しく、解析者の専門知や経験、勘によって、様々な仮定を加える必要がでてきてしまう。前段落で示したほとんどの研究過程において解析者の主體的な判断は不可欠であり、むしろ、必要な場面においては、熟練の専門知と経験・直観を積極的に活かしていくことも重要であろう。つまり、計測・可視化・情報処理の過程の中で専門知を加えつつ絶えずフィードバックを与えながら、プロセスの本質に漸近的にアプローチしていくという、いわゆる Human-in-the-Loop の解析が重要となる¹⁶⁾。これを実現するためにも、プロセス発見を促す Human-in-the-Loop な可視化や、組成データ性・サンプリングバイアスなどを持つ地球科学データの特性を考慮した可視化など、岩石学のプロセス抽出に最適な情報処理および可視化方法の開発が望まれている。今後、ますます、対象を解析する地球科学者と、可視化や機械学習などの先端的方法論を開発する数理・情報科学者の密接な連携が必須となっていくだろう。

謝 辞

本研究は、科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業 CREST/さきがけ複合領域「情報計測」の第一期さきがけ研究課題「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」(2016-2019 年度 JPMJPR1676) の支援を受けました。本稿で示した共同研究は、新学術領域「疎性モデリング」などで知遇を得た多数の数理・情報科学者との連携によるものです。特に、可視化に関する考察は、藤代一成教授、高橋成雄教授らとの議論が参考になりました。また、以下の助成も受けました：JST CREST (JPMJCR1761), JSPS KAKENHI (JP19K04027, 18H03820), ERI, U.Tokyo (ERI JURP 2018-B-01)。ここに記して、深謝申し上げます。

参 考 文 献

- 1) 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：フォーワードモデルと逆解析, *地質学雑誌* **123** (2017) 733-745.
- 2) 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** (2018) 49-60.
- 3) A. Yasumoto, K. Yoshida, T. Kuwatani, D. Nakamura, M. Svojtka, T. Hirajima, 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* **103** (2018) 1690-1698.
- 4) P. Lanari, O. Vidal, V. De Andrade, B. Dubacq, E. Lewin, E.G. Grosch, S. Schwartz, XMapTools: A MATLAB®-based program for electron microprobe X-ray image processing and geothermobarometry. *Comp. Geosci.* **62** (2014) 227-240.
- 5) F. S. Spear, *Metamorphic phase equilibria and Pressure-Temperature-Time paths*. Monograph 1, Mineralogical Society of America, Washington, D.C. (1993).
- 6) T. Kuwatani, K. Nagata, K. Yoshida, M. Okada, M. Toriumi, Bayesian probabilistic reconstruction of metamorphic *P-T* paths using inclusion geothermobarometry, *J. Mineral. Petrol. Sci.* **113** (2018) 82-95.
- 7) T. Kuwatani, H. Nagao, S. Ito, A. Okamoto, K. Yoshida, T. Okudaira, Recovering the past history of natural recording media by Bayesian inversion, *Phys. Rev. E* **98** (2018) 043311.
- 8) H. R. Rollinson, *Using geochemical data: evaluation, presentation, interpretation*. (Longman Geochemistry Series), Routledge, London (1993).
- 9) 中村謙吾, 桑谷立, 駒井武, 山崎慎一, 主成分分析を用いた表層土壌の元素濃度の地球化学的特徴の抽出, *J. MMIJ* **134** (2018) 13-21.
- 10) H. W. Nesbitt, G. M. Young, Prediction of some weathering trends of plutonic and volcanic rocks based on thermodynamic and kinetic considerations, *Geochim. Cosmochim. Acta* **48** (1984) 1523-1534.
- 11) 桑谷立, 中村謙吾, 渡邊隆広, 小川泰正, 駒井武, 主成分分析を用いた次元圧縮に基づく東北地方太平洋沖地震による津波堆積物の地球化学的特性評価, *地学雑誌* **123** (2014) 923-935.
- 12) K. Yoshida, T. Kuwatani, T. Hirajima, H. Iwamori, S. Akaho, Progressive evolution of whole-rock composition during metamorphism revealed by multivariate statistical analyses, *J. Metamorph. Geol.* **36** (2018) 41-54.
- 13) R. L. Gresens, Composition-volume relationships of metasomatism, *Chem. Geol.* **2** (1967) 47-55.
- 14) J. A. Grant, The isocon diagram—a simple solution to Gresens' equation for metasomatic alteration, *Econ. Geol.* **81** (1986) 1976-1982.
- 15) T. Kuwatani, K. Yoshida, K. Ueki, R. Oyanagi, M. Uno, S. Akaho, Sparse isocon analysis: A data-driven approach for material transfer estimation, *Chem. Geol.* **532** (2020) 119345.
- 16) 藤代一成, 高橋成雄, 渡辺一帆, H.-Y. Wu, スパースモデリングと可視化, *電子情報通信学会誌 D* **99** (2016) 466-470.