

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
Simultaneous estimation of melting degree and source composition of MORB: an application
of data-driven analysis to Geochemistry

*桑谷 立¹、永田 賢二²、赤穂 昭太郎³、岩森 光¹

*Tatsu Kuwatani¹, Kenji Nagata², Shotaro Akaho³, Hikaru Iwamori¹

1.国立研究開発法人 海洋研究開発機構、2.東京大学、3.国立研究開発法人 産業技術総合研究所

1.Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology, 2.The University of Tokyo, 3.National
Institute of Advanced Industrial Science and Technology

Geochemical data sets, such as major, trace and isotopic compositions, preserve precious information about various physical and chemical processes. For example, bulk compositions of igneous rocks directly reflect melting of original rocks, magma mixing and rock-fluid interaction in the earth's interior. However, it has been still difficult to extract physical and chemical processes quantitatively due to many unknown factors and insufficient quality of data sets. Recently, many sophisticated data-driven methodologies have been proposed to extract useful information from high-dimensional data sets in information sciences. In this presentation, we will briefly overview data-driven analytical technologies and introduce an application to simultaneous estimation of melting degrees and a mantle source composition from MORB bulk compositions based on Bayesian estimation and Markov chain Monte Carlo (MCMC) optimization.

キーワード: データ駆動、ベイズ推論、スパースモデリング、マルコフ連鎖モンテカルロ法

Keywords: data-driven, Bayesian estimation, sparse modeling, Markov chain Monte Carlo method

隕石の蛍光X線エネルギースペクトルを用いた主成分分析

Statistical identification of meteorites using X-ray energy spectra measured with handheld-XRF

*新原 隆史¹、洪 鵬¹、宮本 英昭¹、栗谷 豪²

*Takafumi Niihara¹, Peng K Hong¹, Hideaki Miyamoto¹, Takeshi Kuritani²

1.東京大学 総合研究博物館、2.北海道大学

1.The University Museum, The University of Tokyo, 2.Hokkaido University

Landing explorations of extraterrestrial bodies give us detailed information of their surface materials. Rapid identification of the types of materials is important for planning further in-situ analysis during a remote mission, which includes selecting prime targets to yield optimal science return. Active X-ray fluorescence (XRF) is a candidate for future missions, including being a part of the payload of a surface rover [1] as well as APXS [2], for example, which can perform in-situ measurements of the composition of the surface materials. However, one of the largest problems with XRF measurement is the matrix effect. X-ray excitation intensity is highly influenced by changes in the various matrices (e.g. mineral abundance, crystallinity, and porosity). To remove this effect, fusion bead sample is used for laboratory analyses. Then to calculate quantitative values, abundant numbers of a well-known standard samples are measured to obtain a calibration curve, otherwise the bulk compositions cannot be quantitatively and accurately analyzed. Thus, we are testing whether the meteorite type can be statistically identified without matrix correction using X-ray energy spectra yielded from a hand-held XRF (Olympus Delta). We measured 20 meteorite slab samples stored at the University Museum, University of Tokyo, which include chondrite (carbonaceous and ordinary), achondrite (HED, mesosiderite, and Martian), and primitive achondrite (ureilite). Niihara et al. [3] reported that the compositional values of at least 6 elements (Si, Ti, Al, Fe, Mn, and Ca) could be measured both quantitatively and accurately using a hand-held XRF. Thus, we also perform comparative analysis among the compositional values and the X-ray energy spectra, although the quantitative values include large uncertainty due to the matrix effect; we conduct principal components analysis on both the X-ray energy spectra (10 kV and 40 kV: 40 kV can detect signals from minor to trace heavy elements) and compositional data.

On the PC1 and PC2 space, although the total number of classified types of meteorites is only six, we can distinguish almost every type of meteorite (although mesosiderites are widely distributed) utilizing every data set. Achondrites and primitive meteorites can be easily separated by PC1 for energy spectra or PC2 for compositional data. On PC2, ordinary and carbonaceous chondrites are nearly identical both in 10 kV and 40 kV energy spectra data, while indistinguishable using compositional data. Variations appear to be mainly due to the Fe, Ca, and Si components in the spectral and compositional data sets, consistent with Miyamoto et al.[4], despite the fact that 10 kV and 40 kV spectra have different elemental sensitivities. These three elements are major components of major rock-forming minerals (olivine and pyroxene) and are common in meteorite samples. Based on these result, we suggest X-ray energy spectra could be used to classify meteorites directory without any kind of correction and is useful for primary classification and targeting during future planetary surface explorations.

References: [1]Nagaoka et al., 2016. LPSC. [2]Rieder et al., 2004. Science. [3]Niihara et al., 2015 JpGU. [4]Miyamoto et al., 2016, MAPS (in press).

キーワード：X線エネルギースペクトル、隕石、主成分分析

Keywords: X-ray energy spectra, Meteorites, PCA

隕石の近赤外波長域を含む反射スペクトルの主成分分析および岩石学的分類との比較

Preliminary results of principal component analysis on visible near-infrared reflectance spectra of meteorites with comparison to the petrological classification

*綿引 ゆり杏¹、新原 隆史²、洪 鵬²、宮本 英昭²、斎藤 侑輝^{3,4}、福水 健次^{4,3}

*YURIA WATABIKI¹, Takafumi Niihara², Peng Hong², Hideaki Miyamoto², Yuki Saito^{3,4}, Kenji Fukumizu^{4,3}

1.東京大学大学院、2.東京大学 総合研究博物館、3.総合研究大学院大学 複合科学研究科、4.統計数理研究所

1.The University of Tokyo, 2.The University Museum, The University of Tokyo, 3.SOKENDAI, 4.The Institute of Statistical Mathematics

小惑星の分類は地上および宇宙望遠鏡によって観測される反射スペクトルに基づいており、小惑星の構成物質に制約を与えるために多くの研究がなされてきた。Tholen [1]は、初めて小惑星を主成分分析に基づき、8色の反射スペクトル（波長域0.33–1.1 μm ）を用いて13種類の型に分けた。DeMeo et al. [2]も主成分分析によって41色の反射スペクトル（波長域0.45–2.45 μm ）を用いてさらに詳しく27種類の型に分けた。隕石が岩石学的にGroupレベルで45種類に分類されていることを考慮すると[3]、Tholen [1] からDeMeo et al. [2]にかけて小惑星の型が増えたことは、小惑星を岩石学的特徴が既知の隕石と対応させるために重要である。このことは、反射スペクトルの分類において用いるデータの波長範囲と波長分解能が重要であることを意味している。

Britt et al.[4]は、Eight Color Asteroid Survey（8色）で得られた103個の小惑星の反射スペクトル（波長域0.33–1.1 μm ）と、室内実験で測定された411個の隕石の粉末試料のスペクトル（波長域0.33–1.1 μm ）について、主成分空間上で比較を試みた。その結果、V型小惑星とHED隕石は比較的良好に対応したが、小惑星と隕石の大部分を占めるS型小惑星と普通隕石、およびC型小惑星と炭素質隕石の対応関係は良くないと報告している。しかし、Britt et al.[4]では反射スペクトルを1.1 μm までしか用いておらず、主要構成鉱物であるかんらん石と輝石の違いが明瞭となる2 μm 付近の強い吸収[5]を用いていないため、隕石の分類すらできていないか不明である。本研究では、隕石のより広い波長帯、高い波長分解能（41色）の反射スペクトルデータを用いて主成分分析をおこなうことで、隕石の反射スペクトルと従来の岩石学的な分類との対応関係を明らかにする。

隕石のスペクトルデータは、ブラウン大学のRELABのデータベース[6]から、分類が定まっている709個の隕石を利用する。波長0.45–2.45 μm の範囲の反射スペクトルのデータを使用し、主成分分析を行った。PC1における最大・最小値は炭素質コンドライトとオーブライイトであったが、オーブライイトはPC1上では幅広く分布している。PC1の分散に寄与しているのは0.9 μm 付近の吸収であり、輝石とかんらん石の吸収である。PC2は0.9 μm と2 μm 付近の吸収の寄与が大きい。PC1をみると始原隕石のうち、普通コンドライトとユレライト隕石と炭素質コンドライトは近接しているが、普通コンドライトと炭素質コンドライトの間にユレライト隕石が存在しており、PC1は隕石の始原性を表していると考えられる。太陽系初期の情報を持つ始原隕石と、大規模な溶融・分化を経験した分化隕石（HEDおよび火星）がPC2において優位に区別することができた。それぞれの隕石の主な構成鉱物は輝石やかんらん石であるが、鉱物の比率や粒形、化学組成は大きく異なっており、吸収スペクトルにおいても反射率や吸収の位置が大きく異なる。特に2 μm 付近に観察される吸収は輝石のみに由来するため、PC2の分散は輝石の量比が大きく寄与していると考えられる。今回の波長範囲を伸ばした隕石のスペクトル分析により、PC1およびPC2を利用することで、岩石学的分類[3]のうち主要な隕石種(e.g., C, O, Achondrite)に関してはClass以上の部分の見分けが可能である。

引用文献： [1] Tholen, 1994.Ph.D thesis. [2] DeMeo et al. 2009. Icarus 202. [3] Weisberg et al., 2006. In: Lauretta and McSween (Eds.). [4] Britt et al., 1992. Icarus 99. [5] Mochael J. Gaffey, 1976. JGR. [6] Pieters and Hiroi, 2004. LPSC.

キーワード：主成分分析、隕石、近赤外波長域、小惑星、スペクトル

Keywords: Principal Component Analysis, meteorite, visible near-infrared reflectance spectra, asteroid, spectra

深海堆積物へのレアアース濃集を支配する地球化学的独立成分

Statistically independent components controlling enrichment of rare-earth elements in deep-sea sediments

*安川 和孝^{1,2}、中村 謙太郎¹、藤永 公一郎^{2,1}、岩森 光^{3,4}、加藤 泰浩^{1,2,3}

*Kazutaka Yasukawa^{1,2}, Kentaro Nakamura¹, Koichiro Fujinaga^{2,1}, Hikaru Iwamori^{3,4}, Yasuhiro Kato^{1,2,3}

1.東京大学大学院工学系研究科、2.千葉工業大学、3.海洋研究開発機構、4.東京工業大学理工学研究科地球惑星科学専攻

1.School of Engineering, The University of Tokyo, 2.Chiba Institute of Technology, 3.JAMSTEC, 4.Department of Earth and Planetary Sciences, Tokyo Institute of Technology

Rare-earth elements and yttrium (REY) are critical materials that are indispensable in high-tech devices and green technology applications including electric vehicles, smart phones, LED bulbs, wind power generation, and so on. Recently, deep-sea sediments highly enriched in REY, known as REY-rich mud, have been discovered in the Pacific and the Indian oceans (Kato et al., 2011; Yasukawa et al., 2014, 2015). Because of their huge potential economic value as a new resource for REY, it is becoming an important issue to understand the origin of REY-rich mud.

Elucidating the controlling factors of REY-enrichment in deep-sea sediments is key in finding areas of high resource potential worthy of detailed exploration and for revealing latent relationships between the Earth's system and marine mineral resources. Here we construct a hemisphere-scale compositional dataset of ~4,000 bulk sediment samples from more than 100 sites in the Pacific and the Indian oceans, and we apply Independent Component Analysis originally established in the fields of neuroscience and information science in 1990s, to the huge, multi-elemental data matrix. As a result, we successfully extract the statistically independent geochemical signatures including components controlling the REY-enrichment in deep-sea sediments. The features of the REY-controlling components, including hydrothermal, hydrogenous, and biogenic calcium phosphate components, indicate that an underlying key factor of significant REY-enrichment is a sufficiently low sedimentation rate that enables the mud to accumulate REY from the overlying seawater.

-- References --

Kato, Y. et al. (2011) *Nature Geoscience* 4, 535-539.

Yasukawa, K. et al. (2014) *Journal of Asian Earth Sciences* 93, 25-36.

Yasukawa, K. et al. (2015) *Geochemical Journal* 49, 621-635.

キーワード：深海堆積物、レアアース泥、独立成分分析

Keywords: deep-sea sediment, REY-rich mud, Independent Component Analysis

データ駆動科学から探る固体地球科学過程の再構成力学系

CONSTITUTIVE DYNAMICAL SYSTEMS OF SOLID EARTH MECHANICS FROM DATA DRIVEN SCIENCE

*鳥海 光弘¹*mitsuhiro toriumi¹

1. 海洋研究開発機構

1. Japan agency of marine science and technology

CONSTITUTIVE DYNAMICAL SYSTEMS OF SOLID EARTH MECHANICS FROM DATA DRIVEN SCIENCE

Toriumi, M. (OELE, Jamstec)

Explosive massive data flow of seismic activities in the solid earth and related to the volcanic activities takes a new insight of dynamic processes involving complicated basic mechanisms and various inhomogeneities of present systems by means of reconstruction of the attractors in the high dimensional phase space. Recent data science studies of global geochemical data of ridge basalts clarified the global chemical inhomogeneity of the whole mantle hemisphere, indicating the long term mantle hydration by plate subduction by Iwamori (1). Besides, Toriumi (2) studied the seismic activities of the plate boundary zones using the cross correlation method to apply the dimension reduction of the local mechanical states of the crust and mantle. Further, Kuwatani et al. (3) applied the Markov random field model for fluid phase regional patterns in the uppermost mantle from tomographic data.

Reconstruction of the attractors of the dynamical systems of plate boundary mechanics is possibly obtained by means of dimension reduction method using deep learning processing of time series data of seismicity and eruption related seismicity. In this paper, the author intends to discuss the possibilities of big data analyses for constitutive dynamical system in the solid earth process in the case of mechanical evolution of the plate boundary and the volcanic process.

(1), Iwamori, H. EPSL, 2013, (2), Toriumi, M. Proceeding Math for Ind., 2012. (3), Kuwatani, R., Nagata, T., Okada, M., and M. Toriumi, 2014.

キーワード：再構成力学系、固体地球プロセス、次元圧縮

Keywords: reconstructive dynamical system, solid earth processes, dimension reduction

小惑星のアルベドと可視近赤外反射スペクトルの関係：熱的過程への示唆

Relationship between albedo and reflectance spectra of asteroids: implication to asteroids' thermal processes

*洪 鵬¹、新原 隆史¹、宮本 英昭¹*Peng Hong¹, Takafumi Niihara¹, Hideaki Miyamoto¹

1. 東京大学大学総合研究博物館

1. The University Museum, The University of Tokyo

小惑星の可視近赤外反射スペクトルはこれまで多くの地上および宇宙望遠鏡によって観測されており、得られた反射スペクトルの形状に基づいて小惑星の型が分類されている [1]。しかし黒い普通コンドライトと炭素質コンドライトが極めて似たスペクトルを示すことなどからわかるように、全く異なる種類の岩石であっても見かけ上は似たスペクトルが生じることがある [2]。反射スペクトルのこのような性質は、従来の反射スペクトルの形状のみに依存した小惑星の分類方法には限界があることを示唆している。小惑星のアルベドもこれまで数多くの観測データが蓄積されているが、反射スペクトルとの関係はよく理解されていない [3]。本研究ではアルベドを小惑星の分類体系に組み込むことによって、分類法の改善、およびスペクトル—アルベド間に潜在する物理量の抽出を目的とする。

まず我々は既存の文献から小惑星の反射スペクトルとアルベドのデータベースを構築した。反射スペクトルは主にIRTF Near-IR Spectroscopy of Asteroids [3] で得られた $0.45 - 2.45 \mu\text{m}$ のデータを3次スプライン補間し、波長分解能が $0.05 \mu\text{m}$ の形式に統一した。反射スペクトルは各々の平均値で引き算した上で、S型およびC型小惑星の平均スペクトルとの相関係数をそれぞれ求め、両者の差分をスペクトル型指数 R と定義した。アルベドは主にSupplemental IRAS Minor Planet Survey [4] で観測された幾何アルベドを収集した。合計261個の反射スペクトルとアルベドの組み合わせを収集した（一部の小惑星は複数回観測されているため、天体による重複あり）。

得られたアルベドとスペクトル型指数を図示すると、V、S、およびC型小惑星がそれぞれのクラスターに分離された。各クラスターの分散はV、S、Cの后者になるにつれて大きくなる傾向が見られた。さらにアルベドとスペクトル型指数の間に明瞭な関連性が見られた。このことは、アルベドがスペクトルに影響を与える重要な因子であることを示唆している。小惑星表面のアルベドに影響を及ぼす要素として例えば、（1）鉱物量比および元素組成比、（2）レゴリスの粒径、（3）宇宙風化、（4）岩石中の結晶サイズ、が考えられる。しかし我々は結晶サイズがアルベドに影響する最も重要な因子であると考えており、その理由として（1）隕石の分析によると、普通コンドライトと炭素質コンドライトはアルベドが大きく異なるが、両者の間の平均的な鉱物量比や炭素含有量には顕著な差が見られない、（2）破碎により細粒化された粒子ほどアルベドを高くする効果はあるが、小惑星間に見られる著しいアルベドの差を説明できるほど十分ではない、および（3）宇宙風化によってアルベドを低下させるためには還元鉄の生成が必要であるが、アルベドの低いC型小惑星がV型やS型に比べて還元鉄に富んでいるという観測的裏付けはない、ためである。以下では結晶サイズとアルベドの関連性、および熱的過程へと言及する。

隕石の薄片の観察によると、一般的に細粒の結晶を多く含む岩石ほどアルベドは低くなる。HED隕石の分析に基づくと、V型小惑星は集積後に分化と火成活動を経験したと考えられている。したがって母天体でのマグマ活動によりゆっくりとした冷却の結果、結晶が大きく成長し（ $\sim \text{mm}$ ）、アルベドが高いV型小惑星を生まれたと考えられる。一方で、S型とC型小惑星はそれぞれ普通コンドライトと炭素質コンドライトに対応していると考えられている。これらの隕石はコンドリュールを豊富に含むが、コンドリュールは原始太陽系円盤中で急速に冷却されたため [5]、コンドリュール中の結晶サイズはHED隕石に比べ極めて小さい（ $\sim \text{nm}$ ）。これがC型小惑星の低いアルベドの原因であると考えられる。一方コンドリュールの間隙を埋めるマトリックス物質は、普通コンドライトでは大きい（ $\sim \mu\text{m}$ ）。このことがS型とC型の間で大きなアルベド差を生む原因であると考えられる。

参考文献: [1] DeMeo F.E. et al. (2009) *Icarus*, 202, 160. [2] Britt D.T. et al. (1992) *Icarus*, 99, 153. [3] Bus S.J. and Binzel R.P. (2002) *Icarus*, 158, 146. [4] Tedesco E.F. et al. (2002) *Astronomical J.*, 123, 1056. [5] Yurimoto H. and Wasson J.T. (2002) *GCA*, 66, 4355.

キーワード：小惑星、反射スペクトル、アルベド、隕石、結晶サイズ

Keywords: asteroids, reflectance spectra, albedo, meteorites, crystal size

機械学習による含水マグマの熱力学モデルの構築

Data driven construction of thermodynamic model of hydrous melt using machine learning technique

*上木 賢太¹、桑谷 立¹、岩森 光¹

*Kenta Ueki¹, Tatsu Kuwatani¹, Hikaru Iwamori¹

1. 独立行政法人海洋研究開発機構地球内部物質循環研究分野

1. Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology, Department of Solid Earth Geochemistry

地球深部の高温・高圧条件下のマグマに水が含まれる場合、物性や、融点などの相平衡が大きく変化するため、含水マグマの物理化学特性を正確に予測することは地球内部のマグマプロセスを知るためにきわめて重要である。これらを解明するには高温高圧実験が有効で、これまで多くの研究がなされている。高温高圧実験は、特定の化学組成をもつ出発物質を用い、決められた温度、圧力で行われる。一方、天然のマグマプロセスでは、温度・圧力・化学組成が連続的に変化する。そのため、普遍的な議論を行うには、実験結果を補完する数値計算モデルを確立する必要がある。

含水マグマの相平衡の計算モデルの構築とはすなわち、含水マグマの自由エネルギーを記述する式及びその係数を決定する問題となる。モデル化においては、ミクロな構造などの情報を制約として適切な数式を用いることが重要となるが、高温高圧下での含水マグマの構造や物理特性には未解明な点が多い。モデル構築の制約となる実験の点数は限られる一方、含水マグマの相平衡は非線形性が強いほか多成分系であるため、パラメーターの数も多い。また、マグマを扱う場合は、想定される温度、圧力や組成の幅が非常に広くかつ連続的である。このような条件でのパラメーター決定には、従来地球科学で良く用いられてきた解析的な方法や経験に基づいた方法とは異なる手法を用いる必要がある。本研究では、機械学習の手法を用いて、データ駆動で、含水マグマに関して、自由エネルギーを記述する関係式と多数の熱力学パラメーターの決定を行う。離散的で温度、圧力、組成の幅も限られる実験データから広い条件に適用できるパラメーターを決定するため、本研究では機械学習の手法であるクロスバリデーション法を用いた。クロスバリデーション法（交差検証法）とは、データセットを2分割し、一方を使用してモデル決定を行い、もう一方を使用してモデルの妥当性（汎化性能）の検証を行う手法である。モデル構築の制約となる訓練データ（すなわち実験データ）の点数が少なく離散的である本研究のような場合でも、普遍的に用いることができるパラメーターを制約することができる。本研究では、全体の実験データのうち1つをテストデータとして、残りを訓練データとして用いる、leave-one-out cross-validationという方法を用いた。モデル式に関しては、パラメーターの全数組み合わせ探索を行い、異なる組み合わせのパラメーターを用いた場合の汎化性能を比較することで、最も妥当性の高いモデル式の選択を行った。

基礎モデルとして、上部マントルを構成する主要鉱物である、かんらん石と含水マグマの間の相平衡に着目して開発を行う。モデル決定に用いる実験結果としては、マントルかんらん岩の無水及び含水融解実験 (e.g., Hirose and Kushiro, 1993; Hirose and Kawamoto, 1995)で決定されている温度、圧力、含水量を含むメルト組成、かんらん石組成を使用した。モデリングに必要な比熱、かんらん石の非理想性パラメーターに関しては先行研究を参照し、メルトの非理想性パラメーターの係数の決定を機械学習を用いて行った。非理想性に関しては正則溶液を仮定したが、先行研究結果によって強い非線形性が予想されていたH₂Oに関するパラメーターに関して、特に1次の項に加えて2次の項を考慮して検証を行った。全数探索で、様々なマーグラスパラメーターの組み合わせで汎化性能を比較した結果、H₂Oに関して2次の項と1次の項を両方とも考慮するよりも、1次の項のみを用いたモデルの方が、幅広い条件の実験結果を再現することが分かった。決定されたモデル式とパラメーターを用いてフォワード計算を行った結果、新しいモデルは実験の融融条件を良く再現することが分かった。本研究で示された機械学習を用いた熱力学モデリングの手法はモデルとパラメーターの推定、モデルの検定を同時に行うことが可能であり、より多数の端成分が関与した複雑な化学反応のモデル化や、ケイ酸塩メルト以外の様々な鉱物の熱力学モデル化にも適用可能であると考えられる。

キーワード：機械学習、熱力学、含水メルト、相平衡

Keywords: Machine learning, Thermodynamics, Hydrous melt, Phase equilibrium

順モデルによるマイクロブーディン構造を呈する粒子群データの再現：簡易マイクロブーディン応力計の提案

Forward modeling of microboudinaged columnar grains: simplified microboudin palaeo-piezometer

*松村 太郎次郎¹、増田 俊明²

*Taroujirou Matumura¹, Masuda Toshiaki²

1.静岡大学創造科学技術大学院自然科学系教育部、2.静岡大学理学部地球科学科

1.Graduate School of Science and Technology, Educational Division, Shizuoka University, 2.Institute of Geosciences, Shizuoka University

変成岩中のマイクロブーディン構造を呈する柱状鉱物の存在比は変成岩が過去に経験した差応力の大きさを推定する重要な手がかりである。本発表では順モデルによる数値シミュレーションを行ってマイクロブーディン構造を呈する粒子の数が差応力に対してのように変化するか調べ、無限遠方から生じた差応力をマイクロブーディン構造の存在率から推定する方法を提案する。

シミュレーションは以下の二つの原理に従って行う。一つ目はWeakest link theoryである。これは粒子の破壊はその粒子の最弱の部分で起こると仮定し、柱状鉱物の破壊強度を表す確率密度関数(Masuda et al., 1989)に従う乱数を逆関数法によって生成して粒子の破壊強度を与えた。二つ目はShear-lag モデル(Zhao and Ji 1997)である。これは無限遠方からの応力が柱状鉱物にどのように引っぱり応力として伝搬するかを記述する。与えられた粒子の破壊強度が粒子に生じる引っぱり応力よりも小さい場合、粒子は破壊されマイクロブーディン構造が形成されたとみなす。柱状鉱物の破壊が起こる場所はベータ分布に従うと仮定し、計算に用いる柱状鉱物の寸法データはEast Pilbaraで採取したメタチャート中の電気石のものをを用いた。電気石の寸法データは面構造に平行な面で作った薄片中に含まれる電気石のうち、鉱物線構造方向 $\pm 15^\circ$ の範囲に長軸が向いている電気石1432粒を選び出してそれぞれの幅、長軸の長さ、そして割れた位置をそれぞれ測定した。このデータをもとに無限遠方からの差応力を0MPaから20MPaまで単調に増加させて、粒子全体に占めるマイクロブーディン構造を持った粒子数の変化を調べた。

結果では与える差応力の上昇に伴って粒子全体に占めるマイクロブーディン構造の存在率は上昇し、20MPaの差応力下で70%程度の粒子がマイクロブーディン構造を示した。縦横比別のマイクロブーディン構造存在率は天然のものと非常によく似た分布を示すことがわかった。したがって、我々のモデルは天然のマイクロブーディン構造データをうまく再現できているようである。我々は無限遠方の差応力に対するマイクロブーディン構造存在率の関係に注目し、実際の岩石中に存在するマイクロブーディン構造の存在比に対応する無限遠方からの差応力を推定できる応力計を作った。この応力計は粒子全体のマイクロブーディン構造の存在比から差応力を推定できるのでこれを簡易応力計と呼ぶことにする。本発表では簡易応力計を天然の変成岩に適用し、従来のマイクロブーディン応力計との比較を行う。

引用文献

Masuda, T., Shibutani, T., Igarashi, T., & Kuriyama, M. (1989). Microboudin structure of piedmontite in quartz schists: a proposal for a new indicator of relative palaeodifferential stress. *Tectonophysics*, 163(1-2), 169-180.

Zhao, P., & Ji, S. (1997). Refinements of shear-lag model and its applications. *Tectonophysics*, 279(1), 37-53.

キーワード：マイクロブーディン構造、地質古応力計、数値モデリング

Keywords: Microboudin structure, Palaeo-piezometer, Numerical modeling

クリギング法のための非凸最適化に基づく観測点選択

Selection of observation points in kriging based on non-convex programming

*石川 大智¹、加納 将行²、長尾 大道^{1,2}*Daichi Ishikawa¹, Masayuki Kano², Hiromichi Nagao^{1,2}

1.東京大学大学院情報理工学系研究科、2.東京大学地震研究所

1.Graduate School of Information Science and Technology, The University of Tokyo, 2.Earthquake Research Institute, The University of Tokyo

空間内の各点に定まる確率変数に対して、観測値から空間補間を行う手法の一つとしてクリギング法 (Matheron, 1963) が挙げられる。クリギング法では、確率変数の空間共分散の構造を決めているセミバリオグラム関数の推定を行なったあと、推定値が最良線形不偏予測量となるようにセミバリオグラムと観測値から定まる線形方程式を解くという手続きで行われる。クリギング法は幅広い分野にわたり標準的な空間補間手法として用いられており、その応用例は日射量予測 (Alsamamra et al., 2009等)、ラドン含有量予測 (Zhu et al., 1996等)、集積回路の性能予測 (Velten et al., 2012等) など多岐にわたる。

クリギング法では推定点に対して全ての観測値を用いるため、地震被害の応急評価のように多数の推定点に対する推定を即座に行う必要がある場合には、推定精度に対して要する計算量が大きくなるという問題点がある。この問題を解決する為に、Yang et al., 2014ではクリギング法とleast absolute shrinkage and selection operator (lasso) を組み合わせることを提案した。しかし、クリギング法において凸正則化項を導入しても、推定量が不偏性を持つという制約条件の為に、変数選択に寄与しない。そこで、本研究では、クリギング法における観測点選択を非凸最適化に基づいて行うことを提案する。

本研究で取り上げる非凸最適化問題は、制約領域が超平面であり、目的関数が2次形式と非凸正則化項の和で表される。その非凸正則化項とは、Lou et al. (2015)によって提案されたL1-L2正則化項を導入した問題やGotoh et al. (2015)によってL0制約付き問題と同等であることが指摘されたL1-largest-K正則化項である。この形の最適化問題はDC計画問題というクラスに属しており、制約領域が凸集合であり、目的関数が2つの凸関数の差の形で表すことができる。そして、それらはDC計画問題に対する汎用解法の一つとして知られているTao (1986)によって提案されたDCアルゴリズムを用いて近似解を得ることが出来る。

数値実験により、クリギング法においてlassoでは変数選択ができない場合でも、L1-L2正則化項やL1-largest-K正則化項では変数選択が行えることを確認した。

キーワード：クリギング法、DC計画法、観測点選択

Keywords: Kriging, DC Programming, Selection of observation points

地球統計学と物理則を組み合わせた金属鉱床品位の空間モデリングの試み

Preliminary spatial modeling of ore grades over a deposit by a combination of geostatistics and physical law

*小池 克明¹、呂 磊¹、久保 大樹¹、柏谷 公希¹、多田 洋平¹、山田 亮一²

*Katsuaki Koike¹, Lie Lu¹, Taiki Kubo¹, Koki Kashiwaya¹, Yohei Tada¹, Ryoichi Yamada²

1.京都大学大学院工学研究科、2.東北大学理学研究科

1.Graduate School of Eng., Kyoto Univ., 2.Graduate School of Sci., Tohoku Univ.

金属は社会のあらゆる工業製品やインフラストラクチャーの材料であり、世界的な需要の指数関数的増加が見込まれている。需要増加に対処するには、既存の鉱床の水平・深度方向の広がり の把握、および新規の鉱床の探査・発見がますます重要な課題となつてきている。そのためにも開発中の鉱床、あるいは有望地域における品位（鉱石中の金属濃度）の高精度空間分布推定が不可欠である。このような推定に、不規則配置の測点 で得られ、情報量も少ない地質データの空間的相関構造を用いるという地球統計学（Geostatistics）的手法が広く適用されてきた。しかし、これにより得られる空間分布の特徴はデータの統計学的性質に依存するので、地質学的な妥当性は保証されない。品位の分布は熱水の流動のような物理・化学的現象に起因するので、この考慮も必要である。また、測点が疎な領域での推定精度が低いという問題点もある。

そこで本研究では、これらの問題点の解決を目指し、地球統計学と物理則との組み合わせることで品位の空間分布推定精度の向上を試みた。そのケーススタディの対象として、秋田県北鹿地域での大規模な黒鉱鉱床である松峰鉱床と深沢鉱床を選んだ。黒鉱とはCu, Zn, Pbに富んだ緻密な鉱石で、火山性塊状硫化物（VMS）の一種である。鉱床の形成は、海底火山活動に起因した鉱液が海水との混合によって冷却され、金属が沈殿したことによる（山田・吉田、2013など）。解析では、鉱床での垂直、あるいはそれに近いボーリングによるCu, Zn, Pb濃度データを用いた。

まず各金属濃度データのセミバリオグラム解析を行い、相関構造を明らかにした後にクリギングによる内挿、および逐次ガウス法によるシミュレーションによって3次元の品位分布モデルを作成する。次に、鉱液の移動と金属の沈殿は移流拡散現象で近似できると仮定して、鉱液ソースの位置、移流速度、拡散速度などを未知パラメータとした理論解を測定データに当てはめ、非線形最小二乗法によってパラメータの値を決める。これにより、対象領域全体に対して濃度分布を与えられるようになる。さらに、地球統計学による空間モデルと物理モデルとを、測点の位置で計算濃度が測定値に一致するようにクリギングによって結合させた。

以上の結合モデルによって品位分布から鉱液の主要なパスが概ね推定できようになり、これは鉱床の形成プロセスの解釈に有用である。しかし、ボーリング地点の間隔に依存して数十m単位での品位分布推定と粗い。鉱液の詳細なパスが推定できるように、鉱石試料の顕微鏡観察により小領域での硫化鉱物の分布を抽出し、マイクロスケールでの空間モデリング、およびそれとマクロスケールモデルとの組み合わせに取り組んでいるところである。

謝辞：貴重なボーリング調査資料のご提供と整理にご協力いただいたDOWAメタルマイン(株)、エコシステム花岡(株)に深甚の謝意を表したい。

文 献

山田亮一・吉田武義（2013）北鹿地域における黒鉱鉱床と背弧海盆火山活動，地質学雑誌，v. 119 補遺，p. 168-179.

キーワード：黒鉱、クリギング、移流拡散方程式、銅品位、鉱液パス

Keywords: Kuroko, kriging, advection-diffusion equation, copper grade, ore-solution path

近似的ベイズ計算による岩石-水相互作用における表面積モデル選択

Approximate Bayesian Computation of surface-area model selection in water-rock interactions

*福島 孝治¹、岡本 敦²、桑谷 立³、大森 敏明⁴

*Koji Hukushima¹, Atsushi Okamoto², Tatsu Kuwatani³, Toshiaki Omori⁴

1.東京大学大学院総合文化研究科、2.東北大学大学院環境科学研究科、3.国立研究開発法人 海洋研究開発機構、4.神戸大学大学院工学研究科

1.Department of Basic Science, University of Tokyo, 2.Graduate School of Environmental Studies, 3.Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology, 4.Graduate School of Engineering, Kobe University

岩石-水相互作用の理解は地球表面での岩石形成ダイナミクスを理解する上で最も基本的かつ重要な要素である。しかしながら、例えば実験室系とフィールドでは運動速度の評価値に数桁もの違いがしばしば生じ、相互作用および運動論の正しい理解には至っていない。その原因の一つには様々な地質学的環境における反応表面積の評価の不定性が挙げられる。それを解決するために、実験室系やフィールドにおいて比較的容易に得られる反応溶液データから反応速度定数を正しく評価する方法の確立が望まれる。特に反応の表面積モデルの同定も可能な解析手法が運動速度の理解へつなげるために重要である。

我々は化学反応の部分観測データから反応速度定数を推定する近似的ベイズ計算 (Approximate Bayesian Computation, ABC) を用いた方法を提案する。ABCは近年機械学習の分野で、尤度関数の評価が難しい推定問題に対して、シミュレーションにより近似的評価を行う効果的な方法として注目されている。実験室系でも行える最も単純な化学反応モデルとして、反応物 → 中間生成物 → 生成物を考える。化学反応式はそれぞれの成分濃度の常微分方程式で与えられ、反応速度定数と初期条件を指定すれば時間発展を数値的に求めることは容易である。一方、観測ノイズを考慮した尤度関数の評価は非自明である。特に、中間生成物の時間発展の観測データを部分的にしか得られない状況において、観測データから反応速度定数のベイズ推定が行いたい。本研究では、中間生成物の人工データに対して、ABCの幾つかの技法の中でポピュレーション型モンテカルロ法による計算を用いて、それぞれの反応速度定数が正しい推定できることを示す。また、反応速度定数の推定だけでなく、幾つかの表面積モデルの候補からABCを基礎としたモデル選択を試みる。この方法ではベイズ因子が各モデルのポピュレーション比として求めることができる。発表では、入力データのサンプル数やノイズ強度による推定精度や推定限界の影響について詳しく調べた結果を報告する。

キーワード：岩石-水相互作用、近似ベイズ計算、表面積モデル

Keywords: water-rock interactions, Approximate Bayesian Computation, surface-area model