

交換モンテカルロ法を用いた合成単斜輝石の反射スペクトル分解 Deconvolution analysis of reflectance spectra of synthetic clinopyroxenes using the exchange Monte Carlo method

洪 鵬^{1*}; 宮本 英昭¹; 永田 賢二²; 杉田 精司³; 新原 隆史¹; James Dohm M.¹; 逸見 良道¹;
岡田 真人²
HONG, Peng^{1*}; MIYAMOTO, Hideaki¹; NAGATA, Kenji²; SUGITA, Seiji³; NIIHARA, Takafumi¹;
JAMES, Dohm M.¹; HENMI, Ryodo¹; OKADA, Masato²

¹ 東京大学 総合研究博物館, ² 東京大学 複雑理工学専攻, ³ 東京大学 地球惑星科学専攻
¹Univ. Museum, Univ. of Tokyo, ²Complexity Sci. & Eng., Univ. of Tokyo, ³Earth & Planetary Sci., Univ. of Tokyo

反射スペクトル分解はこれまで様々な鉱物に適用され、その組成や結晶構造の推測に役立ってきた。その中でも単斜輝石は固体天体表層に豊富に存在すること、その特徴的なスペクトルの形状から、スペクトル分解において最も重要な鉱物の一つだとみなされている。単斜輝石の可視近赤外反射スペクトルに含まれる吸収帯中心は、Fe と Ca の量に応じて移動することが知られている。Klima et al. (2011) は人工的に合成した様々な組成を持つ単斜輝石の可視近赤外反射スペクトルを修正ガウス関数モデル (MGM) (Sunshine et al., 1990) を用いて分解した。MGM は反射スペクトル分解において広く用いられている手法だが、そのアルゴリズムで用いられている最急降下法は、局所解に陥りやすいという欠点を持つ。したがって、解析者は初期値を調節しながら何度も計算を繰り返す必要があり、理想的な解が得られたとしても、その解には初期値を調節したこと起因する恣意性が付きまとう。我々はこの局所解問題を解決するため、ベイズ理論に基づく交換モンテカルロ法 (Nagata et al., 2012) を用いて、幅広い組成の単斜輝石の反射スペクトル分解を行った。交換モンテカルロ法はマルコフ連鎖モンテカルロ法を改良したものであり、局所解に陥りにくく、初期値依存性も少ないという性質を持つ。そのモデルを、我々は Klima et al. (2011) によって計測された人工的に合成された単斜輝石の可視近赤外反射スペクトルに適用した。スペクトルの波長解像度は 5 nm であり、波長範囲は 0.3-2.6 μm である。試料は 45 μm 以下のサイズの粉末であり、典型的なサイズは 15-25 μm である。31 個の単斜輝石の反射スペクトルを用い、Ca, Mg, Fe のそれぞれの含有量は 8-52%, 0-52%, 3-90% と幅広い組成を含んでいる。解析の結果、(1) 1 μm 吸収帯は Ca 量の増加に応じて長波長側に移動する (2) 1 μm 吸収帯は Fe 量の増加に応じて短波長側に移動するが、分散は斜方輝石のそれに比べて大きい (3) Ca < 30% の試料については、Ca の増加につれて 2 μm 吸収帯が長波長側に移動するが、Ca > 30% の試料については 2 μm 吸収帯の中心は 2.4 μm でほぼ固定される (4) 普通輝石 (Ca < 20%) の 2 μm 吸収帯の中心波長は Fe 量にあまり依存しないが、ピジョン輝石 (Ca > 20%) については Fe 量の増加に応じて 2 μm 吸収帯の中心波長が長波長側に移動する、ことがわかった。これらの結果は MGM を用いた Klima et al. (2011) の結果と極めて調和的であり、交換モンテカルロ法が伝統的な MGM による解析と同じ結果を得ることが可能であることを示唆している。また幅広い組成の単斜輝石に対して交換モンテカルロ法が適用できたことは、今後かんらん石や斜方輝石など様々な鉱物を含む反射スペクトルへの応用の第一歩となることを意味する。