

環境研究総合推進費 終了研究成果報告書

公募区分： 環境問題対応型研究（ミディアムファンディング枠）

研究予定期間： 令和4（2022）年度 ～ 令和5（2023）年度

課題番号： 【5MF-2201】

体系的番号： （JPMEERF20225M01）

研究課題： 「機械学習によって観測データと統合された新しい大気汚染予測システムの開発と実働実験」

Research Title: Development and test experiment of a new air pollution prediction system integrated with observational data by machine learning

研究代表者： 弓本 桂也

研究代表機関： 九州大学

研究分担機関： 国立研究開発法人国立環境研究所、一般財団法人電力中央研究所

研究協力機関：

研究領域： 安全確保領域

キーワード： 機械学習、ガイダンス、大気汚染予測システム、大気汚染物質広域監視システム、光化学オキシダント

令和6（2024）年5月

目次

環境研究総合推進費 終了研究成果報告書	1
I. 成果の概要	3
1. はじめに（研究背景等）	5
2. 研究開発目的	5
3. 研究目標	6
4. 研究開発内容	7
5. 研究成果	8
5-1. 成果の概要	8
5-2. 研究目標の達成状況	13
5-3. 研究成果の学術的意義と環境政策等への貢献	15
6. 研究成果の発表状況の概要	16
6-1. 成果の件数	16
6-2. 主な査読付き論文等の主要な成果	16
7. 国際共同研究等の状況	16
8. 研究者略歴	17
II. 成果の詳細	18
II-1 サブテーマ1「機械学習による大気汚染予測版ガイダンスシステムの開発と改良」	18
[サブテーマ1要旨]	18
1. サブテーマ1研究開発目的	18
2. サブテーマ1研究目標	19
3. サブテーマ1研究開発内容	19
4. サブテーマ1結果及び考察	20
5. サブテーマ1研究目標の達成状況	29
II-2 サブテーマ2「ガイダンスを導入した大気汚染予測システムの開発と実働実験」	31
[サブテーマ2要旨]	31
1. サブテーマ2研究開発目的	31
2. サブテーマ2研究目標	31
3. サブテーマ2研究開発内容	31
4. サブテーマ2結果及び考察	32
5. サブテーマ2研究目標の達成状況	37
III. 研究成果の発表状況の詳細	39
(1) 成果の件数	39
(2) 誌上発表	39
(3) 口頭発表	40
(4) 知的財産権	41
特に記載すべき事項はない。	41
(5) 「国民との科学・技術対話」の実施	41
(6) マスメディア等への公表・報道等	41
(7) 研究成果による受賞	41
(8) その他の成果発表	42

I. 成果の概要
 <課題情報>

公募区分：	環境問題対応型研究（ミディアムファンディング枠）
研究実施期間：	令和4（2022）年度 ～ 令和5（2023）年度
課題番号：	【5MF-2201】
研究課題：	「機械学習によって観測データと統合された新しい大気汚染予測システムの開発と実働実験」
研究代表者：	弓本 桂也（九州大学、教授）
重点課題（主）：	【重点課題⑮】大気・水・土壌 等の環境管理・改善のための対策技術の高度化及び評価・解明に関する研究
重点課題（副）：	【重点課題④】環境問題の解決に資する新たな技術シーズ発掘・活用
行政要請研究テーマ（行政ニーズ）：	非該当
研究領域：	安全確保領域

<キーワード>

機械学習
ガイダンス
大気汚染予測システム
大気汚染物質広域監視システム
光化学オキシダント

<研究体制>

サブテーマ1 「機械学習による大気汚染予測版ガイダンスシステムの開発と改良」

<サブテーマ1 リーダー及び研究分担者>

機関名	部署名	役職名	氏名	参画期間
九州大学	応用力学研究所	教授	弓本桂也	
電力中央研究所	サステナブルシステム研究本部	主任研究員	板橋秀一	

サブテーマ2 「ガイダンスを導入した大気汚染予測システムの開発と実働実験」

<サブテーマ2 リーダー及び研究分担者>

機関名	部署名	役職名	氏名	参画期間
国立環境研究所	地域環境保全領域大気モデリング研究室	主席研究員	菅田 誠治	

< 研究経費（間接経費を含む） >

年度	直接経費	間接経費	経費合計
2022	14,746千円	4,424千円	19,170千円
2023	14,716千円	4,415千円	19,131千円
合計	29,462千円	8,839千円	38,301千円

1. はじめに（研究背景等）

自然現象や人為活動によって大気中に放出される大気汚染物質（エアロゾル（PM2.5）や光化学オキシダント（オゾン））は、大気環境の悪化や人間の健康など国民生活に大きな影響を与えている。大気汚染防止法等の排出規制にも関わらず、オゾン濃度は減少せず、令和元年度の環境基準達成率はほぼ0%と極めて厳しい状況が続いている。これらの早期警戒を呼びかけ、社会生活や健康に与える影響を抑制するために、国立環境研究所では化学輸送モデル（CTM）を用いた大気汚染予測システムVENUS（以下「VENUS」）の開発・運用を行っており、重要な社会インフラとして認識されている。しかし、その予測精度は定量的に十分であるとは言い難く、PM2.5およびオゾン濃度の予測値と実測値の間には依然として大きな乖離がある。一方、環境省では大気汚染物質広域監視システム（以下「AEROS」）を構築し、大気汚染の監視とデータの収集と蓄積を行ってきた。これらのデータは、CTMの検証と改良や予測精度の評価には用いられてきたが、より直接的に予測精度の向上には用いられてこなかった。

申請者は推進費5RF-2002「機械学習を用いた大気汚染予測システムへのガイダンス手法の開発と予測精度向上」（代表：弓本桂也、2020～2021、事後評価S）（以下、推進費5RF-2002）の中で、大気汚染予測に適した新しいガイダンスの開発を行った。ガイダンスとは、数値天気予報で広く用いられているポストプロセス（事後処理）の1つで、予報の補正・翻訳とも呼ばれる。具体的には、数値気象モデルの予測結果をインプットに、予測に含まれる系統誤差（解像できない現象によるものやモデルの不完全さによる誤差など）の修正や、数値気象モデルが直接計算しない要素（視程や発雷確率など）への変換を行う過程のことである。

推進費5RF-2002では、機械学習（AI）技術を応用し、AEROSで得られた膨大な観測を教師データとすることで、大気汚染予測を対象としたガイダンスの開発を行った（図0-1に大気汚染予測版ガイダンスの概略図）。構築したガイダンスを用いた予測実験を行ったところ、CTMの予測結果にガイダンスを作用させることで、PM2.5およびオゾンの予測濃度が大幅に改善され、ガイダンスが大気汚染予測の予測精度向上に非常に有効であることが示された。

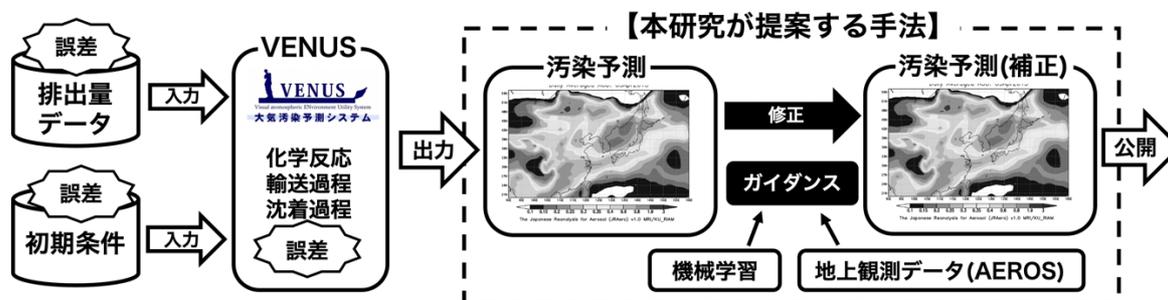


図0-1 大気汚染予測システムにおけるガイダンスの概略図。

2. 研究開発目的

本課題では、PM2.5およびオゾン濃度を対象に、推進費5RF-2002で得られたガイダンスをVENUSに応用し、観測データと統合した新しい大気汚染予測システムの開発を行う（先行課題（推進費5RF-2002）と本課題の関係を図0-2に示す）。図0-3に大気汚染予測システム版のガイダンスの概念図を示す。ガイダンスの構築にはニューラルネットワークによる機械学習を用いる。CTMで予測されたPM2.5およびオゾン濃度に加え、気温、風向・風速などの気象データ、時刻や月といった時間に関する情報を入力し、PM2.5およびオゾン濃度の修正を行う。ニューラルネットワークの学習に用いる教師データにはAEROSで観測された濃度データを用いる。推進費5RF-2002で明らかとなったガイダンスの課題の克服や、VENUSの実装を想定したガイダンスの改良を進める。また、VENUSへのガイダンスの実装と現業運用（web公開も含む）を想定した実働実験を実現させ、ガイダンス導入版VENUSの現業運用の検討まで繋げる。

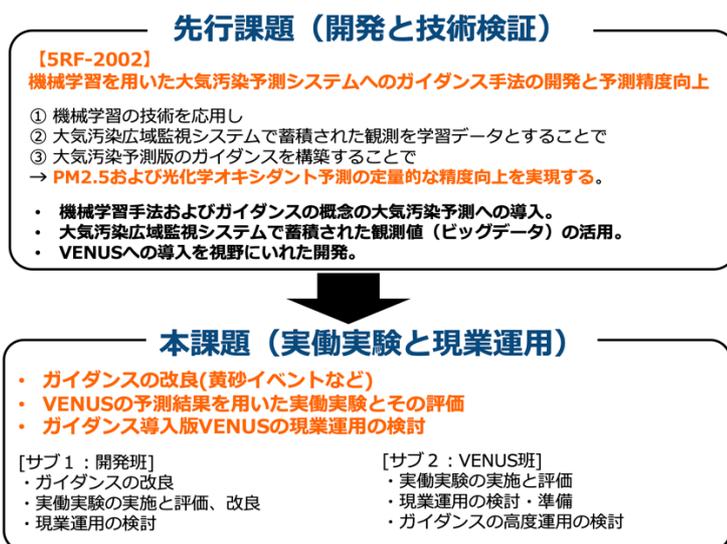


図0-2 先行課題である推進費5RF-2002の研究内容と本課題の課題と研究内容。

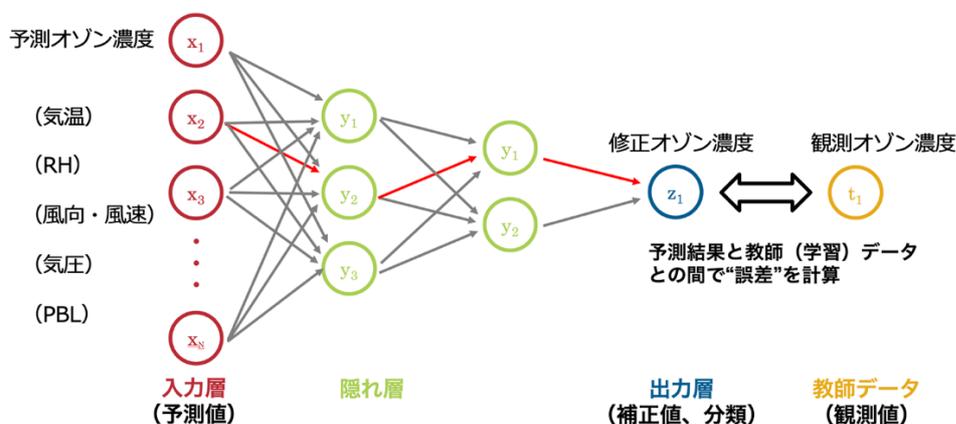


図0-3 ニューラルネットワークを用いた大気汚染予測システム版ガイダンスの概略図。

3. 研究目標

全体目標	<ul style="list-style-type: none"> ・ 国立環境研究所が開発・運用する大気汚染予測システム（以下「VENUS」）を対象としたガイダンスの開発を行い、PM2.5および光化学オキシダント（オゾン）の予測精度の向上を行う。 ・ ガイダンスの作成には、機械学習（多層ニューラルネットワーク）の技術を応用する。環境省が運用する大気汚染物質広域監視システム（以下「AEROS」）で得られた膨大な観測データを教師データに、蓄積されたVENUSの予測値を入力データに、ガイダンスを構築する。 ・ 構築したガイダンスをVENUSに導入した新しい大気汚染予測システムを開発する。開発したシステムを用い、現業運用を想定した実働実験を行う。実働実験の結果から予測精度の評価・検証を行い、ガイダンスの改良を行う。 ・ PM2.5濃度予測に対しては、相関係数0.7以上、二乗平均平方根誤差の30%減少を目標とする。 ・ オゾン濃度予測に対しては、平均バイアス30%減少、相関係数0.8以上、二乗平均平方根誤差の30%減少を目標とする。 ・ 実働実験の結果を詳細に検討し、ガイダンス導入版VENUSの現業運用を検討する。必要に応じて現業運用に向けた準備を行う。
------	--

サブテーマ1	「機械学習による大気汚染予測版ガイダンスシステムの開発と改良」
サブテーマ1 実施機関	九州大学、電力中央研究所
サブテーマ1 目標	<ul style="list-style-type: none"> サブテーマ2から提供されたAEROSの観測データおよびVENUSの予測値をそれぞれ教師データ、入力データとすることで、VENUSに対応したガイダンスの作成を、機械学習（多層ニューラルネットワーク）を用いて行う。 構築したガイダンスサブテーマ2に提供する。VENUSへの導入の補助を行う。 サブテーマ2が行った実働実験の結果から予測精度の評価・検証を行い、ガイダンスの改良を行う。 サブテーマ2と共同で、実働実験の結果の詳細な検証を行い、ガイダンス導入版VENUSの現業運用についての検討を行う。ガイダンス導入版VENUSの現業運用に向けた開発の補助を行う。

サブテーマ2	「ガイダンスを導入した大気汚染予測システムの開発と実働実験」
サブテーマ2 実施機関	国立環境研究所
サブテーマ2 目標	<ul style="list-style-type: none"> 機械学習の教師データおよび入力データとなるAEROSの観測データおよびVENUSの予測値をサブテーマ1に提供する。 サブテーマ1が開発したガイダンスを導入したガイダンス導入版VENUSの開発を行う。 ガイダンス導入版VENUSを用い、現業運用を想定した実働実験を行い、予測結果をサブテーマ1に提供する。 実働実験の結果をサブテーマ1と共同で詳細に検証し、ガイダンス導入版VENUSの現業運用についての検討を行うとともに、必要に応じて現業運用に向けた準備を行う。

4. 研究開発内容

本研究ではVENUSへのガイダンスの導入と現業運用についての検討を行うために、以下の3つの項目について研究開発を行った。

1. 「大気汚染予測システムに関するアンケート」の実施（サブテーマ1、サブテーマ2）

VENUSへのガイダンス導入を検討するうえで、大気汚染予測システムのユーザーの現状認識と要望の調査を行った。

2. ガイダンスの開発と改良（サブテーマ1）

先行プロジェクトである推進費5RF-2002では、特にPM2.5の高濃度イベントでのガイダンスのパフォーマンス低下が課題となっていた。これを克服するために逐次型ガイダンスや回帰型と分類型の2つのガイダンス直列でつなぐ連続型ガイダンスの開発を行った。

また、1.「大気汚染予測システムに関するアンケート」の結果を踏まえつつ、VENUSへの導入とwebページでの予測結果の公開を想定したガイダンスの改良を行った。予測結果の地図表示を行うためにガイダンスを全国に拡張するとともに、ガイダンスを応用した予測信頼度の算出を行った。

これらのガイダンスの開発および改良にはサブテーマ2より提供されたVENUSの計算設定および観測データが用いられた。

3. ガイダンス導入版VENUSの開発（サブテーマ2、サブテーマ1）

2.「ガイダンスの開発と改良」で作成されたガイダンスのプロトタイプを用い、ガイダンス導入版のVENUSの設計開発を行った。ガイダンス導入版VENUSの現業運用を想定した実働実験を行った。この実働実験では、実際のVENUSの予測値を用いて、ガイダンス導入版VENUSを並行的に実行した。

5. 研究成果

5-1. 成果の概要

1. 「大気汚染予測システムに関するアンケート」の実施（サブテーマ1、サブテーマ2）

研究初年度のキックオフ会合において、アドバイザーより「現在のVENUSのwebページの表示にガイダンスがどのように関わってくるのか？」など、ガイダンス導入版VENUSのアウトプットの検証の少なさが指摘された。将来的な現業運用を想定するうえで、ガイダンス導入版VENUSの公表の仕方を検討することは重要である。そのため、VENUSを普段から活用している大気環境研究者や地上自治体の関係者を中心に「大気汚染予測システムに関するアンケート」を実施し、ユーザーの現場認識と要望を調査した（図0-5）。大気環境研究者や地方自治体の環境研究所の担当者を中心に合計22件の回答を得た。

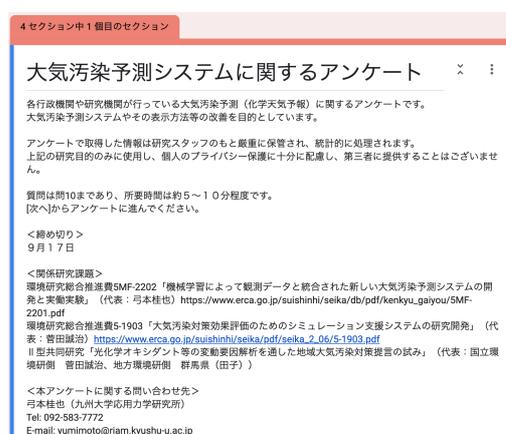


図0-5（図1-1） 大気汚染予測システムに関するアンケートの要旨

この調査から以下のような結果を得た。

- 特定の都市や地域ではなく、大気汚染の輸送の様子を俯瞰できる濃度分布の地図分布が求められている。
- 予測精度の評価や信頼度の表示に需要がある。

この調査の結果から、ガイダンスの開発方針を以下のようにした。

- 日本全国を144の地域に分割し、それぞれの地域でガイダンスを構築することで、ガイダンスによる予測の地図表示できるように拡張する。観測地点がなくガイダンスの構築できない地域や海上は、画像補完手法を開発することでガイダンスの結果を展開する。
- ガイダンスによる濃度補正を応用し、予測に対する信頼度を算出する技術を開発する。

2. ガイダンスの開発と改良（サブテーマ1）

特に、黄砂といったPM2.5の濃度が非常に高くなるイベントにおいては、ガイダンスの補正効果が限定的となり、そのパフォーマンスが低下することが指摘されていた。主な原因として、高濃度となるイベントの観測データ自体が限られているため、教師データが不十分となることが考えられる。これを克服するために、新しく得られた観測データを逐次的に学習し、ガイダンスの更新を毎日行う「逐次型ガイダンス」の開発を行った。その結果、比較的高いPM2.5濃度において、ガイダンスの補正効果の向上が見られた。

さらに、先行課題である推進費5RF-2002で開発した回帰型ガイダンスと分類型ガイダンスの2つを直列的に接続した「連続型ガイダンス」の開発を行った（図0-6）。この「連続型ガイダンス」によって、予測濃度区分の的中率（＝濃度区分が一致した時刻／総予測時刻）はPM2.5濃度では10.8-21.1ポイント、オゾン濃度では7.3-33.6ポイント改善した。図0-7に福岡におけるPM2.5濃度の予測結

果をカレンダー表記で示す。ガイダンスなし予測（二段目）は、観測値（一段目）と比べ、5-6日や26-27日に過小評価（見逃し）、12日や19日に過大評価（空振り）が見られたが、「連続型ガイダンス」によってより正確な予測に修正されている。特に、19日はPM2.5濃度をかなり過大に予測していたが、ガイダンスによって観測と同じ濃度区分に修正されている。

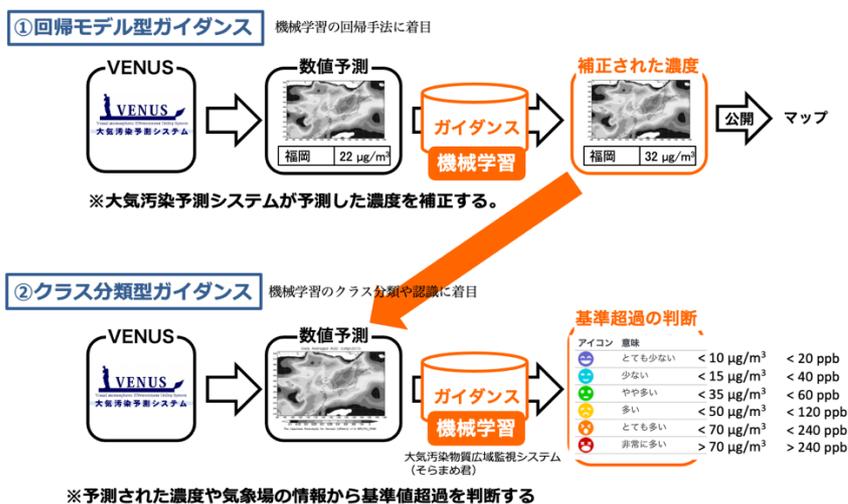


図0-6 (図1-7) 連続型ガイダンスの概念図。まず、回帰型ガイダンスで予測濃度の補正を行う。次に、補正された予測濃度や気象場の情報を分類型ガイダンスに入力することで、VENUSが採用している濃度区分のうち、どの区分の濃度が出現するかを予測する。

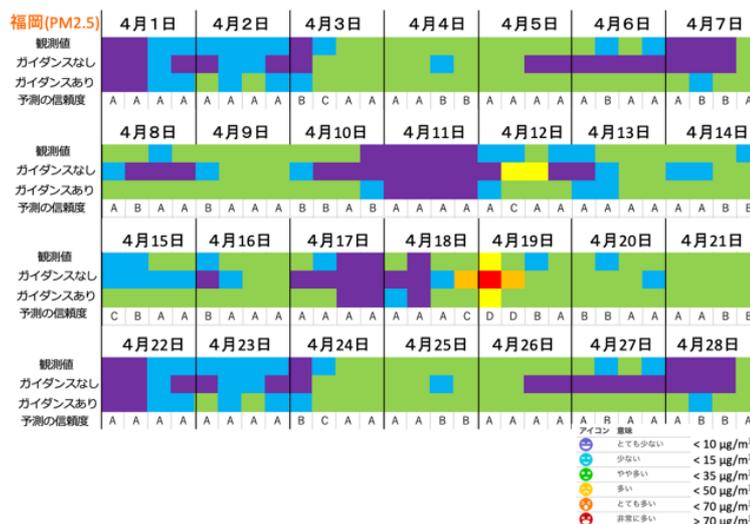


図0-7 福岡におけるPM2.5濃度区分予測。色がそれぞれの濃度区分を示し、暖色の濃度が高い。上から観測、ガイダンスなし予測、連続型ガイダンスを作用させた結果である。4行目は予測の信頼度であり、Aが最も信頼度が高く、Dがもっとも低い。

ガイダンスによる修正量を統計的に処理することで、予測に対する信頼度の算出を行った（図0-7）。Aが最も信頼度が高く、Dが最も低い。信頼度と的中率の関係を調べると、PM2.5濃度予測については、明確な相関関係が見られ、算出された信頼度が予測精度を適切に表せると判断された。一方、オゾン濃度予測については、バイアスの影響が大きく、信頼度の算出に課題を残した。

「1. 大気汚染予測システムに関するアンケート」の実施で決定したガイダンスの開発方針を踏まえ、ガイダンスの効果を濃度の地図分布に拡張するために、日本全国を144の地域に分割、それぞれのグリッドでPM2.5およびオゾン濃度に対するガイダンス（合計288）を作成し、パフォーマンスの評価を行った。パフォーマンスの評価には次の統計量を用いた。予測値と観測値の一致性を測るも

のとして、相関係数または重相関係数（決定係数）、一致指数（Index Of Agreement; IOA）。両者の間の差（誤差）を測るものとして、平均二乗誤差（Root Mean Square Difference; RMSD）、規格化平均誤差（Normalized Mean Error; NME）および平均分割誤差（Mean Fractional Error; MFE）。両者の偏差（バイアス）を測るものとして、規格化平均偏差（Normalized Mean Bias; NMB）および平均分割偏差（Mean Fractional Bias; MFB）。また、Boylan and Russell (2006)およびEmery et al. (2017)が提唱したPM2.5またはオゾン濃度の数値予測に対する予測再現性の許容範囲と目標範囲も用いて評価を行った。

オゾン濃度予測については、ガイダンスなし予測に見られた過大バイアスが大幅に改善された。相関係数（R）および平均二乗誤差（RMSD）はすべてのグリッドで改善され、相関係数（R）は全体の94.4%にあたる136グリッドで目標とした0.8を超えた（ガイダンス作用前は2グリッドのみ）。平均二乗誤差（RMSD）は全グリッドで目標とした30%以上の減少（平均で60.0%の減少）が見られた。全グリッド全体（総データ数1,239,400）では、相関係数（R）は0.66から0.87に、平均二乗誤差（RMSD）は20.66 ppbから8.08 ppbに大幅に改善された。Emery et al. (2017) の予測再現性の許容範囲（ $NME \leq 15\%$ かつ $NMB \leq \pm 5\%$ ）と目標範囲（ $NME \leq 25\%$ かつ $NMB \leq \pm 15\%$ ）による検証（図0-8）では、ガイダンス適用前は、すべてのグリッドで目標範囲、許容範囲を達成することができなかったが、ガイダンスによる修正後は138グリッド（全体の95.8%）で許容範囲を、4グリッド（全体の2.8%）で目標範囲を達成することができた。

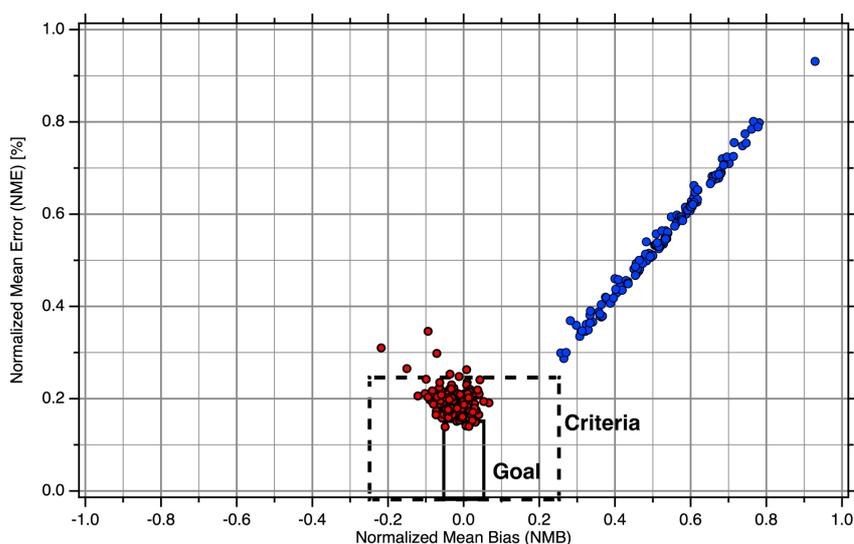


図0-8（図1-12） Emery et al. (2017)の指標を用いたオゾン濃度の予測再現性の検証。青丸はガイダンスなし、赤丸はガイダンスありの予測結果。縦軸はNMEを横軸はNMBを表す。図の中心かつ下軸に近ければ予測再現性が高く、各破線の枠の内側に位置すれば、それぞれ目標範囲、許容範囲達成である。

PM2.5濃度予測については、相関係数（R）および平均二乗誤差（RMSD）はすべてのグリッドで改善され、相関係数（R）は全体の46.5%にあたる67グリッドで目標とした0.8を超えた（ガイダンス作用前は1グリッドのみ）。平均二乗誤差（RMSD）は137グリッド（全グリッドの95.1%）で目標とした30%以上の減少を達成した。相関係数（R）および平均二乗誤差（RMSD）ともにガイダンスによって、すべてのグリッドで値が改善された。全グリッド全体（総データ数1,239,400）では、相関係数（R）は0.54から0.67に、平均二乗誤差（RMSD）は $8.96 \mu\text{g}/\text{m}^3$ から $6.51 \mu\text{g}/\text{m}^3$ に大幅に改善された。図0-9にBoylan and Russell (2006)の予測再現性の許容範囲（ $MFE \leq 70\%$ かつ $MEB \leq \pm 60\%$ ）と目標範囲（ $MFE \leq 50\%$ かつ $MEB \leq \pm 30\%$ ）による検証を示す。ガイダンス適用前は、66のグリッド45.8%（45.8%）で許容範囲を達成したが、目標範囲を達成できたグリッドはなかった。ガイダンスによる修正後は138グリッド（全体の95.8%）で許容範囲を、79グリッド（全体の54.9%）で目標範囲を達成すること

ができた。

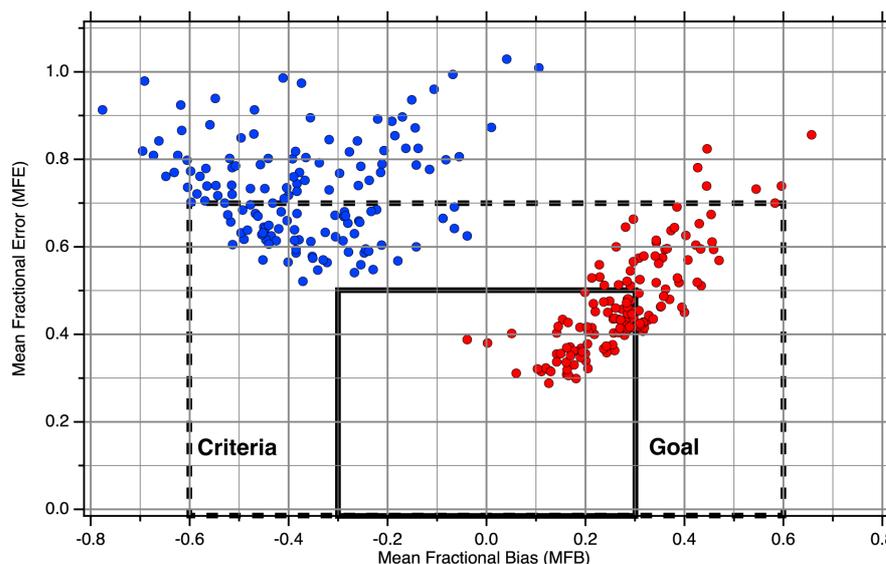


図0-9 (図1-15) Boylan and Russell (2006)の指標を用いたPM2.5濃度の予測再現性の検証。青丸はガイダンスなし、赤丸はガイダンスありの予測結果。縦軸はMFEを横軸はMFBを表す

本項目で開発したガイダンスをサブテーマ2に提供し、VENUSへの導入と実働実験を行った。

<参考文献>

Boylan, James W., and Armistead G. Russell. "PM and light extinction model performance metrics, goals, and criteria for three-dimensional air quality models." *Atmospheric environment* 40.26 (2006): 4946-4959.

Emery, Christopher, et al. "Recommendations on statistics and benchmarks to assess photochemical model performance." *Journal of the Air & Waste Management Association* 67.5 (2017): 582-598.

3. ガイダンス導入版VENUSの開発

サブテーマ1で開発と改良を行ったガイダンスを用いて、ガイダンス導入版VENUSの開発と実働実験を行った。開発は既存のVENUSを基礎とし、ガイダンスを適用させるプロセスの検討を行い、新たに2つのプロセス（プログラム群）の開発を行った。1つめは、VENUSの予測結果をガイダンスに入力するための前処理を行うためのプロセスである。このプロセスでは、VENUSの予測結果を読み込み、ガイダンス側で設定したグリッド座標に内挿し、ガイダンスの入力データファイルの作成を行う。2つ目は、ガイダンスによって補正された予測結果を、ホームページ（HP）を管理する表示サーバに受け渡す作業を行う。ガイダンスで補正された予測値を読み込み、内挿を含んだ地図座標変換を行う。これにより、ガイダンスによって補正された予測値を地図上に濃度分布として表示できるようになる。

ガイダンス導入版VENUSの現業運用に向けた実働実験を行った。図0-10に運用中のVENUSにおける予測結果表示までのフローチャート（左図）とガイダンス導入版VENUSの実働実験におけるフローチャートを示す。現行のVENUSでは、国立環境研究所のスカラ計算機を用いて、CTMによる大気質計算を実施、予測結果を表示用サーバに送付することで予測結果の公表を行っている。ガイダンス導入版VENUSおよびその実働実験（右図）では、CTMによる大気質計算は現状のVENUSと同様であるが、予測結果にガイダンス処理を行うプロセスが追加されている。データ同化や排出量逆推計と異なり、入力データの差し替えやCTMの再計算が不必要なため、比較的容易に導入でき、計算コストも抑えられることがこのフローチャートからもわかる。ガイダンス処理され補正された予測結果は同じく表示用サーバに送られ、web上で公開される。本課題では、運用中のVENUSのHPを模した開発用のHPを作成（VENUS実働実験用HP）、2024年3月の運用と研究関係間でHPの共有を行い、

実働実験の検証を行った。以下にVENUS実働実験HPのURLとアクセス情報を記す（スカラ計算機のジョブの関係から現在は更新していないことを留意）。図0-11にVENUS実働実験用HPの表示例を示す。

<https://venus.nies.go.jp/devel>

ID: venus

PASSWORD: 7j0Xe1cY27

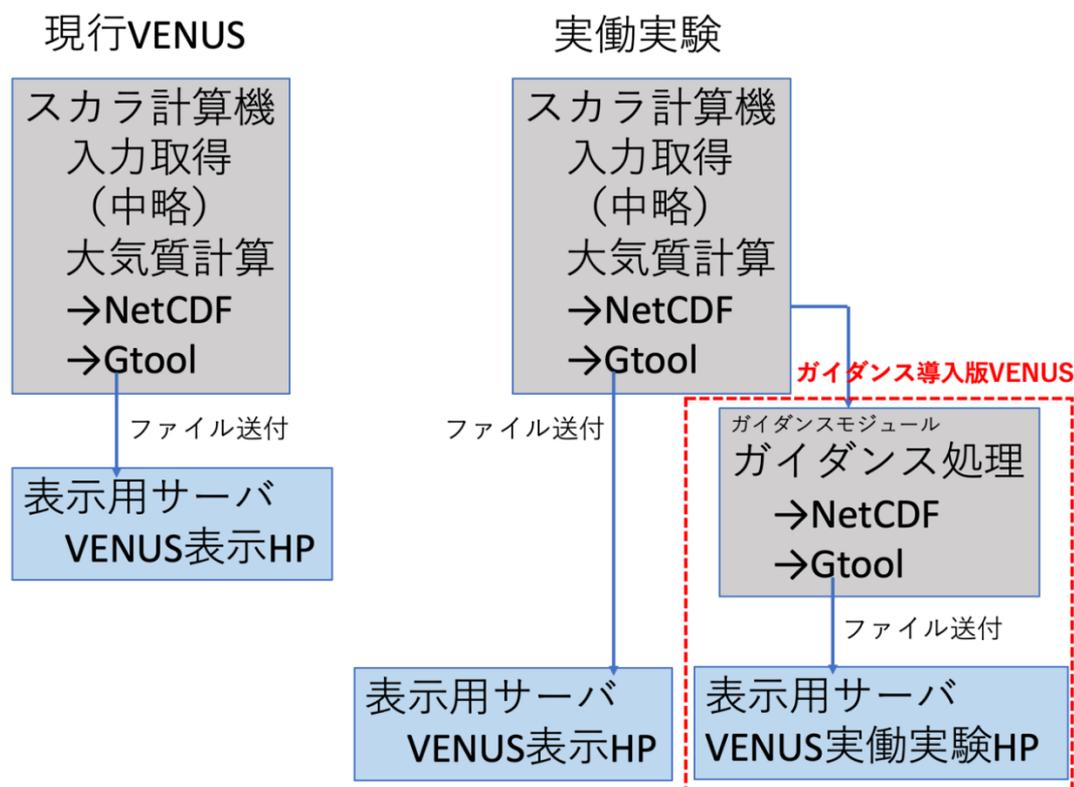


図0-10 現在運用中のVENUS（左）とガイダンス導入版VENUSの実働実験用計算（右）の概略を示すフローチャート。赤太破線で囲われた部分が運用版VENUSに本課題で加えた処理部分。

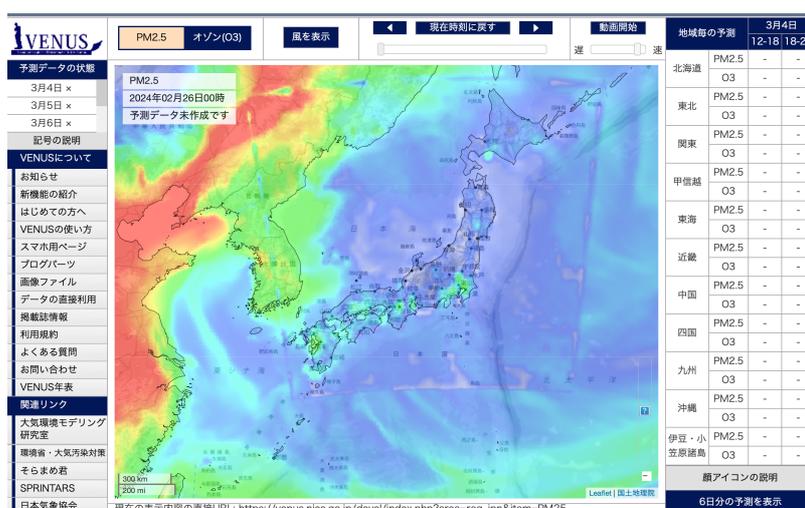


図0-11 VENUS実働実験HPの表示例。

実働実験の結果、ガイダンスのパフォーマンスについて次のような改良点を得た。PM2.5の濃度予測においては、ガイダンスを作用させ補正させた予測値が、観測値と比べて過大になる傾向があることがわかった。これは、ガイダンスの作成に過去の観測データを用いるため、最近のPM2.5

濃度の減少傾向が反映されていないことが原因であると考えられる。また、ガイドンス導入版 VENUSを開発している間にVENUS自体の改良とバージョンアップが行われ、ガイドンスが現状のVENUSに対応していない点を指摘された。実際の現業運用を行う前に、近年の観測データを含めたガイドンスの再学習を行う必要性がある。

5-2. 研究目標の達成状況

<全体の達成状況> 2. 目標を上回る成果をあげた

「機械学習によって観測データと統合された新しい大気汚染予測システムの開発と実働実験」

全体目標	全体の達成状況
<p>1. 国立環境研究所が開発・運用する大気汚染予測システム（以下「VENUS」）を対象としたガイドンスの開発を行い、PM2.5 および光化学オキシダント（オゾン）の予測精度の向上を行う。</p> <p>2. ガイドンスの作成には、機械学習（多層ニューラルネットワーク）の技術を応用する。環境省が運用する大気汚染物質広域監視システム（以下「AEROS」）で得られた膨大な観測データを教師データに、蓄積されたVENUSの予測値を入力データに、ガイドンスを構築する。</p> <p>3. 構築したガイドンスをVENUSに導入した新しい大気汚染予測システムを開発する。開発したシステムを用い、現業運用を想定した実働実験を行う。実働実験の結果から予測精度の評価・検証を行い、ガイドンスの改良を行う。</p> <p>4. PM2.5 濃度予測に対しては、相関係数 0.7 以上、二乗平均平方根誤差の 30%減少を目標とする。</p> <p>5. オゾン濃度予測に対しては、平均バイアス 30%減少、相関係数 0.8 以上、二乗平均平方根誤差の 30%減少を目標とする。</p> <p>6. 実働実験の結果を詳細に検討し、ガイドンス導入版 VENUS の現業運用を検討する。必要に</p>	<p>1. VENUS と同じ化学輸送モデル（CTM）、同じ計算設定で得られた計算データを入力データにして、機械学習の技術を応用してガイドンスを開発、PM2.5 およびオゾン濃度の予測精度向上に成功した。</p> <p>2. ガイドンスの構築には多層ニューラルネットワークを用いた。AEROS で得られた 2013-2016 年のデータを教師データに、前述のVENUS を模した CTM の予測結果を入力データとしてガイドンスの構築を行った。</p> <p>3. 構築したガイドンスを VENUS に導入し、VENUS の予測結果にガイドンスが作用するようにシステムの改良を行った。現業運用を想定した実働実験および web 表示実験を行った。実働実験の結果からガイドンスの課題の洗い出しを行った。</p> <p>4. 全国 144 グリッド全てで相関係数が改善し、67 グリッド(46.5%)で 0.7 を超えた（ガイドンス適用前は 1 グリッド）。平均二乗誤差はすべてのグリッドで改善、137 グリッド(全体の 95.1%)で 30%以上の改善（平均で 27.8%）が見られた。</p> <p>5. 全国 144 グリッド全てで、相関係数が改善した、136 グリッド(94.4%)で相関係数が 0.8 を超えた（ガイドンス適用前は 2 グリッド）。平均二乗誤差はすべてのグリッドで改善、144 グリッド(全体の 100%)で 30%以上の改善（平均で 60.0%）が見られた。平均バイアスはすべてのグリッドで改善し、平均で 93.2%削減した。</p> <p>6. 実働実験や web 表示実験を通じ、現業化の検討を行い、ガイドンスの改良ポイントの洗い</p>

応じて現業運用に向けた準備を行う。	出しを行った。ガイダンス導入版 VENUS は現業運用直前の段階まで準備を行った。
-------------------	---

< 【サブテーマ1】 達成状況 > 2. 目標を上回る成果をあげた

「機械学習による大気汚染予測版ガイダンスシステムの開発と改良」

サブテーマ1 目標	サブテーマ1 の達成状況
<ol style="list-style-type: none"> サブテーマ2から提供された AEROS の観測データおよび VENUS の予測値をそれぞれ教師データ、入力データとすることで、VENUS に対応したガイダンスの作成を、機械学習（多層ニューラルネットワーク）を用いて行う。 構築したガイダンスサブテーマ2に提供する。VENUS への導入の補助を行う。 サブテーマ2が行った実働実験の結果から予測精度の評価・検証を行い、ガイダンスの改良を行う。 サブテーマ2と共同で、実働実験の結果の詳細な検証を行い、ガイダンス導入版 VENUS の現業運用についての検討を行う。ガイダンス導入版 VENUS の現業運用に向けた開発の補助を行う。 	<ol style="list-style-type: none"> ガイダンスの構築には多層ニューラルネットワークを用いた。AEROS で得られた 2013-2016 年のデータを教師データに、VENUS を模した CTM の予測結果を入力データとしてガイダンスの構築を行った。 構築した PM2.5 およびオゾン濃度に関するガイダンスをサブ2に提供した。 実働実験の結果を検討し、ガイダンスの改良ポイントの洗い出しを行った。 実働実験や web 表示実験を通じ、現業化の検討を行い、ガイダンスの改良ポイントの洗い出しを行った。ガイダンス導入版 VENUS は現業運用直前の段階まで準備を行った。

< 【サブテーマ2】 達成状況 > 3. 目標どおりの成果をあげた

「ガイダンスを導入した大気汚染予測システムの開発と実働実験」

サブテーマ2 目標	サブテーマ2 の達成状況
<ol style="list-style-type: none"> 機械学習の教師データおよび入力データとなる AEROS の観測データおよび VENUS の予測値をサブテーマ1に提供する。 サブテーマ1が開発したガイダンスを導入したガイダンス導入版 VENUS の開発を行う。 ガイダンス導入版 VENUS を用い、現業運用を想定した実働実験を行い、予測結果をサブテーマ1に提供する。 実働実験の結果をサブテーマ1と共同で詳細に検証し、ガイダンス導入版 VENUS の現業運用についての検討を行うとともに、必要に応じて現業運用に向けた準備を行う。 	<ol style="list-style-type: none"> AEROS の観測データを収集しサブテーマ1に提供した。VENUS の予測値はサブテーマ1が VENUS と同一設定で再計算した。 サブテーマ1が開発したガイダンスを導入したガイダンス導入版 VENUS を開発した。 ガイダンス導入版 VENUS を用いた現業運用同様にホームページ掲載までを行う実働実験を行い、実験用予測結果ホームページをサブテーマ1および関係者に提供した。 実働実験の結果をサブテーマ1と共有し、ガイダンスの改良点などの洗い出しは行ったが、詳細な精度検証までは至らなかった。ただし、ガイダンス導入版 VENUS の現業運用は可能であると判断され、現業運用直前の

	段階まで準備を行った。
--	-------------

5-3. 研究成果の学術的意義と環境政策等への貢献

<得られた研究成果の学術的意義>

- CTMを用いた大気汚染予測は数値天気予報と比べて歴史が浅く、ガイダンスの研究・導入は行われていない。予測精度向上の試みとしては、逆推計による排出量データの修正、データ同化による初期条件の最適化があるが、導入や運用に関するコストが高い。一方、ガイダンスはポストプロセス（事後処理）なので、大気汚染予測システム自体に大きな変更を課すことなく導入を行うことができる。本研究課題はガイダンスの概念を化学天気予報に導入することで、予測精度の向上を目指す初めての取り組みである。
- 環境省では大気汚染物質広域監視システムを構築し、大気汚染の監視とデータの収集と蓄積を行ってきた。一方、国立環境研究所では環境省の支援のもと、CTMをベースにした予測システムを構築、VENUSとして運用してきた。本研究は、機械学習（AI）の技術を応用し、これらを教師データおよび入力データとすることでガイダンスを構築、予測精度の向上を図る。すなわち、観測データとCTMを統合した新しい予測システムの開発を目指すものである。
- VENUSと同様の化学輸送モデルおよび計算設定を採用することで、より現実的でVENUSへの導入を視野に入れた開発を行うことができる。さらに、VENUSへの導入と実働実験を実施、公開用のwebページの構築まで行うことで、将来の導入に見通しをつけることができた。

<行政等に既に貢献した成果>

特に記載すべき事項はない。

<行政等に貢献することが見込まれる成果>

環境省と国立環境研究所では、2014年度以降、CTMを利用した大気汚染予測システム（VENUS）を開発し、運用を行ってきた。本課題では、VENUSをターゲットとしたガイダンスを開発し、予測精度の向上を実現するとともに、実働実験やweb表示実験を行うなど、現業運用に向けた検討と準備を行った。これにより、ガイダンス導入版VENUSを近年度中に運用できる見通しが本課題により立った。VENUSの予測精度が定量的に向上し、より観測データ（すなわち、現実）に近い予測を行うことが出来き、以下の項目への貢献が期待できる。

- 越境大気汚染を含む PM2.5 およびオゾンによる大気汚染現象の解明や監視および早期警戒を通じて、健康被害の軽減など公共の福祉の増加に寄与することができる。
- 地方自治体が行っている PM2.5 に関する注意喚起および光化学オキシダント注意報の発令は、直前までの観測データ（すなわち現況）を基に判断が行われている。大気汚染予報版ガイダンスがもたらす精度の高い予測は、これに新しい判断材料（すなわち将来予測）を提供し、注意喚起および注意報発令の精度向上、発表・発令時刻の迅速化等が期待でき、都道府県等の環境政策に大きく寄与する。

6. 研究成果の発表状況の概要

6-1. 成果の件数

成果の種別	件数
査読付き論文：	0
査読付き論文に準ずる成果発表（人文・社会科学分野）：	0
その他誌上発表（査読なし）：	1
口頭発表（国際学会等・査読付き）：	3
口頭発表（学会等・査読なし）：	4
知的財産権：	0
「国民との科学・技術対話」の実施：	4
マスコミ等への公表・報道等：	0
研究成果による受賞：	0
その他の成果発表：	0

6-2. 主な査読付き論文等の主要な成果

成果番号	主要な成果（10件まで）
	特に記載すべき事項はない。

7. 国際共同研究等の状況

<国際共同研究等の概要>

特に記載すべき事項はない。

<相手機関・国・地域名>

機関名	国・地域名（本部所在地等）

--	--

8. 研究者略歴

<研究代表者略歴>

代表者氏名	略歴（学歴、学位、経歴、現職、研究テーマ等）
弓本 桂也	九州大学大学院総合理工学府博士課程修了 博士（工学） ハーバード大学理工学部客員研究員、気象庁気象研究所主任研究官、九州大学応用力学研究所准教授などを経て 現在、九州大学応用力学研究所教授 専門は環境気象学、研究テーマは大気汚染の数値シミュレーションとデータ同化

<研究分担者（サブテーマリーダー）略歴>

分担者氏名	略歴（学歴、学位、現職、研究テーマ等）	参画期間
1) 菅田 誠治	京都大学大学院理学研究科単位取得退学 博士（理学） 国立環境研究所研究員、室長等を経て 現在、国立環境研究所主席研究員 中央環境審議会専門委員 専門は気象力学、研究テーマは大気汚染の数値予測	

II. 成果の詳細

II-1 サブテーマ1 「機械学習による大気汚染予測版ガイダンスシステムの開発と改良」

[サブテーマ1 要旨]

本課題全体の研究目標である「ガイダンス導入版VENUSの開発と実働実験の実施」を実現するため、サブテーマ1では先行課題である推進費5RF-2002で開発されたガイダンスの改良とVENUS実装に向けた拡張を行い、サブテーマ2が実施したVENUSへのガイダンス導入と実働実験実施の補助を行った。

ガイダンス導入版VENUSのアウトプットの形をより詳細に検証するため、VENUSを普段から活用している大気環境研究者や地上自治体の関係者を中心に「大気汚染予測システムに関するアンケート」を実施し、ユーザーの現場認識と要望を調査した。この調査から濃度分布の地図表示や予測精度の評価や信頼度の表示に需要があることがわかり、ガイダンス導入版VENUSの開発方針を決定した。

先行課題である推進費5RF-2002では、黄砂のような高いPM2.5濃度イベントの際に、ガイダンスのパフォーマンスが低下し、予測の過小評価の修正が限定的になる課題が指摘されていた。これは、PM2.5が高濃度となる事例が少なく、高いPM2.5濃度に関する学習データが少ないことが原因であるが、この課題を克服するために、新しく得られた観測データを逐次的に学習しガイダンスの更新を行う「逐次型ガイダンス」、回帰型ガイダンスと分類型ガイダンスを直列的に接続した「連続型ガイダンス」の開発を行った。特に連続型ガイダンスでは、VENUSが現在行っている濃度区分別の予測において、その的中率がPM2.5濃度では10.8–21.1ポイント、オゾン濃度では7.3–33.6ポイント上昇した。また、ガイダンスの修正量を統計的に処理することで予測の信頼度の導出を行った。特に、PM2.5の濃度予測では、求めた信頼度と的中率の間に明瞭な相関関係が見られ、信頼度が適切に見積もられていることを確認した。

「大気汚染予測システムに関するアンケート」の結果を踏まえ、日本全国を144の地域に分割、それぞれのグリッドでPM2.5およびオゾン濃度に対するガイダンス（合計288）を作成し、パフォーマンスの評価を行った。PM2.5濃度予測においては、ガイダンスを適用することによって、相関係数（R）および平均二乗誤差（RMSD）ともにすべてのグリッドで改善された。相関係数（R）は全体の46.5%にあたる67グリッドで0.7を超え、平均二乗誤差（RMSD）は137グリッド（全グリッドの95.1%）で目標とした30%以上の減少（全体の平均は27.8%の減少）を実現した。また、Boylan and Russell (2006) の予測再現性の許容範囲（MFE ≤ 70%かつMEB ≤ ±60%）と目標範囲（MFE ≤ 50%かつMEB ≤ ±30%）による検証においても、許容範囲を達成したグリッドは66から138に、目標範囲を達成したグリッドは0から79グリッドに増加した。

オゾン濃度予測では、相関係数（R）および平均二乗誤差（RMSD）ともにガイダンスによって、すべてのグリッドで値が改善された。相関係数（R）は全体の94.4%にあたる136グリッドで0.8を超え、平均二乗誤差（RMSD）は全グリッドで目標とした30%以上減少した。Emery et al. (2017) の予測再現性の許容範囲（NME ≤ 15%かつNMB ≤ ±5%）と目標範囲（NME ≤ 25%かつNMB ≤ ±15%）による検証では、ガイダンスなし予測ではすべてのグリッドで目標範囲、許容範囲を達成することができなかったが、ガイダンスによる修正後は138グリッド（全体の95.8%）で許容範囲を、4グリッド（全体の2.8%）で目標範囲を達成することができた。

構築したガイダンスをサブテーマ2に提供、ガイダンス導入版VENUSの開発や実働実験の補助を行った。

<参考文献>

Boylan, James W., and Armistead G. Russell. "PM and light extinction model performance metrics, goals, and criteria for three-dimensional air quality models." *Atmospheric environment* 40.26 (2006): 4946-4959.

Emery, Christopher, et al. "Recommendations on statistics and benchmarks to assess photochemical model performance." *Journal of the Air & Waste Management Association* 67.5 (2017): 582-598.

1. サブテーマ1 研究開発目的

本課題全体の研究目標である「ガイダンス導入版VENUSの開発と実働実験の実施」を実現するため、サブテーマ1では、推進費5RF-2002で開発されたガイダンスの改良とVENUS実装に向けた拡張を研究開

発目的とする。また、サブテーマ2が実施したVENUSへのガイダンス導入と実働実験実施の補助を行う。

2. サブテーマ1 研究目標

サブテーマ1	「機械学習による大気汚染予測版ガイダンスシステムの開発と改良」
サブテーマ1 実施機関	九州大学、電力中央研究所
サブテーマ1 目標	<ul style="list-style-type: none"> ● サブテーマ2から提供されたAEROSの観測データおよびVENUSの予測値をそれぞれ教師データ、入力データとすることで、VENUSに対応したガイダンスの作成を、機械学習（多層ニューラルネットワーク）を用いて行う。 ● 構築したガイダンスサブテーマ2に提供する。VENUSへの導入の補助を行う。 ● サブテーマ2が行った実働実験の結果から予測精度の評価・検証を行い、ガイダンスの改良を行う。 ● サブテーマ2と共同で、実働実験の結果の詳細な検証を行い、ガイダンス導入版VENUSの現業運用についての検討を行う。ガイダンス導入版VENUSの現業運用に向けた開発の補助を行う。

3. サブテーマ1 研究開発内容

本研究課題は、推進費5RF-2002で開発を進めてきたガイダンスのVENUSへの導入、および現業運用についての検討を行うことを目標とする。そのため、研究開発内容として、「1. 大気汚染予測システムに関するアンケートの実施（サブテーマ2と協働、本項目で記述）」、「2. ガイダンスの開発と改良」、「3. ガイダンス導入版VENUSの開発（サブテーマ2と協働、サブテーマ2の項目で記述）」を実施した。ここでは、サブテーマ1が主導的に研究を行った「1. 大気汚染予測システムに関するアンケートの実施」および「2. ガイダンスの開発と改良」について記載する。

1. 「大気汚染予測システムに関するアンケートの実施」

研究初年度のキックオフ会合でアドバイザーより「現在のVENUSのwebページの表示にガイダンスがどのように関わってくるのか?」、「最終的なプロダクトの像が見えてこない」、「見せ方がわからない。空間分布を見せたいのか? 地点毎に見せたいのか?」といったガイダンス導入版VENUSのアウトプットにおける検討の少なさが指摘された。将来的な現業運用を想定するうえで、どのような大気汚染予測システムを開発するのか? どのように予測結果を示すのか? を検討することは非常に重要である。この検討をよりスムーズに行うために、VENUSを普段から活用している大気環境研究者や地上自治体の関係者を中心に「大気汚染予測システムに関するアンケート」を実施し、ユーザーの現場認識と要望を調査した。

2. 「ガイダンスの開発と改良」

先行課題推進費5RF-2002で得られた課題の克服や、「大気汚染予測システムに関するアンケート」で得られた結果を踏まえ、以下の項目について研究開発を行った。

推進費5RF-2002では特にPM2.5の高濃度イベントでガイダンスのパフォーマンスが低下する課題（すなわち、CTMの大幅な過小評価に対して、ガイダンスの修正量が不十分）が指摘されていた。この課題を克服するために、得られたデータをその都度学習させ、ガイダンスを更新していく「2.1 逐次型ガイダンスの導入」を行った。さらに、推進費5RF-2002で提案された予測値を直接補正する「回帰モデル型ガイダンス」、注意喚起基準の超過の判断を行う「クラス分類型ガイダンス」を直列的に繋げて、予測濃度の補正を行う連続型ガイダンスを構築するとともに、ガイダンスによる修正量から予測信頼度を算出するシステムを開発した（「2.2 連続型ガイダンスの開発と予測信頼度の算出」）。

先行課題である推進費5RF-2002では主要都市を対象にガイダンスの構築を行い、予測の修正を行っていた。「大気汚染予測システムに関するアンケート」の結果を踏まえ、日本全国を144の地域に分割、それぞれのグリッドでPM2.5およびオゾン濃度に対するガイダンス（合計288）を開発し、機械学習を応用した画像補完手法を開発することで、ガイダンスで補正された濃度分布の表

示を可能とさせた（「2.3 ガイダンスの全国展開とパフォーマンス評価」）。

ガイダンスの検証とパフォーマンス評価には次の統計量を用いている。予測値と観測値の一致性を測るものとして、相関係数（R）、一致指数（Index Of Agreement; IOA）。両者の間の差（誤差）を測るものとして、平均二乗誤差（Root Mean Square Difference; RMSD）、規格化平均誤差（Normalized Mean Error; NME）および平均分割誤差（Mean Fractional Error; MFE）。両者の偏差（バイアス）を測るものとして、規格化平均偏差（Normalized Mean Bias; NMB）および平均分割偏差（Mean Fractional Bias; MFB）。また、Boylan and Russell (2006) が提唱したPM2.5濃度の数値予測に対する予測再現性の許容範囲（MFE ≤ 70%かつMEB ≤ ±60%）と目標範囲（MFE ≤ 50%かつMEB ≤ ±30%）、および、Emery et al. (2017) が提唱したオゾン濃度の数値予測に対する予測再現性の許容範囲（NME ≤ 25%かつNMB ≤ ±15%）と目標範囲（NME ≤ 15%かつNMB ≤ ±5%）も用いて評価を行った。

4. サブテーマ1 結果及び考察

1. 「大気汚染予測システムに関するアンケートの実施」

Ⅱ型共同研究「光化学オキシダント等の変動要因解析を通じた地域大気汚染対策提言の試み」を中心にインターネット上でアンケートを実施（図1-1）、大気環境研究者や地方自治体の環境研究所の担当者を中心に合計22件の回答を得た。

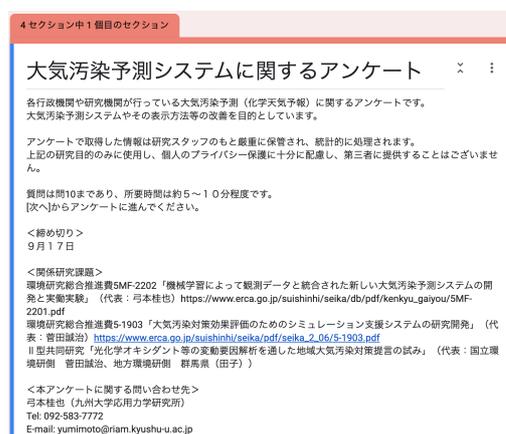


図1-1（図0-3） 大気汚染予測システムに関するアンケートの要旨

「大気汚染予測システムの予測結果をお仕事等の参考にされていますか？」の問にはほぼすべての方が行政や仕事の参考にされているとの回答を得た（図1-2）。「どの大気汚染予測システムを参考にされていますか？」の問には、国立環境研究所大気汚染予測システム（VENUS）とした回答が最も多く、九州大学のSPRINTARS、気象庁黄砂予測が続いた。

問1 大気汚染予測システムの予測結果をお仕事等の参考にされていますか（複数回答可）？
22件の回答



図1-2 「大気汚染予測システムの予測結果をお仕事等の参考にされていますか？」の問に関する回答。

「大気汚染予測システムのどのような情報を参考にされますか？」の問には、濃度マップ情報との回答が最も多く、アイコン（顔マーク等）による濃度区分表示を選んだ回答は少なかった（図1-3）。今回のアンケートは大気環境に仕事や研究を通じて携わっている方を対象としたため、より一般の方を対象とした場合、回答の割合が変化する可能性がある。

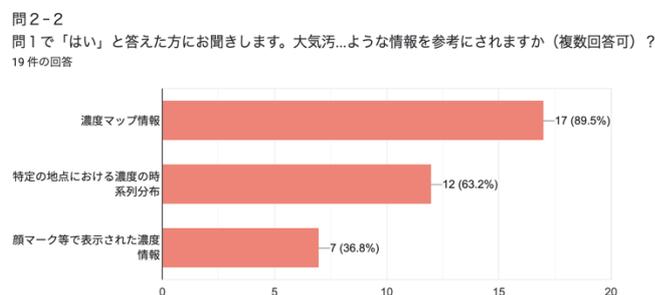


図1-3 「大気汚染予測システムのどのような情報を参考にされますか？」の問に関する回答。

「大気汚染予測システムへの要望に関する問い」では、「予測精度の向上」や「予測精度の検証とその結果の公開（誤差の推定）」に要望が集まった（図1-4）。「予測システムの説明の充実」にも回答が集まった一方、「水平解像度の向上」はあまり必要とされていないことがわかった。

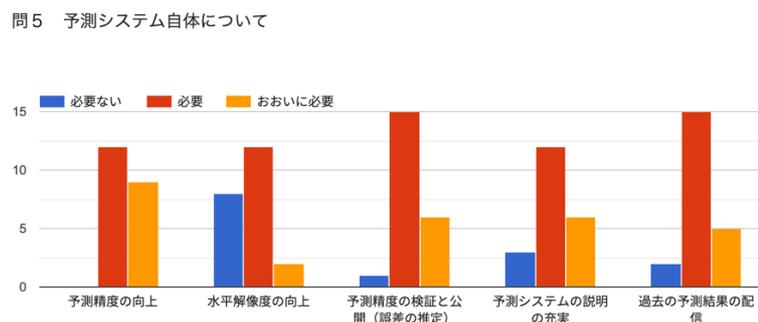


図1-4 「大気汚染予測システムへの要望に関する問い」に関する回答。

「大気汚染予測システムの表示に関する要望」では、「濃度数値データの表示、配信」や「気象楊降雨予測のような信頼度の表示」を求める回答が多かった（図1-5）。

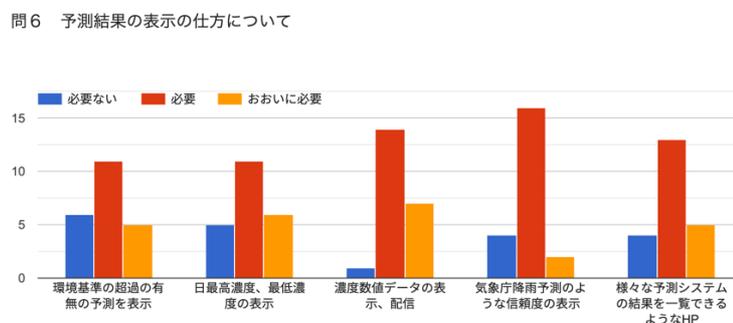


図1-5 「大気汚染予測システムの表示に関する要望」に関する回答。

自由回答欄では「地図表示の重要性」や「注意報発令や解除のタイミングの予測」、「予測値の

表示」に関する要望が見られた。また、本研究課題とは直接関係ないが予測システムの利用データや設定に関するより詳細な説明や現状の精度に関する情報を欲する意見も得られた。

このアンケート結果を精査した結果、ガイダンス導入版VENUSの開発の開発方針として以下の方向性を決定した。

- ・ 特定の都市や地点の濃度予測よりも、大気汚染の全体像を俯瞰できる濃度分布が参照できるシステムが求められている。
 - ▶ 先行課題である推進費5RF-2002では主要都市を対象にガイダンスの構築を行い、予測の修正を行っていた。本課題では、日本全国を144の地域に分割、それぞれのグリッドでPM2.5およびオゾン濃度に対するガイダンス（合計288）を開発し、機械学習を応用した画像補完手法を開発することで、ガイダンスで補正された濃度分布の表示を可能とさせる。
- ・ 予測精度の評価や予測の信頼性の表示に需要がある。
 - ▶ ガイダンスによる濃度補正を応用し、予測に対する信頼度を算出する技術を開発する。

2. ガイダンスの開発と改良

2.1 逐次型ガイダンスの導入

先行課題である推進費5RF-2002では、黄砂のような高いPM2.5濃度イベントの際に、ガイダンスのパフォーマンスが低下し、予測の過小評価の修正が限定的になる課題が指摘されていた。これは、そもそもPM2.5が高濃度となる事例が少なく、高いPM2.5濃度に関する学習データが少ないことが原因として考えられる。一方で、ガイダンス作成の際の学習データに過去のデータを用いることから、近傍の年の大気汚染の傾向や年々変動の学習が不十分になるという欠点があった。これらの課題を克服するために、間近の観測データを学習して、逐次ガイダンスを更新する逐次型ガイダンスの開発を行った。図1.6に逐次型ガイダンスの概念図を示す。これまでのガイダンスでは、例えば、2013–2014年（過去）のデータを学習させて構築したガイダンスを、2015年以降（現在）の予測に作用させ予測の修正を行ってきた。この手法では、学習データは2013–2014年で固定であり、随時蓄えられていく近傍の観測データをガイダンスに取り込むことは出来なかった。逐次法では、例えば、2015年1月1日に行う予測の補正は2013–2014年のデータで学習したガイダンスで行うが、翌1月2日に対しては、新しく得られた1月1日の観測データを含めた新しいデータセットで再学習することでガイダンスを更新し、その新しいガイダンスを用いて予測を補正する。この新しく得られた観測データの収集と再学習によるガイダンスの更新を行うことで、学習データの数を最大限にし、近傍の傾向もガイダンスに含めることができる。

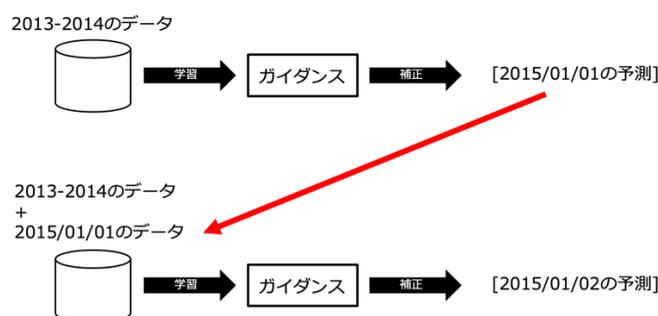


図1-5 逐次型ガイダンスの概念図。2013-2014年のデータを教師データとして構築したガイダンスを2015年の予測に用いるケースを想定した例。

図1-6に福岡のPM2.5濃度予測を対象とした逐次ガイダンスの結果を示す。逐次学習なしのガイダンス（図1-6の左図）では、予測の補正に限界があり、約55 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ 以上の濃度が再現されていない。逐次学習によって構築したガイダンス（図1-6の右図）では、補正限界の濃度が約60 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ まで改善されていることがわかる。相関係数（R）や平均二乗誤差（RMSD）など各統計量にもパフォーマンスの向上が見られたが、特に期待したバイアス（MFBやNMB）の大きな改善には

結びつかず、逐次学習を通じてPM2.5濃度が120 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ に達した黄砂イベントの補正も極めて限定的であった。この原因としては逐次学習によってデータ数を増加させることができたが、高濃度PM2.5事例の学習データが依然として限定的であることが考えられる。

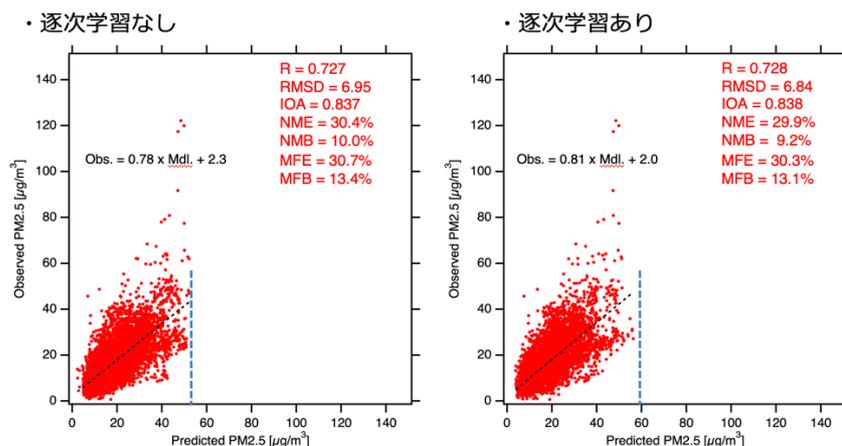


図1-6 逐次学習なしのガイダンス（左図）とありのガイダンス（右図）の比較（福岡におけるPM2.5濃度予測）。縦軸は観測されたPM2.5濃度、横軸はガイダンスで補正された予測濃度である。図中の数字は各統計量を示す。

2.2 連続型ガイダンスの開発と予測信頼度の算出

先行課題である推進費5RF-2002では、

- ・ 大気汚染予測システムによるPM2.5やオゾン濃度の予測値を直接補正する「回帰型ガイダンス」
- ・ PM2.5やオゾン濃度の予測値から注意喚起基準の超過の判断や濃度区分を予測する「分類型ガイダンス」

の構築を行った。さらなるガイダンスのパフォーマンス向上を目指し、この2種類のガイダンスを直列につなげる「連続型ガイダンス」の開発を行った（図1-7）。すなわち、まず、「回帰型ガイダンス」で予測濃度の補正を行ったあと、補正された予測濃度に、さらに「分類型ガイダンス」を作用させ、より精度良く濃度区分の予測を行うことを目的としている。この「連続型ガイダンス」では、最終的なアウトプットが「分類型ガイダンス」の結果となるため、VENUSが採用している6つの濃度区分（図1-7の右下参照）のうち、どの区分の濃度が出現するかを予測する。

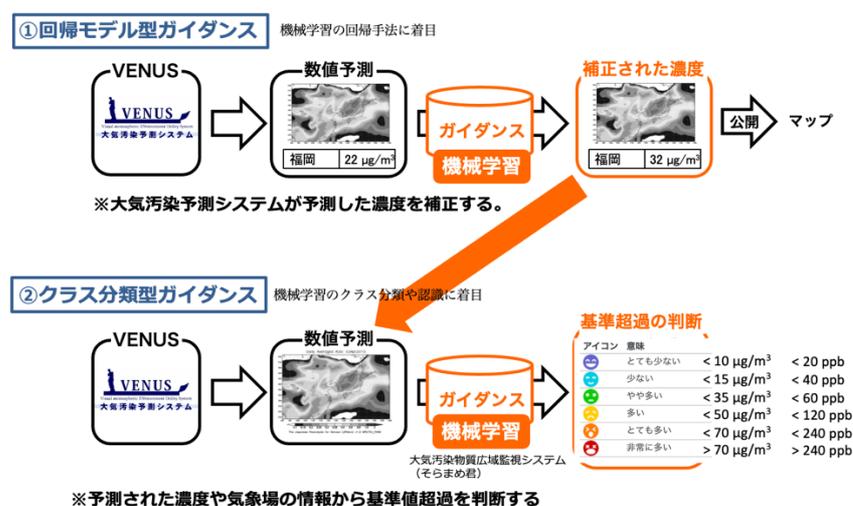


図1-7 連続型ガイダンスの概念図。まず、回帰型ガイダンスで予測濃度の補正を行う。次に、補正された予測濃度や気象場の情報を分類型ガイダンスに入力することで、VENUSが採用している濃度区分のうち、どの区分の濃度が出現するかを予測する。

図1-8に福岡における連続型ガイダンスの結果をオゾン濃度、PM2.5濃度それぞれ示す。図はカレンダーのようになっていて、6時間ごと（1日に4つの時間区分）に予測された濃度区分が色で示されている。予測間隔および濃度区分はVENUSに準拠している。上段より観測値、ガイダンスなしの予測、連続型ガイダンスの結果である。まず、オゾン（図1-8左）を見てみるとガイダンスなしの予測はオゾン濃度を過大評価しており、観測と比べても高い濃度区分を予測していることがわかる。ガイダンスありの予測はこの過大評価を修正しており、より同じ濃度区分の予測を実現できていることがわかる。PM2.5濃度の予測（図1-8右）では、ガイダンスなしの予測は過小評価（例えば、5-6日や26-27日）や過大評価（例えば、12日や19日）が混在していたが、連続型ガイダンスによって修正されている。特に、19日は大幅に過大な予測をしていたが、ガイダンスを作用することで、観測と同じ濃度区分に修正されている。

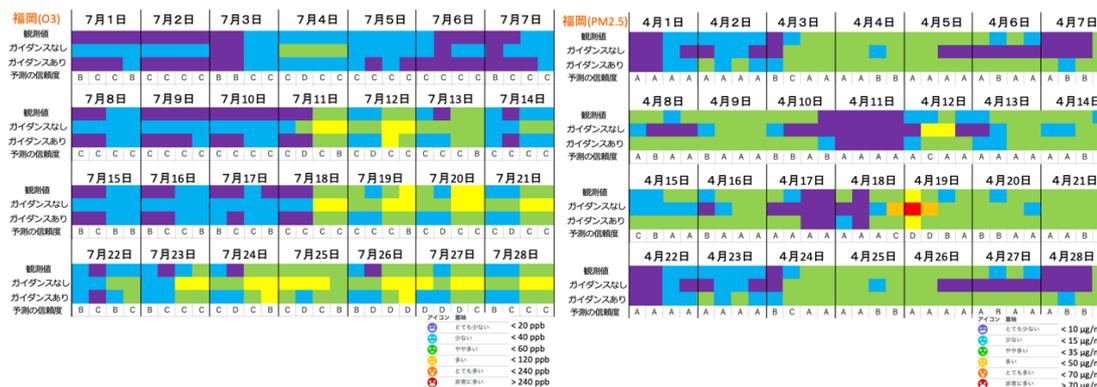


図1-8 福岡における濃度区分予測（左がオゾン、右がPM2.5）。色がそれぞれの濃度区分を示し、暖色の濃度が高い。上から観測、ガイダンスなし予測、連続型ガイダンスを作用させた結果である。4行目は予測の信頼度であり、Aが最も信頼度が高く、Dがもっとも低い。

表1-1に的中率（＝濃度区分が一致した時刻／総予測時刻）を示す。連続型ガイダンスでの的中率が大幅に改善していることがわかる。仙台のPM2.5や福岡のオゾンのように的中率が低い都市や汚染物質に対しても、連続型ガイダンスは的中率の上昇を実現している。

表1-1 連続型ガイダンス作用前後の的中率。的中率は濃度区分が一致した時刻／総予測時刻で求めた。

	[PM2.5]		[オゾン]		
	ガイダンスなし	ガイダンスあり	ガイダンスなし	ガイダンスあり	
福岡	47.5	68.6	福岡	38.6	71.1
北九州	50.2	68.9	北九州	50.5	71.0
大阪	55.3	66.6	大阪	46.6	74.1
名古屋	51.6	62.4	名古屋	42.2	75.8
東京	47.9	65.1	東京	52.4	74.7
仙台	28.6	50.8	仙台	57.8	65.1

さらに、ガイダンスの修正量から予測の信頼度（A-Dで、Aが最も信頼度が高い）を計算した。図1-8をざっと見てみると、ガイダンスによって濃度区分の変更が行われた予測では、信頼度が低い傾向にある。表1-2に信頼度と的中率の関係をまとめた。まず、PM2.5の予測を見てみると、信頼度Aから順に的中割合が高い。信頼度がB、C、Dと下がるにつれ、的中率は下がっていき、東京では信頼度がDと反映された予測の的中率は0%であった。ガイダンスより算出された信頼度が予測の的中率を適切に表せているといえる。一方、オゾンの予測では、信頼度と的中率に明確な関係を見出すことができなかった。これは、オゾンの予測に含まれている過大バイアスが原因であると考えられる。

表1-2 ガイダンスより求めた予測信頼度と的中率の関係。

[PM2.5]

	福岡			東京			大阪		
	的中	外し	的中割合(%)	的中	外し	的中割合(%)	的中	外し	的中割合(%)
A	763	259	74.7	734	280	72.4	796	289	73.4
B	183	133	57.9	179	167	51.7	134	158	45.9
C	51	62	45.1	37	45	45.1	40	35	53.3
D	4	5	44.4	0	18	0.0	3	5	37.5

[オゾン]

	福岡			東京			大阪		
	的中	外し	的中割合(%)	的中	外し	的中割合(%)	的中	外し	的中割合(%)
A	63	19	76.8	227	85	72.8	232	119	66.1
B	189	70	73.0	290	117	71.3	306	106	74.3
C	528	192	73.3	526	150	77.8	492	139	78.0
D	258	141	64.7	48	17	73.8	52	14	78.8

2.3 ガイダンスの全国展開とパフォーマンス評価

ガイダンスで修正された濃度場のマップ表示を可能とするために、日本全国を144の地域（グリッド）に分割し、それぞれのグリッドに対してガイダンスの作成を行った。ガイダンスの学習（学習フェイズ）には2013-2016年のデータを用い、2017年に対して予測実験（予測フェイズ）を行うことで、そのパフォーマンスの評価を行った（図1-9）。

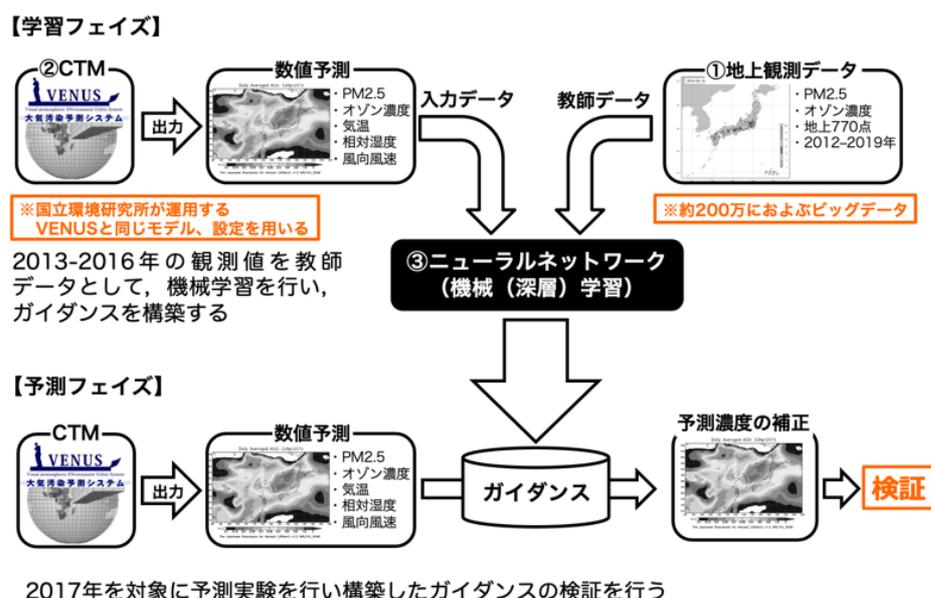


図1-9 ガイダンスの学習と検証の流れ。2013-2016年の4年分のデータでガイダンスの学習を行い、2017年の予測に対して構築したガイダンスを作用してそのパフォーマンスを検証する。全国を144グリッドにわけ、それぞれの地域に対してガイダンスの構築と検証を行った。

まず、オゾン濃度予測の結果について示す。図1-10に相関係数(R)および平均二乗誤差(RMSD)のガイダンス作用前、ガイダンスによる修正後、ガイダンス作用前とガイダンス修正後の差を示す。値が表示されない地域は、AEROSによる観測がなくガイダンスの作成ができなかった地域である。この地域についてはサブテーマ2が開発した画像補完手法で補完する。相関係数(R)および平均二乗誤差(RMSD)ともにガイダンスによって、すべてのグリッドで値が改善された。相関係数(R)は全体の94.4%にあたる136グリッドで0.8を超えた(ガイダンス作用前は2グリッド)。平均二乗誤差(RMSD)は全グリッドで目標とした30%以上の減少(平均で60.0%の減少)が見られた。平均バイアスはすべてのグリッドで改善し、平均で93.2%減少した。

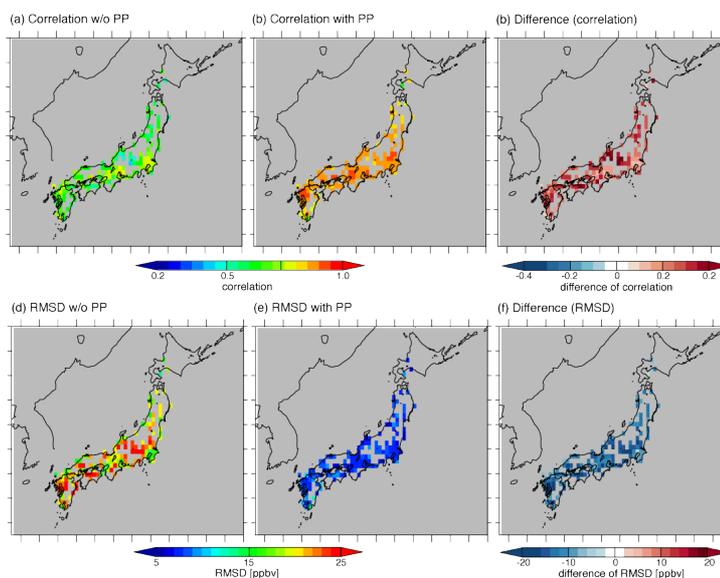


図1-10 オゾン濃度予測の検証結果。上段は相関係数（R）、下段は平均二乗誤差（RMSD）。左側からガイダンスなし予測、ガイダンスによる修正後、修正前と修正後の差。

図1-11に予測値と観測値の差の頻度分布を示す。赤がガイダンスによる修正後、青が修正前である。ガイダンス修正前、すなわちCTMによる予測は全体的にオゾン濃度を過大評価しており、観測値からの差が±10 ppbvにおさまった予測は全体の59.8%であった。ガイダンス修正後は、観測値からの差が±10 ppbvにおさまった予測は全体の82.5%となり予測精度が定量的に大幅に改善していることがわかる。

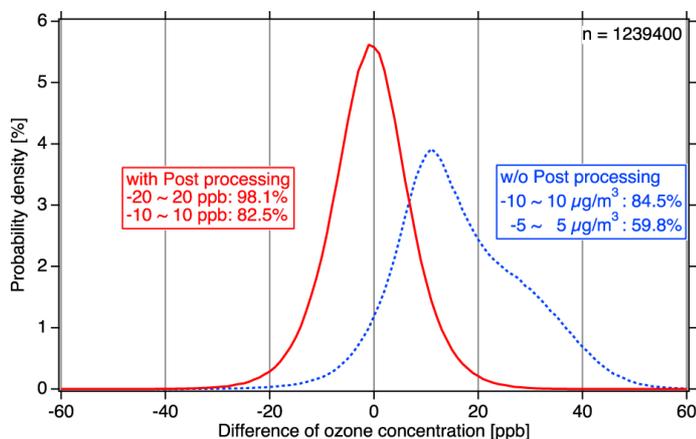


図1-11 オゾン濃度予測の予測値と観測値の差の頻度分布。赤がガイダンスによる修正後、青が修正前。

オゾン濃度予測の統計量をまとめる表1-3のようになる。相関係数（R）および平均二乗誤差（RMSD）だけではなく、予測値の一致性の指標であるIOAやSSも大きく改善している。

表1-3 オゾン濃度予測における統計量のまとめ。左側がガイダンス作用前、右側がガイダンス作用後。nは総データ数。

n=1239400	w/o Post processing	with Post processing
Correlation	0.66	0.87
Root Mean Square Difference [ppb]	20.66	8.08
Index of Agreement (IOA)	0.41	0.93
Skill Score (SS)	0.76	0.92

図1-12にEmery et al. (2017)の予測再現性の許容範囲（ $NME \leq 15\%$ かつ $NMB \leq \pm 5\%$ ）と目標範

圏 ($NME \leq 25\%$ かつ $NMB \leq \pm 15\%$) による検証を示す。図1-12 は図の中心かつ下軸に近ければ予測再現性が高く、各破線の枠の内側に位置すれば、それぞれ目標範囲、許容範囲達成である。青丸はガイダンスなし、赤丸はガイダンスありの予測結果である。ガイダンスなしの予測では、すべてのグリッドで目標範囲、許容範囲を達成することができなかったが、ガイダンスによる修正後は138グリッド（全体の95.8%）で許容範囲を、4グリッド（全体の2.8%）で目標範囲を達成することができた。

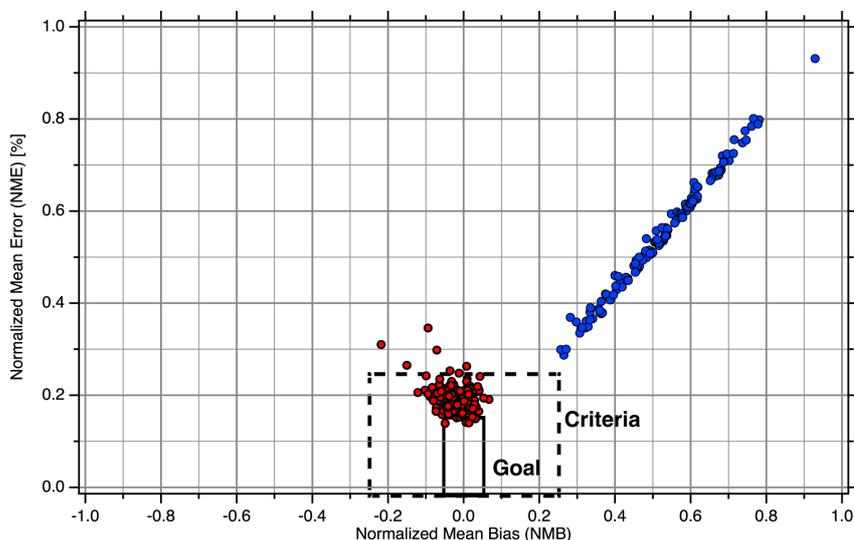


図1-12 Emery et al. (2017)の指標を用いたオゾン濃度の予測再現性の検証。青丸はガイダンスなし、赤丸はガイダンスありの予測結果。縦軸はNMEを横軸はNMBを表す。

次に、PM_{2.5}濃度予測の結果について示す。図1-13に相関係数(R)および平均二乗誤差(RMSD)のガイダンス作用前、ガイダンスによる修正後、ガイダンス作用前とガイダンス修正後の差を示す。相関係数(R)および平均二乗誤差(RMSD)ともにガイダンスによって、すべてのグリッドで値が改善された。相関係数(R)は全体の46.5%にあたる67グリッドで0.7を超えた（ガイダンス作用前は1グリッド）。平均二乗誤差(RMSD)は137グリッド（全グリッドの95.1%）で目標とした30%以上の減少（平均で27.8%の減少）が見られた。

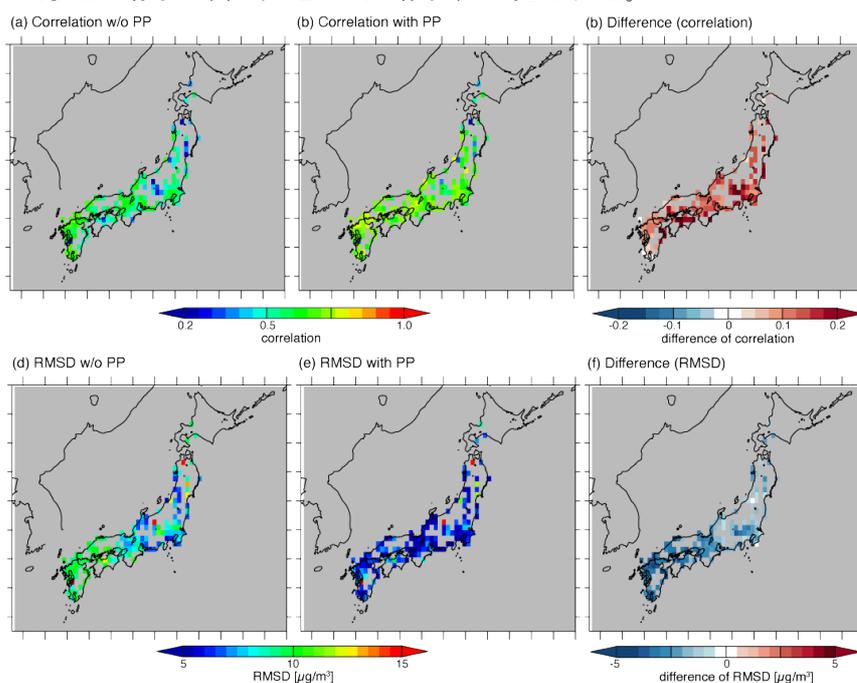


図1-13 PM_{2.5}濃度予測の検証結果。上段は相関係数(R)、下段は平均二乗誤差(RMSD)。左側からガイダンスなし予測、ガイダンスによる修正後、修正前と修正後の差。

図1-14に予測値と観測値の差の頻度分布を示す。赤がガイダンスによる修正後、青が修正前である。ガイダンス修正前、すなわちCTMによる予測は全体的にオゾン濃度を過大評価しており、観測値からの差が $\pm 5 \mu\text{g}/\text{m}^3$ におさまった予測は全体の59.8%であった。ガイダンス修正後は、観測値からの差が $\pm 5 \mu\text{g}/\text{m}^3$ におさまった予測は全体の68.8%となり予測精度が定量的に改善していることがわかる。 $\pm 10 \mu\text{g}/\text{m}^3$ には、ガイダンス修正後は全体の92.9%がおさまっている。

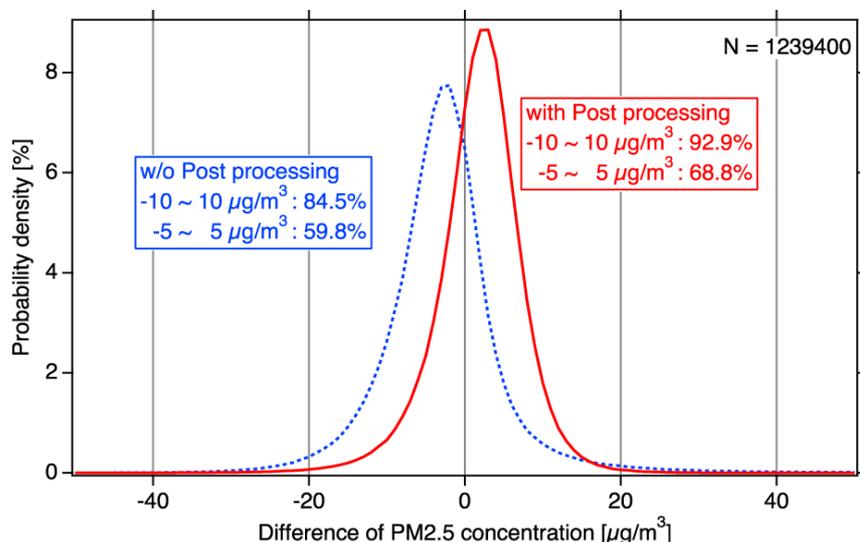


図1-14 PM2.5濃度予測の予測値と観測値の差の頻度分布。赤がガイダンスによる修正後、青が修正前。

PM2.5濃度予測の統計量をまとめる表1-3のようになる。相関係数（R）および平均二乗誤差（RMSD）だけではなく、予測値の一致性の指標であるIOAやSSも大きく改善している。

表1-4 PM2.5濃度予測における統計量のまとめ。左側がガイダンス作用前、右側がガイダンス作用後。nは総データ数。

n=1239400	w/o Post processing	with Post processing
Correlation	0.54	0.67
Root Mean Square Difference [$\mu\text{g}/\text{m}^3$]	8.96	6.51
Index of Agreement (IOA)	0.69	0.79
Skill Score (SS)	0.76	0.80

図1-12にBoylan and Russell (2006)の予測再現性の許容範囲（ $\text{MFE} \leq 70\%$ かつ $\text{MEB} \leq \pm 60\%$ ）と目標範囲（ $\text{MFE} \leq 50\%$ かつ $\text{MEB} \leq \pm 30\%$ ）による検証を示す。図1-12は図の中心かつ下軸に近ければ予測再現性が高く、各破線の枠の内側に位置すれば、それぞれ目標範囲、許容範囲達成である。青丸はガイダンスなし、赤丸はガイダンスありの予測結果である。ガイダンスなしの予測では、45.8%（66/144グリッド）で許容範囲を達成したが、目標範囲を達成することができたグリッドはなかった。ガイダンスによる修正後は138グリッド（全体の95.8%）で許容範囲を、79グリッド（全体の54.9%）で目標範囲を達成することができた。

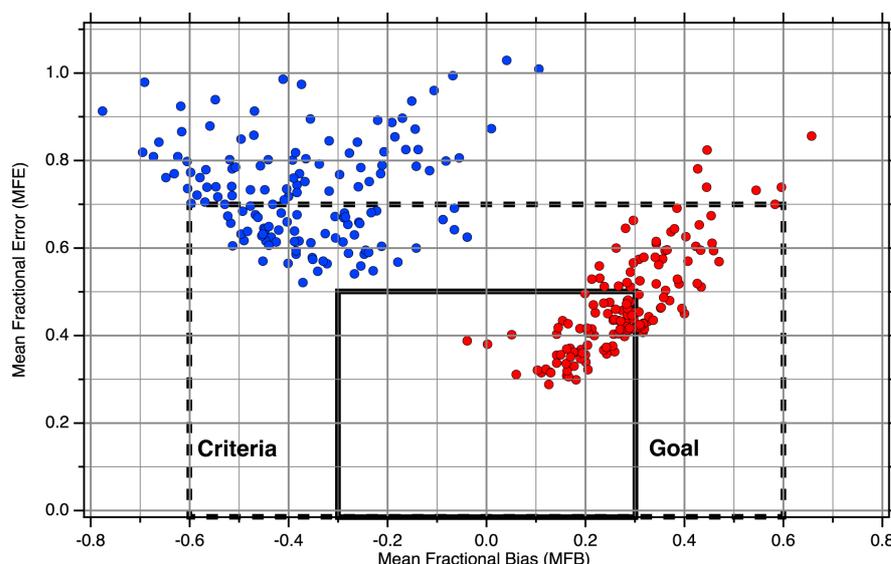


図1-15 Boylan and Russell (2006)の指標を用いたPM2.5濃度の予測再現性の検証。青丸はガイダンスなし、赤丸はガイダンスありの予測結果。縦軸はMFEを横軸はMFBを表す。

このように全国展開したガイダンスをサブテーマ2に提供し、VENUSへの導入と実働実験を行った。ガイダンス導入版VENUSの開発と実働実験、予測結果の公表を想定したwebページの作成については、サブテーマ2の項目で示す。

5. サブテーマ1 研究目標の達成状況

研究課題全体の目標として、ガイダンスのパフォーマンスに関する数値目標を設けた。ガイダンスのパフォーマンスは、ガイダンスの開発と改良を行ったサブテーマ1に直結するため、ここで達成状況について記述する。研究課題全体としてガイダンスのパフォーマンスに関わる目標として、

- PM2.5濃度予測に対しては、相関係数0.7以上、二乗平均平方根誤差の30%減少を目標とする。
- オゾン濃度予測に対しては、平均バイアス30%減少、相関係数0.8以上、二乗平均平方根誤差の30%減少を目標とする。

を設定した。この目標に対しては、

- PM2.5濃度予測に対しては、全国144グリッド全てで、相関係数が改善した、67グリッド(46.5%)で相関係数が0.7を超えた(ガイダンス適用前は1グリッド)。平均二乗誤差はすべてのグリッドで改善、137グリッド(全体の95.1%)で30%以上の改善(平均で27.8%)が見られた。
- オゾン濃度予測に対しては、全国144グリッド全てで、相関係数が改善した、136グリッド(94.4%)で相関係数が0.8を超えた(ガイダンス適用前は2グリッド)。平均二乗誤差はすべてのグリッドで改善、144グリッド(全体の100%)で30%以上の改善(平均で60.0%)が見られた。平均バイアスはすべてのグリッドで改善し、平均で93.2%削減した。

となり、PM2.5濃度予測では目標とした予測精度を概ね達成することができ、オゾン濃度予測では目標を大幅に上回る予測精度を達成することができた。このことから、ガイダンスのパフォーマンスに関しては目標を上回る成果を挙げたと評価した。

また、サブテーマ1では、

- サブテーマ2から提供されたAEROSの観測データおよびVENUSの予測値をそれぞれ教師データ、入力データとすることで、VENUSに対応したガイダンスの作成を、機械学習(多層ニューラルネットワーク)を用いて行う。
- 構築したガイダンスサブテーマ2に提供する。VENUSへの導入の補助を行う。

- サブテーマ2が行った実働実験の結果から予測精度の評価・検証を行い、ガイダンスの改良を行う。
- サブテーマ2と共同で、実働実験の結果の詳細な検証を行い、ガイダンス導入版 VENUS の現業運用についての検討を行う。ガイダンス導入版 VENUS の現業運用に向けた開発の補助を行う。

これらの目標に対し、以下のような達成状況を得た。

- ガイダンスの構築には多層ニューラルネットワークを用いた。AEROS で得られた 2013–2016 年のデータを教師データに、VENUS を模した CTM の予測結果を入力データとしてガイダンスの構築を行った。
- 構築した PM2.5 およびオゾン濃度に関するガイダンスをサブ2に提供した。
- 実働実験の結果を検討し、ガイダンスの改良ポイントの洗い出しを行った。
- 実働実験や web 表示実験を通じ、現業化の検討を行い、ガイダンスの改良ポイントの洗い出しを行った。ガイダンス導入版 VENUS は現業運用直前の段階まで準備を行った。

実働実験の詳細な検証は引き続き取り組む必要があるが、ガイダンス導入版 VENUS の開発と実働実験だけではなく、予測結果の公表を想定した web ページの作成まで達成することができた。ガイダンスのパフォーマンスに関する目標と合わせ、サブテーマ1としては**目標を上回る成果を挙げた**と評価した。

II-2 サブテーマ2 「ガイダンスを導入した大気汚染予測システムの開発と実働実験」

[サブテーマ2 要旨]

サブテーマ2では推進費5RF-2002で得られたガイダンスの知見を大気汚染予測システムVENUSに応用し、観測データと統合した新しい大気汚染予測システムの開発を行い、構築したシステムの実働実験を行うことで、ガイダンスの評価・改良を進めPM2.5およびオゾン濃度予測の精度向上を行い、現業運用を検討することが目標である。

まず、2022年度には、機械学習の教師データおよび入力データとなるAEROSの観測データを収集し、サブテーマ1に提供した。また、ガイダンス導入時に生じる可能性のある濃度分布図における補正前後の予測値の乖離および図としてのズレへの対処について検討した。

2023年度には、サブテーマ1が開発したガイダンスを導入したガイダンス導入版VENUSの開発を行った。また、ガイダンス導入版VENUSを用い、現業運用を想定した実働実験を行い、補正した予測結果を関係者用のホームページで共有した。実働実験により、ガイダンス導入版VENUSの現業運用についての検討を行い、現業運用がいつでも可能である状態まで準備を進めた。実働実験の結果、導入したガイダンスが現在の大気環境の傾向やVENUSの更新を反映していない点が明らかになった。現業運用を行うためには、ガイダンスの再学習と更新が必要であることがわかった。

これらの成果は、実働実験結果の詳細な検証等の一部研究目標に至らない部分があるが、他方で現業運用がいつでも可能な状態まで準備を進める等の研究目標を超える部分もあり、全体として目標通りの成果を挙げたものと判断できる。

1. サブテーマ2 研究開発目的

推進費5RF-2002で得られたガイダンスの知見をVENUSに応用し、観測データと統合した新しい大気汚染予測システムの開発を行う。構築したシステムの実働実験を行うことで、ガイダンスの評価・改良を進めPM2.5およびオゾン濃度予測の精度向上を行い、現業運用を検討する。

2. サブテーマ2 研究目標

サブテーマ2	「ガイダンスを導入した大気汚染予測システムの開発と実働実験」
サブテーマ2 実施機関	国立環境研究所
サブテーマ2 目標	<ul style="list-style-type: none"> ● 機械学習の教師データおよび入力データとなる AEROS の観測データおよび VENUS の予測値をサブテーマ1に提供する。 ● サブテーマ1が開発したガイダンスを導入したガイダンス導入版 VENUS の開発を行う。 ● ガイダンス導入版 VENUS を用い、現業運用を想定した実働実験を行い、予測結果をサブテーマ1に提供する。 ● 実働実験の結果をサブテーマ1と共同で詳細に検証し、ガイダンス導入版 VENUS の現業運用についての検討を行うとともに、必要に応じて現業運用に向けた準備を行う。

3. サブテーマ2 研究開発内容

機械学習の教師データとして2013-2019年度のAEROSの観測データのアーカイブよりPM2.5およびオゾン濃度を収集しサブテーマ1に提供した。VENUSの予測データについては、VENUSの予測時と全く同じ設定でサブテーマ1が再計算を行った。

サブテーマ1が作成したガイダンスのプロトタイプを用い、ガイダンス導入版のVENUSの設計開発を行った。ガイダンス導入版VENUSの現業運用を想定した実働実験を行った。この実働実験では、実際

のVENUSの予測値を用いて、ガイドンス導入版VENUSを並行的に実行した。

実働実験の結果を詳細に検証し、ガイドンス導入版VENUSの現業運用について検討した。必要に応じて現業運用に向けた準備（予測ルーチンの設計、ガイドンス適用後のデータフローの検討等）を行った。

4. サブテーマ2 結果及び考察

1. AEROS の観測データの収集および提供

2013年度から2019年度までのAEROSデータ（環境省大気汚染物質広域監視システム、通称「そらまめくん」）を収集し、サブテーマ1に提供した。

2. ガイドンス導入版 VENUS の開発

大気汚染予測システムVENUSは、国立環境研が2004年頃から開発を始め、2014年度以降は環境省と協働し開発を続けているシステムである。システムの概略は以下である。

- ・ 地域気象モデルWRFv3.9.1と大気質モデルCMAQ5.3.2の組合せ
- ・ 計算領域は東アジア域、拡大日本域、日本域の3領域をネスティング（階層）計算
- ・ 水平分解能は、順に45km、15km、5km
- ・ 発生源データは茶谷ら（J-STREAM、推進費5-1601）による最新データを使用
- ・ 当日から6日後までのオゾン濃度とPM2.5濃度を予測し、毎朝7時頃に更新
- ・ 数値計算は国立環境研のスカラ計算機システムを使用し、ホームページ（HP）表示は国立環境研の環境情報部の表示用サーバを使用

VENUSの計算のフローチャートを、本報告書の説明と関連する部分を残して簡潔にしたものを図2-1に示す。図中でNetCDFとGtoolはどちらもデータファイルのフォーマットを表し、NetCDFは数値シミュレーションにおいて一般的によく使われるデータフォーマットの一種であり、Gtoolは日本の気象研究分野の一部で標準的に使われているデータフォーマットである。



図2-1 VENUSの計算の概略を示すフローチャート。

2-1. ガイダンス補正導入後の濃度分布図の表示についての検討

2022年度は、検討の一環としてガイダンス補正導入後の濃度分布図の表示に関する懸念点について検討を行った。ガイダンスを数値予測（VENUS）に導入した際に、ガイダンスにより補正された予測値とその周辺の未補正の予測値の値には大きな差が生じる可能性があり、画像として不自然な断絶を生じる可能性があるというのが、検討すべき懸念点である。よって以下のように、画像としての断絶をどう繋げ滑らかにすべきなのかについて検討を行った。

検討方法としては、過去のVENUS計算値の水平濃度分布データの日本周辺部分に敢えて欠損域を与えた上で、画像補完の機械学習（AI）を用いて欠損区域がどのように補完されるか検討した。AIの手法としては U-Net、モデル学習方法としては、画像系AIのチューニングにおいて一般的に使われている手法であるGAN（Generative Adversarial Networks）を用いて画像補完を試みた（図2-2）。

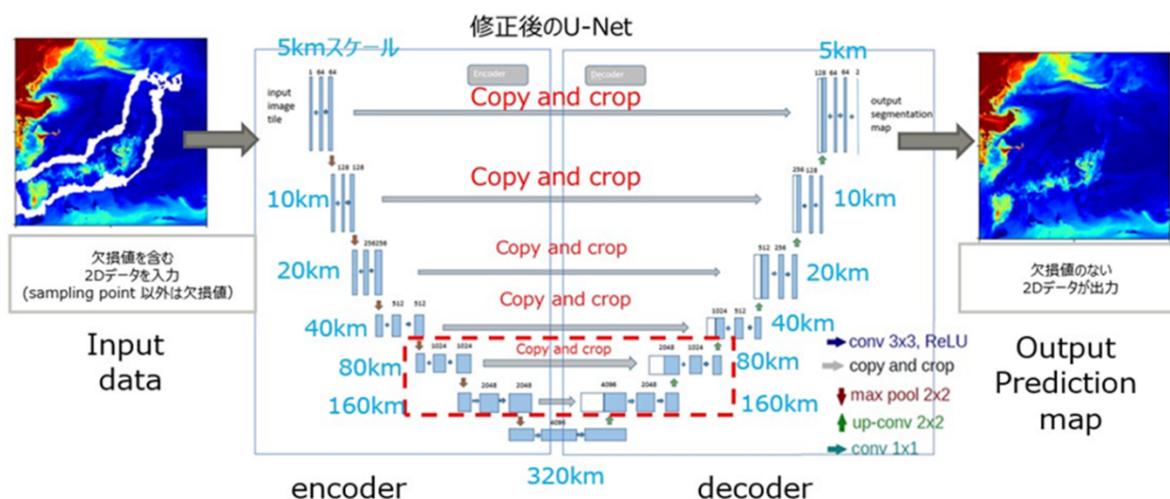


図2-2 画像補完機械学習のデータ処理の概要を概念的に表す図

検討の詳細であるが、まず、AIの入力データとしてVENUSの2018年12月1日から2020年12月10日までの731日（うち有効データは691日）の各予測日の0～23時間後の予測値データ（691×24=16584データ）を利用した。予測で得られた濃度分布に対して、AEROS観測が無い周辺部に敢えてデータ欠損領域を設けた（図2-3 右上図）上で、画像補完を行った。

初期検討の結果、画像を滑らかに補完でつなぐことができるとわかったが、ケースによってある程度誤差が発生することもわかった。特に欠損領域内外の値のずれが大きい場合には追加の検討が必要であると判明した。

機械学習の学習回数が補完の精度に与える影響を示す一例を図2-3に示す。元の予測値の周辺に経緯度0.5度の欠損部分（同図右上）を与え補完させたところ、学習回数200回では日本周辺域で不自然な分布となっている（同図左下）のに対して、250回ではより自然で元の分布に近い分布が得られた。ある程度の学習回数を確保することで結果が改善することがわかった。

また、画像補完の学習時に同じ時刻だけでなく、1時間前とN時間前も使用しての改善度合いを検討したところ、1時間前と2時間前を追加で用いるケースで結果は改善され、1時間前と5時間前を追加で用いるケースでは更に改善されることがわかった。

以上のようなガイダンス導入によって生じると予想される画像のズレを補正する手法について検討を行ったが、後述のように、2023年度にVENUSにガイダンスを実際に導入してみたところ、画像の断絶は目立たず、これらの検討を陽に生かす必要は無くなった。

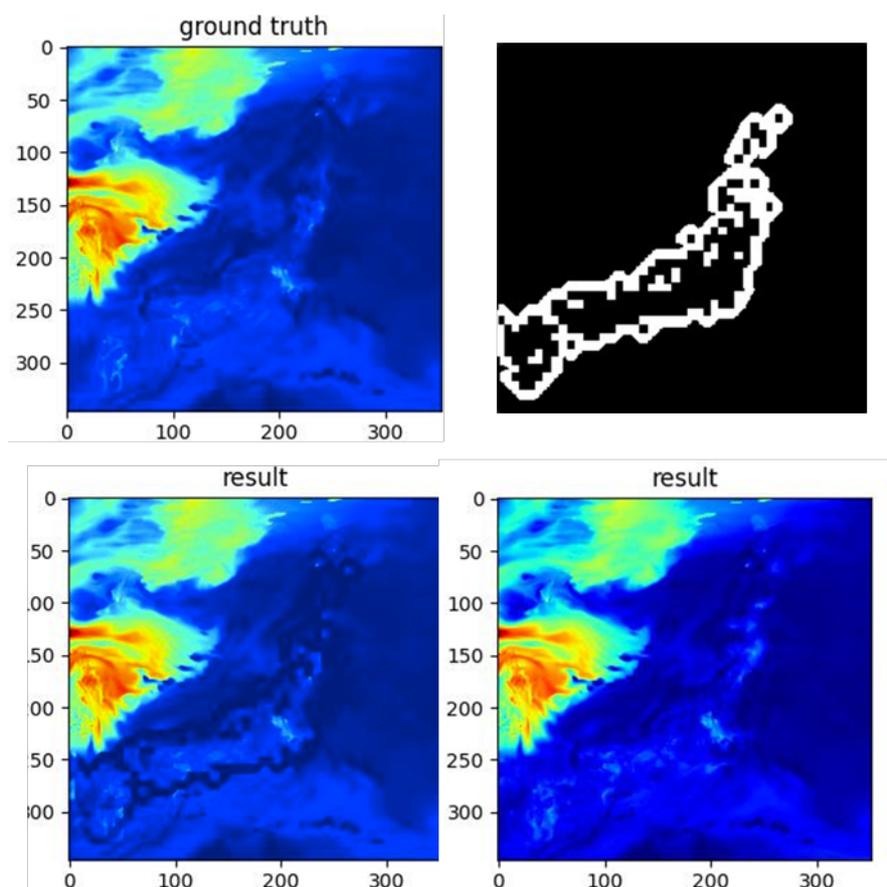


図2-1 機械学習による画像補完の一例。VENUS予測値の濃度分布図（左上）にデータ欠損領域（右上）を設定して元の分布図から値を削除した上で値を補完した結果（下2図）。学習回数200回（左下）と250回（右下）。

2-2. ガイダンス導入版 VENUS の開発

サブテーマ1によって開発されたガイダンス補正は前節に記述があるように、緯度経度0.375度間隔の格子ごとに、濃度の予測計算値等をテキスト形式で与えて観測値を踏まえた機械学習を用いて計算値を補正しテキスト形式の結果を得るものであり、当該補正処理はPythonを用いて行われる。一方で、VENUSの計算予測値は、Lambert図法上で5kmの東西南北間隔で得られるものであり、そのデータフォーマットはNetCDF形式であり、国立環境研のスカラ計算機システムのLinux上で処理は行われる。更に、通常のVENUSでは、NetCDF形式のデータをGtool形式に変換した上で表示用サーバにデータをコピーして可視化を行っている（図2-1）。

これらの計算環境やファイル形式の違いを考慮しつつ、ガイダンス補正をどのようにVENUSに導入すべきか検討を行い、以下のように処理を行うのが最適であると判断した。

1. VENUS実行開始時に、Python環境および関連モジュールを組み込む
2. 予測計算結果はLambert図法上の東西南北5km間隔で、NetCDF形式のデータで出力される
3. NetCDF形式のまま、Lambert図法上の5km間隔データから、緯度経度0.375度間隔のデータに変換を行う。この際には既存のツールであるNCO、NCLを利用する。
4. 0.375度間隔のNetCDFデータをテキストデータに変換する。
5. 得られたテキストデータに対して、緯度経度位置ごとにガイダンス補正を掛けて予測計算結果を補正する。
6. 補正值をテキストデータからNetCDF形式に戻す。
7. NetCDF形式の補正值ファイルを、緯度経度0.375度間隔からLambert図法5km間隔に座標再変換により戻す。

8. NetCDFファイルをGtoolファイルに変換する。
9. 得られたGtoolファイルは通常のVENUS運用と同様に可視化が可能である

運用版VENUSの処理スクリプトをコピーした上でガイダンス計算処理を加えたガイダンス導入版VENUSのスク립トを開発した。その計算のフローチャートを図2-4に示す。太い破線で囲まれた追加導入部分の内容は上述の3. から9. に示す通りである。

2-3. ガイダンス導入版 VENUS の実働実験

運用中のVENUSは、国立環境研のスカラ計算機システム上のVENUS専用ジョブクラスを用いて、毎夕17時頃から翌朝7時頃まで実行されており、本課題の実施中もそのサイクルを止めることは困難であった。よってガイダンス導入版VENUSは運用版VENUSが実施されていない昼間に実験を行うこととした。

前節で開発したガイダンス導入版 VENUS のスク립トを昼間に定期運用し、図 2-4 に示すようにガイダンス補正を加えた予測計算値を、運用中の VENUS と同じ表示用サーバにデータ送付し、ホームページ表示も行った。ただし、計算日数は運用版 VENUS の 7 日間に対して、実働実験版では 4 日間とした、また、表示は実働実験用の運用版とは別の、ID とパスワードを知る関係者向けホームページに表示し、関係者間で共有した。ページ情報は以下に示す通りである。

<https://venus.nies.go.jp/devel>

ID: venus

PASSWORD: 7j0Xe1cY27

以上の実働実験は2024年3月中の一部期間に行ったが、それ以降は他の計算用務に当該ジョブクラスを用いるために計算は行っておらず、上記ホームページを確認して原則として更新はなされていないことに留意されたい。

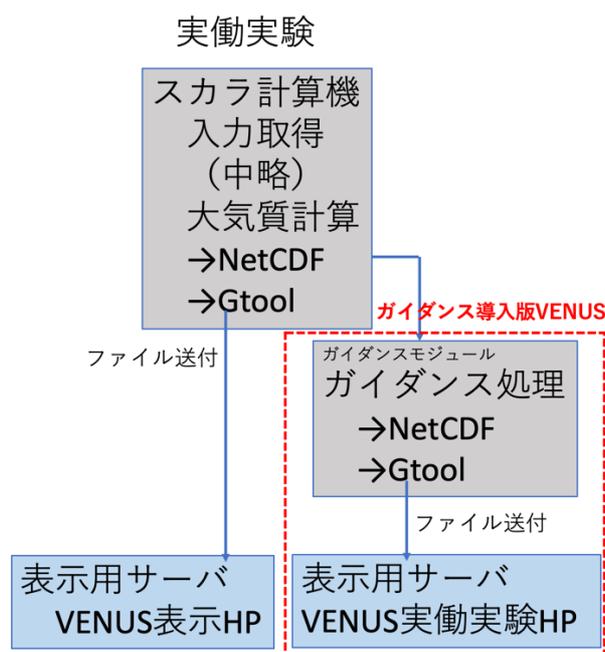


図2-4 ガイダンス導入版VENUSの実働実験用計算の概略を示すフローチャート。太破線で囲われた部分が運用版VENUSに本課題で加えた処理部分。

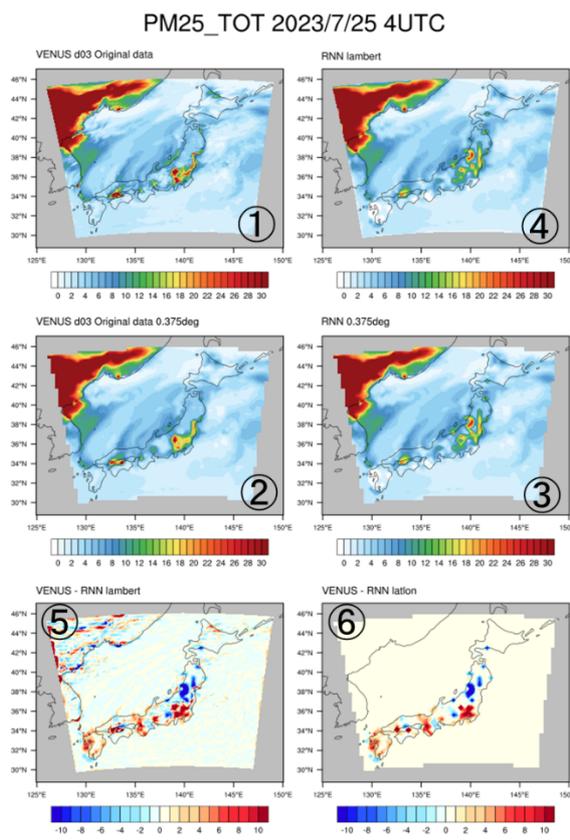


図2-5 ガイダンス導入版VENUSの実働実験の一例。通常計算により得られた予測計算結果の①元データ（5km, Lambert図法）、②座標変換後の緯度経度データ（0.375度間隔、緯度経度）、③ガイダンス補正処理後のデータ（0.375度間隔、緯度経度）、④座標再変換後のデータ（5km, Lambert図法）、⑤①から④を引いた差（5km, Lambert図法）、⑥②から③を引いた差（0.375度、緯度経度）。

3. 実働実験の検証およびガイダンス導入版VENUSの現業運用についての検討・準備

前節の実働実験の一環として行った検証の一例を示す。図2-5に過去事例に対してガイダンスを適用した例を示す。まず、①が通常の計算にて求めたLambert図法上の5kmメッシュの予測値であり、②がそれを座標変換し0.375度間隔の緯度経度データに変換したもの、③が②にガイダンス補正を加えたもの、④が③を座標再変換後し、Lambert図法上の5kmメッシュの補正済み予測値である。ガイダンス補正によって、通常版VENUSの予測結果①がガイダンス補正によって④に変換されることになり、その差を①から④を引いた差⑤で示す。①と④の差はガイダンス補正による違いだけでなく、Lambert図法から緯度経度座標、緯度経度座標からLambert図法への2回の座標変換による違いも含まれている。ガイダンス補正だけの違いは②から③を引いた差である⑥で示される。よって⑤と⑥の差は座標変換によるものと判断できるが、見比べると差は計算領域の周辺部と中国大陸上で大きいことがわかる。これらの差は座標変換による見せかけの違いであり、ガイダンス導入版VENUSではこれらの差異を反映させることは避けたい。よって、ガイダンス導入版VENUSでは④のデータを得た後に、観測に基づく機械学習のガイダンスの範囲である図2-6の5つの四角内のみを①のデータから④のデータに置き換えることにし、座標変換による見せかけの違いは反映されないようにした。

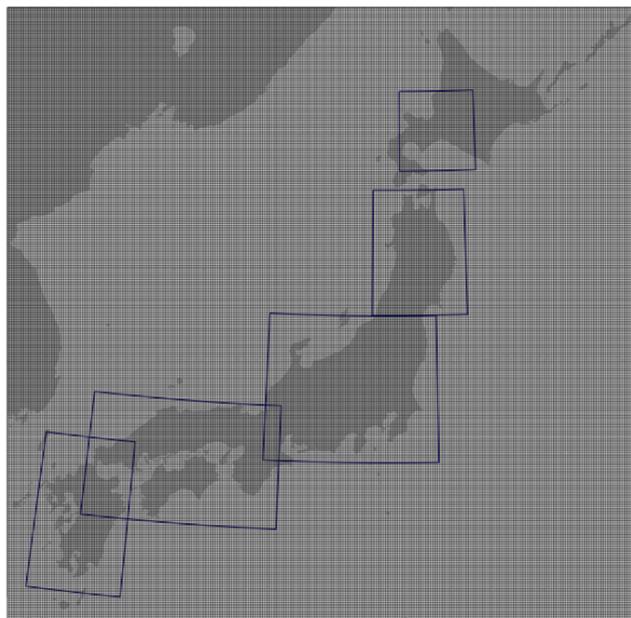


図2-6 ガイダンス補正を適用する範囲。青線の四角で囲われた5つの範囲内のみでガイダンス補正を反映する。

実働実験の結果、ガイダンスのパフォーマンスについて次のような課題を得た。まず、PM2.5の濃度予測においては、ガイダンスを作用させ補正させた予測値が、観測値と比べて過大になる傾向があることがわかった。これは、ガイダンスの作成に過去の観測データを用いるため、最近のPM2.5濃度の減少傾向が反映されていないことが原因であると考えられる。次に、また、ガイダンス導入版VENUSを開発している間にVENUS自体の改良とバージョンアップが行われ、ガイダンスが現状のVENUSに対応していない点を指摘された。実際の現業運用を行う前に、近年の観測データを含めたガイダンスの再学習を行う必要がある。

以上のように開発されたガイダンス導入版VENUSであるが、現業運用に際しては実働実験のスク립トを昼間でなく運用版VENUSの代わりに運用し、またホームページ表示を通常版VENUSのホームページに行えば直ちに現業運用に切り替えることが可能である。ただし、現業運用に切り替える前には、ガイダンスによる予測結果の補正の結果について詳細な検証を行うことが必要である。また、ガイダンス自体についても機械学習を、より最新の観測データと予測データを用いて行った上で適応するのが望ましいと考えられる。

5. サブテーマ2 研究目標の達成状況

サブテーマ2では、以下の4つの目標に沿って進めた。

1. 機械学習の教師データおよび入力データとなるAEROSの観測データおよびVENUSの予測値をサブテーマ1に提供する。
2. サブテーマ1が開発したガイダンスを導入したガイダンス導入版VENUSの開発を行う。
3. ガイダンス導入版VENUSを用い、現業運用を想定した実働実験を行い、予測結果をサブテーマ1に提供する。
4. 実働実験の結果をサブテーマ1と共同で詳細に検証し、ガイダンス導入版VENUSの現業運用についての検討を行うとともに、必要に応じて現業運用に向けた準備を行う。

これに対してサブテーマ2での達成状況は、以下である。

1. AEROSの観測データを収集しサブテーマ1に提供した。VENUSの予測値は、サブテーマ1がVENUSと同一設定で再計算した。
2. サブテーマ1が開発したガイダンスをVENUSに導入し、ガイダンス導入版VENUSを開発した。
3. ガイダンス導入版VENUSを用いて、現業運用同様にホームページ掲載までを行う実働実験を行い、

当該する実働実験用予測結果ホームページをサブテーマ1および関係者に提供した。

4. 実働実験の結果をサブテーマ1と共有し、ガイダンスの改良点などの洗い出しは行ったが、詳細な精度検証までは至らなかった。ただし、ガイダンス導入版VENUSの現業運用は可能であると判断され、現業運用直前の段階まで準備を行った。

以上により、サブテーマ2では一部達しない目標があったが、同時に目標を超えた成果も挙げており、全体としてほぼ目標通りの成果を挙げている。

Ⅲ. 研究成果の発表状況の詳細

(1) 成果の件数

成果の種別	件数
査読付き論文：	0
査読付き論文に準ずる成果発表（人文・社会科学分野）：	0
その他誌上発表（査読なし）：	1
口頭発表（国際学会等・査読付き）：	3
口頭発表（学会等・査読なし）：	4
知的財産権：	0
「国民との科学・技術対話」の実施：	4
マスコミ等への公表・報道等：	0
研究成果による受賞：	0
その他の成果発表：	0

(2) 誌上発表

< 査読付き論文 >

成果 番号	【サブテーマ1】の査読付き論文
	特に記載すべき事項はない。

成果 番号	【サブテーマ2】の査読付き論文
	特に記載すべき事項はない。

< 査読付き論文に準ずる成果発表（人文・社会科学分野） >

成果 番号	【サブテーマ1】の査読付き論文に準ずる成果発表（人文・社会科学分野）
	特に記載すべき事項はない。

成果 番号	【サブテーマ2】の査読付き論文に準ずる成果発表（人文・社会科学分野）
	特に記載すべき事項はない。

<その他誌上発表（査読なし）>

成果 番号	【サブテーマ1】のその他誌上発表（査読なし）
1	弓本桂也、菅田誠治、板橋秀一：機械学習によって観測データと統合された新しい大気汚染予測システムの開発と実働実験，大気環境学会誌，59(1)，A27-A30(2024)

成果 番号	【サブテーマ2】のその他誌上発表（査読なし）
	特に記載すべき事項はない。

(3) 口頭発表

<口頭発表（国際学会等・査読付き）>

成果 番号	【サブテーマ1】の口頭発表（国際学会等・査読付き）
2	Yumimoto et al.: Development of aerosol data assimilation system integrated with satellite retrievals, 2023 International Conference on CMAS-Asia-Pacific, Saitama, Japan, 12-21 July, 2023 (Oral)
3	Yumimoto et al.: Integration of aerosol retrieval and assimilation: current status and future direction, AERSS Annual Meeting 2023, Wuhan China, 17-19 September 2023 (Oral, invited)
4	Yumimoto et al.: Integration of aerosol retrieval and assimilation: current status and future direction, AGU Fall Meeting 2023, San Francisco, USA, 11-15 December, 2023 (Oral, invited)

成果 番号	【サブテーマ2】の口頭発表（国際学会等・査読付き）
	特に記載すべき事項はない。

<口頭発表（学会等・査読なし）>

成果 番号	【サブテーマ1】の口頭発表（学会等・査読なし）
5	弓本桂也、第64回大気環境学会年会、(2023)「大気環境予測と観測データ：観測情報を数値シミュレーションに取り込む」
6	弓本桂也、菅田誠治、板橋秀一、第64回大気環境学会年会、(2023)「機械学習によって観測データと統合された新しい大気汚染予測システムの開発」
7	弓本桂也、鉄鋼環境基金 助成研究2023年度成果報告会、「機械学習を用いた大気汚染予測システムの予測精度向上」（2024年3月6日）
8	弓本桂也、公益社団法人自動車技術会 第12回 大気環境技術・評価部門委員会、「環境予測と観測データ：観測情報を数値シミュレーションに取込む」（2024年3月12日）

成果 番号	【サブテーマ2】の口頭発表（学会等・査読なし）
----------	-------------------------

	特に記載すべき事項はない。
--	---------------

(4) 知的財産権

成果番号	発明者	出願者	名称	出願以降の番号	出願年月日
	特に記載すべき事項はない。				

(5) 「国民との科学・技術対話」の実施

成果番号	実施年度	【サブテーマ1】の実施状況
9	2022	弓本桂也、九州大学総合理工学府オープンキャンパス、「機械学習について」（2022年5月21日、オープンキャンパスに出展。機械学習の基礎と大気環境予測への応用例について発表）
10	2022	弓本桂也、大和中学校連携事業（研究室訪問）、「大気環境予測について」（2022年12月8日、地元中学生の学生を対象に大気環境予測についてレクチャー）
11	2023	弓本桂也、九州大学総合理工学府オープンキャンパス、「機械学習について」（2023年5月27日、オープンキャンパスに出展。機械学習の基礎と大気環境予測への応用例について発表）
12	2023	弓本桂也、気象学会九州支部「第24回気象教室」、「大気環境予測におけるデータ同化」（2023年11月26日）

成果番号	実施年度	【サブテーマ2】の実施状況
		特に記載すべき事項はない。

(6) マスメディア等への公表・報道等

成果番号	【サブテーマ1】のメディア報道等
	特に記載すべき事項はない。

成果番号	【サブテーマ2】のメディア報道等
	特に記載すべき事項はない。

(7) 研究成果による受賞

成果番号	【サブテーマ1】の研究成果による受賞
	特に記載すべき事項はない。

成果番号	【サブテーマ2】の研究成果による受賞

	特に記載すべき事項はない。
--	---------------

(8) その他の成果発表

成果 番号	【サブテーマ1】のその他の成果発表
	特に記載すべき事項はない。

成果 番号	【サブテーマ2】のその他の成果発表
	特に記載すべき事項はない。

Abstract

[Research Title]

Development and test experiment of a new air pollution prediction system integrated with observational data by machine learning

Project Period (FY) :	2022-2023
Principal Investigator :	Yumimoto Keiya
(PI ORCID) :	ORCID 0000-0002-3465-0613
Principal Institution :	Kyushu University 6-1 Kasuga Park, Kasuga 816-8580, Fukuoka, JAPAN Tel: +81-92-583-7772 Fax: +81-92-583-7774 E-mail: yumimoto@riam.kyushu-u.ac.jp
Cooperated by :	Central Research Institute of Electric Power Industry, National Institute for Environmental Studies
Keywords :	Machine learning, Guidance, Air pollution forecasting system, big data, Atmospheric Environmental Regional Observation System, Photochemical oxidant

[Abstract]

Air pollutants (aerosols (PM_{2.5}) and photochemical oxidants) emitted into the atmosphere by natural phenomena and human activities have a significant impact on people's lives, including deterioration of the air environment and human health. The National Institute for Environmental Studies (NIES) operates an air pollution forecasting system (VENUS) to provide early warning of photochemical oxidants and PM_{2.5}, thereby contributing to reducing their impact on social life and health. Air pollution forecasting is increasingly recognized as an important part of social infrastructure in the context of public concern about health effects. However, its prediction accuracy is quantitatively insufficient. In this project, we applied machine learning techniques to develop a post-process (guidance) that corrects the prediction results of the air pollution forecasting system by learning from observational data collected by the Atmospheric Environmental Regional Observation System (AEROS). In addition, we developed a guidance implementation version of VENUS and conducted pre-operational experiments to study the actual operation of the guidance implementation version of VENUS.

In the current VENUS forecasts by concentration category, the guidance increased the accuracy rate by 10.8-21.1 percentage points for PM_{2.5} concentrations and by 7.3-33.6 percentage points for ozone concentrations. The confidence level of the forecast was derived by statistically processing the amount of revision of the guidance. A clear correlation was observed between the confidence level obtained and the accuracy of the PM_{2.5} concentration forecast, confirming that the confidence level was appropriately estimated.

To develop the guidance implementation version of VENUS, we divided Japan into 144 regions, created guidance in each region, and evaluated its performance. In predicting PM_{2.5} concentrations, both the correlation coefficient (R) and the root mean square error (RMSD) were improved in all grids by applying the guidance. The correlation coefficient (R) exceeded 0.7 for 67 grids (46.5% of the total), and the mean squared error (RMSD) achieved the target reduction of more than 30% for 137 grids (95.1% of all grids) (the overall mean reduction was 27.8%).

Based on VENUS in operation, we developed a guidance implementation version of VENUS by developing two processes for input and output to and from guidance. Through pre-operational experiments and web display experiments using the guidance implementation version of VENUS, we identified points for improvement of the guidance and explored its actual operation. The VENUS guidance implementation version was prepared to the stage just before the actual operation.

This research was funded by the Environment Research and Technology Development Fund (ERTDF).