

Environment Research and Technology Development Fund

環境研究総合推進費 終了研究成果報告書

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
発と予測精度向上
(JPMEERF20205R02)
令和2年度～令和3年度

英文課題名

Development of Post-processing for Chemical Weather Forecasting Using Machine Learning Method

＜研究代表機関＞

国立大学法人 九州大学

＜研究分担機関＞

電力中央研究所

＜研究協力機関＞

○図表番号の付番方法について

「Ⅰ．成果の概要」の図表番号は「0．通し番号」としております。なお、「Ⅱ．成果の詳細」にて使用した図表を転用する場合には、転用元と同じ番号を付番しております。

「Ⅱ．成果の詳細」の図表番号は「サブテーマ番号．通し番号」としております。なお、異なるサブテーマから図表を転用する場合は、転用元と同じ図表番号としております。

令和4年5月

目次

I. 成果の概要	・・・・・・・・・・	1
1. はじめに（研究背景等）		
2. 研究開発目的		
3. 研究目標		
4. 研究開発内容		
5. 研究成果		
5－1. 成果の概要		
5－2. 環境政策等への貢献		
5－3. 研究目標の達成状況		
6. 研究成果の発表状況		
6－1. 査読付き論文		
6－2. 知的財産権		
6－3. その他発表件数		
7. 国際共同研究等の状況		
8. 研究者略歴		
II. 成果の詳細		
II－1 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・・・9		
（国立大学法人 九州大学、電力中央研究所）		
要旨		
1. 研究開発目的		
2. 研究目標		
3. 研究開発内容		
4. 結果及び考察		
5. 研究目標の達成状況		
6. 引用文献		
III. 研究成果の発表状況の詳細	・・・・・・・・・・	2 2
IV. 英文Abstract	・・・・・・・・・・	2 3

I. 成果の概要

課題名 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

課題代表者名 弓本 桂也（国立大学法人九州大学、応用力学研究所、教授）

重点課題 主：【重点課題⑯】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

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の発掘・活用

行政要請研究テーマ（行政ニーズ） (5-9) PM2.5 及び O_x の総合的な削減シナリオ・技術の特定と対策コストの評価

研究実施期間 令和2年度～令和3年度

研究経費

11,765千円（合計額）

（各年度の内訳：令和2年度：5,928千円、令和3年度：5,837千円）

研究体制

（サブテーマ1）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（九州大学）

他のサブテーマはない

研究協力機関

研究協力機関はない

本研究のキーワード 機械学習、PM2.5、光化学オキシダント、ガイダンス、大気汚染予測システム、ビッグデータ、大気汚染物質広域監視システム

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）や大気微量気体（オゾン等））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、大きな社会問題となっている。このような光化学オキシダントやPM2.5等の早期警戒を呼びかけ、社会生活や健康に与える影響の抑制し被害を低減するために、様々な現業・研究機関で化学輸送モデル（CTM）による数値シミュレーションを用いた“大気汚染予測”が提供されているが、その予測精度は定量的に十分であるとは言い難い。例えば、国立環境研究所では大気汚染予測システムVENUSによるPM2.5とオゾンの予測を公開しているが、予測値と実測値の間に大きな乖離がある。

予測精度を左右するCTMの不確実性としては、モデルの系統誤差、初期条件に含まれる誤差、そしてCTMの特色として大気汚染の排出インベントリ（強度・分布）に含まれる誤差が挙げられる。申請者は、これまでにデータ同化技術を用い観測データと数値モデルを融合し、排出源と初期条件を最適化することで数値予測の精度向上に取り組んできた。しかし、これらはCTMのインプットや境界条件、すなわちモデルより上流における取り組みであり、モデル自体に含まれる誤差を修正することができない（図0.1、

左側部分）。このモデル系統誤差は依然として予測精度を大きく左右している。本研究では、数値天気予報で導入されているガイダンス（天気翻訳）の概念に着目、機械学習（AI）技術を応用し、大気汚染物質広域監視システムで得られた膨大な観測データを教師データとすることで、大気汚染予測に適した新しいガイダンスを構築、PM2.5および光化学オキシダント濃度予測の精度向上を実現することで、社会活動や健康に与える影響の低減に貢献する（図0.1 右側部分）。

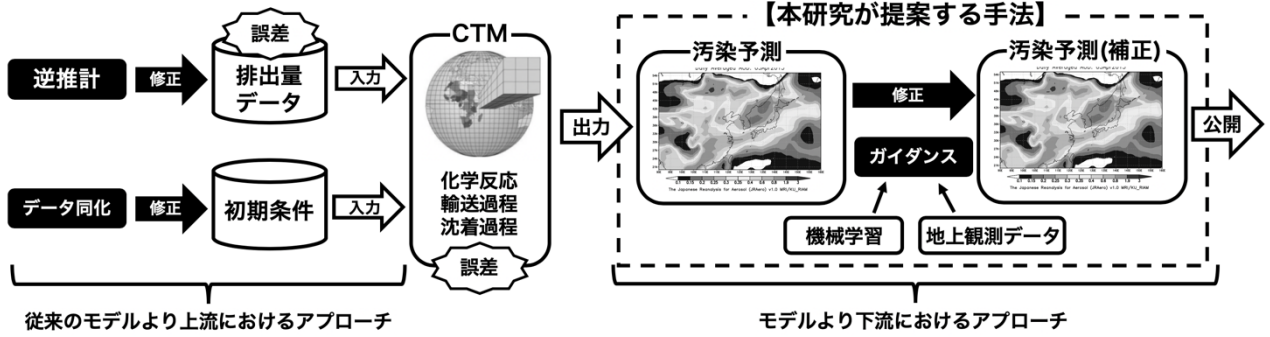


図0.1 CTMの入力データと誤差要因と予測精度向上に関する従来の取り組み（左側）、本研究が目指すガイダンスの構築と予測精度向上の概念（右側）。

2. 研究開発目的

ガイダンスとは、数値天気予報で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。本研究では、国立環境研究所が開発・運用を行っている大気汚染予測システム（VENUS）での利用を想定し、機械学習の技術を応用することで化学輸送モデル（CTM）版のガイダンス手法の開発を行い、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。CTM版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）の技術を応用し、環境省が運用する大気汚染物質広域監視システム（そらまめ君）で得られた膨大な観測データを教師データとすることで、24および48時間先予測の定量的な精度向上および、日平均値の基準超過など環境行政に必要な出力への翻訳を目指す。

3. 研究目標

全体目標	機械学習（多層ニューラルネットワーク）技術を応用することで、大気汚染物質広域監視システムを学習させた化学輸送モデル（CTM）版のガイダンス手法の開発を行うことで、大気汚染予測システムによるPM2.5および光化学オキシダント予測（24および48時間先予測）の定量的な精度向上を実現する。
サブテーマ1	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
サブテーマリーダー/所属機関	弓本 桂也／九州大学
目標	機械学習（多層ニューラルネットワーク）技術を応用することで、大気汚染物質広域監視システムを学習させた化学輸送モデル（CTM）版のガイダンス手法の開発を行うことで、大気汚染予測システムによるPM2.5および光化学オキシダント予測（24および48時間先予測）の定量的な精度向上を実現する。従来の化学輸送モデルを用いた予測に対し、平均二乗誤差および平均バイアスを20%改善させることを目標とする。

4. 研究開発内容

図0.2 に研究開発内容の概念図を示す。機械学習（多層ニューラルネットワーク）を基に、大気汚染予測システム（CTM）の予測結果を入力データに、大気汚染物質広域監視システムで得られた観測値を教師データにガイダンスの構築を行った。入力データには、修正の対象となるPM2.5やオゾン濃度だけでなく、気温や相対湿度、風向風速といった気象場や月・時間の情報も含めた。また、国立環境研究所が運用する大気汚染予測システム（VENUS）への将来的な導入を想定して、CTMにはVENUSと同じ領域化学輸送モデルを採用し、計算設定もVENUSと同一とした。ガイダンスには次の2つのタイプを検討した。

1. 予測値を直接補正する「回帰モデル型ガイダンス」
2. 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」

教師データは2013–2016年の4年分の計測データを教師データとし、2017年に対して予測実験を行い結果の検証を行った。

本課題の特色として以下の点があげられる。

- 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。
- 環境省および国立環境研究所と地方自治体が整備・展開を行ってきた大気汚染物質広域監視システム（AEROS）の膨大な観測データ（ビックデータ）を、機械学習（AI）の手法で大気汚染予測システムの精度向上につなげる新しい技術の開発である。
- 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。

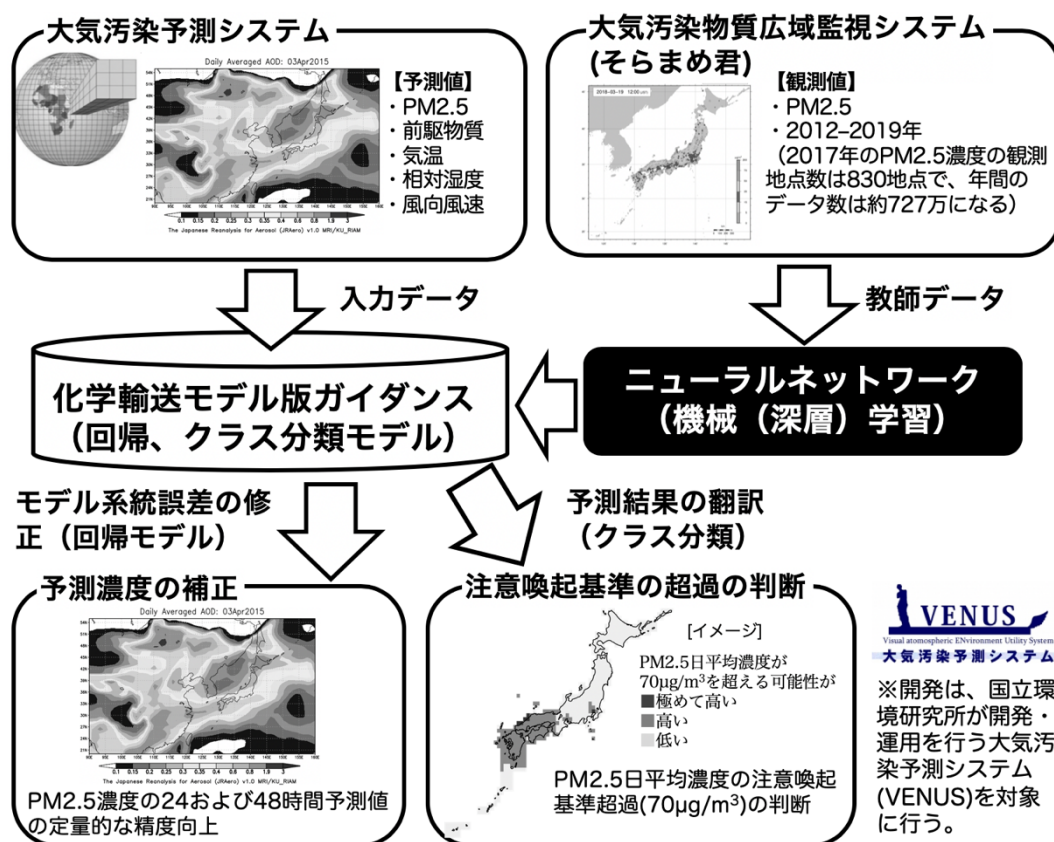


図0.2 本研究で構築するガイダンスの概念図

5. 研究成果

5-1. 成果の概要

ガイダンスの構築と検証は、図0.3 に示す「学習フェイズ」と「予測フェイズ」の2つの過程で行う。「学習フェイズ」では多層ニューラルネットワーク対し、大気汚染予測システム（CTM）の予測結果を入力データに、大気汚染物質広域監視システムで得られた観測値を教師データとして学習させ、ガイダンスの構築を行う。「予測フェイズ」では構築したガイダンスを予測に適用しそのパフォーマンスを検証・改良を行う。本課題では、東京、大阪、名古屋、福岡、新潟の5地点に対して、PM2.5およびオゾン濃度予測にたいしてそれぞれガイダンスを構築、予測実験を行うことでガイダンスによる予測精度向上のパフォーマンスの評価を行った。

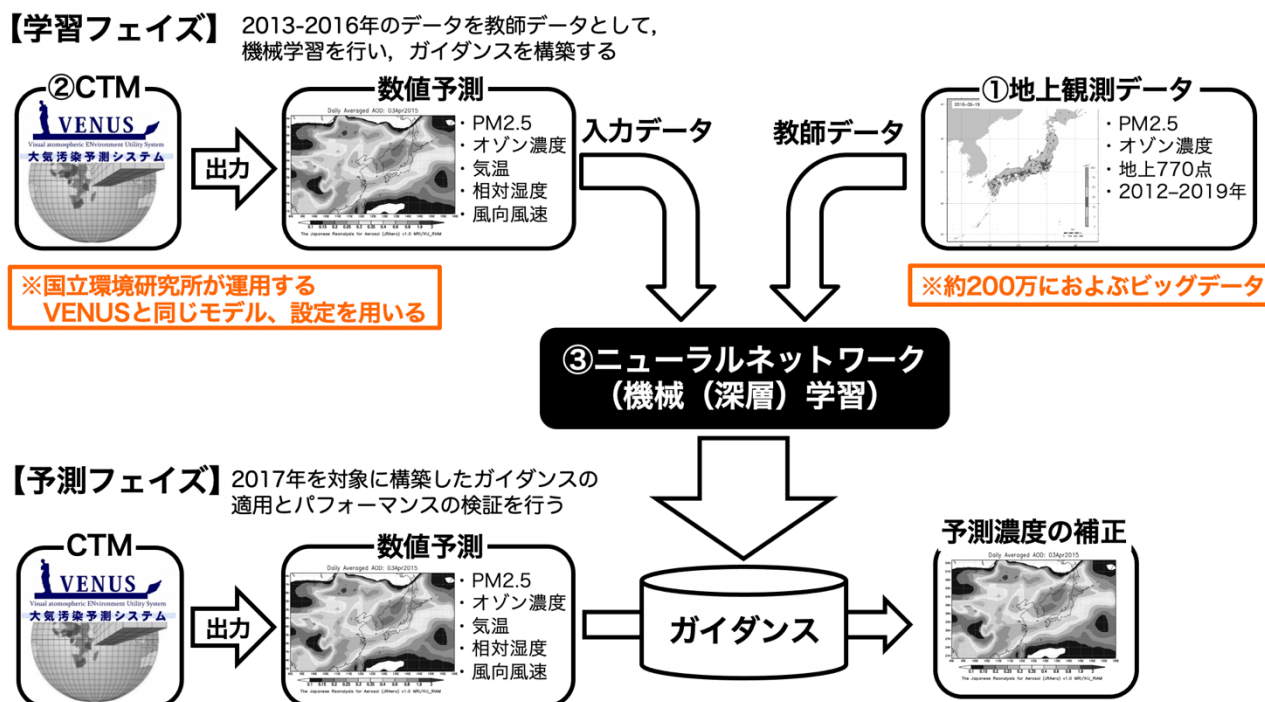


図0.3 ガイダンスの構築を行う学習フェイズ（上段）と検証を行う予測フェイズ（下段）の概念図。

ガイダンスの検証と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。

・回帰モデル型ガイダンスによるPM2.5濃度予測の精度向上

入力データを変えた感度実験を行い、入力データの組み合わせとガイダンスによる予測精度向上の関係（ガイダンスのパフォーマンスとの関係）を調べた。PM2.5濃度だけではなく、気象要素として気温、相対湿度、オゾン濃度、風速成分（U, V）を与えることにより予測精度が向上する（ガイダンスとしてのパフォーマンスが増加する）ことがわかった。一方、時刻や月などの情報は予測精度にほとんど影響を与えなかった。

ガイダンス適用前の予測値は、決定係数は0.36–0.50と地点間に大きなばらつきがある一方、RMSDは8.2–12.2 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ と大きく、すべての地点で負の偏差であった。ガイダンスの導入によって決定係数は0.50–

0.64となり27.4–48.6%増加、RMSDは5.9–7.1 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ となり22.8–49.5%減少、IOAは8.5–17.9%増加した。予測値の誤差を評価するNMEおよびMFEはそれぞれ16.5–38.5%、54.4–77.7%減少した。一方、予測値の偏差（バイアス）を評価するNMBおよびMFBはそれぞれ35.9–71.5%、28.9–72.1%減少した。すべての地点でこれらすべての統計量が改善され、ガイダンスの汎用性が示された。また、研究目標に上げたRMSDおよびバイアスの20%減少をすべての地点で達成した。

図0.3 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0.3 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はすべての地点で許容範囲を達成していたが、目標範囲を達成していた地点はなかった。ガイダンスによる修正を行うことで、予測精度が向上し、全地点で目標範囲を達成している。

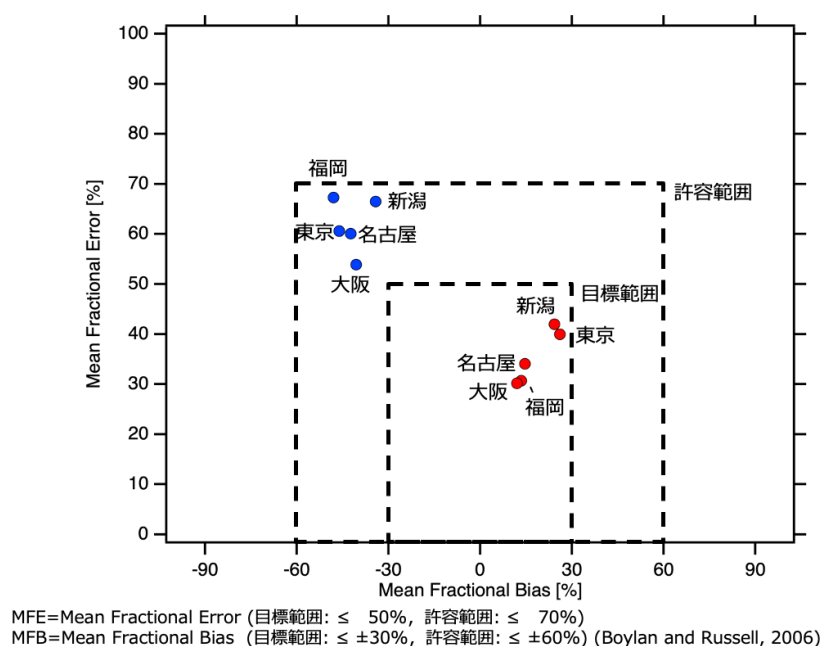


図0.3 Boylan and Russell (2006)の指標を用いた予測再現性の検証。青丸はガイダンスなし、赤丸はガイダンスありの予測結果。縦軸はMFEを横軸はMFBを表す。

・回帰モデル型ガイダンスによるオゾン濃度予測の精度向上

オゾン濃度予測においては、PM2.5濃度予測で採用した気温、相対湿度、風速成分に加え、月や時刻を入力データとして加えると予測精度が向上する（ガイダンスのパフォーマンスが増大する）ことがわかった。これは、PM2.5濃度予測では見られなかった事象であり、オゾン濃度の予測においては、時刻と月がそれぞれ、オゾン濃度の日内周期変動や季節変動を再現する上で重要な情報となっていることが考えられる。

ガイダンス適用前のオゾン予測値は、決定係数は0.49–0.64とPM2.5濃度予測に比べて高い値を示したが、RMSDは13.4–20.9 ppbと大きかった。NMBやMFBすべての地点で正の値となり、PM2.5濃度予測と異なりオゾン濃度予測は正の偏差を持っていた。ガイダンスの導入によって決定係数は0.67–0.77となり15.6–37.2%増加、RMSDは7.6–8.4 ppbとなり39.1–59.8%減少、IOAは7.0–55.0%増加し、すべての地点で0.9を超えた。予測値の誤差を評価するNMEおよびMFEはそれぞれ40.3–63.4%、28.9–51.2%減少した。一方、予測値の偏差（バイアス）を評価するNMBおよびMFBは30%を超える地点もあったが、それぞれ86.8–96.8%、51.6–96.5%減少し、すべての地点で6%未満となった。すべての地点でこれらすべての統計量が改善され、ガイダンスの汎用性が示された。また、研究目標に上げたRMSDおよびバイアスの20%減少をすべての地点で達成した。

図0.4 にEmery et al. (2017)の予測再現性の許容範囲（ $NME \leq 15\%$ かつ $NMB \leq \pm 5\%$ ）と目標範囲（ $NME \leq 25\%$ かつ $NMB \leq \pm 15\%$ ）による検証を示す。図0.4 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はすべての地点で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を行うことで、予測精度が向上し、全地点で目標範囲を達成している。

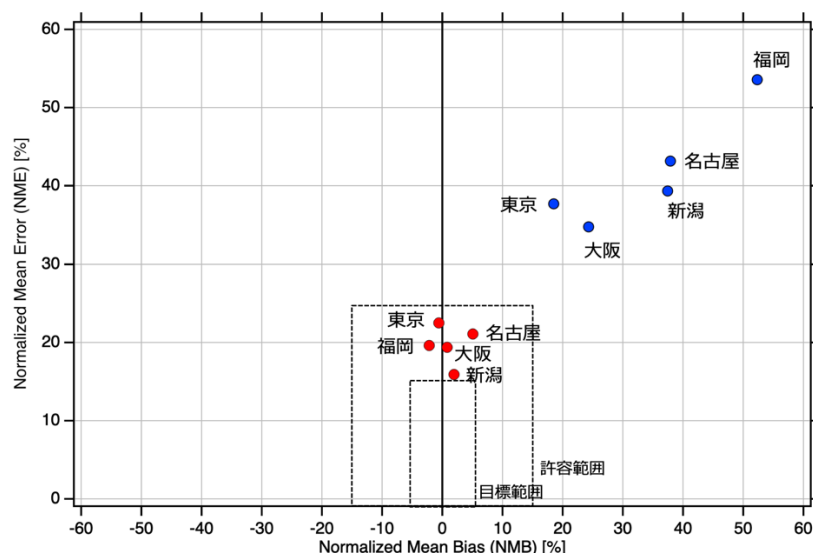


図0.4 Emery et al. (2017)の指標を用いた予測再現性の検証。青丸はガイダンスなし、赤丸はガイダンスありの予測結果。縦軸はNMEを横軸はNMBを表す。

以上の結果より、本研究で開発したガイダンス手法はPM2.5および光化学オキシダント濃度の予測精度向上に有効であることが示された。令和3年度開始の環境研究総合推進費課題「5MF-2201、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」にて実際のVENUSに対する実働実験を行う予定である。

5－2．環境政策等への貢献

<行政等が既に活用した成果>

特になし。

<行政等が活用することが見込まれる成果>

本研究により大気汚染予測に特化したガイダンスの開発に成功、PM2.5および光化学オキシダント濃度の予測精度向上に有効であることを示した。これにより、VENUSの定量的な予測精度の向上が期待でき、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、都道府県等の環境政策に大きく寄与することが期待できる。

5－3．研究目標の達成状況

以下の成果より「目標を上回る成果をあげた」と評価できる。

機械学習（AI）の技術を応用し、大気汚染物質広域監視システムで蓄積された観測値を教師データとして活用することで、大気汚染予測に特化したガイダンスの構築に成功した。

PM2.5濃度予測においては、ガイダンスの導入によって決定係数は0.50–0.64となり27.4–48.6%増加、RMSDは5.9–7.1 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ となり22.8–49.5%減少、IOAは8.5–17.9%増加した。予測値の誤差を評価するNMEおよびMFEはそれぞれ16.5–38.5%、54.4–77.7%減少した。一方、予測値の偏差（バイアス）を評価するNMBおよびMFBはそれぞれ35.9–71.5%、28.9–72.1%減少した。また、ガイダンスによる補正によってBoylan and Russell (2006)が提唱するPM2.5濃度予測再現性の目標範囲を対象とした5つの都市全てで達成した。研究目標に掲げたRMSDおよびバイアスの20%減少をすべての都市で達成した。

オゾン濃度予測においては、ガイダンスの導入によって決定係数は0.67–0.77となり15.6–37.2%増加、RMSDは7.6–8.4 ppbとなり39.1–59.8%減少、IOAは7.0–55.0%増加し、すべての地点で0.9を超えた。予測値の誤差を評価するNMEおよびMFEはそれぞれ40.3–63.4%、28.9–51.2%減少した。一方、予測値の偏差（バイアス）を評価するNMBおよびMFBは30%を超える地点もあったが、それぞれ86.8–96.8%、51.6–96.5%減少し、すべての地点で6%未満となった。また、ガイダンスによる補正によってEmery et al. (2017) が提唱するオゾン濃度予測再現性の許容範囲を対象とした5つの都市全てで達成した。研究目標に掲げたRMSDおよびバイアスの20%減少をすべての都市で達成した。

これらガイダンスによる予測精度の向上は、PM2.5およびオゾン濃度の両者、研究対象とした5都市すべてで得られ、本研究で提唱するガイダンス手法の汎用性の高さを示した。VENUSへの導入とそれにとまう予測精度の向上が期待できる成果が得られた。

6．研究成果の発表状況

6－1．査読付き論文

<件数>

0件

<主な査読付き論文>

6－2．知的財産権

特になし

6－3．その他発表件数

査読付き論文に準ずる成果発表	0件
その他誌上発表（査読なし）	1件
口頭発表（学会等）	8件
「国民との科学・技術対話」の実施	1件
マスコミ等への公表・報道等	1件
本研究に関連する受賞	0件

7. 国際共同研究等の状況

特に記載すべき事項はない。

8. 研究者略歴

研究代表者

弓本 桂也

九州大学大学院総合理工学府大気海洋環境システム学専攻博士後期課程修了、気象庁気象研究所環境・応用気象研究部主任研究官、現在、九州大学応用力学研究所教授

研究分担者

1) 板橋 秀一

九州大学大学院総合理工学府大気海洋環境システム学専攻博士後期課程修了、現在、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

II. 成果の詳細

II-1 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

国立大学法人九州大学応用力学研究所 教授 弓本 桂也

一般社団法人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

[要旨]

国立環境研究所では大気汚染予測システム（VENUS）を運用し、光化学オキシダントやPM2.5等の早期警戒を呼びかけ、社会生活や健康に与える影響の抑制に貢献している。この大気汚染予測は、国民の健康影響への懸念を背景に社会インフラの重要な一部として認識されつつある。しかし、その予測精度は定量的に十分であるとは言えない。本課題では機械学習の技術を応用し、大気汚染物質広域監視システム（そらまめ君）で蓄積された観測データを学習することで、大気汚染予測システムの予測結果を補正する事後処理プロセス（ガイダンス）の開発を行った。

2013-2016年の4年分の観測値を教師データとして多層ニューラルネットワークに学習させることでガイダンスの構築を行った。学習期間外である2017年を対象に予測実験を行い、構築したガイダンスによる予測精度の変化を定量的に評価した。ガイダンスの構築はPM2.5および光化学オキシダント濃度予測を対象とし、日本中の5つの都市で行った。また、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った。

PM2.5濃度に対しては、決定係数が27.4-48.6%上昇、平均二乗誤差が22.8-49.5%減少した。偏差を測る規格化平均偏差および平均分割偏差はそれぞれ35.9-71.5%、28.9-72.1%減少した。Boylan and Russell (2006) の提唱した予測再現性の基準を用いた検証では、ガイダンスの適用により5都市全てで目標範囲を達成した。

光化学オキシダント濃度に対しては、決定係数が7.5-14.3%上昇、平均二乗誤差が39.1-59.8%減少した。偏差を測る規格化平均偏差および平均分割偏差は30%を超える地点もあったが、それぞれ86.8-96.8%、51.6-96.5%減少し、すべての地点で6%未満となった。Emery et al. (2017) の提唱した予測再現性の基準を用いた検証では、ガイダンスの適用により5都市全てで許容範囲を達成した。

以上の結果より、本研究で開発したガイダンス手法はPM2.5および光化学オキシダント濃度の予測精度向上に有効であることが示された。令和3年度開始の環境研究総合推進費課題「5MF-2201、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」にて実際のVENUSの予測結果を用いた実働実験を行う予定である。

1. 研究開発目的

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）や大気微量気体（オゾン等））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、大きな社会問題となっている。このような光化学オキシダントやPM2.5等の早期警戒を呼びかけ、社会生活や健康に与える影響の抑制し被害を低減するために、様々な現業・研究機関で化学輸送モデル（CTM）による数値シミュレーションを用いた“化学天気予報”が提供されている。例えば、国立環境研究所では大気汚染予測システム（VENUS）を運用し、社会インフラの重要な一部として認識されつつある。しかし、予測値と実測値の間に大きな乖離があり、その予測精度は定量的に十分であるとは言えない。

予測精度を左右するCTMの不確実性としては、モデルの系統誤差、初期条件に含まれる誤差、そしてCTMの特色として大気汚染の排出インベントリ（強度・分布）に含まれる誤差が挙げられる。申請者は、これまでにデータ同化技術を用い観測データと数値モデルを融合し、排出源と初期条件を最適化することで数値予測の精度向上に取り組んできた。しかし、これらはCTMのインプットや境界条件、すなわちモデルより上流における取り組みであり、モデル自体に含まれる誤差を修正することができない（図0.1、

左側部分)。このモデル系統誤差は依然として予測精度を大きく左右している。

本課題では数値天気予報に導入されているガイダンスの概念に着目した。ガイダンスとは、数値天気予報で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（視程や発電確率など）への変換を行う。しかし、光化学オキシダントやPM2.5濃度など大気汚染予測への導入例は殆どない。本研究では、機械学習（AI）技術を応用し、大気汚染物質広域監視システムで得られた膨大な観測データを教師データとすることで、化学天気予報に適した新しいガイダンスを構築、PM2.5および光化学オキシダント濃度予測の精度向上を実現することで、社会活動や健康に与える影響の低減に貢献する（図0.1右側部分）。

本課題の特色として以下の点があげられる。

- 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。
- 環境省および国立環境研究所と地方自治体が整備・展開を行ってきた大気汚染物質広域監視システム（AEROS）の膨大な観測データ（ビックデータ）を、機械学習（AI）の手法で大気汚染予測システムの精度向上につなげる新しい技術の開発である。
- 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。

2. 研究目標

機械学習（多層ニューラルネットワーク）技術を応用することで、大気汚染物質広域監視システムを学習させた化学輸送モデル（CTM）版のガイダンス手法の開発を行うことで、大気汚染予測システムによるPM2.5および光化学オキシダント予測（24および48時間先予測）の定量的な精度向上を実現する。従来の化学輸送モデルを用いた予測に対し、平均二乗誤差および平均バイアスを20%改善させることを目標とする。

3. 研究開発内容

図0.2 に本研究課題で構築したガイダンスの概念図を示す。機械学習（多層ニューラルネットワーク）を基に、化学輸送モデル（大気汚染予測システム）を入力データに、大気汚染物質広域監視システムで得られた観測値を教師データとして学習を行うことでガイダンスの構築を行った。

- 化学輸送モデル（大気汚染予測システム）

図1.1 に本研究で用いた化学輸送モデル（CTM）の設定を示す。本研究では、国立環境研究所が開発・運用を行っている大気汚染予測システム（VENUS）への将来的な導入を想定し、同システムに準拠したモデルの構築を行った。気象モデルにはWRF Ver 4.1.1を、化学物質輸送モデルにはCMAQ Ver 5.3.1を採用した。各種スキームや境界条件の設定等は極力VENUSに準拠するように設定した。計算領域の設定もVENUSにならい、3回のネスティングを行っている。機械学習によるガイダンス構築は領域3（d03）の予測結果を対象とした。水平解像度は5kmである。

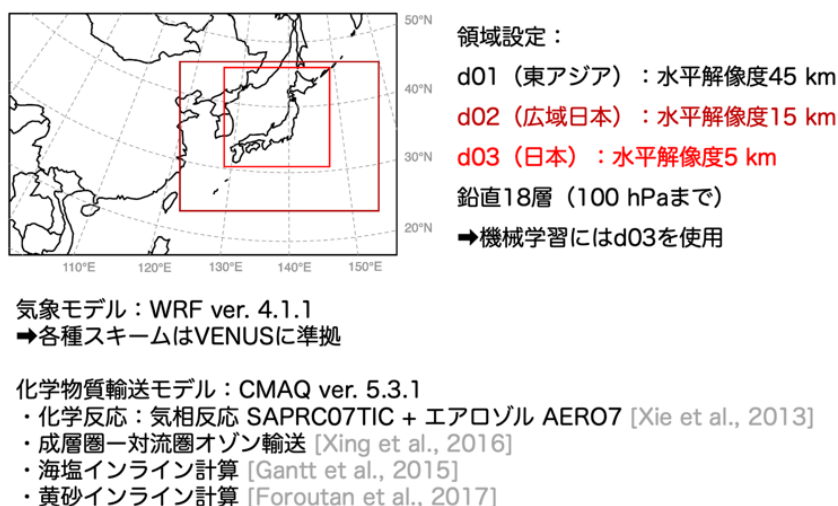


図1.1 化学輸送モデルの計算設定

● 教師データの取得と品質管理

教師データには、各都道府県が整備・展開し、国立環境研究所が2001年より運用している大気汚染物質広域監視システムで収集・蓄積された観測データを用いた。大気汚染物質広域監視システムでは2009年からの全国の大気汚染物質濃度の観測値が時間値として蓄積されている。本課題では、大気汚染物質広域監視システムで取得可能なデータのうち、光化学オキシダントおよびPM2.5濃度を利用する。観測データを国立環境研究所のwebページより取得・整理するとともに、異常値を取り除くデータの品質管理（早崎他、「大気汚染常時監視測定値の品質管理」⁽⁵⁾）を行った。

● ガイダンスの構築

機械学習手法としては多層ニューラルネットワークを採用し、以下の2つのタイプのガイダンスを検討する。

1. 予測値の補正を行う回帰モデル型ガイダンス（機械学習の“回帰手法”に着目）

大気汚染物質広域監視システムで得られた濃度データを教師データとした「教師あり学習」を通じて、CTMで予測されたPM2.5やオゾン濃度を補正する回帰モデルを構築する（図1.2）。これにより、モデルの系統誤差の修正を行い、濃度予測の精度向上を行う。入力データにはPM2.5やオゾン濃度だけではなく、気温や相対湿度、風向風速等の気象データも含める。ガイダンスの構築には多層ニューラルネットワーク（DNN）を用いた。再帰型ニューラルネットワーク（RNN）を用いた予備的な試験も行ったが、RNNは時間変化の激しい（突発的に急激な濃度上昇が生じる）PM2.5には不向きと判断し、ここではDNNを採用した。損失関数には平均二乗誤差（MSE）を、最適化アルゴリズムにはAdamを採用した。また、入力データ間の偏りを避けるために、すべての入力データに対し、標準化を行っている。

回帰モデル型ガイダンスの構築

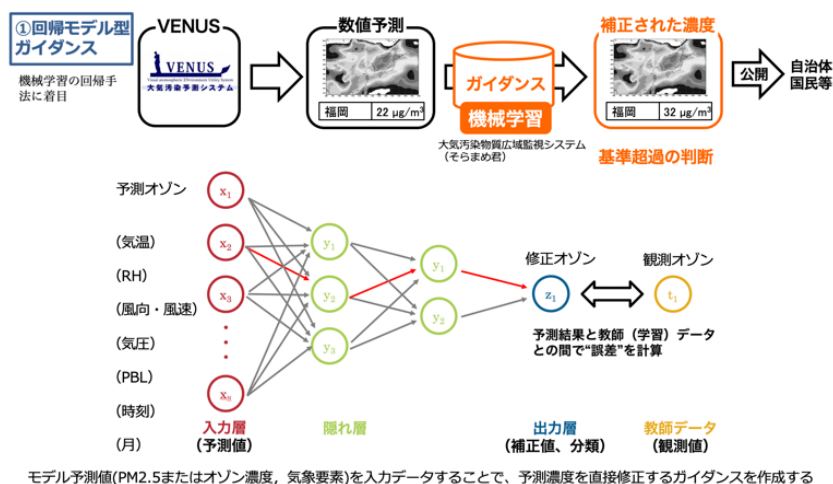


図1.2 回帰モデル型ガイダンスの概要

2. 予測値から基準超過を判断するクラス分类型ガイダンス (機械学習の“クラス分類”や“認識”に着目)

環境行政から見た場合、24時間先の正確な予測値が必要ではない場合がある。ここでは、機械学習が分類問題の解決に秀でる特徴に着目し、CTMの予測値を入力することで、翌日および翌々日における注意喚起等の基準の超過を判断するクラス分類モデルを構築する (図1.3)。回帰モデル型ガイダンスでは入力されたPM2.5予測濃度や気象データを直接修正していたが、クラス分类型ガイダンスでは入力されたPM2.5予測濃度や気象データ等から、観測データを教師データに、予め設定した濃度区分のうち、どの濃度区分のPM2.5が到来するかを予測する。クラス分类型の有名な例として、ユリの種類の分別がある。これは、ガクの長さや幅、花卉の長さ等を入力するとどのユリの種類か (たとえば、setosaやversicolorなど) を判別するものであるが、本研究では、モデルで予測されたPM2.5濃度、気温、相対湿度等を入力することで、どの濃度区分 (例えば、 $35\mu\text{g}/\text{m}^3$ 超) のPM2.5濃度が飛来するかを予測する。

クラス分类型ガイダンスの構築

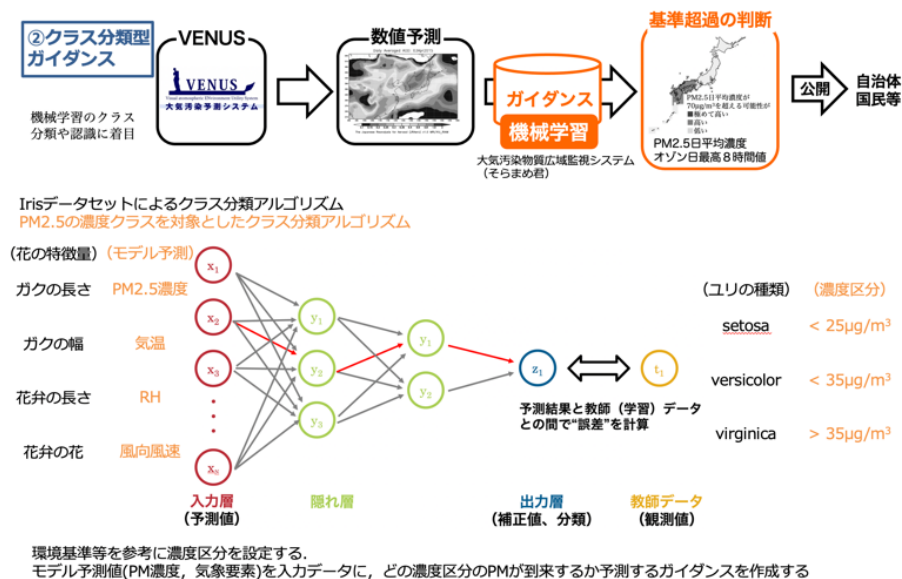


図1.3 クラス分类型ガイダンスの概要

ガイダンスの構築には、汎用プログラミング言語であるpythonを用い、オープンソース機械学習ライブラリであるPyTorchを利用することで、開発にかかる時間とコストを圧縮する。

● 学習と予測実験

図0.4 にガイダンスの構築と予測実験の過程について示す。ガイダンスの作成とその検証は2つのフェーズに分けることができる。教師データを用いてガイダンスを構築する「学習フェーズ」と、構築したガイダンスを予測に適用しそのパフォーマンスを検証・改良を行う「予測フェーズ」である。

「学習フェーズ」では2013–2016年の4年間を対象に機械学習を行い、ガイダンスの構築を行った。多層ニューラルネットワークの学習は、構築したCTMで予測されたPM2.5および光化学オキシダント濃度や気象場（VENUSの予測を再現と想定）を入力データに、大気汚染物質広域監視システムで得られ前述の品質管理を行ったデータを教師データとして行った。

「予測フェーズ」は構築したガイダンスを適用させ、そのパフォーマンスを検証し、ガイダンスの改良を行う過程である。学習期間外の2017年に対して行い、ガイダンスによる補正前後の予測濃度と大気汚染物質広域監視システムによる観測値を比較することで、そのパフォーマンスを定量的に評価する。ガイダンスの構築とその検証は東京、大阪、名古屋、福岡、新潟の5都市を対象に行った。

ガイダンスの検証と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)⁽⁶⁾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（ $MFE \leq 70\%$ かつ $MEB \leq \pm 60\%$ ）と目標範囲（ $MFE \leq 50\%$ かつ $MEB \leq \pm 30\%$ ）、および、Emery et al. (2017)⁽⁷⁾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（ $NME \leq 25\%$ かつ $NMB \leq \pm 15\%$ ）と目標範囲（ $NME \leq 15\%$ かつ $NMB \leq \pm 5\%$ ）も用いて評価を行った。

4. 結果及び考察

研究結果および考察について、2つのタイプ、すなわち回帰モデル型ガイダンスおよびクラス分類型ガイダンスについてそれぞれ記述する。

4. 1 回帰モデル型ガイダンス

● 入力データに対する感度実験

まず、入力データによるガイダンスのパフォーマンスについて調べた。図1.4 にPM2.5濃度予測における福岡を対象とした入力値を変えた感度実験の結果を示す。様々な入力データの組み合わせを試したが、PM2.5濃度に加え、気象要素として気温、相対湿度、オゾン濃度、風速成分（U, V）を与えると予測精度が最も向上する（ガイダンスとしてのパフォーマンスが最大になる）ことを発見した。風速成分に対しては、風速と風向を分けて与える実験も行ったが、南北・東西の風速成分を与えたほうが予測精度は向上した。また、気温や相対湿度は、PM2.5の生成等にかかわる環境の情報だけではなく、時刻や季節の情報のプロキシとなっていることが考えられる。一方、時刻や月の情報はガイダンスのパフォーマンスにほとんど影響を及ぼさなかった。

入力データ									相関係数		RMSD		MFE		MFB	
PM2.5	気温	相対湿度	オゾン濃度	地上気圧	PBL	風向	風速	風速成分	Gなし	Gあり	Gなし	Gあり	Gなし	Gあり	Gなし	Gあり
●									0.634	→ 0.634	12.187	→ 7.621	67.3	→ 35.1	-48.0	→ 15.9
●	●								0.634	→ 0.674	12.187	→ 7.302	67.3	→ 33.6	-48.0	→ 13.8
●		●							0.634	→ 0.695	12.187	→ 7.160	67.3	→ 32.6	-48.0	→ 14.1
●			●						0.634	→ 0.682	12.187	→ 7.234	67.3	→ 33.4	-48.0	→ 13.6
●				●					0.634	→ 0.686	12.187	→ 7.186	67.3	→ 32.6	-48.0	→ 12.4
●					●				0.634	→ 0.668	12.187	→ 7.352	67.3	→ 34.3	-48.0	→ 16.2
●						●	●		0.634	→ 0.684	12.187	→ 7.350	67.3	→ 32.9	-48.0	→ 14.8
●								●	0.634	→ 0.694	12.187	→ 7.136	67.3	→ 32.2	-48.0	→ 13.7
●	●	●	●					●	0.634	→ 0.727	13.187	→ 6.945	68.3	→ 30.7	-48.0	→ 13.4

※風速成分は南北・東西方向の風速を2つのデータとして入力、風向は風向を8つにわけ8つのデータとして入力
MFE=Mean Fractional Error (目標範囲: ≤ 50%, 許容範囲: ≤ 70%)
MFB=Mean Fractional Bias (目標範囲: ≤ ±30%, 許容範囲: ≤ ±60%) (Boylan and Russell, 2006)

図1.4 入力データを変えた予備感度実験の結果（PM2.5濃度予測に対して）。Gなしはガイダンスなし、Gありはガイダンスによる修正ありを表す。

オゾン濃度予測においては、PM2.5濃度予測で採用した気温、相対湿度、風速成分に加え、月や時刻を入力データとして加えると予測精度が向上する（ガイダンスのパフォーマンスが増大する）ことがわかった（図1.5）。これは、PM2.5濃度予測では見られなかった事象であり、オゾン濃度の予測においては、時刻と月がそれぞれ、オゾン濃度の日内周期変動や季節変動を再現する上で重要な情報となっていることが考えられる。

		相関係数	RMSD	IOA	NME	NMB	MFE	MFB
ガイダンスなし		0.772	20.86	0.60	53.6	52.3	49.6	48.1
時刻・月データなし		0.876	8.38	0.93	19.6	-2.2	24.2	1.7
時刻データあり	▲ +24	0.888	7.99	0.94	18.7	-1.9	23.4	2.4
月データあり	▲ +12	0.883	8.15	0.93	19.1	-2.7	23.8	1.0
時刻・月データあり	▲ +36	0.901	7.59	0.94	17.8	-3.3	22.4	-0.2

図1.5 時刻データを加えることによる予測精度向上の変化（オゾン濃度予測に対して）。Gなしはガイダンスなし、Gありはガイダンスによる修正ありを表す。

● PM2.5濃度予測に対する回帰モデル型ガイダンスの構築

図1.6 および図1.7 に福岡におけるPM2.5濃度の比較をそれぞれ時系列と散布図およびヒストグラムで示す。ガイダンスなし予測は、全体的に観測されたPM2.5濃度の変化を捉えているが、冬季は高濃度時に過大評価が、春季は過小評価が見られる。ガイダンスあり予測を見てみると、予測結果にガイダンスによる修正を行うことで、特に春季の過小評価（低濃度バイアス）が補正され、予測精度が大幅に向上していることがわかる。このモデルがもつ低濃度バイアスとガイダンスによる修正は予測値と測定値の差のヒストグラムからも明らかである。ガイダンスによって、決定係数は0.40から0.53に、平均二乗誤差(RMSD)は12.19 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ から6.16 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ に大幅に改善されている。一方、濃度が50 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ を超えるような高濃度イベントでは、ガイダンスを作用させてもほとんど効果が発揮されていない。これは、濃度が50 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ を超えるがそもそも少なく（福岡では全体の1.4%）、学習機会が少ないことが原因であると考えられる。

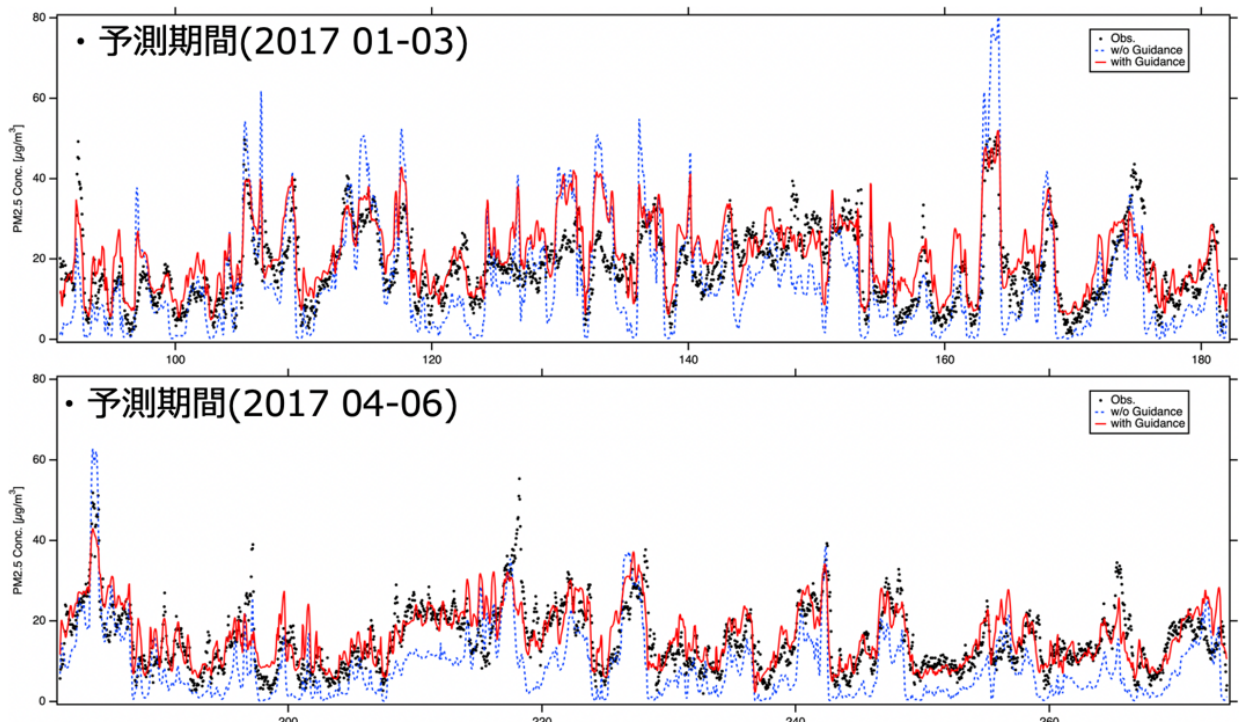


図1.6 福岡におけるPM2.5濃度の推移（予測期間）。それぞれ、観測値（黒丸）、ガイダンスなし予測（青破線）、ガイダンスあり予測（赤線）を表す。

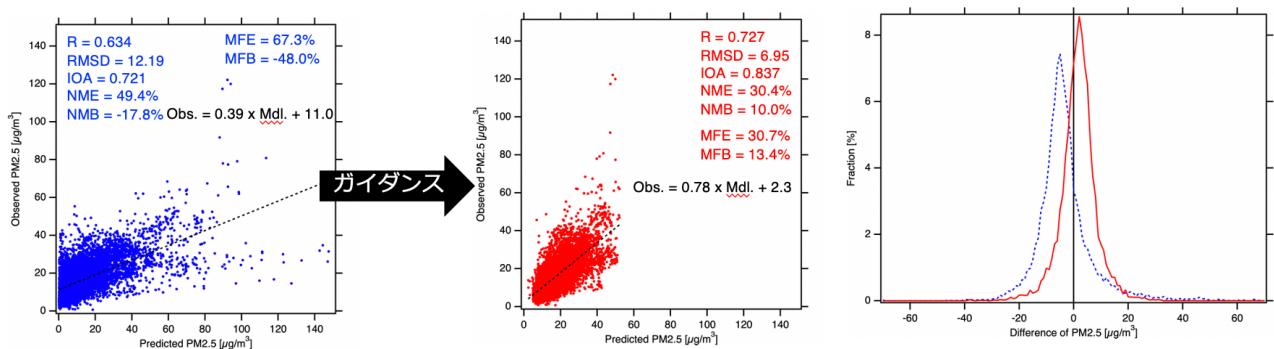


図1.7 観測値とモデル予測値の散布図（左）と予測値と測定値の差のヒストグラム（右）（PM2.5）。青点および青線はガイダンスなし、赤点および赤線はガイダンスあり。図中の数字は回帰直線および各種統計量。

図1.8 に他の地点におけるガイダンスなし予測（青）とガイダンスあり予測（赤）の精度比較を示す。ガイダンス適用前の予測値は、決定係数は0.36–0.50と地点間に大きなばらつきがある一方、RMSDは8.2–12.2 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ と大きく、すべての地点で負の偏差であった。改善の度合いは地点によって様々であるが、すべての地点で予測精度が改善しており、手法に汎用性があることが示された。ガイダンスの導入によって決定係数は0.50–0.64となり27.4–48.6%増加、RMSDは5.9–7.1 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ となり22.8–49.5%減少、IOAは8.5–17.9%増加した。予測値の誤差を評価するNMEおよびMFEはそれぞれ16.5–38.5%、54.4–77.7%減少した。一方、予測値の偏差（バイアス）を評価するNMBおよびMFBはそれぞれ35.9–71.5%、28.9–72.1%減少した。すべての地点でこれらすべての統計量が改善され、ガイダンスの汎用性が示された。また、研究目標に上げたRMSDおよびバイアスの20%減少をすべての地点で達成した。

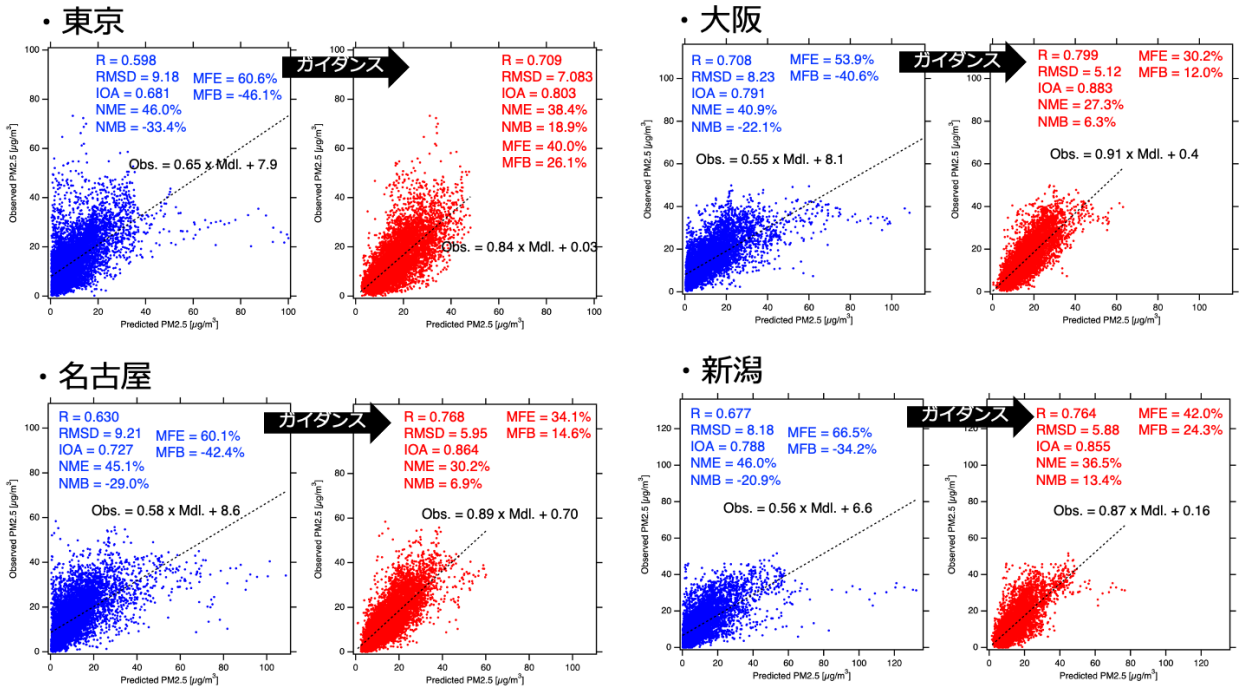


図1.8 各地点における観測値とモデル予測値の散布図 (PM2.5)。青点はガイダンスなし、赤点はガイダンスあり。図中の数字は回帰直線および各種統計量。

図0.3 にBoylan and Russell (2006)の予測再現性の許容範囲と目標範囲による検証を示す。Boylan and Russell (2006)はMean Fractional Error (MFE)およびMean Fractional Bias (MFB)の2つの指標を用い、PM2.5の数値シミュレーションに対する予測再現性の許容範囲と目標範囲を提唱した。MFE ≤ 50%かつMEB ≤ ±30%で目標範囲達成、MFE ≤ 70%かつMEB ≤ ±60%で許容範囲達成である。図0.3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はすべての地点で許容範囲を達成していたが、目標範囲を達成していた地点はなかった。ガイダンスによる修正を行うことで、全地点で予測精度が向上し、目標範囲を達成している。

● オゾン濃度予測に対する回帰モデル型ガイダンスの構築

図1.9 および図1.10 に福岡におけるオゾン濃度の比較をそれぞれ時系列と散布図およびヒストグラムで示す。ガイダンスなし予測は、全体的に観測されたオゾン濃度の変化を捉えているが、一年を通じて濃度を過大評価している。また、観測値に見られる日内周期変動を再現できているがその振幅は小さい。ガイダンスによる修正によって、オゾン濃度の過大予測が大幅に改善されている。また、日内周期変動の振幅の再現性も改善され、ピークとボトムの濃度が正確に予測できるようになっている。予測の過大バイアスは図1.10 のヒストグラムからも明らかであり、ほとんどの観測値に対してモデルはオゾン濃度を過大評価している。ガイダンスによって、決定係数は0.59から0.77に、平均二乗誤差(RMSD)は20.9 ppbから8.4 ppbと大幅に改善されている。過大バイアスがガイダンスによって減少している様子はNMBやMFBの改善や、ヒストグラムの形からも明らかである。

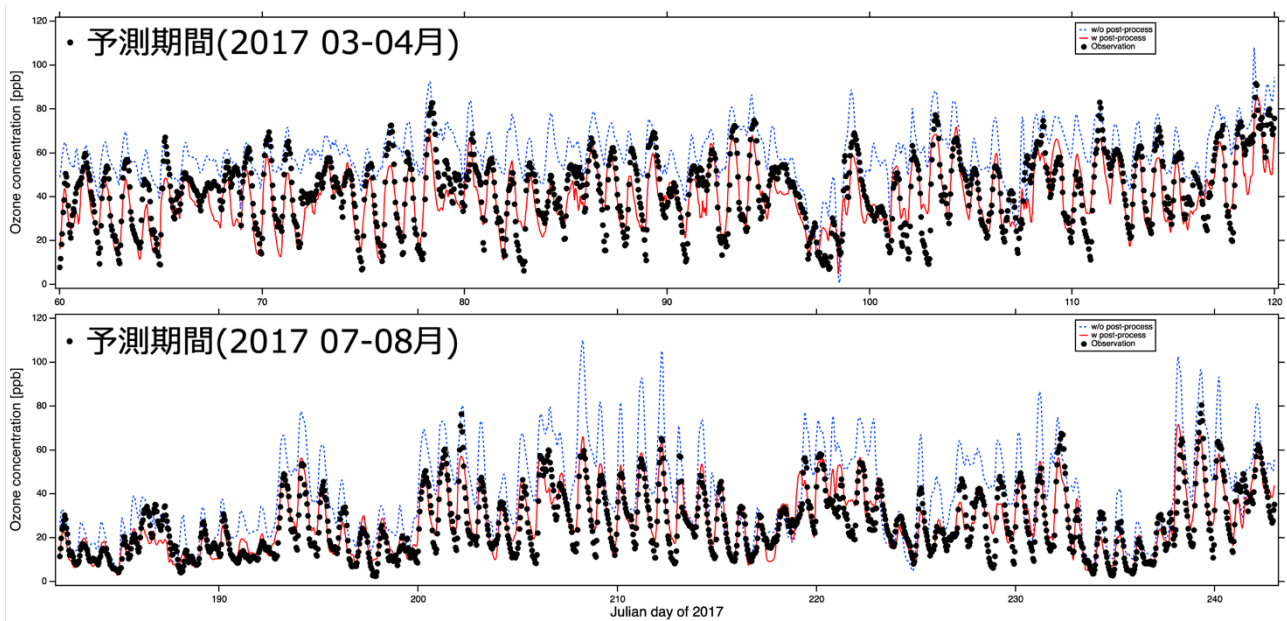


図1.9 福岡におけるオゾン濃度の推移（予測期間）。それぞれ、観測値（黒丸）、ガイダンスなし予測（青破線）、ガイダンスあり予測（赤線）を表す。

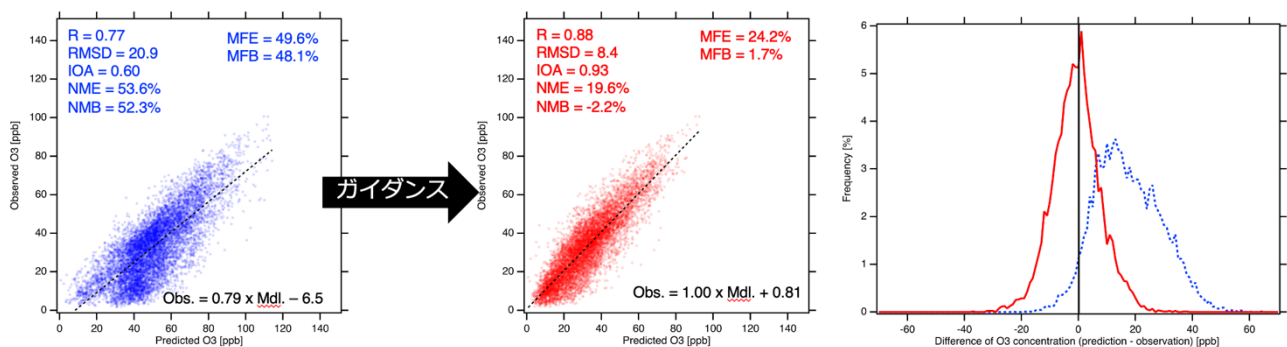


図1.10 観測値とモデル予測値の散布図（左）と予測値と測定値の差のヒストグラム（右）（オゾン）。青点および青線はガイダンスなし、赤点および赤線はガイダンスあり。図中の数字は回帰直線および各種統計量。

図1.11 に他の地点におけるガイダンスなし予測（青）とガイダンスあり予測（赤）の精度比較を示す。ガイダンス適用前のオゾン予測値は、決定係数は0.49–0.64とPM2.5濃度予測に比べて高い値を示したが、RMSDは13.4–20.9 ppbと大きかった。NMBやMFBすべての地点で正の値となり、PM2.5濃度予測と異なりオゾン濃度予測は正の偏差を持っていた。ガイダンスの導入によって決定係数は0.67–0.77となり15.6–37.2%増加、RMSDは7.6–8.4 ppbとなり39.1–59.8%減少、IOAは7.0–55.0%増加し、すべての地点で0.9を超えた。予測値の誤差を評価するNMEおよびMFEはそれぞれ40.3–63.4%、28.9–51.2%減少した。一方、予測値の偏差（バイアス）を評価するNMBおよびMFBは30%を超える地点もあったが、それぞれ86.8–96.8%、51.6–96.5%減少し、すべての地点で6%未満となった。すべての地点でこれらすべての統計量が改善され、ガイダンスの汎用性が示された。モデルの予測精度の低い地点（新潟、決定係数=0.49、IOA=0.52）でもガイダンスの導入によって他の地点と遜色のない予測精度が得られたことは特筆に値する。また、研究目標に上げたRMSDおよびバイアスの20%減少をすべての地点で達成した。

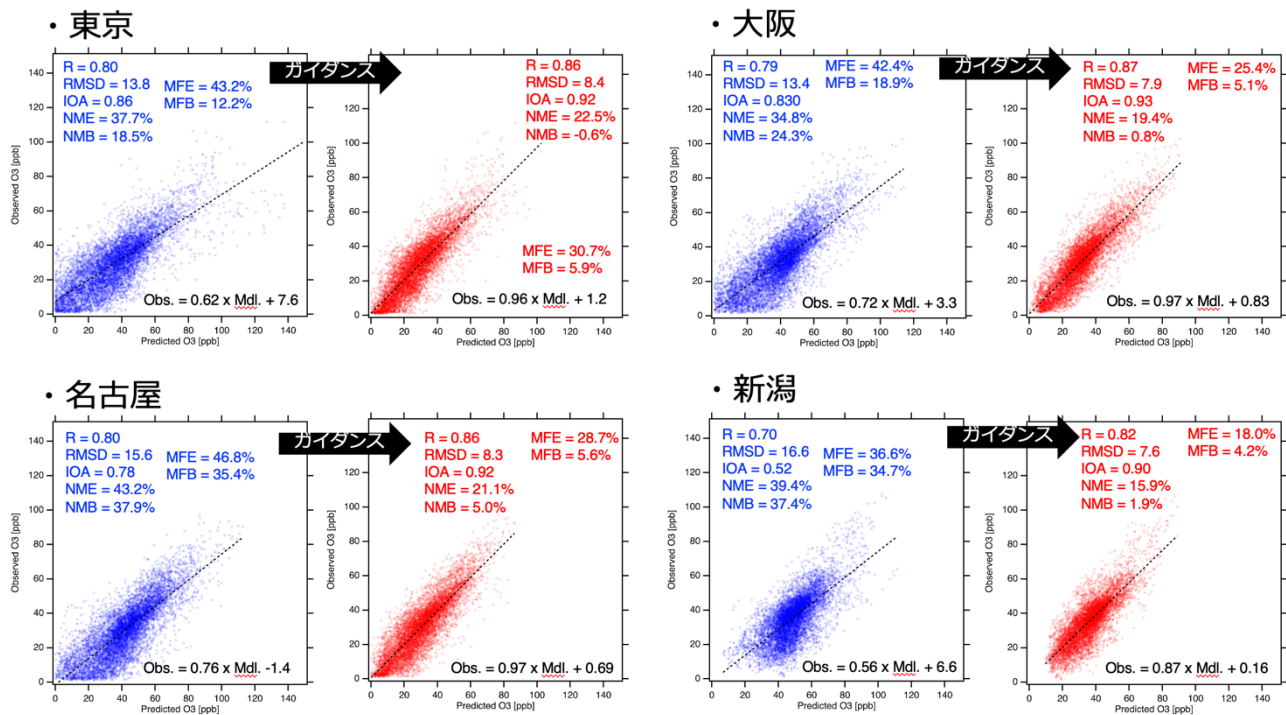
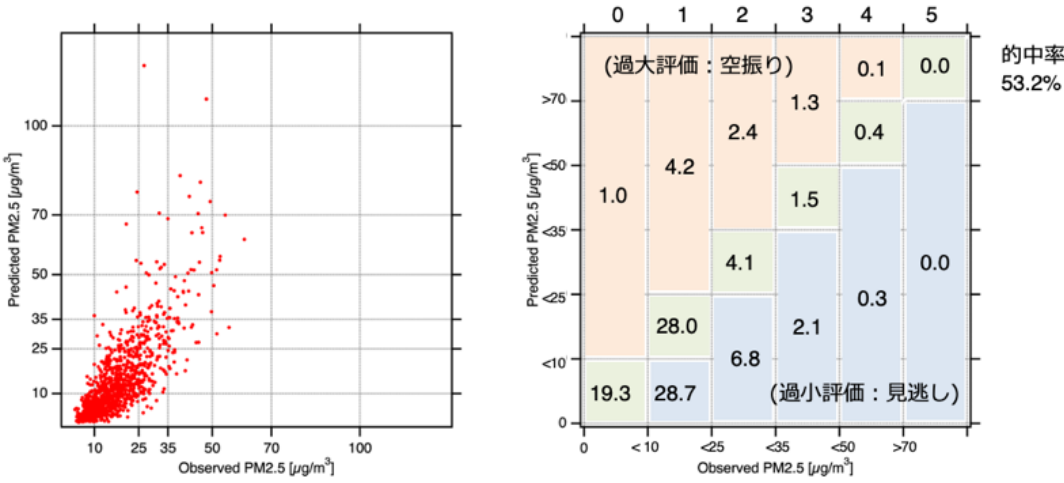


図1.11 各地点における観測値とモデル予測値の散布図 (PM2.5)。青点はガイダンスなし、赤点はガイダンスあり。図中の数字は回帰直線および各種統計量。

図0.4 にEmery et al. (2017)の予測再現性の許容範囲 ($NME \leq 15\%$ かつ $NMB \leq \pm 5\%$)と目標範囲 ($NME \leq 25\%$ かつ $NMB \leq \pm 15\%$)による検証を示す。図0.4 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はすべての地点で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を行うことで、予測精度が向上し、全地点で許容範囲を達成している。

4. 2 グラス分類型ガイダンス

回帰モデル型ガイダンスと同様に2013–2016年のデータを対象に、クラス分類型ガイダンスの構築と予備実験を行った。図1.3 に構築した回帰型ガイダンスの概要と設定を示す。ガイダンスの構築には多層ニューラルネットワーク (DNN) を用いた。回帰モデル型ガイダンスでは入力されたPM2.5予測濃度や気象データを直接修正していたが、クラス分類型ガイダンスでは入力されたPM2.5予測濃度や気象データ等から、観測データを教師データに、予め設定した濃度区分のうち、どの濃度区分のPM2.5が到来するかを予測する。図1.12 に設定した濃度区分を示す。ここでは、PM2.5濃度をWHOや日本の基準を参考にクラス0から5までの6区分に分類した。例えば、クラス0はPM2.5濃度が $10\mu\text{g}/\text{m}^3$ 未満の清浄大気、クラス2はPM2.5濃度が $25\mu\text{g}/\text{m}^3$ 以上 $35\mu\text{g}/\text{m}^3$ 未満のWHOの基準は超過するが、日本の環境基準は超過しない大気となる。左図は学習および予測の全期間をあわせた福岡におけるモデル予測値(縦軸)および観測値(横軸)の散布図である。右図は各濃度区分に含まれた事例の割合を示す。モデルの予測値には空振り (過大評価) や見逃し (過小評価) が見られ、的中率は53.2%であった。この空振りおよび見逃しを減少させ、的中率を下げられるかがクラス分類型ガイダンスのパフォーマンスとなる。



日平均値に対して、6つのクラスを設定
クラス0 $<10\mu\text{g}/\text{m}^3$: 清浄大気
クラス1 $\geq 10\mu\text{g}/\text{m}^3, < 25\mu\text{g}/\text{m}^3$: PMは到来するが、WHOの基準は超過しない
クラス2 $\geq 25\mu\text{g}/\text{m}^3, < 35\mu\text{g}/\text{m}^3$: WHOの基準は超過するが、日本の環境基準は超過しない
クラス3 $\geq 35\mu\text{g}/\text{m}^3, < 50\mu\text{g}/\text{m}^3$: 日本の環境基準を超過するPMが到来する
クラス4 $\geq 50\mu\text{g}/\text{m}^3, < 70\mu\text{g}/\text{m}^3$: 日本の環境基準を大幅に超過するPMが到来する
クラス5 $\geq 70\mu\text{g}/\text{m}^3$: 多岐にわたる影響が懸念されるPMが到来する

図1.12 クラス分類型ガイダンスの濃度区分

図1.13 に福岡におけるクラス分類型ガイダンスの適用結果を示す。上段は学習期間、下段は予測機関である。ガイダンスを適用することで、的中率は学習（予測）期間で51.8%から75.8%（56.2%から73.2%）に大きく改善された。ただし、この改善は主に低濃度（クラス0-2、 $35\mu\text{g}/\text{m}^3$ 未満）で顕著であった。高濃度域では空振り（モデルの過大評価）の改善は見られたものの、見逃し（過小評価）の改善には課題が残った。これは、回帰モデル型同様にそもそも高濃度イベントの割合が少なく、学習機会が十分に得られなかったことが原因としてあげられる。表1に他の6都市における結果を示す。概ねほとんどの都市で改善が見られ、手法の汎用性が確かめられた。他の都市でも福岡と同様に高濃度区分での改善に課題が残り、過学習が起りやすいことが確認された。

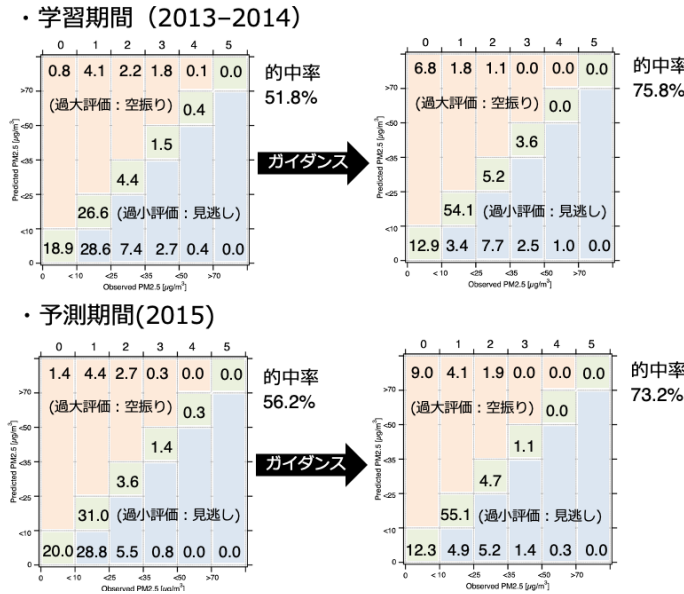


図1.13 福岡におけるクラス分類型ガイダンスの結果

表1.1 各地点におけるクラス分類型ガイダンスの結果

的中率[%]の推移

	学習期間		予測期間	
	Gあり	Gなし	Gあり	Gなし
東京	50.0	80.3	57.0	66.8
大阪	59.7	79.6	60.0	76.2
名古屋	52.3	76.6	58.4	71.8
札幌	74.2	82.9	80.6	84.0
仙台	57.6	81.3	67.9	70.7
新潟	61.2	81.4	72.2	71.9

より問題を単純化し課題を洗い出すために、前述の6クラスから、環境基準を超えるか超えないかの2クラスに絞った実験も行った。図1.14 に福岡における結果を示す。学習期間および予測期間において的中率は上昇し、ガイダンスによって予測精度が向上していることが確認されたが、PM2.5予測の要であるスレットスコア（まれな現象の予測を評価する際に用いられる）は予測期間においてはわずかな改善しか見られなかった。詳細に結果をみてみると、ガイダンスによって環境基準を超える濃度の空振り（FP）は減少し、これが的中率の上昇につながっている。見逃し（FN）はもともとその頻度が少ないためか改善は見られなかった。一方、環境基準を超える濃度の的中（TP）はガイダンス適用後も変わらず、この結果がスレットスコアの上昇を限定的なものにしている。すなわち、観測濃度が高い事例においてガイダンスの効果が薄いということができる。

・ クラスを環境基準（日平均値35μg/m³）を超えるか否かの2つに絞る

クラス0 <35μg/m³ : 清浄大気
 クラス1 ≥35μg/m³ : 環境基準を超過する

		観測	
		1	0
モデル	1	的中 (TP)	空振り (FP)
	0	見逃し (FN)	的中 (TN)

$$\text{的中率} = (TP + TN) / (TP + FP + FN + TN)$$

$$\text{スレットスコア} = (TP) / (TP + FP + FN)$$
 ※稀な現象の予測を評価するのに使われる

・ 学習期間（2013-2014）

		観測	
		1	0
モデル	1	29	21
	0	22	658

的中率=94.1, スレットスコア=0.403

ガイダンス

		観測	
		1	0
モデル	1	33	10
	0	18	669

的中率=96.2, スレットスコア=0.541

・ 予測期間(2015)

		観測	
		1	0
モデル	1	7	16
	0	3	339

的中率=94.8, スレットスコア=0.269

ガイダンス

		観測	
		1	0
モデル	1	7	11
	0	3	344

的中率=96.2, スレットスコア=0.333

図1.14 福岡におけるモデル区分型ガイダンスの結果（2クラス）

以上の結果より、本研究で開発したガイダンス手法はPM2.5および光化学オキシダント濃度の予測精度向上に有効であることが示された。令和3年度開始の環境研究総合推進費課題「5MF-2201、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」にて実際のVENUSの予測結果を用いた実働実験を行う予定である。

5. 研究目標の達成状況

以下の成果より「目標を上回る成果をあげた」と評価できる。

機械学習（AI）の技術を応用し、大気汚染物質広域監視システムで蓄積された観測値を教師データとして活用することで、大気汚染予測に特化したガイダンスの構築に成功した。

PM2.5濃度予測においては、ガイダンスの導入によって決定係数は0.50–0.64となり27.4–48.6%増加、RMSDは5.9–7.1 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ となり22.8–49.5%減少、IOAは8.5–17.9%増加した。予測値の誤差を評価するNMEおよびMFEはそれぞれ16.5–38.5%、54.4–77.7%減少した。一方、予測値の偏差（バイアス）を評価するNMBおよびMFBはそれぞれ35.9–71.5%、28.9–72.1%減少した。また、ガイダンスによる補正によってBoylan and Russell (2006)が提唱するPM2.5濃度予測再現性の目標範囲を対象とした5つの都市全てで達成した。研究目標に掲げたRMSDおよびバイアスの20%減少をすべての都市で達成した。

オゾン濃度予測においては、ガイダンスの導入によって決定係数は0.67–0.77となり15.6–37.2%増加、RMSDは7.6–8.4 ppbとなり39.1–59.8%減少、IOAは7.0–55.0%増加し、すべての地点で0.9を超えた。予測値の誤差を評価するNMEおよびMFEはそれぞれ40.3–63.4%、28.9–51.2%減少した。一方、予測値の偏差（バイアス）を評価するNMBおよびMFBは30%を超える地点もあったが、それぞれ86.8–96.8%、51.6–96.5%減少し、すべての地点で6%未満となった。また、ガイダンスによる補正によってEmery et al. (2017) が提唱するオゾン濃度予測再現性の許容範囲を対象とした5つの都市全てで達成した。研究目標に掲げたRMSDおよびバイアスの20%減少をすべての都市で達成した。

これらガイダンスによる予測精度の向上は、PM2.5およびオゾン濃度の両者、研究対象とした5都市すべてで得られ、本研究で提唱するガイダンス手法の汎用性の高さを示した。VENUSへの導入とそれにとまう予測精度の向上が期待できる成果が得られた。

6. 引用文献

- 1) Xie, Y., et al. "Understanding the impact of recent advances in isoprene photooxidation on simulations of regional air quality." *Atmospheric Chemistry and Physics* 13.16 (2013): 8439-8455.
- 2) Xing, Jia, et al. "Representing the effects of stratosphere–troposphere exchange on 3-DO 3 distributions in chemistry transport models using a potential vorticity-based parameterization." *Atmospheric Chemistry and Physics* 16.17 (2016): 10865-10877.
- 3) Gantt, B., J. T. Kelly, and J. O. Bash. "Updating sea spray aerosol emissions in the Community Multiscale Air Quality (CMAQ) model version 5.0. 2." *Geoscientific Model Development* 8.11 (2015): 3733-3746.
- 4) Foroutan, H., et al. "Development and evaluation of a physics-based windblown dust emission scheme implemented in the C MAQ modeling system." *Journal of advances in modeling earth systems* 9.1 (2017): 585-608.
- 5) 早崎将光, 菅田誠治, “大気汚染常時監視測定値の品質管理”, 第56回大気環境学会年会講演要旨集 (3G1545) (2015).
- 6) 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.
- 7) 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.

Ⅲ. 研究成果の発表状況の詳細

(1) 誌上発表

<査読付き論文>

特に記載すべき事項はない。

<査読付論文に準ずる成果発表>

特に記載すべき事項はない。

<その他誌上発表（査読なし）>

1) 板橋秀一、大気環境学会誌(資料)57 巻, 1 号, A56-A61(2022)COVID-19 の感染拡大・対策に伴う大気質変化

(2) 口頭発表（学会等）

1) Fujita, R., Yumimoto K. et al.: Modification of PM2.5 Forecasting with Deep Learning, *22nd Cross Straits Symposium on Energy and Environmental Science and Technology*, Virtual Platform, 2-3 December, 2020.

2) Yumimoto, K.: Aerosol assimilation/forecasting in Japan, *NASA ACCP Air Quality Virtual Workshop*, Virtual Platform, March 16-18, 2021

3) 藤田瞭紀、弓本桂也、他：機械学習によるPM2.5予測精度向上に関する研究、大気環境学会九州支部第21回研究発表会、オンライン開催、2021年3月12日

4) 板橋秀一、第62回大気環境学会年会 株式会社ROKI公開シンポジウム「COVID-19 と大気環境」（オンライン開催）(2021)COVID-19 の感染拡大・対策に伴う大気質変化

5) 弓本桂也：機械学習によるPM2.5予測精度向上に関する研究、第38回エアロゾル科学・技術討論会、オンライン開催、2021年8月26-27日

6) 弓本桂也：エアロゾル版再解析プロダクトの開発と長期変動研究への応用、第38回エアロゾル科学・技術討論会、オンライン開催、2021年8月26-27日

7) 弓本桂也、板橋秀一、早崎将光：機械学習によるPM2.5予測精度向上に関する研究、第38回エアロゾル科学・技術討論会、オンライン開催、2021年8月26-27日

8) 弓本桂也、板橋秀一、早崎将光：機械学習による大気汚染予測精度向上に関する研究、第62回大気環境学会年会、オンライン開催、2021年9月15-17日

(3) 「国民との科学・技術対話」の実施

1) 弓本桂也：東アジアの大気環境予測について、第9回STI政策シンポジウム「総合知で創る東アジアの環境イノベーション」（主催：九州大学科学技術イノベーション政策教育研究センター、2022年3月10日アクロス福岡大会議室、現地50名、オンライン300名）

(4) マスコミ等への公表・報道等>

1) NHK WORLD-JAPAN 『BOSAI: Science that can save your life / #15 PM2.5』（2022年3月5日、PM2.5予測の現状と予測精度改善に向けた取り組みについて説明）

(5) 本研究費の研究成果による受賞

特に記載すべき事項はない。

IV. 英文Abstract

Development of Post-processing for Chemical Weather Forecasting using Machine Learning Method

Principal Investigator: Keiya YUMIMOTO

Institution: Research Institute for Applied Mechanics, 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

[Abstract]

Key Words: Machine learning, PM2.5, Photochemical oxidant, Guidance, Air pollution forecasting system, big data, Atmospheric Environmental Regional Observation System

The National Institute for Environmental Studies (NIES) operates an air pollution forecasting system (VENUS) to call for early warning of photochemical oxidants and PM2.5, thereby contributing to reducing their impact on social life and health. This air pollution forecasting is increasingly recognized as an important part of the social infrastructure against the backdrop of public concern over health effects. However, its forecasting accuracy is not quantitatively sufficient. 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 observation data accumulated by Atmospheric Environmental Regional Observation System (AEROS).

The guidance was constructed by training a multilayer neural network using four years of observed data from 2013-2016 as teacher data. Forecasting experiments were conducted for the year 2017, which is outside the training period, to quantitatively evaluate changes in forecast accuracy using the constructed guidance. The guidance was constructed for PM2.5 and photochemical oxidant concentration forecasts and was performed for five cities across Japan. In addition, a chemical transport model and calculation setups identical with those used in VENUS were employed to develop the system for implementation in VENUS.

For PM2.5 concentration forecast, the determination coefficient increased by 27.4-48.6% and the mean squared error decreased by 22.8-49.5%. Validation using the model performance criteria proposed by Boylan and Russell (2006) showed that the application of the guidance achieved the model performance goal in all five cities.

For photochemical oxidant concentrations, the determination coefficient increased by 7.5-14.3% and the mean squared error decreased by 39.1-59.8%. Normalized mean bias and mean fractional bias, which measure deviations between observation and forecast, decreased by 86.8-96.8% and 51.6-96.5%, respectively. Validation using the model performance criteria proposed by Emery et al. (2017) showed that the application of the guidance achieved the model performance criteria in all five cities. These results indicate that the guidance method developed in this study is effective in improving the prediction accuracy of PM2.5 and photochemical oxidant concentrations.