

海洋観測データの異常検知における データ合成の有用性の基礎検討

○ 井手上 陽祐 (鹿児島大学) 福井 健一 (大阪大学)
細田 滋毅 (海洋研究開発機構) 小野 智司 (鹿児島大学)

A Preliminary Study on the Effectiveness of Data Augmentation on Error Detection of Ocean Observation Data

*Yosuke Idenoue (Kagoshima University), Ken-ichi Fukui (Osaka University),
Shigeki Hosoda (Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology),
Satoshi Ono (Kagoshima University)

Abstract– Ocean observation data has been used for analyzing and forecasting global warming and climate changes. The globally-covered ocean observation system Argo including more than 3,800 floats is an international project aiming at real-time acquisition of global ocean data. Argo system realizes automatic observation inside the ocean; however, Argo floats sometimes fail in observation and, in such cases, the data includes inaccurate observation values. A few attempts have been studying automatic quality control comparable to human experts; however, the amount of error observation data is much less than normal data, which makes it difficult to apply machine learning techniques. Therefore, this paper attempts to apply data augmentation techniques to error detection of Argo float data.

Key Words: data augmentation, sequential data, machine learning, error detection, ocean observation

1 はじめに

地球温暖化や異常気象などの気候変動のメカニズムはまだ十分に理解されていないが、変動の要因として、海洋が強く関係していると考えられている。これは、海洋が大気の1,000倍もの熱容量を持ち、大気の状態を大きく変化させうるためである。このため、海洋内部の状態を把握することは、長期的な気候変動の予測や解明に寄与する。2000年に30ヶ国以上の海洋・気象機関によって国際アルゴ計画が始動され¹⁾、3,800を超える自律移動フロート（アルゴフロート）が海洋内部の観測を行っている。

アルゴフロートにより自動観測された海洋データは、予期しないエラーを含むことがある。このため、観測の信頼性を表す指標として、観測値ごとに品質管理フラグが導入されている。エラーの除去、訂正を行うために、観測値に対して様々な歴史的観測データ²⁾等を用いて観測エラーを検知し、補正を行う自動的な品質管理が行われている（Real-time Quality Control: RQC）。しかし、自動品質管理においてすべての観測エラーを検知することは困難であり、最終的に専門技術者により目視で確認が行われている（Delayed-mode Quality Control: DQC）。現在の手動の品質管理は、人間の専門家の経験則に依存するため、世界中の海洋観測データの品質を統一することは困難である点が問題となっている。

このような海洋観測データの異常（本研究では、異常という言葉を観測エラーと同義の言葉として扱う）を検知するために、機械学習を用いた異常検知方式が提案されている。上川路らは条件付確率場を用いた方

式を提案した³⁾。また、林らは空間的自己相関を考慮した方式を提案した⁴⁾。近年は深層ニューラルネットワークを中心とする機械学習技術が急速な発展を遂げており、海洋観測データに対するさらなる機械学習の応用が期待される。しかし、海洋観測データにおいて異常を含むデータの量は、正常な観測データと比較して極めて少ないため、深層ニューラルネットワークの適用が容易ではない。

一方で、機械学習技術は、トレーニングデータの合成（データ拡張、水増し、Data augmentation）によって性能が向上することが知られている。コンピュータビジョン（Computer Vision: CV）などの分野においては、データ合成の有用性が示されている⁵⁾が、時系列データにおけるデータ合成技術に関する研究は比較的行われていない⁶⁾。海洋観測データにおけるデータ合成の有用性も明らかにされていない。

本研究では、全球観測データの自動かつ高精度な品質管理手法の実現を目指し、機械学習を用いた海洋観測データの異常検知技術を提案する。特に、訓練データの合成方式の導入により、ニューラルネットワークやより大量のデータを要求する深層ニューラルネットワークの適用を試みる。アルゴフロートによる観測データは、プロファイル単位では10%程度の割合で観測異常が含まれるものの、その多くが観測層の一部のみにおいて観測異常を含む。このため、層ごとに観測データを分割して訓練データとすると、異常データの量は正常データと比較して2%程度まで減少し、不均衡さが深刻化する。提案手法は、擬似的な観測異常を含むデータを合成することにより、上記の不均衡さを改善する。

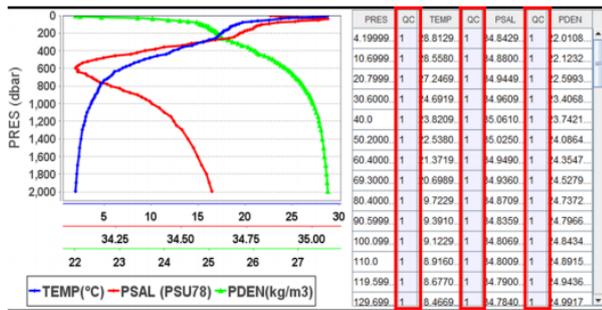


Fig. 1: Example profile of Argo observation data.

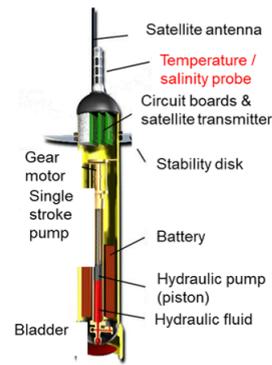
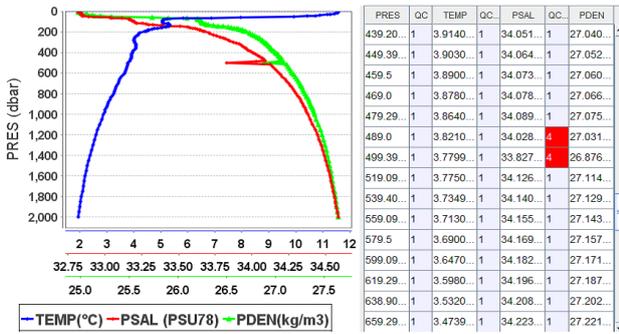
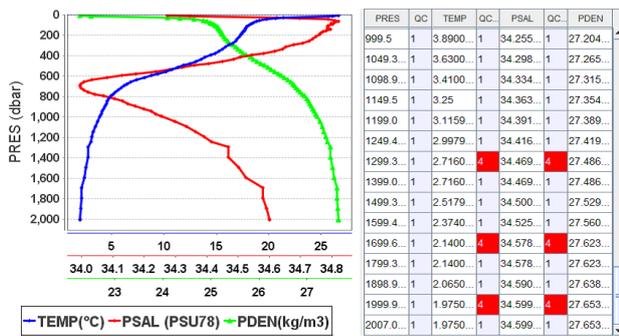


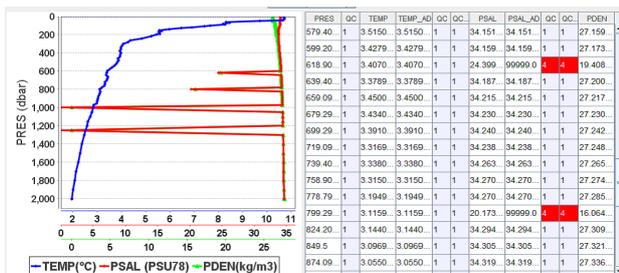
Fig. 3: Argo float ¹



(a) Density inversion error



(b) Equivalence error



(c) Outlier error

Fig. 2: Examples of Argo observation errors.

実験により、データ合成を用いることで、浅層、中層において異常検知の精度が向上することを確認した。

2 関連研究

2.1 アルゴ計画

全球海洋監視システム「アルゴ」は、「アルゴ計画」のもとで運営される国際プロジェクトであり、2000年より全球観測データのリアルタイムな取得を目的として開始された。このプロジェクトでは、全球アルゴ観測網を実現するために、アルゴフロートと呼ばれる自

動昇降型の海洋観測ロボット Fig. 3 を海へ投入し、海洋内部の基本的な物理量である水温や塩分の自動観測を行っている。

アルゴフロートには自身の浮力を調整する機能が内蔵されている。海中に投入されると、海流の影響が少ない漂流深度（通常 1,000[m]）まで沈む。一定期間（通常 10 日間程度）漂流深度で漂流した後、観測最深層（通常 2,000[m]）まで降下してから海面に浮上する間に水温や塩分等の鉛直分布を観測する。海面浮上後にアンテナから電波を発射して衛星経由で観測データを伝送する。通信が終わると、再び漂流深度まで沈む。このような沈降、浮上サイクルを約 140 回、通常の設定で 3~4 年にわたって繰り返すように設計されている。

2.2 アルゴフロートによる観測データ

アルゴフロートが 1 回の観測で得たデータの単位をプロファイルと呼ぶ。1つのプロファイルには水温、塩分等の観測値が含まれ、また、それらの値の品質管理フラグが与えられる。品質管理に用いられる主なフラグの種類として、1（正）2（おそらく正）、3（おそらく誤）、4（誤）の 4 段階の信頼性と、観測予定の水深で観測を行えなかったことを表す 9 が使用される。

観測データの例を Fig. 1 に示す。縦軸は水圧 [dbar] であり、観測深度とおおよそ同義である。青色のグラフは水温 [°C]、赤色のグラフは塩分 [PSU - 78]、緑色のグラフは密度 [kg/m³] を表す。密度は、水温と塩分から算出される値であり、単調増加するという特徴を持つ。

上川路らはアルゴフロートによる観測データのエラーを 13 種類に分類した³⁾。主なエラーの例を Fig. 2 および下記に示す。

(1) 密度逆転エラー 密度逆転エラーの例を Fig. 2(a) に示す。密度逆転は、ハードウェア・ソフトウェアの問題、汚濁物質や生物の付着などの環境場に起因して観測不良が発生するエラーである。密度は、水温と塩分から算出される値であり、深度方向に単調増加する特徴がある。そこで、海面から 2,000[dbar] までの観測層のうち、ある閾値より大きな鉛直密度の重軽の関係が逆転する場所を検知することでエラーを検知し、そ

¹<https://www.euro-argo.eu/Outreach/Education/On-the-way-to-an-oceanic-treasure-hunt/How-Argo-Floats-work>

の深度を特定する。密度逆転は、水温または塩分のどちらか一方の観測不良によって引き起こされることが多く、上下層の値の関係で決まる。一方で、自然現象に伴う変動が含まれるため、観測不良と自然現象を切り分ける必要があり、判断が困難である。

(2) 同値エラー 同値エラーは、連続した観測層で同じ観測値が格納されるエラーのことである (Fig. 2(b)). アルゴフロートが観測する際に、電圧低下により観測が行われず、前の観測した値がそのままコピーされることがある。ただし、連続した観測層間の水圧値の差が小さい場合は許容され、フラグ4(誤)が割り当てられないこともある。

(3) 外れ値エラー 外れ値は、観測した値が正常な範囲を外れている場合を指す (Fig. 2(c)). この観測エラーは、単層にのみエラーフラグを割り当てることが多い。

2.3 海洋観測データの異常検知

海洋観測データの異常検知のために、上川路らはアルゴフロートによる品質管理を系列ラベリング問題ととらえ、条件付確率場 (Conditional Random Field: CRF) に基づく系列ラベリング方式を提案した³⁾。CRFは、隠れマルコフモデル (Hidden Markov Model: HMM) と比較して、様々な素性を同時に設計できる点に特徴がある。

林らは、空間的自己相関を考慮した海洋データのエラー検知フレームワークを提案した⁴⁾。正常である訓練データ (水温または塩分のプロファイル) が与えられたとき、テストデータの異常度を出力する。一般的な異常検知手法が適用可能であり、また、不均衡問題を受けず、様々な変動が存在する海洋データの未知のエラーに対応可能になる。

2.4 データ合成

機械学習の分野では、訓練データを増やすこと (データ合成) によって、性能が向上することが知られている。mixupはZhangらによって提案されたデータ合成手法である⁷⁾。訓練データのペアとそのラベルを凸結合させることで新たな訓練データを合成する。前原らは気象時系列データの変化点検知において、人工データの合成手法を提案した⁸⁾。教師信号を持たないデータから教師信号付きの学習データを合成できる点に特徴がある。

3 データ合成と機械学習を用いた海洋観測データの異常検知

3.1 概要

本研究は、機械学習とデータ合成技術を用いた海洋観測データの異常検知手法を提案する。海洋観測データは、正常なデータに比べて異常なデータが少なく、不均衡データである。このため、異常なデータを合成することにより、異常検知の精度向上を試みる。

本手法の概要を Fig. 4 に示す。本手法は大きく分類して訓練段階と推論段階の2段階に分けられる。訓練

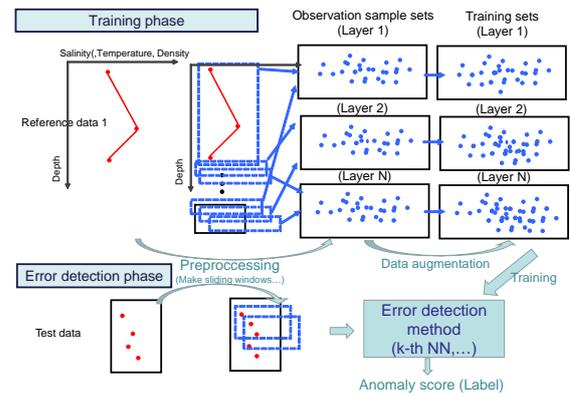


Fig. 4: Process flow of the proposed method.

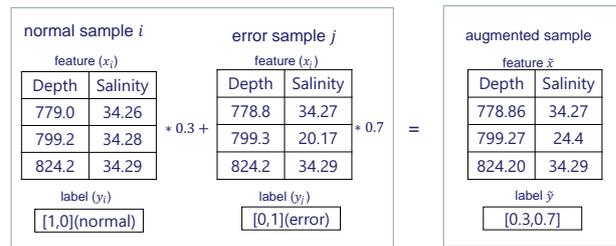


Fig. 5: Example of data augmentation by augmentation method 1 ($\lambda=0.3$)

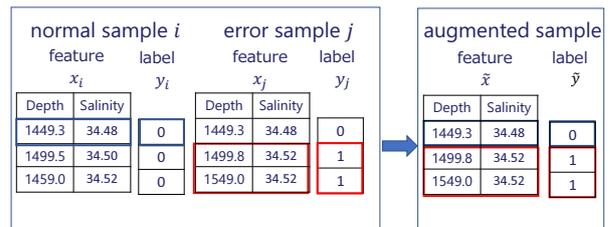


Fig. 6: Example of data augmentation by augmentation method 2

段階では、訓練データを用いて異常検知モデルの学習を行う。推論段階では、学習済みのモデルを用いて推論を行う。学習段階は、前処理、データ合成、および、モデルの訓練の段階から構成される。それぞれについて、次節以降で述べる。

3.2 前処理

前処理として、深度ごとのスライド窓集合の生成を行う。訓練データに対してスライド窓変換を行い、深度方向にスライド窓幅に相当する層数の特徴量を得る。なお、先行研究⁴⁾では、観測値に対して深度方向の線形補間を行った後にスライド窓に分割を行っていたが、本研究では、同値エラーを適切に検出するために、補間を行わない。また、スライド窓幅を10、オフセットを1と設定する。スライド窓変換を行う際は、スライド窓内の全層における観測値のフラグが正常フラグからなる場合のみ、スライド窓に正常フラグを付与し、いずれかの層に異常なフラグを含む場合はスライド窓に異常なフラグを付与する。

上記のようにしてスライド窓ごとに切り出された事例から、観測終了深度に基づいて浅層0~250[m]、中

層 250~650[m], 深層 650~2,000[m] における事例を集め, その層における訓練事例集合とする.

3.3 データ合成

前処理によって生成された訓練事例集合に対して, データの合成を行う. データ合成はスライド窓変換後の各深度における訓練事例集合内で行う. すなわち, 深度が異なる事例同士のデータ合成は行わないものとする.

本研究では, 下記に示す 2 通りの合成方式を利用する. なお, 合成元的事例をランダムに抽出する方法は, どちらも同じとし, 非復元抽出で行う.

(1) データ合成方式 1 Zhang らによって提案されたデータ合成方式⁷⁾を海洋観測データに適用する. データ合成の概要を Fig. 5 に示す. まず, 同深度におけるスライド窓変換後の事例をランダムに 2 つ選択する. 次に各特徴量を式 1 に示すように凸結合することで合成事例を得る.

$$\begin{aligned}\tilde{x} &= \lambda x_i + (1 - \lambda)x_j \\ \tilde{y} &= \lambda y_i + (1 - \lambda)y_j\end{aligned}\quad (1)$$

ここで, (x_i, y_i) と (x_j, y_j) は学習データからランダムに抽出された 2 つのサンプルである. また, λ は, ベータ分布 $Beta(\alpha, \alpha)$ から得られるランダムな値であり, $\lambda \in [0, 1]$ である. α は, 補間の強さを制御するハイパーパラメータである. なお, 本方式では, 正常なサンプル同士の合成は行わないものとする.

(2) データ合成方式 2 前原らによって提案されたデータ合成方式⁸⁾を海洋観測データに適用する. 本方式は, 教師信号を持たないデータから教師信号付きのデータを生成できる点に本来の特徴を有するが, 本研究では, 教師信号付きデータに適用して異常な事例を合成する. データ合成の概要を Fig. 6 に示す. 図中のラベル 0 はその観測点が正常であることを意味しており, ラベル 1 はその観測点が異常であることを意味する. まず, 訓練事例集合の中から正常な事例と異常な事例とを 1 事例ずつランダムに選択する. 次に, 正常な事例の一部を, 異常な事例の異常箇所絶対値で置き換えることにより, 新たな異常事例を合成する.

3.4 観測エラーの検知

異常の検知を行う段階では, 前処理段階及びデータ合成段階で得られた, 各深度における事例集合を訓練データセットとして異常検知手法の学習を行う. 本研究では, 異常検知手法として, kNN, MLP 及び MLSTM-FCN を用いる. なお, 異常検知モデルを学習させる前に, 訓練データセットに対して, 標準化を行う.

(1) kth Nearest Neighbor (kNN) kNN は, 距離ベースの異常検知手法である⁹⁾. kNN は, 統計的手法が必要とするデータ分布の事前知識を必要としない点に特徴がある. 提案方式では, 参照サンプルが教師信

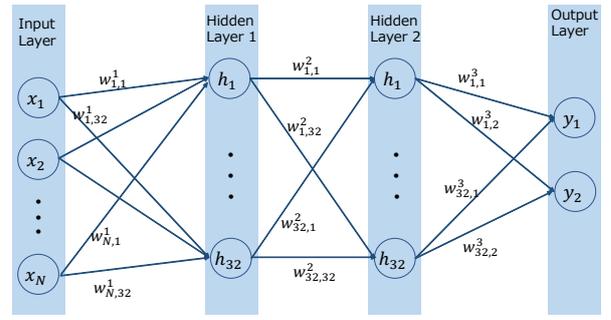


Fig. 7: Architecture of MLP

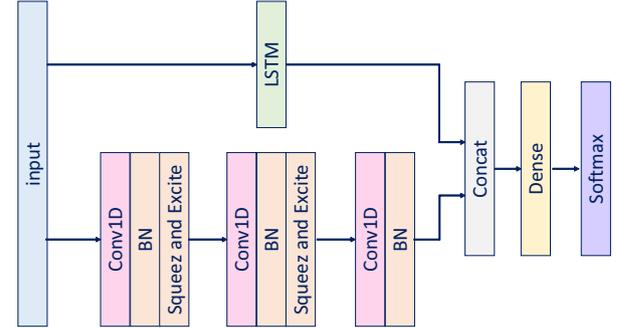


Fig. 8: Architecture of MLSTM-FCN

号を持つため, テストサンプル \mathbf{x} の異常度 $S(\mathbf{x})$ を式 (2) のように定義する.

$$S(\mathbf{x}) = \begin{cases} d_k & \text{if } y_{d_k} = 0 \wedge |\mathcal{N}^k| \geq \frac{k}{2} \\ C & \text{otherwise} \end{cases}\quad (2)$$

d_k はテストサンプルから k 番目に近いデータ点までの距離であり, y_{d_k} は k 番目に近いサンプルのラベルを表す. \mathcal{N}^k は, \mathbf{x} の近傍 k 個のサンプルのうち, 正常なサンプルからなる集合を表す. C は任意に設定する定数である. $k = 1$ の場合, 最近傍の参照サンプルが正常なサンプルであれば異常度として最近傍サンプル間の距離を付与し, 最近傍の参照サンプルが異常なサンプルであれば異常度として C を付与する. k が 2 以上の場合, k 個の最近傍サンプルに付与されているラベルの多数決をとる. 多数決の結果, 正常なサンプルが多い場合は異常度として k 番目のサンプル間の距離を付与する. 異常なサンプルが多い場合は, 異常度として C を付与する.

本研究では, データ合成方式 1 を用いる場合, 訓練サンプルのラベルとして, ソフトラベルを扱う. ソフトラベルの場合は近傍 k 個のサンプルのソフトラベルに対して正常なソフトラベルおよび異常なソフトラベルの和を算出する.

$$S(\mathbf{x}) = \begin{cases} d_k & \text{if } \sum_{j \in \mathcal{N}^k} \tilde{y}_j \geq \sum_{j \in \mathcal{A}^k} \tilde{y}_j \\ C & \text{otherwise} \end{cases}\quad (3)$$

正常なソフトラベルの和 $\sum_{j \in \mathcal{N}^k} \tilde{y}_j$ が異常なソフトラベルの和 $\sum_{j \in \mathcal{A}^k} \tilde{y}_j$ よりも大きい場合, 異常度として

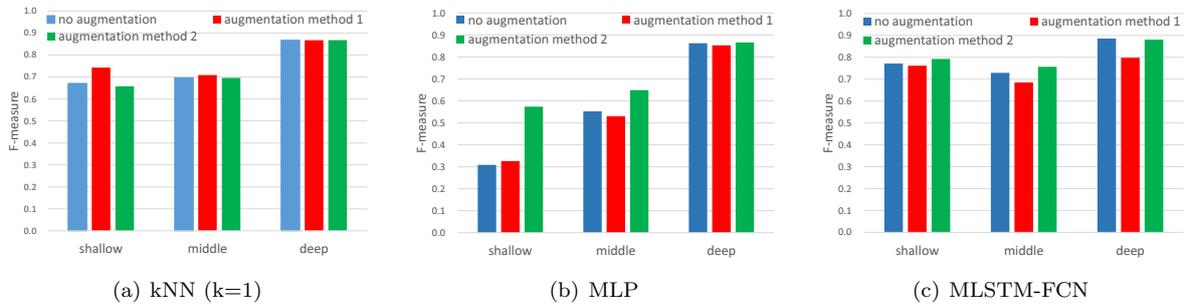


Fig. 9: Experiments results

k 番目のサンプル間の距離を付与し、異常なソフトウェアの和の方が大きい場合は、異常度として C を付与する。本研究では、十分に大きい定数として、 $C = 10^4$ とする。また、距離尺度として、ユークリッド距離を用いる。

(2) Multi Layer Perceptron (MLP) MLP は、ニューラルネットワークベースのクラス分類手法である¹⁰⁾。本研究で用いた MLP のアーキテクチャを Fig. 7 に示す。それぞれ 32 個のニューロンを持つ 2 層の隠れ層を含んだ MLP を用いる。各層の活性化関数は ReLU 関数を用いる。最適化手法は確率的勾配降下法 (SGD) を用い、学習率は 0.01 とする。また、バッチサイズは 512, epoch 数は 100 とする。

(3) Multivariate LSTM-FCNs (MLSTM-FCN) MLSTM-FCN は Karim らによって提案された、時系列データの分類手法である¹¹⁾。単変量時系列分類モデルである LSTM-FCN¹²⁾ を多変量時系列データの分類モデルへと拡張したモデルである。提案されたモデルは、Fig. 8 に示すように、2 つの分岐構造を持ち、それぞれ畳み込みブロックと LSTM ブロックから構成される。

畳み込みブロックは Wang らによって提案されたモデル¹³⁾ の各畳み込み処理後に Squeeze and Excitation (SE) ブロックを追加したモデルで構築される。3 層の各畳み込み層のカーネルサイズはそれぞれ 8, 5, 3 とする。各層の活性化関数は ReLU 関数を用い、その後 Batch Normalization を行う。1 層目、2 層目の畳み込み層には、SE ブロックが続く。SE ブロック¹⁴⁾ では、まず global average pooling によって各チャンネルの平均をとり、次に、これを全結合層に入力することにより、チャンネルの重みを学習する。最終的に、SE ブロックの入力に各チャンネルの重みをかけ合わせた結果を出力する。SE ブロックは、畳み込み後の特徴マップ全体の情報を利用する Self-Attention の 1 種と考えることができる。

LSTM ブロックでは 1 層の一般的な LSTM を用いて特徴抽出を行う。LSTM の活性化関数は tanh 関数を用いる。

学習の設定として、バッチサイズは 1,024, エポック数は 100 とし、最適化手法は Adam を用い、学習率は 0.001 とする。

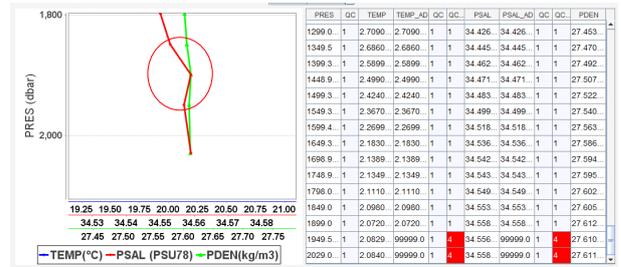


Fig. 10: Successfully detected example (Density inversion error)

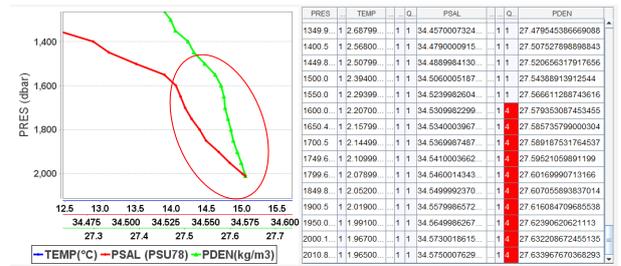


Fig. 11: Failed example (Continuous error)

4 評価実験

4.1 実験設定

本実験では、北太平洋 (北緯 10~50 度, 東経 140~西経 140 度) で観測されたデータを対象として実験を行った。学習データとして、塩分値が正常なプロファイルと異常なプロファイルをランダムに 5,000 プロファイルずつ抽出した。テストデータとして学習データと同範囲内から、重複がないように、2,000 プロファイル抽出した (そのうち、異常なプロファイル数は 117 であった)。

実験に使用したプロファイルは、国立研究開発法人海洋研究開発機構で遅延品質管理 (DQC) が行われたプロファイルとし、DQC による品質管理フラグを真値とした。先行研究⁴⁾ にならい、異常標本精度と正常標本精度の調和平均を評価尺度とし、浅層 0~250[m], 中層 250~650[m], 深層 650~2,000[m] の 3 層に分割して算出した。本実験における、データ合成方式 1 のパラメータ α は 0.2 とした。

4.2 実験結果

各異常検知手法を用いた場合の実験結果を Fig. 9 に示す。縦軸は調和平均を表す。青のグラフがデータ合

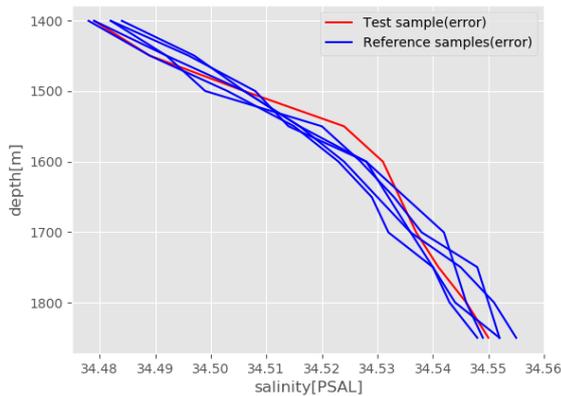


Fig. 12: Neighborhood profiles of the failed example shown in Fig. 11

成を用いない場合の評価値、赤のグラフがデータ合成方式1を用いた場合の評価値、緑のグラフがデータ合成方式2を用いた場合の評価値を示す。

異常検知モデルとして、kNNの結果に着目すると、データ合成方式1を利用することで、浅層において調和平均の値が改善されていることが分かる。また、データ合成2による改善はみられなかった。

MLPの結果に着目すると、データ合成方式2を利用することで浅層および中層において調和平均の値が改善されていることがわかる。また、データ合成方式1を利用すると、浅層において調和平均の値が改善されていることが分かる。

MLSTM-FCNの結果に着目すると、データ合成方式2を利用することで、浅層、中層において調和平均の値が改善されていることが分かる。一方で、データ合成1を利用することによる改善はみられなかった。特に、Fig. 10に示すような密度逆転エラーが検知可能になったことを確認した。一方で、Fig. 11に示すような連続エラーの検知が困難であった。このエラーは、深度1,600[m]あたりから、塩分の増加量が減少して観測されたエラーである。

Fig. 12は、検知に失敗したエラー (Fig. 11) に対して、訓練データに含まれるエラープロファイルのうち、kNNを用いた場合の近傍5サンプルを示す。近傍のエラーサンプルには、上記の検知に失敗したエラーサンプルのような塩分の増加量が減少するような傾向はみられなかった。従って、上記のエラーは、発生頻度が低いために訓練データとして十分な数の事例が存在しなかったため、検知が困難であったと考える。

5 おわりに

本研究では、海洋観測データの異常検知において、データ合成を行うことでニューラルネットワークや深層ニューラルネットワークの適用を可能にする方式を提案した。提案する方式は、異常観測データを合成することで正常データと異常データの不均衡性を緩和し、識別精度の改善を図る。実験により、データ合成を行う

ことで異常検知の精度が向上することを確認した。今後、発生頻度が低いエラーを検知できるよう、提案方式の改善が必要である。また、本方式を他の海域で検証する必要がある。

参考文献

- Desaubies Yves, Freeland Howard, Kim Kuh, King Brian, Le Traon Pierre-Yves, Molinari Robert, Owens Brechner W., Riser Stephen, Send Uwe, Takeuchi Kensuke, Wijffels Susan, Roemmich Dean, Boebel Olaf. Argo: The global array of profiling floats, 2001.
- Olga Baranova, et al. World ocean atlas 2005. 2015.
- 上川路洋介, 松山開, 福井健一, 細田滋毅, 小野智司. 条件付確率場を用いた海洋観測データの品質管理. 人工知能学会論文誌, Vol. 33, No. 3, pp. G-SGAI05.1, 2018.
- 林勝悟, 小野智司, 細田滋毅, 沼尾正行, 福井健一. 空間的自己相関を考慮した海洋データのエラー検知. 人工知能学会論文誌, Vol. 33, No. 3, pp. D-SGAI02.1, 2018.
- Connor Shorten and Taghi M Khoshgoftaar. A survey on image data augmentation for deep learning. *Journal of Big Data*, Vol. 6, No. 1, pp. 1-48, 2019.
- Qingsong Wen, Liang Sun, Xiaomin Song, Jingkun Gao, Xue Wang, and Huan Xu. Time series data augmentation for deep learning: A survey. *arXiv preprint arXiv:2002.12478*, 2020.
- Hongyi Zhang, Moustapha Cisse, Yann N Dauphin, and David Lopez-Paz. mixup: Beyond empirical risk minimization. *arXiv preprint arXiv:1710.09412*, 2017.
- 前原宗太郎, 福井健一, 富田智彦, 小野智司. 気象時系列データにおける変化点検知の基礎検討. 人工知能学会全国大会論文集 第31回全国大会 (2017), pp. 4P2OS38b1-4P2OS38b1. 一般社団法人 人工知能学会, 2017.
- Sridhar Ramaswamy, Rajeev Rastogi, and Kyuseok Shim. Efficient algorithms for mining outliers from large data sets. In *ACM Sigmod Record*, Vol. 29, pp. 427-438. ACM, 2000.
- Matt W Gardner and SR Dorling. Artificial neural networks (the multilayer perceptron)—a review of applications in the atmospheric sciences. *Atmospheric environment*, Vol. 32, No. 14-15, pp. 2627-2636, 1998.
- Fazle Karim and et al. Multivariate lstm-fns for time series classification. *Neural Networks*, Vol. 116, pp. 237 - 245, 2019.
- Fazle Karim, Somshubra Majumdar, Houshang Darabi, and Shun Chen. Lstm fully convolutional networks for time series classification. *IEEE access*, Vol. 6, pp. 1662-1669, 2017.
- Zhiguang Wang, Weizhong Yan, and Tim Oates. Time series classification from scratch with deep neural networks: A strong baseline. In *2017 International joint conference on neural networks (IJCNN)*, pp. 1578-1585. IEEE, 2017.
- Jie Hu, Li Shen, and Gang Sun. Squeeze-and-excitation networks. In *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, pp. 7132-7141, 2018.