

自己組織化マップを用いた海水中水銀の *In-situ* Methylation 機構の解明に向けた解析

九州大学大学院 矢野真一郎・谷中敬亮・松本賢・Edistri Nur Fathya
長崎大学大学院 多田彰秀 環境省国立水俣病総合研究センター 松山明人

1. はじめに

水俣病の公式確認から60年以上経った現在も世界中で水銀汚染が深刻な状況である。水俣病の原因物質は有機水銀の中のメチル水銀であるが、自然環境中に放出された無機水銀がどのような機構でメチル化するかは現在も不明な点が多い。本研究グループは、過去に重大な水銀汚染があり、現在も非汚染海域よりも水銀濃度が高いことから、水俣湾を研究対象として2006年から水銀濃度の現地モニタリングや数値モデリングにより、水銀リスク管理に貢献できるような研究を試みている。

これまでの研究で、河川水の流入による水温・塩分・DOの変化がメチル化に影響を及ぼすことが示唆されている[Matsuyama *et al.*(2010)]が、観測年によっては影響が確認できない場合もあった。また、これまでの観測データに関して重回帰分析などの線形的な解析を行ってきたが有意な結果は得られていない。そこで、本研究はこれまでの観測データを多次元かつ複雑なデータのパターン認識に有効な自己組織化マップ (Self-Organizing Map: SOM)を利用して、環境条件のグループ化を行い、その分類により海水中の溶存態水銀の現場でのメチル化、すなわち *in-situ* methylation の予測を行う手法の開発を試みた。また、予測結果からメチル化の要因について考察する。

2. 内容

2.1 観測概要

本研究の基礎データは2006年から概ね月に1度、大潮の下げ潮最強時の前後60分間で、図-1に示す水俣湾内の観測地点 Sta.1(裸瀬)、Sta.2(湾央)、Sta.3(恋路島)の3地点で海水を採取した。サンプルから海水中の懸濁態総水銀、懸濁態メチル水銀、溶存態総水銀(diss-THg)、溶存態メチル水銀(diss-MeHg)の測定を行った。採水は海面から0m、6m、10m、海底から1m、0.1m(2010年より開始)の計5層で行った。また、

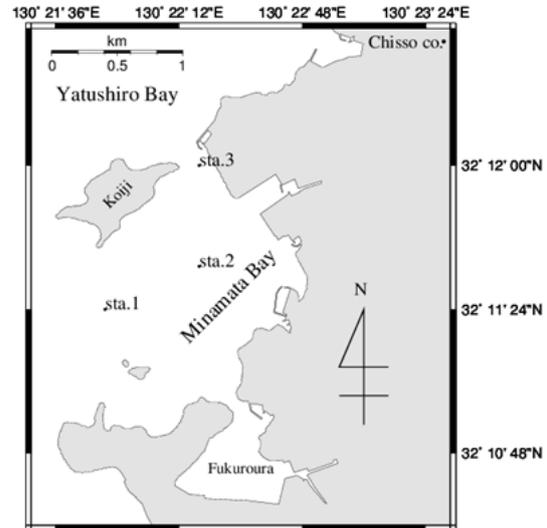


図-1 現地観測の測点

多項目水質計を用いて塩分、水温、DO、クロロフィル *a* 等の鉛直分布の測定も併せて行っている。本研究では、観測によって得られたデータのうち、diss-MeHg、diss-THg、水温、塩分、DO、クロロフィル *a* のデータを用いる。

2.2 自己組織化マップの概要

過去の研究より、溶存態水銀のメチル化傾向を示す diss-MeHg/diss-THg と環境要因の間に線形的な関係性が見られなかったため、本研究では自己組織化マップ(SOM)を用いて解析を行う。SOMは教師なしニューラルネットワークの一種である。本研究では次式で表される基本型SOMを用いている。

$$m_i(t+1) = m_i(t) + h_{ci}(t)[x(t) - m_i(t)] \quad (1)$$

この式は、神経細胞 *i* が時刻 *t* で処理している情報処理能力を *m_i* とすると、外部から入ってきた入力信号 *x(t)* を神経細胞が学習して、より入力信号に近い処理能力 *m_i(t+1)* を次の時刻に持つことを示す。このとき *x(t)* が *n* 次元の入力ベクトルであれば、*m_i* も同じ *n* 次元の要素を持ち、参照ベクトルと呼ばれる。なお、*h_{ci}* は学習率係数を含めた近傍関数であり、*t* は離散型

時間座標である。基本型 SOM は 2 層の階層型のネットワークを構成する。1 層目は n 次元の入力層 $x(t)$ である。2 層目は競合層であり、競合層(以下、ユニットと呼ぶ)のベクトルは参照ベクトル m_i で表される。 m_i は入力層の次元に合わせて n 次元の要素をもつ。本研究では、ユニット数を 10×10 の 100 個と設定し、マッピングを行った。結果の一例を図-2 に示す。図中の扇型は参照ベクトル中の各要素の大きさを示している。基本 SOM では、 n 次元の入力ベクトルにより特徴付けられたユニットに分類される。入力ベクトルは参照ベクトルと比較され、ユークリッド距離が最小となる参照ベクトルを持つユニットが持つ特性値(学習の結果、各ユニットに分配されたデータの平均値)が予測値となる。本研究では、2006 年から 2012 年のデータを用いてメチル化傾向と環境要因の関係を学習させ、2013 年の環境要因の観測結果から diss-MeHg の予測を試みた。

2.3 入力ベクトルの選定

$\text{diss-MeHg}/\text{diss-THg}$ の予測の際に、入力ベクトルの選定は非常に重要であり、予測精度を大きく左右する。本研究では、入力ベクトルの選定について、3 つの条件で検討した。パターン①では観測された環境要因を全て用い、パターン②では Matsuyama *et al.* (2010) が示した水温、塩分、DO の三要素を、パターン③ではステップワイズ法により決定した水深、塩分、DO、クロロフィル a の四要素を入力ベクトルとして試みた。また比較のため、線形解析となる重回帰分析より得られたモデル式を用いた予測も同様に行った。

3. 結果と考察

それぞれの予測結果を水深ごとに分類し、相対誤差の RMSE を計算することで、予測精度を検討した。得られた結果を表-1 に示す。SOM による①と②の比較から、全体を見るとわずかであるが精度が上昇した。このことから、Matsuyama *et al.* が示唆した 3 要素はメチル化に影響を及ぼすことは確認できたが、その影響は小さいと考えられる。一方、③の結果では精度が大きく上昇した。これより、クロロフィル a 及び水深がメチル化に影響を与えていることが分かる。

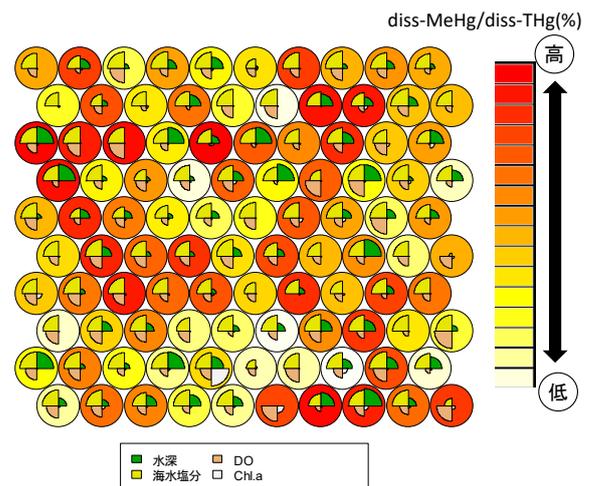


図-2 SOM の学習結果の一例

表-1 予測結果の相対誤差の RMSE

	SOM			線形モデル		
	パターン①	パターン②	パターン③	パターン①	パターン②	パターン③
0m	81.37	107.40	73.01	69.23	59.63	67.51
6m	113.08	89.34	85.57	160.48	155.13	159.21
10m	136.51	78.26	48.87	65.16	62.05	63.31
B+1	33.96	49.87	33.51	46.21	48.17	45.60
B+0.1	60.26	106.10	64.13	84.82	83.69	84.99
全体	92.55	88.75	63.68	93.94	90.33	92.97

また、線形モデルとの比較を行うと、①と②では大きな違いはなかったが、③においては SOM が良好な結果となった。これより、SOM を用いた非線形的な検討は、線形的な解析では捉えられなかった水銀のメチル化に及ぼす影響を捉えられると考えられる。

4. まとめ

非線形性をもつ複雑な情報をパターン分類する SOM を用いた結果、海水中の溶存態水銀のメチル化は水温・塩分・DO 以外にもクロロフィル a と水深に紐づく環境要因を含めたことで、線形的な手法より良好な予測ができることが分かった。一方、予測精度はまだ十分ではないので、ここで解析に用いた要素以外のデータが必要であることも示唆される。今後は、2014 年以降に観測されたデータを追加して学習させることや、本観測で行った栄養塩類、TOC などの要素も加えることで、精度の向上を試みたい。

【謝辞】本研究は、科研費基盤研究(B) (24360200) により実施された。

【参考文献】 1) Matsuyama *et al.* (2010): *Water, Air and Soil Pollution*, 218, 399-412.