原 著

ランダムフォレスト法による γ 線スペクトルを用いた 放射性廃棄物ドラム缶の分類

秦はるひ^{*, **, †}, 石森 有^{*}

^{*} 国立研究開発法人日本原子力研究開発機構バックエンド研究開発部門人形峠環境技術センター

708-0698 岡山県苫田郡鏡野町上齋原1550

^{**} 岡山大学大学院自然科学研究科

700-8530 岡山県北区津島中3-1-1

[†] hata.haruhi@jaea.go.jp

2016年7月 4日 受付

2016年9月 9日 受理

放射性廃棄物ドラム缶の分類に対し、機械学習法の一つであるランダムフォレスト法が適用できるか検討した。ウランの起源が天然または回収燃料かで分類された954点のドラム缶の γ 線スペクトルデータを利用した。300点を訓練データ用にとりわけ、残りの654点のスペクトルデータを用いて、ランダムフォレストの分類の正答率を評価した。カウント数の対数の差分値をとる前処理を行う場合、ランダムフォレスト法で654点を正確に分類できた。

Key Words: radioactive waste, machine learning, Random Forests, γ -ray measurement

1. 序 論

放射性廃棄物の処分では、設計への適合を確認するため、廃棄物中の放射性核種の種類や量（インベントリ）を測定で明らかにする必要がある。 γ 線測定など、廃棄物を外部から非破壊測定することが合理的である。非破壊測定による確認が困難な放射性核種については、廃棄物から試料採取して化学処理するなど、破壊分析を行う。

すべての廃棄物に対し破壊分析を行うことは現実的でないため「スケーリングファクター法（SF法）」が確立された^{1, 2)}。SF法では、事前にいくつかのグループに分類した廃棄物ごとの代表サンプルについて、化学分析と γ 線測定を行い、非破壊測定が困難な放射性核種と容易な放射性核種の統計的な相関関係を求め、この相関関係と γ 線測定結果から化学分析を行っていない廃棄物の放射能インベントリを推定する。

ウラン取扱施設から発生するウラン廃棄物についても、天然起源のウラン（NU）と回収燃料起源のウラン（RU）に分類できれば、SF法で必要なグルーピングがより確かなものとなり、放射能インベントリの評価精度を向上できる。

筆者らは、内容物が確かなウラン廃棄物ドラム缶の γ 線スペクトルデータを訓練データとして、サポートベクターマシン（SVM）と呼ばれる機械学習法を用い、ウラン廃棄物ドラム缶の内容物や収納状況、放出される γ 線エネルギーなどの事前情報を必要としない分類方法を提案した³⁾。SVMは、高次元空間にあるデータと境界面の距離が最大となるような基準を用いて、境界面を決定し分類する方法である。NaI（Ti）検出器で測定したウラン廃棄物ドラム缶の γ 線スペクトルデータ12点を訓練データとして学習させ、955点のデータについて分類を行ったところ、正答率が99%を超える結果となった。12点の訓練データは、運転切り替えや年度が変わるときに出てくる最初のウラ

ン廃棄物ドラム缶データから選んだ。

本研究では、訓練データで各分類の特徴を表す量（説明変数）を学習し、未知のデータを分類・回帰するランダムフォレスト（RF）と呼ばれるアルゴリズムを用いて、ウラン廃棄物ドラム缶の γ 線スペクトルデータによる分類を試みる。RFは、画像認識やビッグデータ解析などでよく用いられる手法で、スペクトルデータの分類では化学分析での利用例がある⁴⁻⁶⁾。

SVMは2クラス分類のためのアルゴリズムで、一度に多クラス分類はできないことから、複数回繰り返して多クラス分類をすることになる。一方、RFは一度に多クラス分類ができるため、実際の廃棄物の分類ではより優位な手法となる可能性がある。

2. 適用データ

日本原子力研究開発機構人形峠環境技術セ

ンター製鍊転換施設の廃水処理で発生した中和澱物を封入したドラム缶954点（NU469点、RU485点）の γ 線スペクトルデータを使用した。既報³⁾で用いたデータと同一であるが、メンテナンス時等のデータを除いた。工程で使われたウランの起源によってNUまたはRUに分類している。

γ 線測定は、縦長の130(W)×80(D)×400(L) mmのNaI (TI) 検出器2本、鉄製の遮蔽容器、ドラム缶の回転台から構成されるQ²装置（CANBERRA社製）で行った。この装置で取得した γ 線スペクトルの典型例をFig. 1に示す。解像度は低いものの、両方のスペクトルに^{234m}Pa由来の1001 keV、766 keVと²³⁵U由来の186 keV、RUのスペクトルでは、原子炉内で生成される²³²U、²³⁶Uの子孫核種であるトリウム系列の²¹²Pbと²⁰⁸Tl由来の238 keV、510 keV、583 keVのピークが見られる（1チャンネル=約

Fig. 1 Typical spectra of NU and RU with Q² system.

4 keV)。本研究では、スペクトルデータについて、495チャンネルまでに限定した。

3. 解析手順

Breiman⁷⁾ が提案したRFは、与えた訓練データセットからランダムにサンプリングしたデータで多数の訓練データセットを再構成し、学習により探知した分岐条件で、樹木状の分類モデル（決定木）を複数作成して分類するアンサンブル学習アルゴリズムである。アンサンブル学習とは、単独では精度が低い分類モデルを複数組み合わせることによって精度を上げる学習法である。RFでは、単独では分類精度が低い決定木の分類予測を多数行い、それらの多数決をとることによって、分類精度を高める。

3.1 データの前処理

効果的な前処理方法を検討するため、次に示す前処理方法の違う6種類のデータ $d_1 \sim d_6$ を用意した。カウント数を規格化したデータ(d_1)、カウントの少ない領域でピークを強調するため、カウントの対数をとって規格化したデータ(d_2)、スペクトルの変化を強調するため一次微分としてカウントの差分をとって規格化したデータ(d_3)、カウントの少ない領域での変化をより強調するため、カウントの対数をとって、さらに差分をとって規格化したデータ(d_4)、さらに変化を強調するため二次微分としてカウントの差分をとったデータのさらに差分をとって規格化したデータ(d_5)、カウントの少ない領域での変化をより強調するため、カウントの対数の二次微分として差分をとったデータのさらに差分をとって規格化したデータ(d_6)を比較した。

d_1 : カウント数を規格化したもの

$$d_1 = \left\{ \frac{x_i}{\sum_{i=1}^{495} x_i} \right\}_{i=1}^{495}$$

d_2 : カウント数の対数を規格化したもの

$$d_2 = \left\{ \frac{\log x_i}{\sum_{i=1}^{495} \log x_i} \right\}_{i=1}^{495}$$

d_3 : カウント数の差分を規格化したもの（一次微分）

$$d_3 = \left\{ \frac{x_{i+1} - x_i}{\sum_{i=1}^{494} (x_{i+1} - x_i)} \right\}_{i=1}^{494}$$

d_4 : カウント数の対数の差分を規格化したもの（一次微分）

$$d_4 = \left\{ \frac{\log x_{i+1} - \log x_i}{\sum_{i=1}^{494} (\log x_{i+1} - \log x_i)} \right\}_{i=1}^{494}$$

d_5 : カウント数の一次微分の差分を規格化したもの（二次微分）

$$d_5 = \left\{ \frac{x_{i+2} - 2x_{i+1} - x_i}{\sum_{i=1}^{493} (x_{i+2} - 2x_{i+1} - x_i)} \right\}_{i=1}^{493}$$

d_6 : カウント数の対数の一次微分の差分を規格化したもの（二次微分）

$$d_6 = \left\{ \frac{\log x_{i+2} - 2\log x_{i+1} - \log x_i}{\sum_{i=1}^{493} (\log x_{i+2} - 2\log x_{i+1} - \log x_i)} \right\}_{i=1}^{493}$$

3.2 RFの手順

サンプリングしたデータを元のデータセットに戻すことにより、毎回同じデータセットからサンプリングを行うブートストラップ法^{7,8)}を用いて、訓練データセット S から重複を許したサンプリングを行い、 B 点のデータを抽出し、これを T 回繰り返して、新たな訓練データセット $S_1, S_2, \dots, S_T$ として再構成する。新たな訓練データセットを使い、ルートノードと呼ばれる出発点からある条件を用いて分岐させる。Fig. 2に示した○は、ノード（分岐点）で、条件によって下位のノードに振り分ける。この分岐を繰り返し、ノードのデータが単一のクラスとなれば、それを終端ノード(□)としてラベル付けを行い、決定木を完成する。この決定木

Fig. 2 Concept of RF classification to NU or RU.

に、前処理したデータ d を入力して、辿り着いた終端ノードのラベルをその決定木の分類結果とする。このようにして得られた T 個の決定木の分類結果の多数決により分類を確定する。単独の決定木の具体的な作成手順を①～⑤に示す。

- ① ランダムに選んだ m 個のチャネルについて、 B 点の訓練データの規格化したカウント数や差分などを昇順に並び替える。隣り合う2つの値の中央値をしきい値の候補とし、 $(B-1) \times m$ 個用意する (Fig. 3)。
- ② ジニ係数の減少度より、 $(B-1) \times m$ 個のしきい値候補を評価する。
- ③ 最適なチャネルまたは相当する序数としきい値の組を求め、分岐条件とする。
- ④ あるノードに属する訓練データと③で求めた分岐条件のしきい値を比較して、左右の下位のノードに分ける。分岐したノードについても、それぞれ同様に分岐を繰り返す。
- ⑤ ノードに属するデータのクラスがNUまたはRUのみになったら、そのノードを終端ノードとし、分岐を止める。終端ノードに行き着

いた訓練データのクラスをその終端ノードの分類クラスとし、ラベルをつける。

①では、NUとRUの違いがカウント数やその差分に出ると考えられるため、NUとRUを分類するしきい値の候補として、隣接する値の中央値を用いている。

②、③で選定する最適なしきい値は、分岐前の i 番目のノード i のジニ係数 $GI(i)$ から左右の下位のノードへの分岐時のジニ係数 $GI(t_{\text{Left}})$ 及び $GI(t_{\text{Right}})$ との差である減少度 $\Delta GI(i)$ が最大となる序数としきい値の組み合わせであり、ジニ係数とその減少度は以下の式で導かれる。

$$GI(i) = 1 - \sum_{C \in \{NU, RU\}} p(C|i)^2 \quad (1)$$

$$\Delta GI(i) = GI(i) - (p_{\text{Left}} GI(t_{\text{Left}}) + p_{\text{Right}} GI(t_{\text{Right}})) \quad (2)$$

p_{Left} , p_{Right} は、あるノードに属するデータ数に対する、左または右の下位のノードに属するデータ数の割合である。あるノード i におけるクラス C の事後確率 $p(C|i)$ は、そのノードに属するデータ数に対するクラス $C \in \{NU, RU\}$ に属するデータ数の割合 $N_C(i)/N(i)$ で求められる。

Fig. 3 Image of sampling from training data.

Fig. 4 Flow chart of RF algorithm.

ジニ係数が小さいほど、分類結果に他クラスの要素が少なく純度の高い状態を示し、1に近づくほど他クラスの要素が多く混ざり合い不純物が多い状態を示す。つまり、あるノードから下位のノードに分岐する際のジニ係数の減少度が大いほど、より精度よく分類ができる分

岐条件といえる。

分岐条件の探索では、事前に想定していない特徴量が「潜在的な支配パラメータ」として抽出される可能性もあるため、事前のチャンネルの絞り込みは行わない。全体のフローをFig. 4に示した。

本解析では、Windows 8.1上で統計解析言語R⁹⁾にて行い、RFについてはRのrandomForestパッケージ¹⁰⁾を使用した。

3.3 検討の手順

事前に全データ954点の1/3程度を目安に、NU、RUそれぞれ150点ずつ300点のデータをランダムに選び、残りの654点で分類精度を評価した。300点は、 $d_1 \sim d_6$ の前処理をしたデータにNUまたはRUのクラス情報を組み合わせ、訓練データセット S を作成するためのデータとした。残りの654点は、 $d_1 \sim d_6$ のデータの前処理をして、RFの分類結果を実際のクラスと比較して正答率を求めるためのデータとした。

本研究では、訓練データ数によって、分類精度がどう変化するか前処理方法ごとに調べた。このため訓練データセット S として事前に準備した300点のデータから2~300点(1~150組)まで変化させた。それぞれ、50回ずつ、訓練データセット S をランダムに作成し、分類を繰り返して、正答率を平均した。また、訓練データセット S から抽出するデータ数 B は、訓練データセット S のデータ数と一致させ、決定木の個数 $T=500$ とし、ランダムに選ぶ説明変数の数 m は、すべての説明変数の個数の平方根 $\sqrt{495}$ 、 $\sqrt{494}$ 、 $\sqrt{493}$ より $m=22$ と設定した。

4. 結果と考察

6種の前処理方法による正答率をFig. 5に示す。対数をとる方法(d_2)を除き、すべての方法において、平均の正答率は使用する訓練データ数の増加に伴い収束している。 d_1 、 d_3 、 d_4 、 d_5 では、99%以上の平均正答率となり、NUまたはRUへの分類に適用可能であることが確認できた。特に、カウント数の対数の差分を1度とった方法(d_4)では、訓練データ数が186点以上で、正答率がすべて1となり、6種の前処理方法の中で最適な前処理方法といえる。

300点の訓練データを用いてRFを実行したときのジニ係数の減少度の平均を相対度数¹¹⁾

でFig. 6に示す。差分を取らない d_1 と d_2 は、400チャンネル以降(1600keV相当)に減少度の大きいチャンネルがある。少ない訓練データ数では他の方法に比べて正答率も低い。ウラン量が少ないウラン廃棄物ドラム缶では、ウラン由来の主要なピークが小さくなり、相対的に、440チャンネル付近の ^{214}Bi など、バックグラウンド由来のピークが大きく見える。そのため、ウラン由来のピーク以外に400番目以降の説明変数に減少度が大きいものが出現し、正答率も低くなったと考えられる。 d_3 、 d_4 では、400番目以降の説明変数の減少度の大きいものがなくなり、差分を取ることでバックグラウンドの影響が抑えられることが解った。正答率が一番高い d_4 では、他の方法に比べ、510keV、583keVなどのRUに特有のエネルギーピーク付近で減少度が大きい説明変数がある。それにより、他の方法より核種に応じた分類になり、正答率が上がったと考えられる。

また、Fig. 6における d_4 のジニ係数の減少度の平均を見ると、50チャンネル付近(200keV相当)より前のピークも重要であると認識していることがわかる。想定していたトリウム系列だけでなく、特性X線のピークも分類に使われており、事前に想定していなかった「潜在的な支配パラメータ」が抽出されている。

5. まとめ

本研究ではウラン廃棄物ドラム缶のNUまたはRUへの分類について、NaI(Tl)で計測した γ 線スペクトルに対するRFの適用可能性について検討した。スペクトルデータに対する前処理方法が異なる6種類のデータセットに対してRFを実行し、最適な前処理方法を検討した。その結果、カウント数を規格化する方法、カウント値の差分を規格化する方法、カウント値の対数の差分を規格化する方法の4種の方法で、50回試行の平均の正答率が99%以上に収束し、NUまたはRUへの分類が可能であることが確

Fig. 5 Result of RF accuracy.

認できた。特に、カウント数の対数を取り、前後の差分を取る前処理方法が一番高い正答率となった。この方法では、訓練データ数が186点

以上のとき、正答率はすべて1になり、6種の前処理方法の中で最適な前処理方法と言える。

機械学習を用いた分類方法では、 γ 線スペク

Fig. 6 Relative value of mean decrease in Gini index.

トルの各チャンネルのカウント数のみを使用し、それ以外の内容物や収納状況、放出される γ 線エネルギーなどの事前情報を必要としない。つ

まり、訓練データがあれば、内容物の遮蔽効果を考慮する必要がなく、モデル化が難しい廃棄物の分類に対しても、有効な手段だと考えら

れる。また、識別結果を数値化できるため、特に境界領域で、客観的な分類指標を提供でき、SF法の補助ツールとして期待できる。

今後は、一度に多クラスへの分類ができるRFと2クラスへの分類のためのSVMを複数回繰り返すことによって多クラス分類する方法との比較を行い、核原料や濃縮度の異なるウラン等の多クラスへの拡張について検討する。また、原子炉廃棄物や核鑑識等への応用についても検討する。

文 献

- 1) 日本原子力学会, 日本原子力学会標準ピット処分及びトレンチ処分対象廃棄物の放射能濃度決定に関する基本手順: 2011, AESJ-SC-F022: 2011 (2012)
- 2) International Organization for Standardization, Nuclear energy—Nuclear fuel technology—Scaling factor method to determine the radioactivity of low- and intermediate-level radioactive waste packages generated at nuclear power plants, ISO 21238: 2007 (2007)
- 3) Hata, H., Yokoyama, K., Ishimori, Y., Ohara, Y., Tanaka, Y. and Sugitsue, N., Application of support vector machine to rapid classification of uranium waste drums using low-resolution γ -ray spectra, *Appl. Radiat. Isot.*, **104**, 143–146 (2015)
- 4) Hilario, M., Kalousis, A., Pellegrini, C. and Müsseler, M., Processing and classification of protein mass spectra, *Mass Spectrom. Rev.*, **25**, 409–449 (2006)
- 5) Satten, G. A., Datta, S., Moura, H., Woolfitt, A. R., Carvalho, M. da G., Carlone, G. M., De, B. K., Pavlopoulos, A. and Barr, J. R., Standardization and denoising algorithms for mass spectra to classify whole-organism bacterial specimens, *Bioinformatics*, **20**, 3128–3136 (2004)
- 6) Menze, B. H., Petrich, W. and Hamprecht, F. A., Multivariate feature selection and hierarchical classification for infrared spectroscopy: Serum-based detection of bovine spongiform encephalopathy, *Anal. Bioanal. Chem.*, **387**, 1801–1807 (2007)
- 7) Breiman, L., Random forests, *Mach. Learn.*, **45**, 5–32 (2001)
- 8) Hastie, T., Tibshirani, R. and Friedman, J., The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction, Second Edition, Springer-Verlag, New York (2009)
- 9) R Core Team, R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria, October 2015, <http://www.R-project.org/>
- 10) Liaw, A. and Wiener, M., Classification and regression by randomForest, *R News*, **2**, 18–22 (2002)
- 11) 下川敏雄, 杉本知之, 後藤昌司, Rで学ぶデータサイエンス 9: 樹木構造接近法, 共立出版, 東京 (2013)

Abstract**Classification of Radioactive Waste Drums
Using Random Forests for Their γ -ray Spectra**Haruhi HATA^{*, **, †} and Yuu ISHIMORI^{*}

^{*}Ningyo-toge Environmental Engineering Center,
Sector of Decommissioning and Radioactive Waste Management, Japan Atomic Energy Agency
1550 Kamisaibara, Kagamino-cho, Tomata-gun, Okayama Pref. 708-0698, Japan
^{**}Graduate School of Natural Science and Technology, Okayama University
3-1-1 Tsushima-naka, Kita-ku, Okayama Pref. 700-8530, Japan

The feasibility of Random Forests, one of machine learning methods was examined for the classification of radioactive waste drums. It was carried out using 954 γ -ray spectra of drums which were already classified to natural or reprocessed uranium. After 300 spectra were selected at random to reassemble training datasets, the percentages of correct classification by Random Forests were evaluated with another 654 spectra. When the counts of spectra were reprocessed as the difference of their logarithm, Random Forests accurately classified 654 drums.

(Received July 4, 2016)

(Accepted September 9, 2016)