

分光法における因果発見

Causal Discovery from Spectroscopy

富士通¹ 東北大院理² 東北大 FRIS³ 東北大 AIMR⁴ 東北大 MathCCS⁵ 東北大 SRIS⁶

○藤田慶¹, 中山耕輔², 藤木結香^{3,4,5}, 加藤剛臣⁴, 水藤寛^{2,4,5}, 樋口博之^{1,5}, 佐藤宇史^{2,4,5,6}

Fujitsu Limited¹, Grad. Sch. Sci., Tohoku Univ.², FRIS, Tohoku Univ.³, AIMR, Tohoku Univ.⁴,

MathCCS, Tohoku Univ.⁵, SRIS, Tohoku Univ.⁶, ○Kei Fujita¹, Kosuke Nakayama², Yuka

Fujiki^{3,4}, Takemi Kato⁴, Hiroshi Suito^{4,5}, Hiroyuki Higuchi^{1,5}, Takafumi Sato^{2,4,5,6}

E-mail: fujita-kei@fujitsu.com

【緒言】近年分光法における計測データの次元と量が増加傾向にあり、1,2次元のピークフィッティングなど一般的な解析手法では取得できる情報に限度がある。さらに情報を取得するにはデータの因果関係を見る必要があるが、現状では専門家の経験に強く依存しており、客観的な評価方法が望まれている。一方で統計的因果探索の技術が向上しており、ある変数の変化が他の変数にどのような影響を及ぼすか統計的に分析が可能である。本報告では統計的因果探索技術の一つである DirectLiNGAM¹ を利用し、計測データに対する因果探索の方法を提案する。また、因果探索によって解明した物性メカニズムや、特徴的なドメインの抽出による分析結果も示す。

【実験】図1に今回実行した因果推論のフローを示す。取得した計測データに Lorentzian 分布でフィッティングをし、各ピークの位置と強度、バックグラウンド

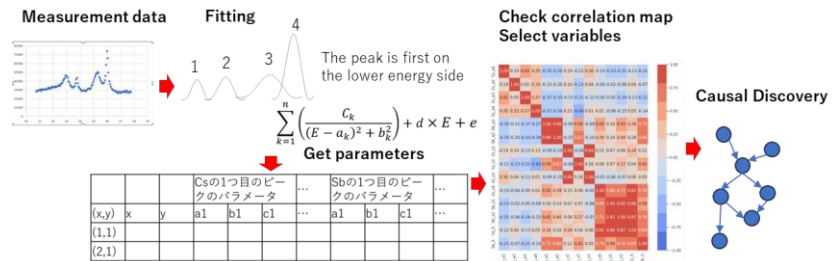


Figure1 Flow of Causal Discovery

の面積を取得する。取得した変数間の相関を確認し、1に近い相関の変数組がある場合は代表変数1つだけ残す。これを因果推論の入力とし、因果グラフやブートストラップによる因果関係の信頼度を出力する。本実験では、カゴメ格子物質に対する ARPES 測定データを対象に行った。

【結果】図2に本フローの適用結果の一例を示す。Csの3番目のピーク強度やSbの2番目のピーク位置が強い影響力を持つなど、新たな情報を抜き出すことができた。

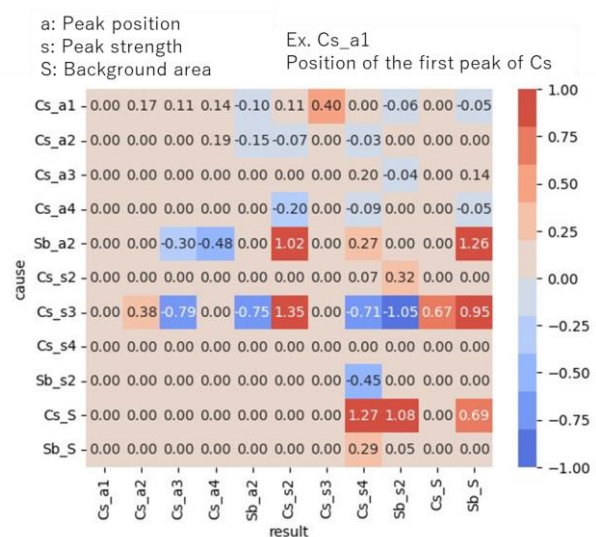


Figure2 Causal relation of Kagome lattice

[1] Shimizu et al., "DirectLiNGAM: A Direct Method for Learning a Linear Non-Gaussian Structural Equation Model", Journal of Machine Learning Research 12, Pages: 1225–1248, 2011.