

2025/03/25  
地球データ駆動科学シンポジウム  
JAMSTEC・東大・筑波大・NIMS 合同セミナー

# 材料開発におけるデータ駆動的方法論

永田 賢二  
国立研究開発法人 物質・材料研究機構  
マテリアル基盤研究センター

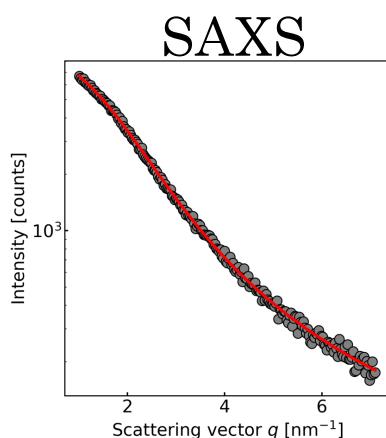
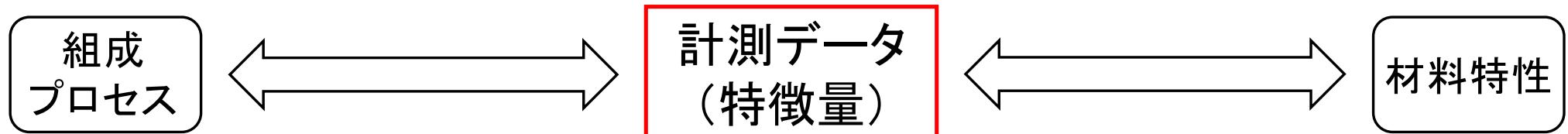
# 永田 賢二 (NIMS)



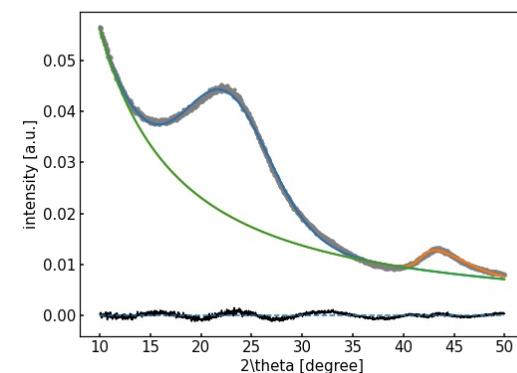
- 2000.4 - 2004.3 東京工業大学 情報工学科
- 2004.4 - 2009.3 東京工業大学大学院 知能システム科学専攻
  - ベイズ推定における統計的学習理論.
  - 代数幾何学用いたMCMC法の性能評価.
- 2009.4 – 2016.3 東京大学
  - Analysis of property for MCMC method based on algebraic geometry.
  - Spectral deconvolution based on Bayesian inference
- 2016.4 – 2019.3 産業技術総合研究所 人工知能研究センター
- 2019.4 – current NIMS Japan.

# 材料開発におけるデータ科学

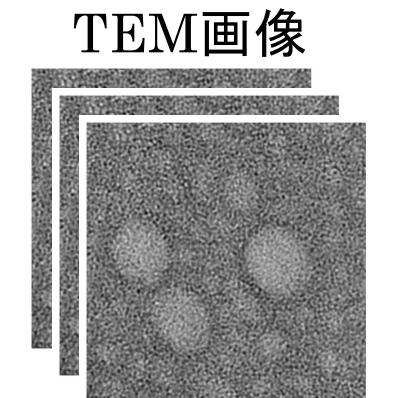
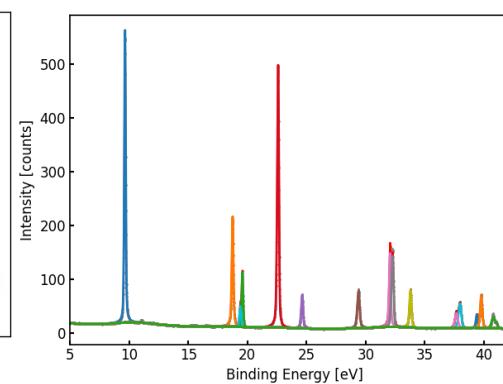
材料開発に資する計測データから、重要な特徴量を抽出する（基底抽出、特徴量抽出）



細孔径  
粒子モデル



結晶構造、パターン同定、ピーク分離



# 材料設計に向けたアプローチ

材料開発に資する計測データから、重要な特徴量を抽出する（基底抽出、特徴量抽出）



## 1. 各階層の数値化: データベース構築

- ・組成情報の数値化: 原子番号, 値電子の数など. 第一原理などを利用するのもあり?
- ・計測データの数値化: ベイズ推定によるフィッティング, 画像特徴量抽出

## 2. 階層間の関係を明らかにするモデル抽出: スパースモデリング

- ・高次元データかつ少数データセットになりがち→シンプルな線形モデルを基軸.
- ・階層間のデータフィットと, 多数の特徴量から少数の重要な因子を抽出
- ・仮設検定も大事: ラベルシャッフリングによる自由エネルギー比較(ベイズファクター)

## 3. 特性予測と有用物質の提案: ベイズ推定による予測

# 計測データの数値化：フィッティング

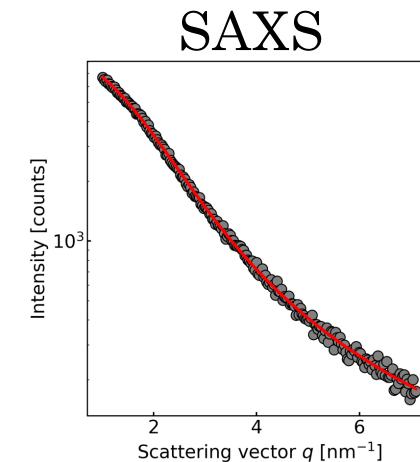
計測の種類に特化したフィッティング手法を作成

多分散球モデル：

細孔径  $\mu_r$  やその分布の広がり  $\sigma_r$  が抽出できる。

## 1. 球形粒子モデル:

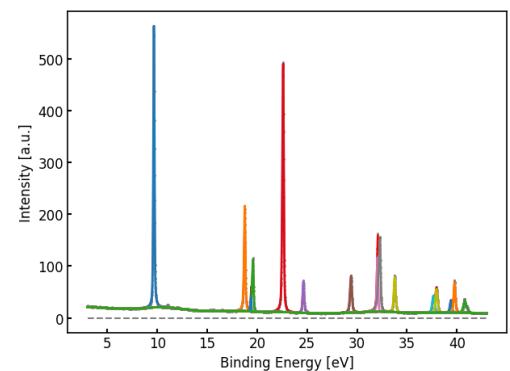
- 関数形:  $I(q) = I(0) \left( \frac{\sin(qr) - qr \cos(qr)}{(qr)^3} \right)^2 \exp(-q^2\sigma^2)$
- ここで、 $q$  は散乱ベクトルの大きさ、 $r$  は粒子半径、 $\sigma$  はサイズ分布の標準偏差です。



## ピーク分離によるフィッティング

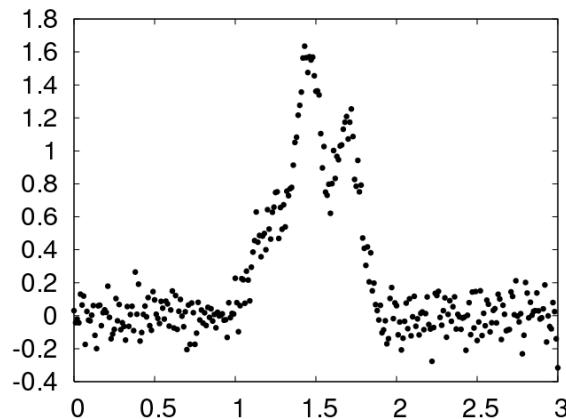
- 強度、位置、幅などがピークごとに出る
- プロファイル or ピークサーチ

## XRD



# モデル選択の例: 基底関数の個数の決定

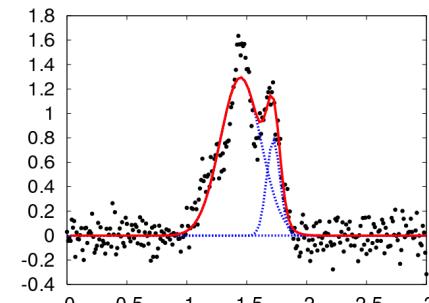
モデル選択: 基底関数の個数  $K$  ?



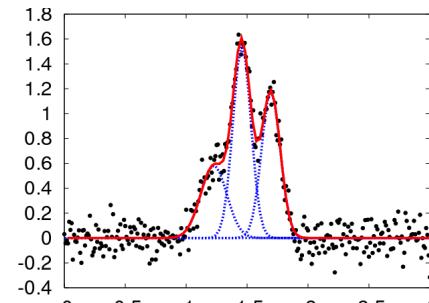
$K$  が大きいと近似精度向上  
ノイズまでフィットしてしまう。



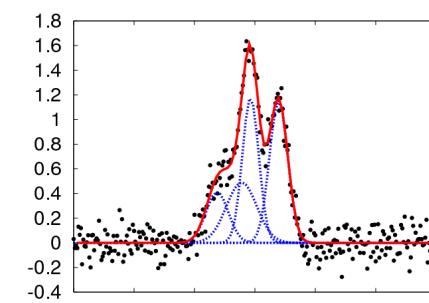
最適な  $K$  をデータだけから  
決めることができるか？



$K = 2$



$K = 3$

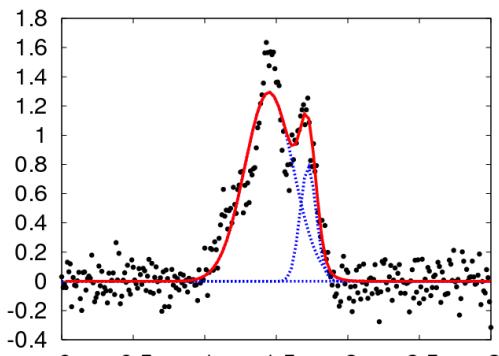
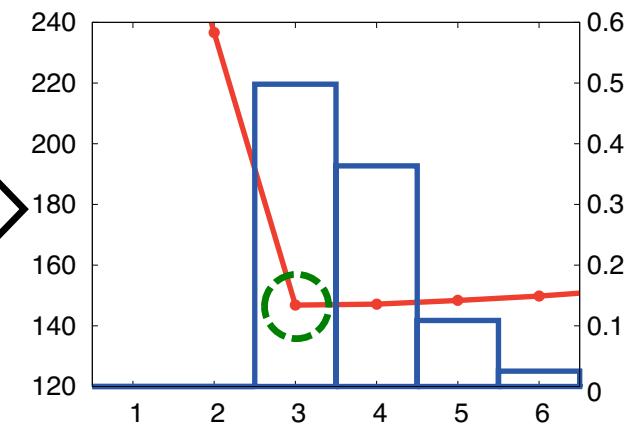
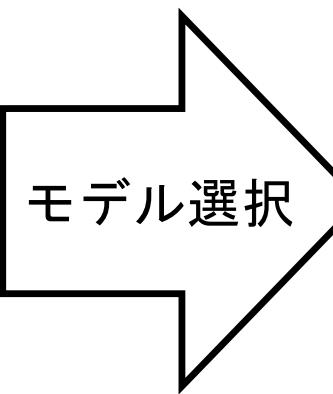
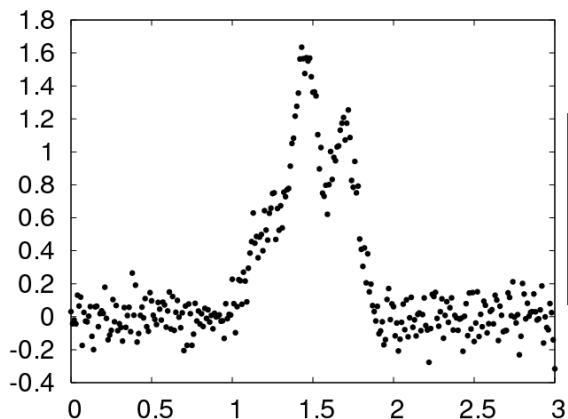


$K = 4$

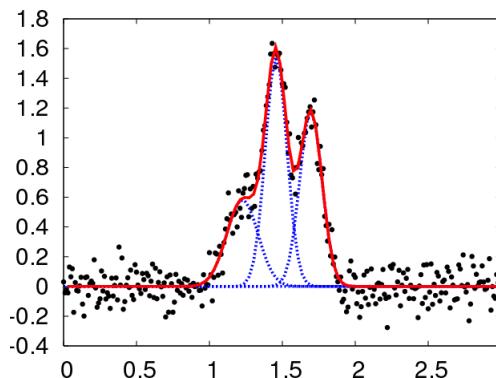
# スペクトル解析におけるモデル選択

ベイズ推定を使うと、適切なピーク個数が推定可能

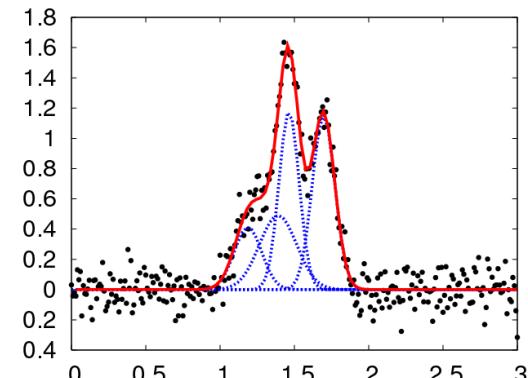
[Nagata et. al., 2012]



$K = 2$



$K = 3$



$K = 4$

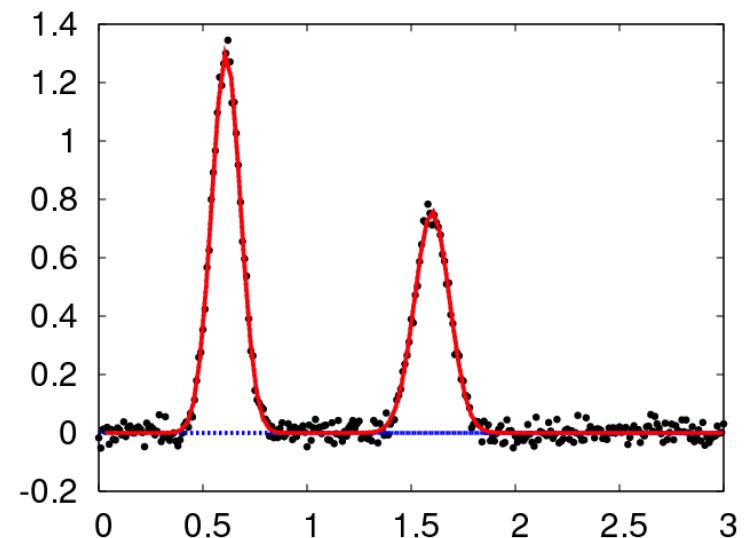
# フィッティングモデル構築の例

Observed data:  $D = \{x_i, y_i\}_{i=1}^n$

$x_i$ : input     $y_i$ : output

$$f(x; \theta) = \sum_{k=1}^K a_k \exp\left(-\frac{b_k(x - \mu_k)^2}{2}\right)$$

$$\theta = \{a_k, b_k, \mu_k\} \quad k = 1, \dots, K$$



Mean squared error

$$E(\theta) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i; \theta))^2$$

評価関数の適切な設定: 計測原理を生かしたモデリング

# 確率モデルの一例：ガウス分布

観測ノイズが、平均0、分散1のガウスノイズ  
→観測データ自体が確率変数

$$y_i = f(x_i; \theta) + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim N(0, 1)$$

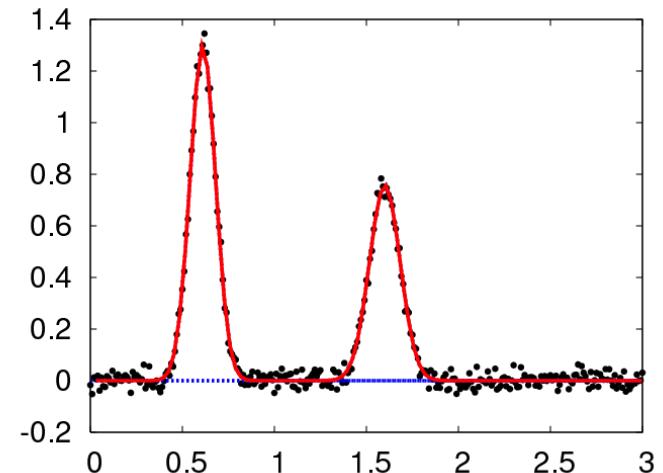
$$p(y_i | \theta) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}\left(y_i - f(x_i; \theta)\right)^2\right)$$

$y_i$  が互いに独立かつ同一分布から生成されるとすると

ボルツマン分布

$$p(Y | \theta) = \prod_{i=1}^n p(y_i | \theta) \propto \exp(-nE(\theta)) \quad Y = \{y_1, \dots, y_n\}$$

$$\text{Energy: } E(\theta) = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i; \theta))^2, \quad \text{Temperature: } \frac{1}{n}$$



# 計測原理を生かしたモデリング カウントデータ：ポアソン分布

光電子によるカウンティング計測→ポアソン過程

Gauss noise modeling

$$E = \frac{1}{n} \sum_i \left( \frac{y_i - f_i}{\sigma} \right)^2$$

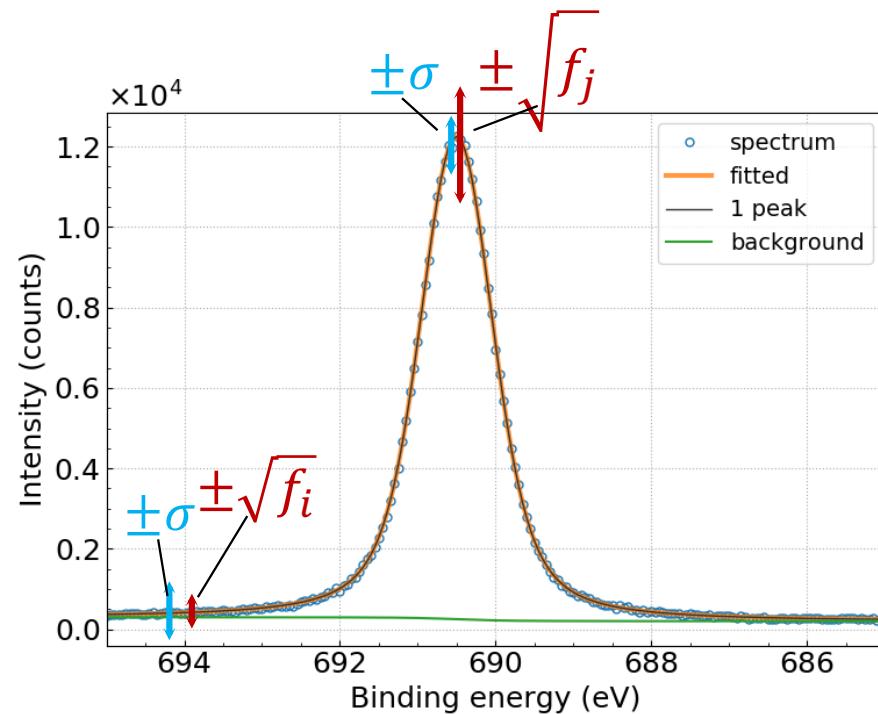
Noise level  $\sigma$  is constant

$y_i$ : data,  $f_i$ :model

Poisson noise modeling

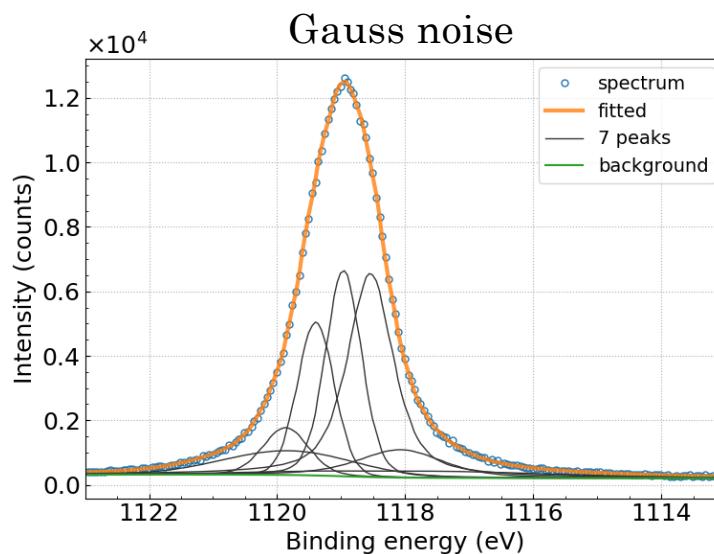
$$E = -\frac{1}{n} \sum_i \log \left( \frac{f_i^{y_i} e^{-f_i}}{y_i!} \right)$$

Noise level depends on intensity.  $\sigma \sim \sqrt{f}$



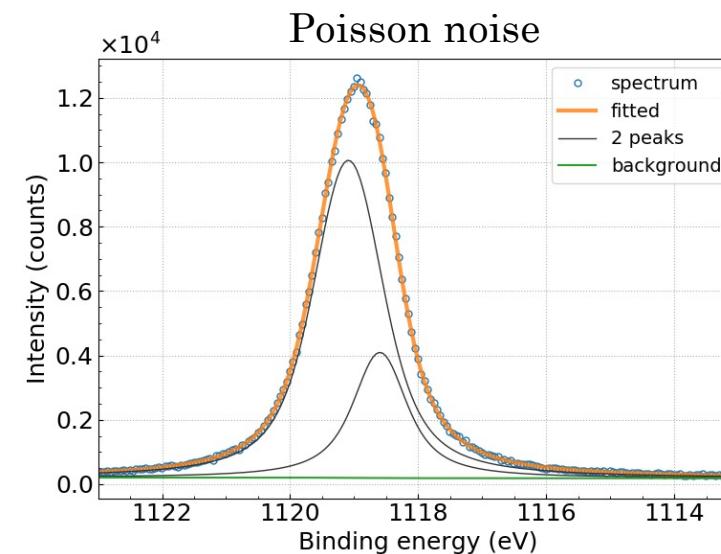
# ポアソンノイズモデリングによる適用例

Model selection result (Ga2p for  $\text{Ga}_2\text{O}_3$ )



抽出されるピークが多すぎる

[重要]

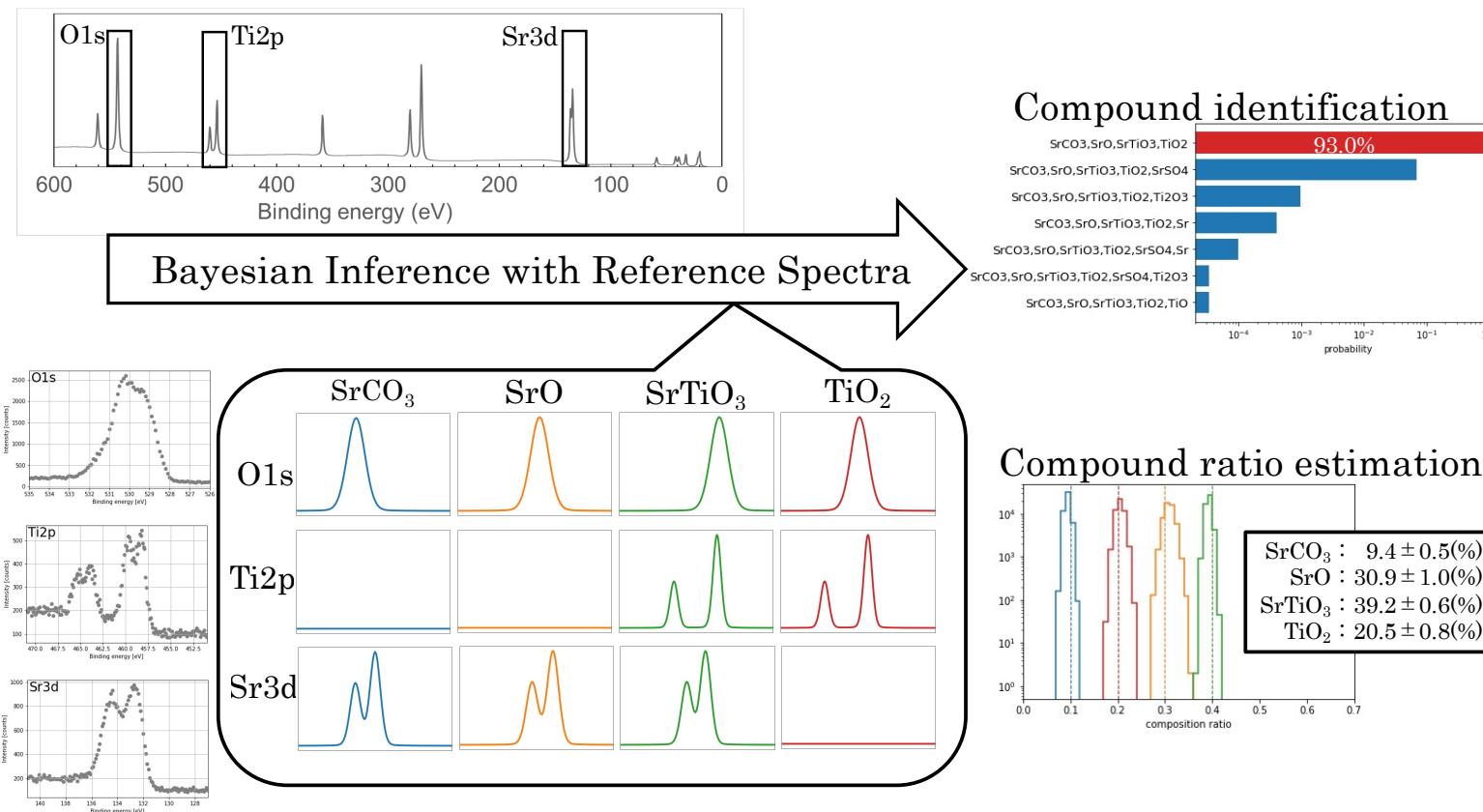


適切なピーク個数の抽出

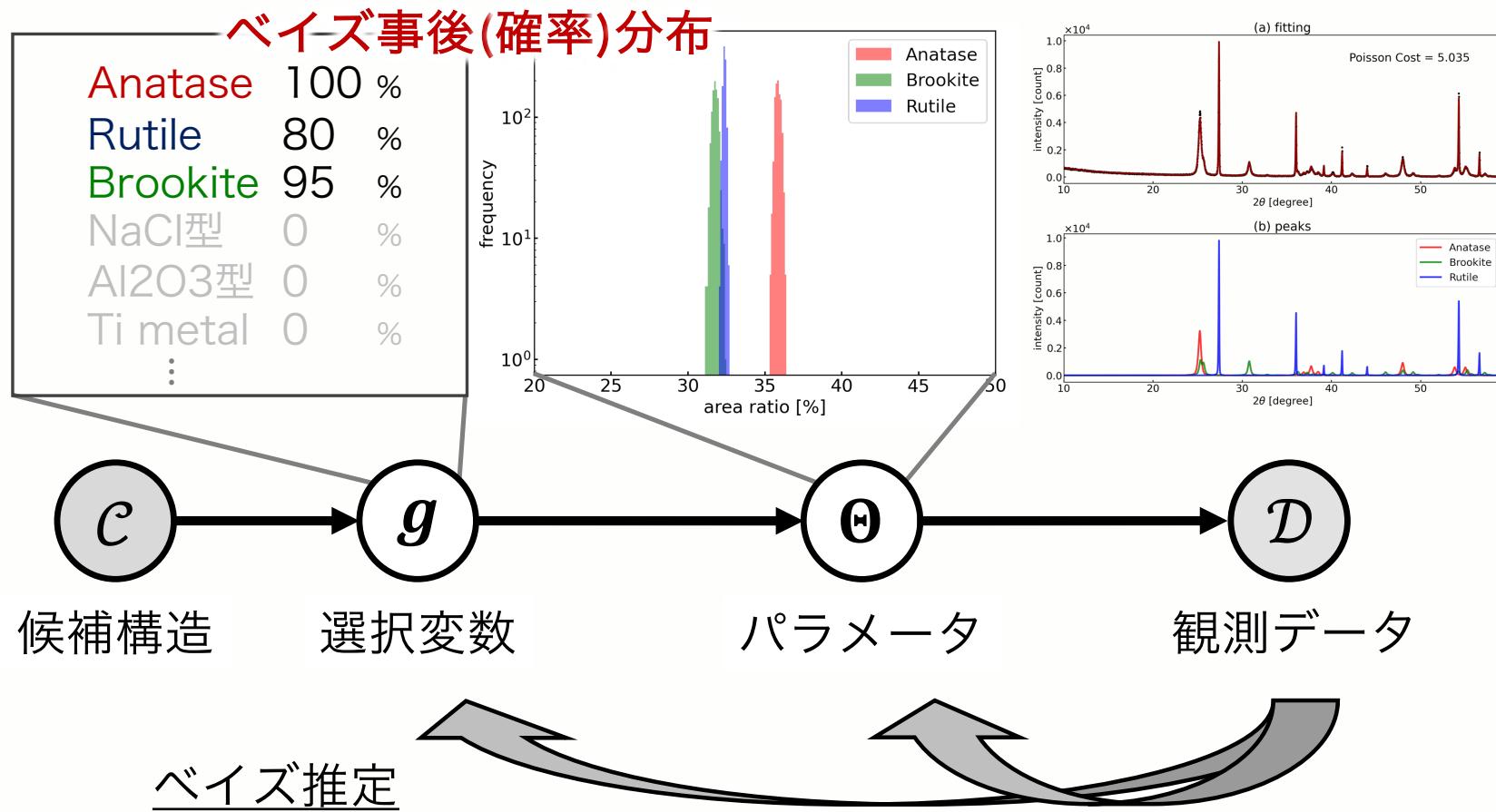
ポアソンノイズモデリングを使うには、カウントデータでないといけない。  
cpsや縦軸スケールしたデータの場合、ポアソン過程を使えなくなる！！

# 複数のコアレベルを対象とした 化合物の存在比率

[Machida et. al., 2021]

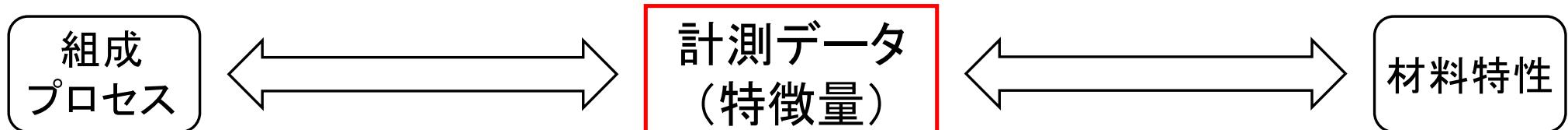


結晶相構造とそれらの混合比を信頼区間付きで自動推定



# 材料設計に向けたアプローチ

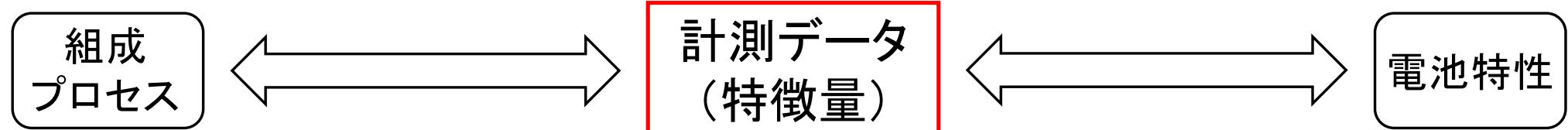
材料開発に資する計測データから、重要な特徴量を抽出する（基底抽出、特徴量抽出）



1. 各階層の数値化: データベース構築
  - 組成情報の数値化: 原子番号, 値電子の数など. 第一原理などを利用するのもあり?
  - 計測データの数値化: ベイズ推定によるフィッティング, 画像特徴量抽出
2. 階層間の関係を明らかにするモデル抽出: スパースモデリング
  - 高次元データかつ少数データセットになりがち→シンプルな線形モデルを基軸.
  - 階層間のデータフィットと, 多数の特徴量から少数の重要な因子を抽出
  - 仮設検定も大事: ラベルシャッフリングによる自由エネルギー比較(ベイズファクター)
3. 特性予測と有用物質の提案: ベイズ推定による予測

# 特徴量エンジニアリング：回帰と予測

作られた特徴量テーブルから、プロセス/特徴量/特性の間の回帰と新規材料への予測



x_{(001)}	x_{(002)}	x_{(003)}	x_{(004)}	x_{(005)}	x_{(006)}	x_{(007)}	x_{(008)}	x_{(009)}	x_{(010)}	x_{(011)}	x_{(012)}	x_{(013)}	x_{(014)}	x_{(015)}	x_{(016)}	x_{(017)}	x_{(018)}	x_{(019)}	x_{(020)}	x_{(021)}	x_{(022)}	x_{(023)}	x_{(024)}	x_{(025)}												
0.4960591	-0.297133	1.2386467	-0.29898	0.9637146	2.7789323	-1.265107	0.7529796	0.0426655	0.3195407	-0.97814	0.3008844	2.709766	1.0194947	-1.369716	0.39998	0.3981654	-0.985468	0.5835062	0.12113	0.4568063	1.8957329	-1.392119	1.1951006	-0.599892												
2.1204055	0.6669248	-0.13969	0.951711	0.0565297	1.1971907	1.2505792	0.6368857	1.0382472	-0.328264	0.7668198	0.3814726	0.3399556	-0.505141	0.039274	-0.92244	-0.504545	0.4480808	0.5506814	-0.07306	0.4563333	-1.495141	-1.26582	0.6980972													
0.3505755	2.4129498	0.3951638	-2.771343	-1.89857	1.439452	2.9236792	0.6376646	-0.85680	1.4365987	-1.37945	1.1696306	-0.557985	0.7122354	0.2948607	-0.83403	0.796774	0.302448	-1.719459	1.6891697	-0.157743	-0.398518	-1.246527	2.387495	0.0220178												
-0.705596	1.2725129	-1.932908	-0.153349	-0.76814	1.0718826	-0.67226	0.4886812	-0.20576	-0.394183	-0.678347	-2.167336	0.548009	0.3490746	-0.588193	-0.2716	-0.054719	1.388026	-0.006857	0.032943	0.4208305	0.8872027	-1.214508														
1.9549665	-0.014545	0.241564	0.2267729	0.1830337	1.364923	1.565061	1.6332699	1.9203439	0.6071613	0.0781075	0.2420815	-0.155169	0.1583167	-0.78836	0.087561	0.8291673	0.3274966	1.0387607	0.6151346	0.072208	-0.242618	0.4669547	0.9256064	-1.127204												
-0.790541	0.6813464	1.3623215	0.7686662	-0.282382	1.691284	0.5160363	-1.432884	-0.547615	1.0923909	-0.511851	0.2564741	0.3705089	0.0879748	-1.649972	1.1435522	-0.038872	0.1629276	-1.441764	1.74267	1.2916605	1.0295129	1.2446065	-0.1565679	0.8621097												
-0.942552	0.6884848	0.075994	0.065657	-0.194723	1.316204	0.6157181	0.9366072	-0.097504	0.3034825	-1.18024	0.4930462	2.554741	0.3860448	0.035001	0.4087561	0.8291673	0.3274966	1.0387607	0.6151346	0.072208	-0.242618	0.4669547	0.9256064	-1.127204												
-0.2477937	-1.3652	0.666552	0.8244247	-0.79113	0.3152505	-0.6504307	-0.800944	0.302078	-0.670775	-1.45338	-0.123371	-0.496209	-0.439398	0.9815548	0.1137294	-0.575613	-0.813258	-0.888501	1.019497	-0.237084	-0.38108	0.5912879	-1.389333	-0.222842												
-0.843422	1.5970937	-0.05997	0.5115428	-0.169389	0.805341	-0.171152	-0.6450571	-0.439767	-0.790842	-0.311942	-0.592978	0.1685475	-0.443724	0.7169	0.189278	1.3748808	0.7084697	-0.54362	1.5176542	-1.290673				-0.2108905												
0.3307761	-2.307597	0.942129	1.237294	1.3690313	1.9548995	1.324915	-1.332641	-0.575952	0.252961	0.6476495	-0.43543	-0.731242	1.0720882	0.3184385	-0.58359	0.4103665	-1.181984	0.9210075	0.3785663	-0.93227	-0.750752	-0.39348	0.500607	0.9222812												
0.688489	1.3443888	0.4798318	-0.733204	0.1620294	-0.405564	-0.008929	-0.438585	-0.20719	0.0995693	0.2572432	1.092178	1.373528	-0.412176	0.0520338	1.5944546	0.28766	-0.293352	-0.102494	0.050505	-0.361058	0.2462394	-0.196346	-0.520266	1.876113	0.2776473											
-0.571873	-0.031077	2.3551196	1.6450099	0.661188	1.970988	1.2171888	0.0634584	0.973468	-2.38529	-1.541888	0.680785	-0.648049	0.6411648	0.889598	0.1184644	-0.977083	0.7986306	0.0945711	0.4125433	1.3050562	0.2462394	-0.196346	0.357207	-0.0709112												
0.1439716	-2.61058	0.6229131	0.0805671	0.9698273	0.637237	-0.566763	-0.158796	-0.813484	-2.1798	1.3863412	1.4023377	-0.812694	0.5690736	-0.0446598	-0.453974	-0.645281	0.6255038	0.4442886	-0.932109	0.7154227	0.4433086	-0.498026	-0.82857													
0.5051968	-1.2450051	1.7594484	-0.227614	0.9126913	0.5947228	0.3891096	-0.867602	-0.985744	1.1669084	-0.97824	-0.657853	-1.180123	-0.355234	0.692551	0.271633	0.2977679	1.058985	-0.054953	-0.143899	0.054953	-0.577755	0.1151444	0.7373665													
0.1834525	0.7786003	-0.662015	1.084344	0.392526	1.4159876	0.016594	0.6132284	0.522573	-0.937422	1.8208473	0.5412308	-1.492537	2.4915849	0.9394020	0.1178947	1.0579779	-0.346114	0.722987	0.0506909	1.265722	-0.4358898	1.0586176	0.3645553													
4.95E-05	1.9763783	-0.421177	-0.437883	-0.844208	-0.69999	-0.128538	-0.553638	-0.933695	0.303094	-0.907070	-0.411642	-0.332862	0.7718326	0.5257326	1.5430762	-0.635375	1.4453433	1.035998	0.9344662	-0.5131409	0.2072003	0.6864623	-1.615998	0.8429888	1.1221475	-1.825622										
-1.239962	0.1719565	-0.46934	-0.102464	-0.072599	-0.10916	0.256072	0.1119354	0.9472544	-0.357829	0.7793226	0.5257326	-0.635375	1.035998	0.9344662	-0.5131409	0.2072003	0.6864623	-1.615998	0.8429888	1.1221475	-1.825622	-0.2118743														
-0.772697	0.1347638	-0.58063	-0.256509	0.6265531	0.6785091	0.2894546	0.0224521	0.58567607	1.798738	-0.527037	-0.266889	0.259729	-0.691236	-0.533378	-0.38006	-0.674075	1.0985302	0.002324	0.7122556	-0.717399	-1.183271	-0.055529	0.2037561	1.3069842												
-0.150083	1.4595156	-1.27333	0.2023137	0.046947	-0.425701	1.7413763	-0.835537	0.1621763	-0.097947	0.1635567	-0.264453	-0.723575	-0.286411	0.1209794	-0.08556	-0.07556	0.134778	-0.029502	-0.131194	0.1810771	-0.236996	-0.134778	-0.015759	0.134778	-0.0727699	0.715427	-0.997024									
1.2960488	-0.027674	0.5405243	2.0078868	0.3505713	-0.21967	-1.479743	1.548318	-0.781449	-2.619897	-0.664071	-0.808215	-0.170164	-1.296087	0.717495	-0.1701495	1.367855	-0.719287	0.247319	0.5616994	-1.147591	-0.394664	0.0379673	0.8043739	-0.294046	-0.780926											
-1.6151929	-0.7470582	0.1203304	-0.0769374	-0.371645	-0.34174	-0.576842	0.127873	-0.877642	0.127873	-0.877642	0.127873	-0.877642	0.127873	-0.877642	0.127873	-0.877642	0.127873	-0.877642	0.127873	-0.877642	0.127873	-0.877642	0.127873	-0.877642	0.127873	-0.877642	0.127873	-0.877642								
-0.453194	0.8697143	0.4761278	0.877642	0.137333	0.127873	0.0874376	0.0313942	0.0267561	0.2927670	0.0511403	0.10760644	-0.123719	0.9748325	0.2005704	0.3709851	-0.914688	0.430849	0.774459	-0.325681	0.223872	0.2999475	0.1054176	-0.210233													
0.3066409	1.0213569	0.2103652	1.329218	1.6938587	0.1703928	1.0073938	1.6173891	0.9247609	0.281087	0.5201922	0.2081087	0.2808088	0.7423438	0.539538	0.50638034	0.50638034	0.5270395	0.5407961	0.7090551	0.020192	0.871112	0.07040334	-0.1018502	0.7448231	-1.019438											
0.993704	0.0254831	0.9116878	0.8012226	-0.28736	1.1674624	0.0150978	-0.361982	0.4712076	-0.828283	-0.291714	-0.195359	-0.316977	1.39698	-0.267739	0.5407961	0.7423438	-0.539538	0.539538	0.539538	0.539538	0.539538	0.539538	0.539538	0.539538	0.539538	0.539538	0.539538	0.539538	0.539538	0.539538	0.539538	0.539538	0.539538			
-0.775778	1.1457033	-0.160794	0.7226908	1.3788387	-0.347124	0.8507021	1.3533947	-0.623227	-0.361957	-0.686824	-0.264453	-0.723575	-0.286411	0.1209794	-0.569844	0.1810771	0.4278944	-0.752663	0.6808929	-0.510429	0.596097	-0.751618	0.7995185	-1.257176												
-0.522752	0.3313327	-0.390995	0.263307	-1.197803	1.6653031	2.057478	-1.5684858	1.1262385	-0.479369	0.2140585	1.1352155	-0.16219	-0.640811	-0.59755	1.3165078	-0.037371	1.537785	0.4501621	0.1035443	-0.990829	0.934153	0.8251415	0.083699	0.5828305												
0.1969212	1.5924044	1.6454257	-0.186701	0.1691185	-0.074185	-0.665676	0.0580008	-1.40151	-0.32307	0.226287	0.0795454	-0.6232929	0.7220759	0.0879545	-0.6232929	0.512344	1.1983983	0.6352326	0.3728217	-0.20128	-0.576247	0.6341943	1.0799398	-0.078795	0.1468136											
-1.052634	1.6394192	-1.318211	-0.52005	-0.650264	2.1623995	-1.154486	0.7257272	0.3182366	-0.642151	-0.348484	-0.339011	1.5341991	0.6342926	-0.664192	0.472827	-0.67383	1.4099507	-0.431181	-0.422625	0.0409389	-1.776868	0.840988	-1.280493	-0.192554												
-1.8665157	0.2101791	-0.309765	-0.167684	-0.176784	-0.13733	-0.4754955	-0.13733	-0.651953	-0.762412	-0.307016	0.770747	-1.543473	-1.68860	-0.44261	0.914179	1.2963797	-0.57904	1.16																		

# ベイズ線形回帰の枠組み

- 作られた特徴量に十分な情報がある → 線形でも十分な相関を見出せるであろう仮説
- 変数の数が多いので、フィッティングだけでなく、重要因子の抽出も同時にを行う

<通常の線形回帰>

$$y = a_0 + a_1x_1 + \cdots + a_dx_d$$

<変数選択つき線形回帰>

$$y = (a_0 \circ c_0) + (a_1 \circ c_1)x_1 + \cdots + (a_d \circ c_d)x_d$$

連続変数だけでなく、離散変数も最適化の対象になるため、計算量爆発を起こす  
→モンテカルロ法の活用

LASSOなどいろいろ知られた方法があるものの、安定性やアルゴリズム特性が未解明

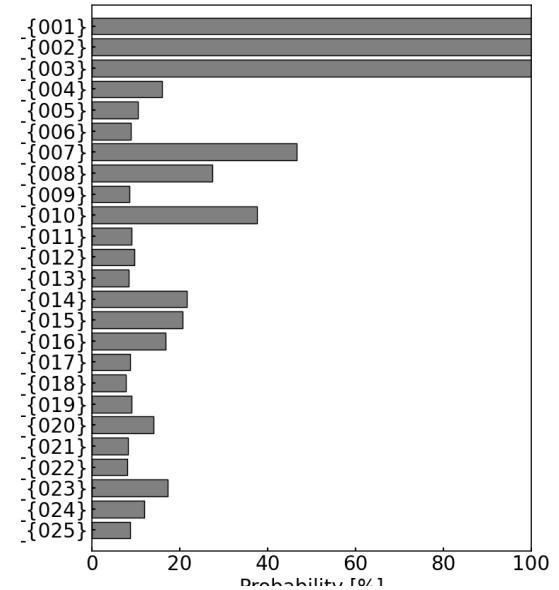
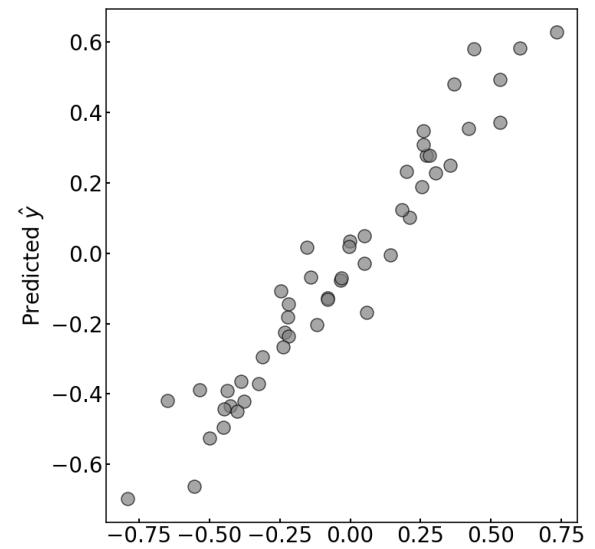
# ベイズ線形回帰で出せるもの

- フィッティング精度

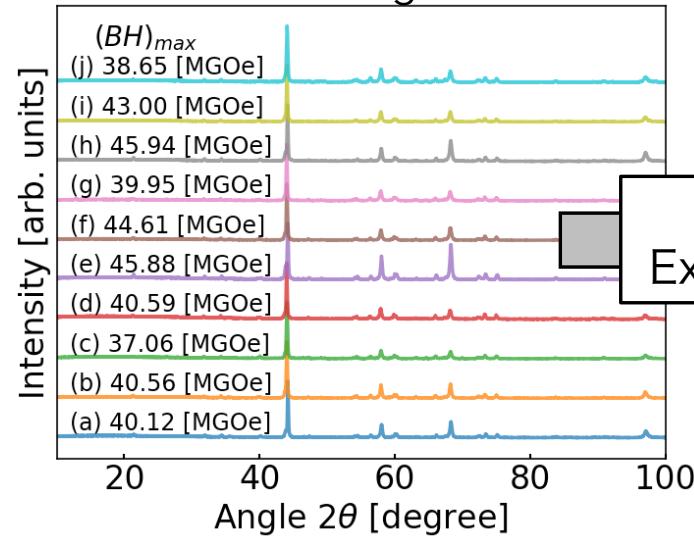
`predict.png`というファイルにて出力  
テストデータに対する性能評価は省いている

- 変数の重要度(確率)

- `feature.png`というファイルにて出力
- 変数の組み合わせを考慮した上で、各変数が  
与えられたデータのフィッティングに必要かどうか



## Measured Data of NdFeB magnets



Hot extrusion temperature  $T_{\text{ext}}$  ( $^{\circ}\text{C}$ ) and Load limit  $F_{\text{ext}}$  (kN)

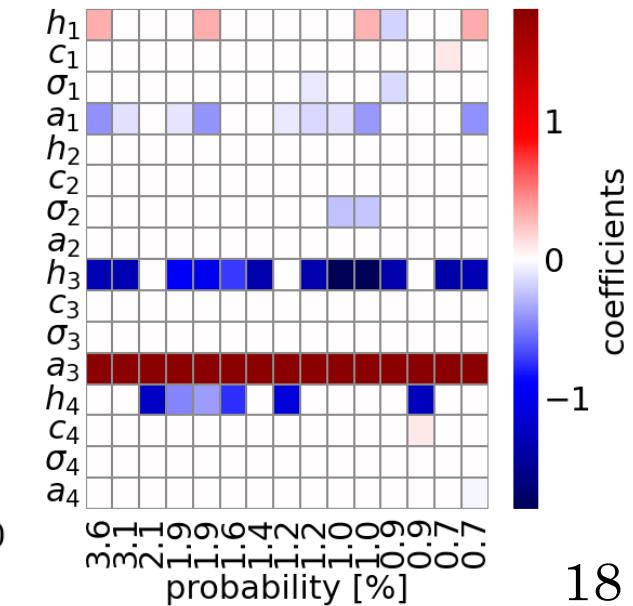
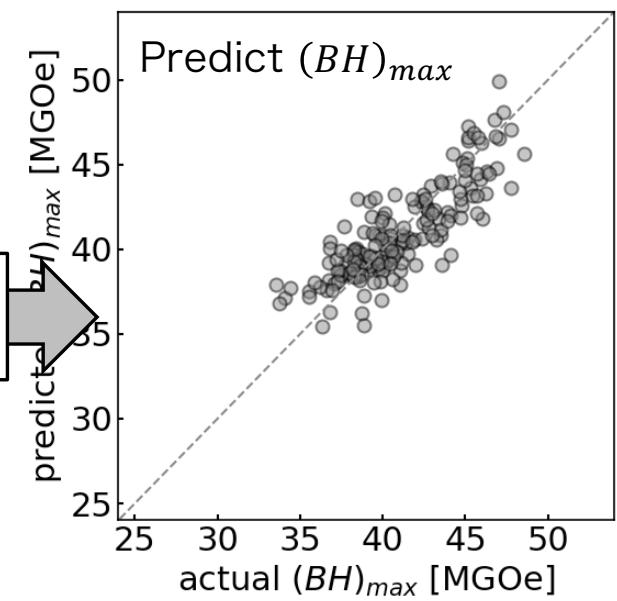
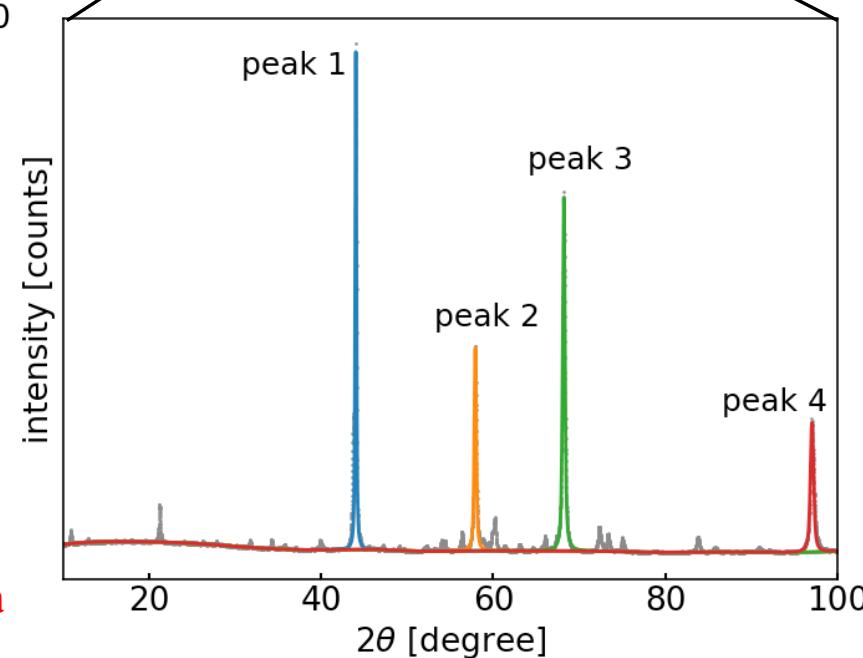
- (a)  $T_{\text{ext}} = 750, F_{\text{ext}} = 70$
- (b)  $T_{\text{ext}} = 750, F_{\text{ext}} = 100$
- (c)  $T_{\text{ext}} = 750, F_{\text{ext}} = 60$
- (d)  $T_{\text{ext}} = 750, F_{\text{ext}} = 60$
- (e)  $T_{\text{ext}} = 750, F_{\text{ext}} = 50$
- (f)  $T_{\text{ext}} = 775, F_{\text{ext}} = 50$
- (g)  $T_{\text{ext}} = 775, F_{\text{ext}} = 50$
- (h)  $T_{\text{ext}} = 750, F_{\text{ext}} = 50$
- (i)  $T_{\text{ext}} = 775, F_{\text{ext}} = 50$
- (j)  $T_{\text{ext}} = 750, F_{\text{ext}} = 35$

**Total XRD dataset: 176**

**Data point: 9000 per an XRD data**

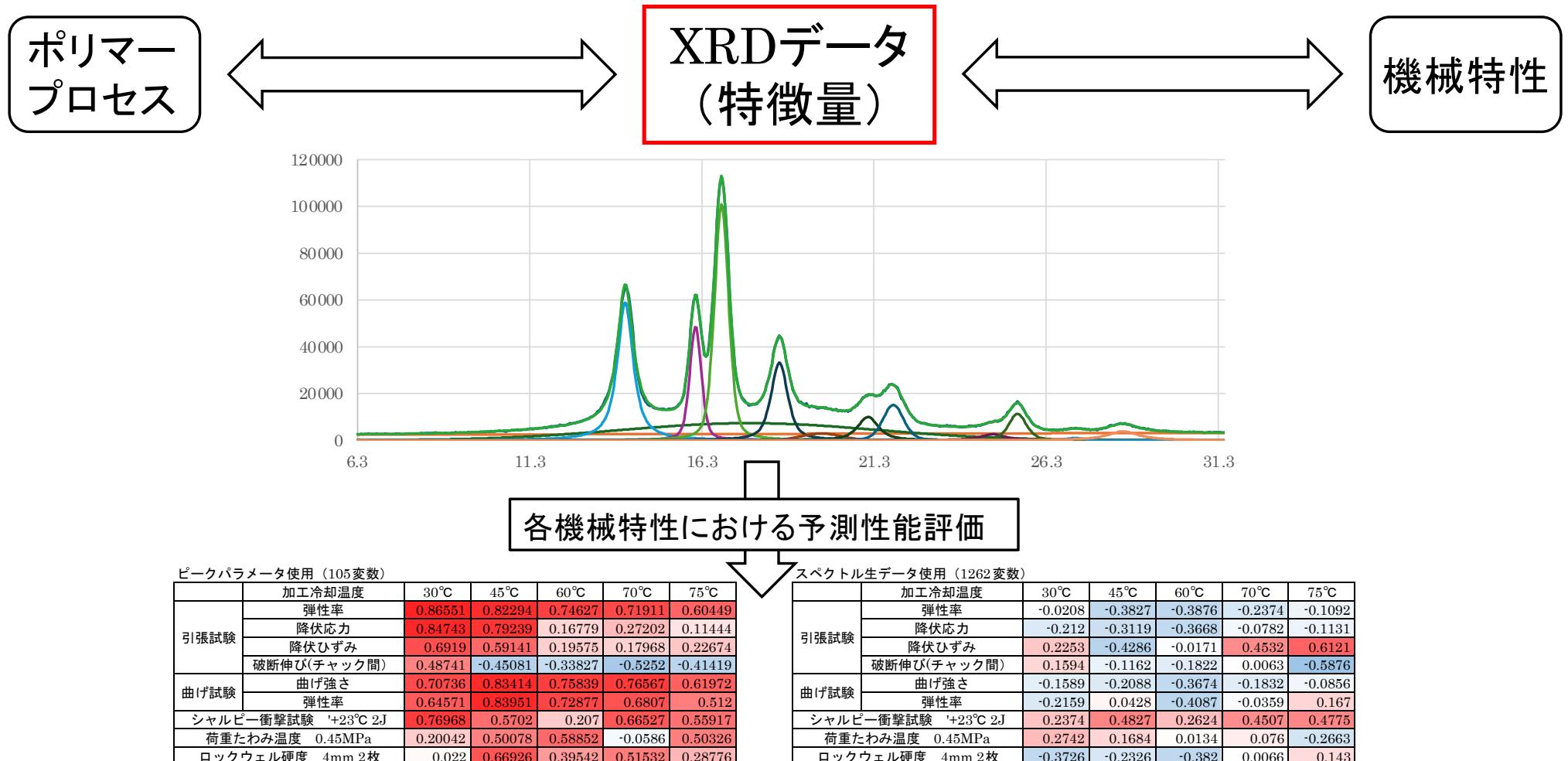
## Dimensionality Reduction via Peak Extraction

<https://doi.org/10.1080/27660400.2024.2384352>



# 高分子材料における事例

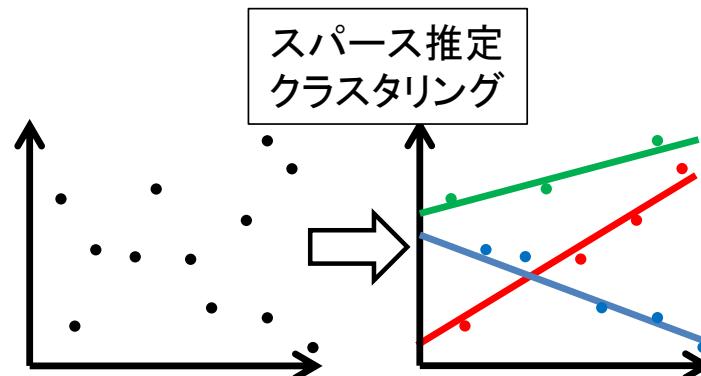
Sci. Technol. Adv. Mater. Vol. 25 (2024) 2388016



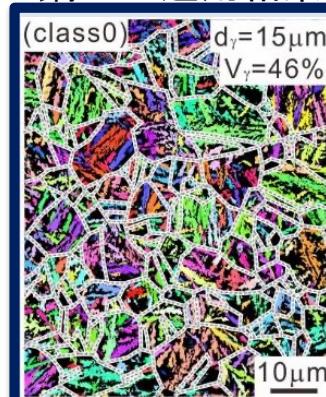
# スパース混合回帰による 材料設計の新規条件提案

[Ueji et al., 2022]

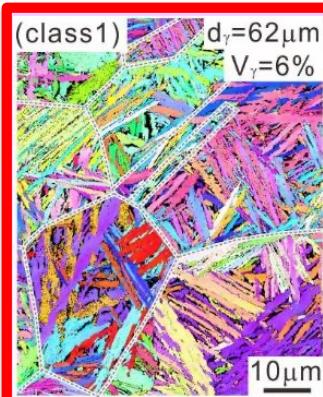
- 構造材料のように、いくつかの相構造が存在する系
- データのみから相分離メカニズムを解明しつつ、材料設計条件と強度、伸びなどの目的変数との関係性を線形回帰でフィッティングするモデリング



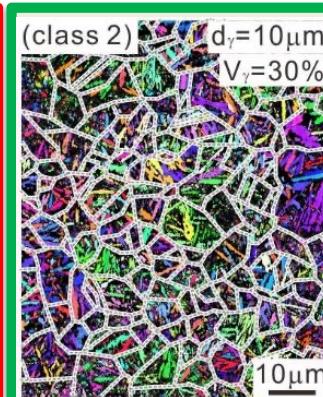
## TRIP鋼への適用結果



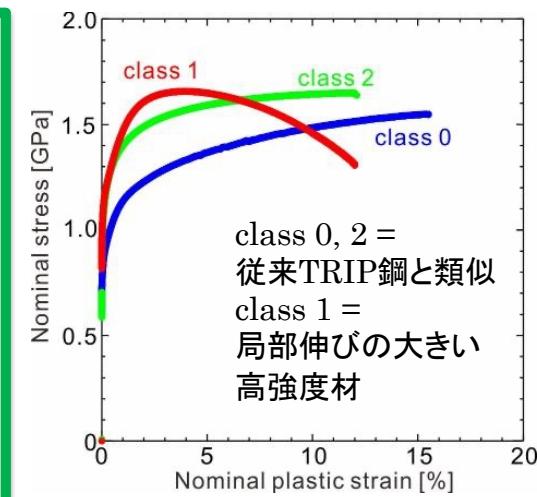
class 0 回帰の提案  
・従来TRIP鋼 + C增量



class 1回帰の提案  
Mnを微量Niで代替  
 $\gamma$ 化高温化で焼入性補完

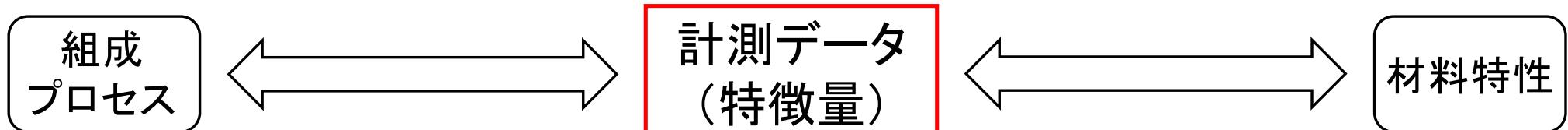


class 2回帰の提案  
・class 0と類似



# 材料設計に向けたアプローチ

材料開発に資する計測データから、重要な特徴量を抽出する（基底抽出、特徴量抽出）



## 1. 各階層の数値化: データベース構築

- ・組成情報の数値化: 原子番号, 値電子の数など. 第一原理などを利用するのもあり?
- ・計測データの数値化: ベイズ推定によるフィッティング, 画像特徴量抽出

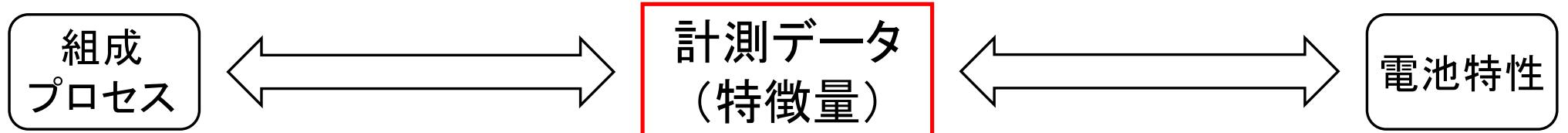
## 2. 階層間の関係を明らかにするモデル抽出: スパースモデリング

- ・高次元データかつ少数データセットになりがち→シンプルな線形モデルを基軸.
- ・階層間のデータフィットと, 多数の特徴量から少数の重要な因子を抽出
- ・仮設検定も大事: ラベルシャッフリングによる自由エネルギー比較(ベイズファクター)

## 3. 特性予測と有用物質の提案: ベイズ推定による予測

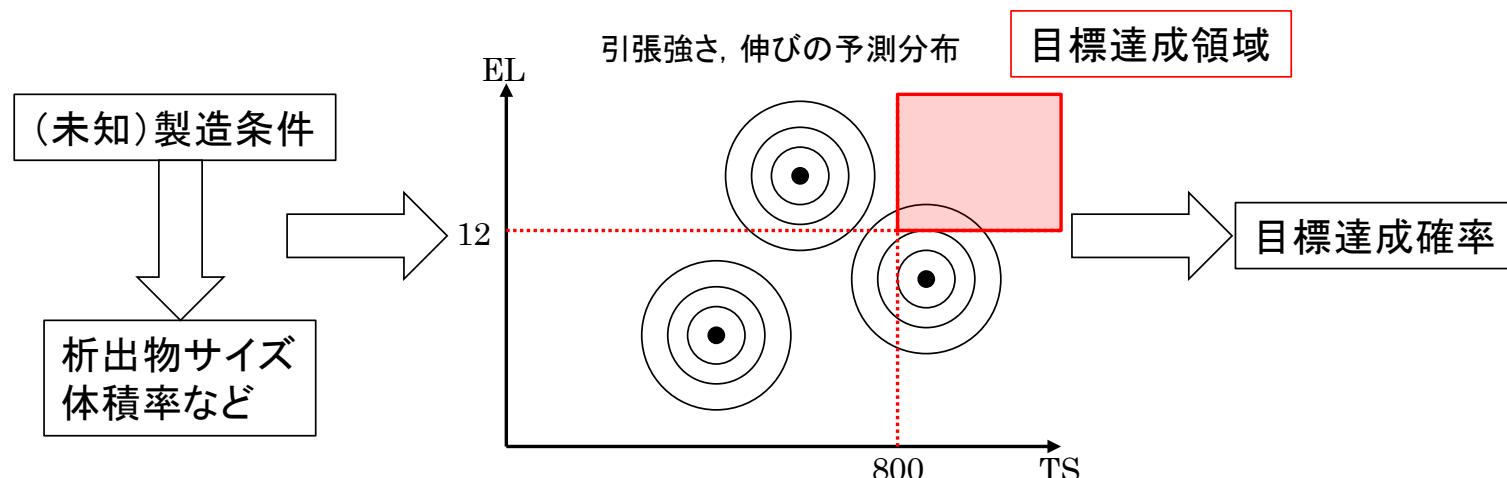
# ベイズ推定による予測

構築された回帰モデルに基づき、特性予測を実施。良好な特性のプロセス条件を提案



ベイズ推定:「ベイズの定理」に基づき、  
事後確率分布を導出・推定

$$p(\theta|D) = \frac{p(D|\theta)p(\theta)}{p(D)}$$



# 予測結果の例

ランダムに製造条件を10,000件生成し、達成確率(Prob.)の高い候補

Prob_TS	Prob_EL	Prob	Si	Fe	Cu	Mn	Mg	Cr	Zn	Ti
0.9738927	0.78613247	0.76718412								
0.95319957	0.77654808	0.74166922								
0.93452275	0.78112659	0.72713667								
0.7443105	0.89063479	0.72223144								
0.94106494	0.76997857	0.72200915								
0.7443105	0.87745883	0.72174934								
0.74426676	0.89660827	0.72058266								
0.95262858	0.75579843	0.71802509								

- 上位2種の合金成分をもとに、様々な時効条件で実証実験
  - 上記予測に「溶体化するかの判別」が反映されていないため
  - 合金成分の複数設計は実験コストが高い反面、時効条件を多数ふるのは、比較的容易に実施可能であるため

# 高強度・高延性アルミニウム合金の最適製造プロセス探索

内閣府 SIP「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」  
(株)UACJ, 東京大学との共同研究

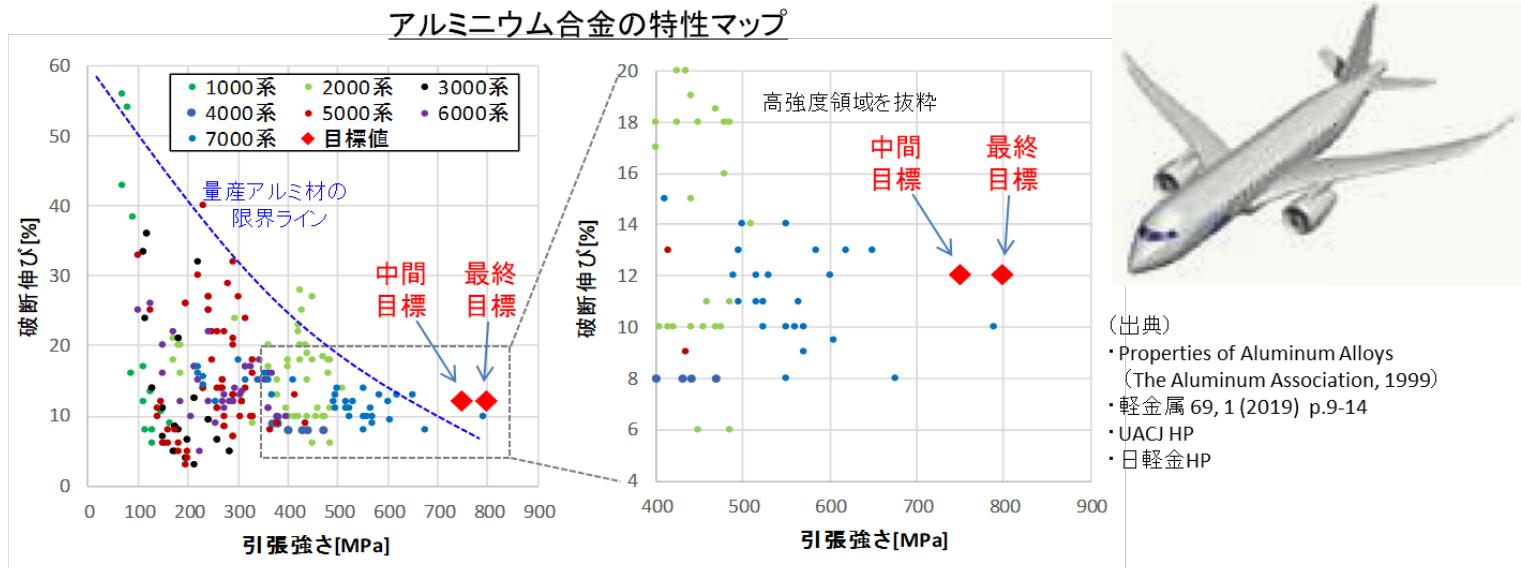
超々ジュラルミン(7000系アルミ合金, Al-Zn-Mg-Cu系合金)

引張強さ(TS)・伸び(EL)を強度と延性の代表特性値とし、それについて、以下の目標値を設けた。

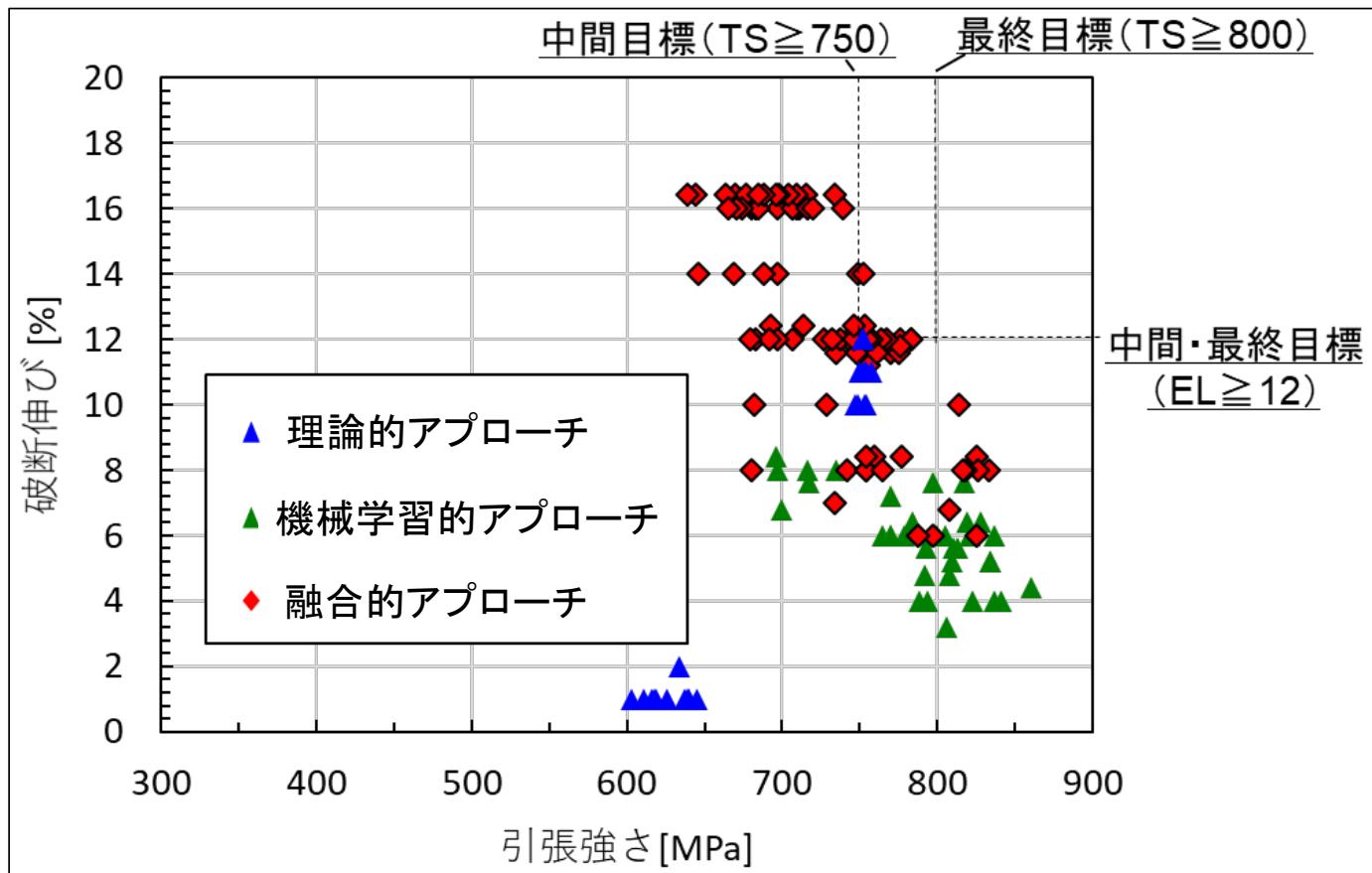
中間目標: TS750MPa以上, EL12%以上(FY2020)

最終目標: TS800MPa以上, EL12%以上(FY2022)

## 【ベンチマーク】



## 実証実験による結果



# まとめ（再掲） 材料設計に向けたアプローチ

材料開発に資する計測データから、重要な特徴量を抽出する（基底抽出、特徴量抽出）



1. 各階層の数値化: データベース構築
  - 組成情報の数値化: 原子番号, 値電子の数など. 第一原理などを利用するのもあり?
  - 計測データの数値化: ベイズ推定によるフィッティング, 画像特徴量抽出
2. 階層間の関係を明らかにするモデル抽出: スパースモデリング
  - 高次元データかつ少数データセットになりがち→シンプルな線形モデルを基軸.
  - 階層間のデータフィットと, 多数の特徴量から少数の重要な因子を抽出
  - 仮設検定も大事: ラベルシャッフリングによる自由エネルギー比較(ベイズファクター)
3. 特性予測と有用物質の提案: ベイズ推定による予測