

KNIMEを使った 材料探索 基本操作(4)

早稲田大学 応用化学科

講師(任期付) 畠山 歓

<https://github.com/KanHatakeyama/>

satokan@toki.早稲田.jp

今回扱う内容

Pythonのイ
ンストール

各種モデル
の利用

KNIME vs Python




KNIME

便利だが、標準で扱えるモデルが少ない



Python

自由度が高いが、プログラミングが大変



KNIME上で
誰かが書いた
Python
スクリプトを
動かせば良い



Pythonのインストール

環境依存性が結構強いので、上手くいかない可能性があります

動作確認済みの環境

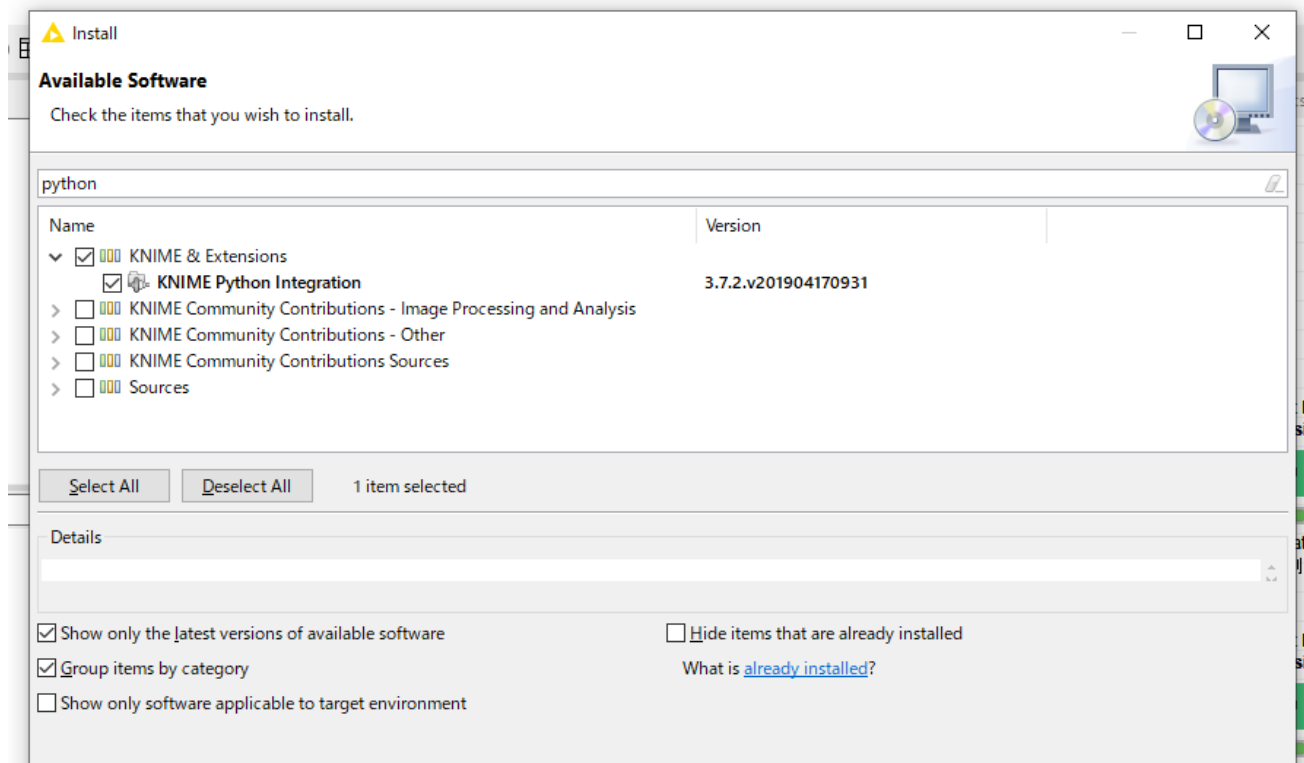
- Windows10
 - Macだと動かせない人がいました
- KNIME 4.2.0
 - 古すぎると微妙です
- Anaconda 4.8.3
 - 後ほど説明
 - 2020/7/23現在の最新バージョンでも多分大丈夫です

Anacondaのインストール

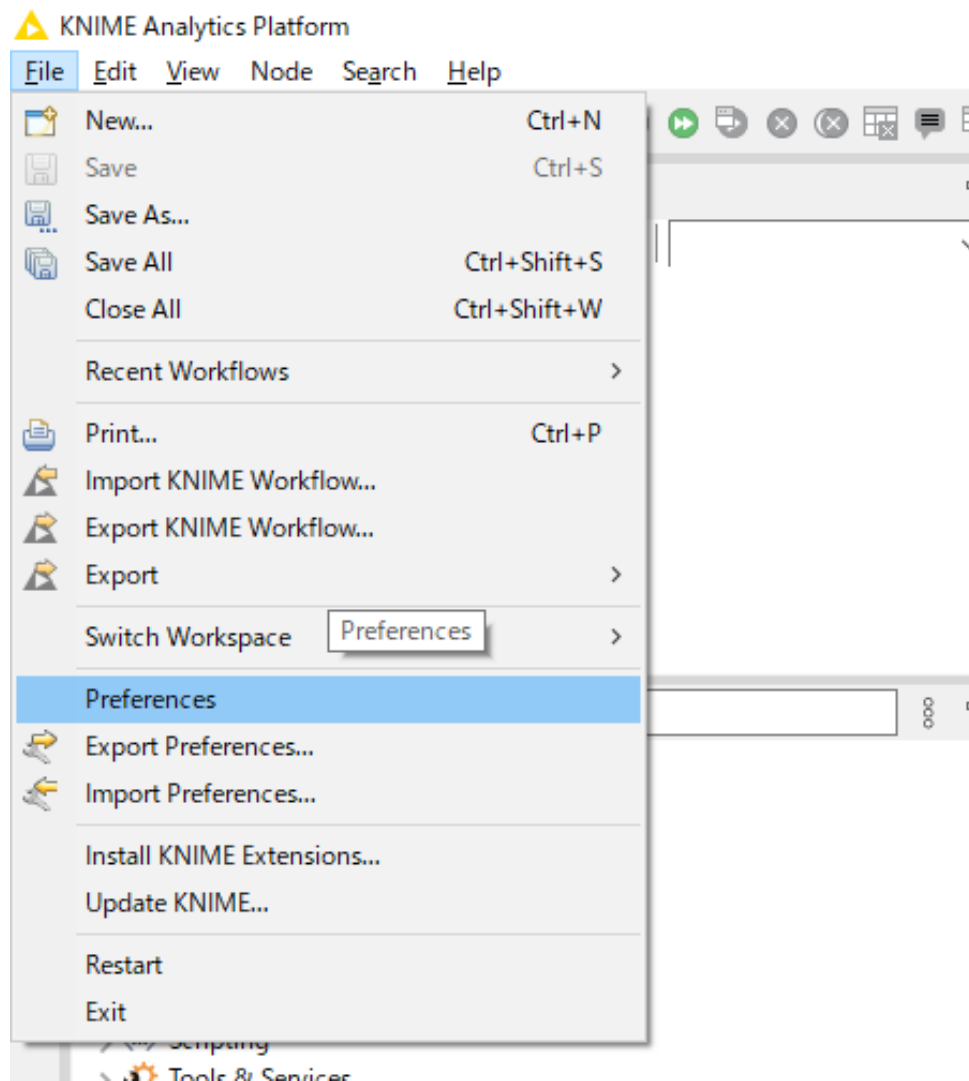
- Pythonの関連ライブラリを同梱したパッケージです。
- 下記URLダウンロードし実行して下さい。
- Python 3.7を選択 (2.7ではない)
- ファイルサイズが大きいので注意(展開すると数GB)

<https://www.anaconda.com/products/individual>

KNIMEにpython extensionを追加



- ”KNIME Python integration”を追加して下さい



KNIMEの 設定画面を開く

Preferences

python

KNIME

Python

Python

See [this guide](#) for details on how to install Python for use with KNIME.

Python version to use by default

☐ Python 2 ☒ Python 3

Python environment configuration

☒ Conda ☐ Manual

Conda

Path to the Conda installation directory Browse...

Conda version: 4.8.3

Python 2

Name of the Python 2 Conda environment New environment...

Python version: 3.7.6

Python is required to have a major version of 2, required minimum version is 2.7.0 (inclusive).
The installed Python version is 3.7.6.

Note: You can create a new Python 2 Conda environment that contains all packages required by the KNIME Python integration by clicking the 'New environment...' button above.

Python 3 (Default)

Name of the Python 3 Conda environment New environment...

Python version: 3.7.6

Serialization library

1. Pythonと
打ち込む

2. Python3選択

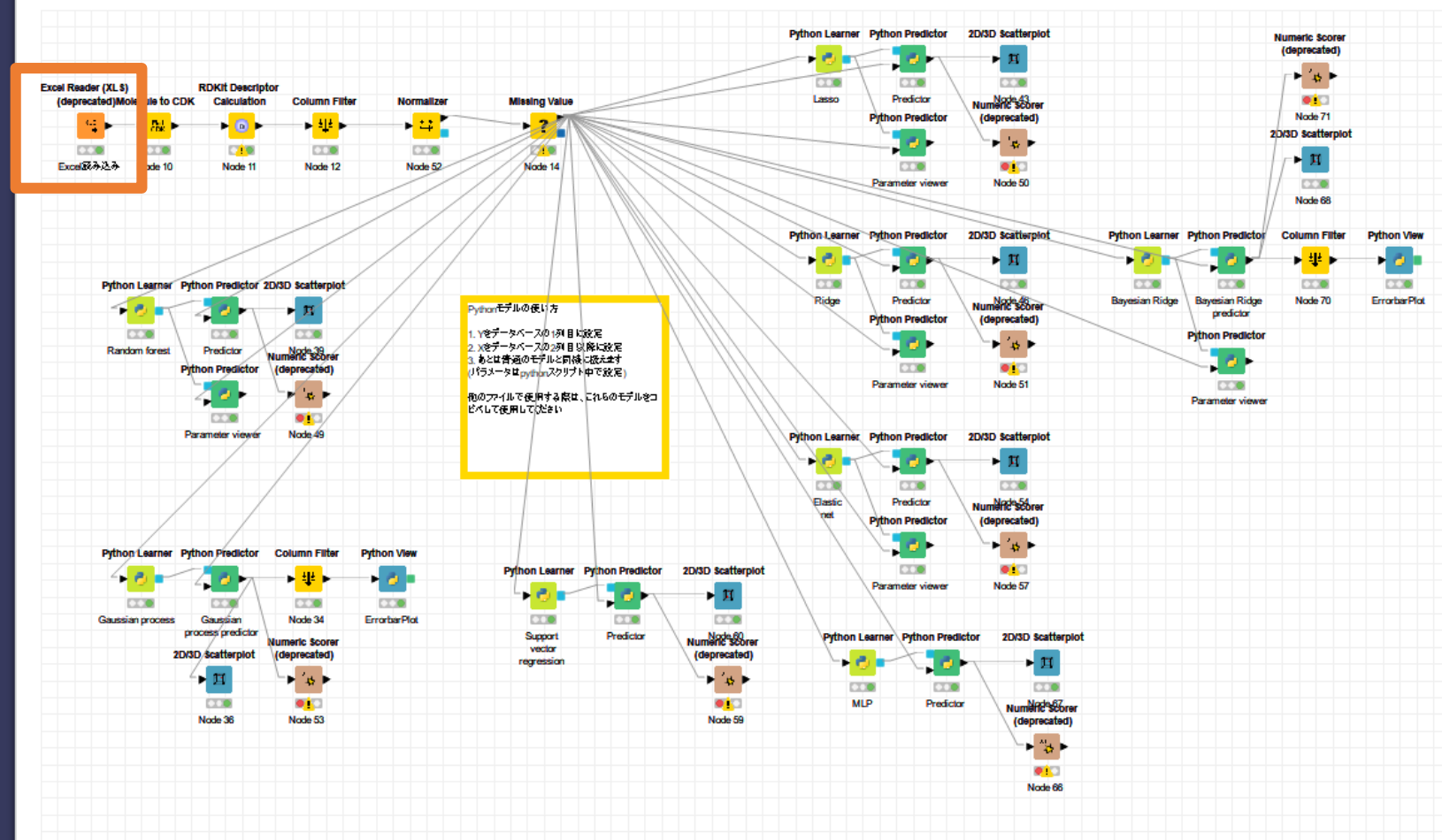
3. Conda 選択

無視してOK

Pythonのバージョンが表示
されていることを確認

KNIMEに
Pythonを
設定

wikipedia_dbを読み込み



20200721wiki_tutorial 4
を開く

色々なモデルが入っているので、便利かもしれません

利用出来るモデル

Scikit-learnと呼ばれるPython用ライブラリを
KNIME上で使用出来るように
プログラムコードを書いています

モデルの説明等はこちら

https://scikit-learn.org/stable/user_guide.html

Lasso

Ridge

Elastic net

Random forest

Gaussian process

Support vector machine

Bayesian ridge

Multi layer perceptron (MLP)

TODO

実例で色々 と機械学習を試す