

DDCoMS-PCoMS-RISME 計算物質科学セミナーシリーズ 2025
ー計算科学によるデータ創出、活用に向けてー

開催方法：オンライン開催

事前登録制：

<https://pcoms.imr.tohoku.ac.jp/R07/DDCoMS-PCoMS-RISME-CMS-seminars-2025/>

第 1 回<応用レベル>令和 7 年 11 月 4 日(火) 16:15-17:45 (最長 18:15)

開始時刻が諸般の事情で当初予定(10/22 以前のご案内)から変更となっています (ご注意ください)

「材料科学における非等長データの解析：
頻出パターンマイニングと置換・証拠理論の活用」

木野 日織 教授 (統計数理研究所)

講演概要：

材料科学の実験や測定で得られるデータは、しばしば欠損を含み、また変数の長さも揃わない「非等長データ」となります。大学で研究や実験に取り組む学生にとっても、このようなデータをどう扱うかは重要な課題と思います。本講演では、その課題に対応する二つのアプローチを紹介します。第一は「頻出パターンマイニング」を利用する方法です。欠損を含むデータから繰り返し現れる規則性を抽出し、材料の性質や挙動を分類するために活用します。第二は「置換を利用する手法」で、非等長な変数を適切に対応づけることにより推薦システムとして機能させるアプローチです。特に、複数の実験データや文献データといった異なる情報源を統合する際には、証拠理論（デンプスター＝シェーファー理論）を利用し、不確実性を考慮しながら信頼できる推薦を導きます。講演では Python コードを交え、理論から実装までを具体例を通じて紹介します。

参考文献：木野 日織, ダム ヒョウ-チ 著「改訂版 Python ではじめるマテリアルズインフォマティクス: ChatGPT を活用しよう」 (近代科学社 Digital) 第 6 章

(お問合せ：PCoMS 事務局 E-mail：pcoms@grp.tohoku.ac.jp)