



データ取得API

ツール

クラスタシステム

クラウドシステム

利用案内

参考情報

ツール

- ▶ 第一原理電子構造自動計算システム
- ▶ nap (Nagoya Atomistic-simulation Package)
- ▶ 化合物予測アプリ
- ▶ 比熱容量予測アプリ
- ▶ APIツール

関連リンク

- ▶ MateriApps
- ▶ 朱鷺の杜Wiki - 機械学習

[ホーム](#) > [ツール](#) > [化合物予測アプリ](#)



化合物予測アプリ

概要

機械学習（ランダムフォレスト）を用いて、化合物の有無を予想するための Webアプリケーションです。

利用方法

- 化合物予測アプリのページにてどなたでもご利用いただけます。
- ページにアクセス後、予測する化合物の構成元素の入力しPredictボタンを押すことで予測結果が表示されます。
- 入力方法はキーボードで入力する方法と、CSVを読み出す方法があります。
- DPF利用者はJupyterクラウドにてPythonバージョンもご利用いただけます。

