

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 > APIツール (概要)

APIツール

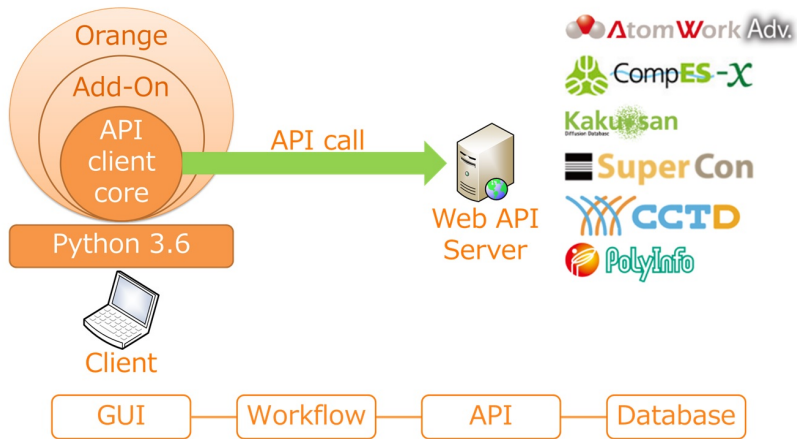
概要

- データ取得API (以下WebAPI) の利用を手助けするツールや環境です。
- 以下を端末室にてご利用いただけます。

MatNavi by Orange	WebAPIの直観的な操作を行えるデータマイニングツール。
Jupyterクラウド	Webブラウザから使用できるPythonコーディング環境。

MatNavi by Orange

「MatNavi by Orange」は、データマイニングツール「Orange」でWebAPIを利用できるようにしたツールです。



以前はWebAPIを利用する場合、Linuxシステムを利用しプログラミングを行うスキルが必要でした。「MatNavi by Orange」ではビジュアルプログラミングによりWebAPIの学習・利用を直感的かつ簡単に利用することができます。

Jupyterクラウド

「Jupyterクラウド」は、Webブラウザから利用できるPythonコーディング環境です。
DPFアカウントをお持ちの場合は、端末室からURLにアクセスするだけですぐにご利用いただけます。
WebAPIの利用はもちろんのこと、TensorFlowやpymatgenなどのライブラリがインストールされています。

	Python2	Python3	Python3.6 for RDKit
NumPy	1.16.2	1.16.2	1.15.0
pandas	0.24.2	0.24.2	0.22.0
Pymatgen	×	2019.3.27	2019.3.13
SciPy	1.2.1	1.2.1	1.2.1
Spglib	1.12.2.post0	1.12.2.post0	1.12.2.post0
COMBO	0.2	×	×
TensorFlow	1.13.1	1.13.1	1.6.0
Keras	2.2.4	2.2.4	×
scikit-learn	0.20.3	0.20.3	0.19.1
PyTorch	1.0.1.post2	1.0.1.post2	1.0.1.post2
RDKit	×	×	2017.09.1
DeepChem	×	×	2.1.0
mordred	×	×	1.1.1
XenonPy	×	×	0.3.2

NIMS機構内限定

利用者の方はAPIツールの詳細をご覧ください。