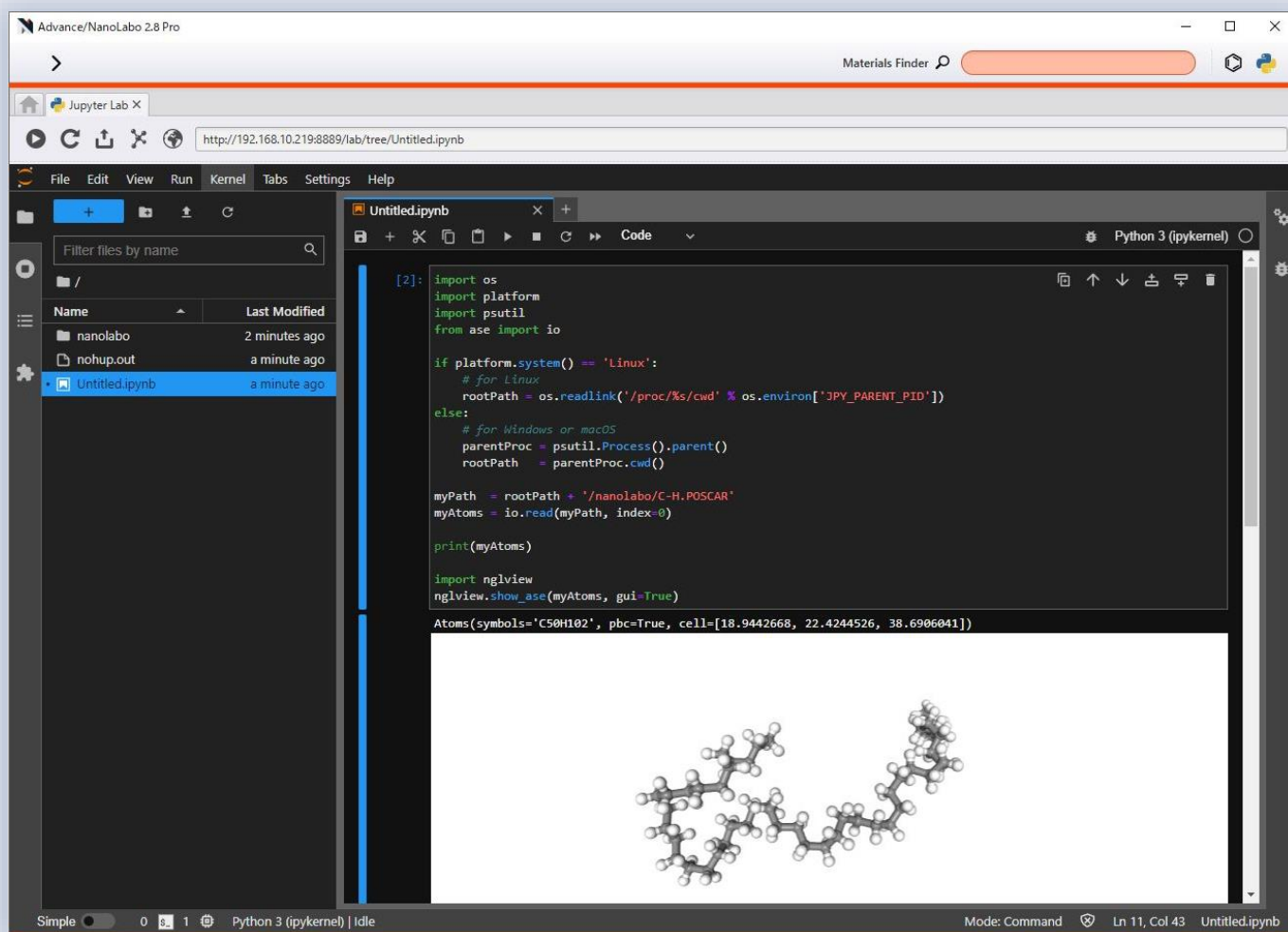


Jupyter Interface for NanoLabo

Advance/NanoLabo の画面上で Jupyter Lab^{※1} を表示および操作することができる新サービス「Jupyter Interface for NanoLabo」を 2023 年 4 月にリリースいたしました。Advance/NanoLabo でモデリングした構造ファイルを Jupyter Lab が動作しているサーバーへ転送して、ASE^{※2} の Atoms オブジェクトを生成する Python コードを出力します。この Python コードを Notebook に貼り付けるだけで、Advance/NanoLabo にて作成した結晶や分子など種々のモデル構造を任意の Jupyter Lab の環境でご利用になれます。逆に、Jupyter Lab にて出力された構造ファイルをダウンロードして、Advance/NanoLabo 上で可視化することも可能です。

※1 Jupyter Lab (<https://jupyter.org>)はウェブベースの統合開発環境ですが、ここでは主として Python をカーネルとした Notebook としての運用を想定しています。

※2 ASE (Atomic Simulation Environment; <https://wiki.fysik.dtu.dk/ase/>)は、第一原理計算や分子動力学計算を実施するための Python モジュールとして広く使われています。



適用例

- Jupyter Lab でハイスループット計算を実施しているが、ベースとなるモデル構造が複雑で Python で生成することが困難な場合(固固界面など)。NanoLabo でベース構造を作成して、Jupyter Lab で種々の派生構造を生成する。
- Jupyter Lab または Python でしか使えない固有の機能を使いたいが、モデリング機能が不十分である。
- NanoLabo 上の QE や LAMMPS で使用するための構造データを、Python スクリプトで生成したい。

動作環境

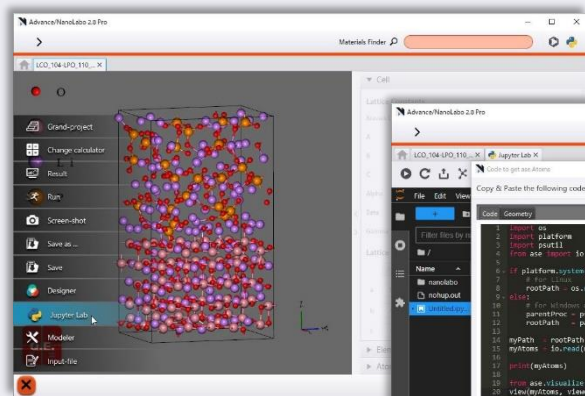
ローカル PC (Advance/NanoLabo を インストールするマシン)

- Windows 10
- CentOS 7
- AlmaLinux 8
- macOS 10.15 以上

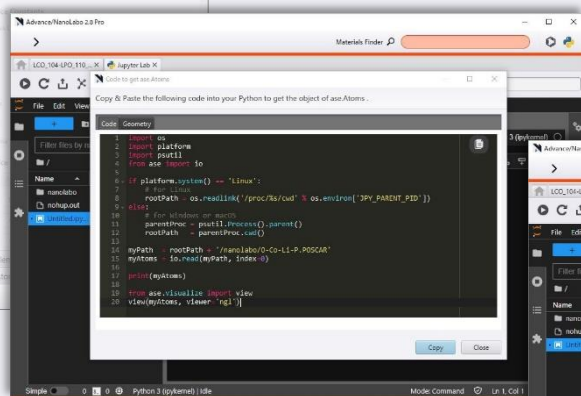
サーバー (Jupyter Lab を インストールするマシン)

- ローカルと同じマシン
- 自社内のサーバー
- クラウド環境
- ※OS 種別は任意

使い方

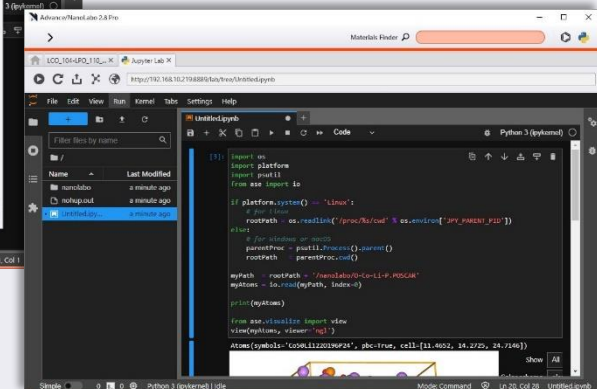


1. NanoLabo で
モデル構造を作成



2. Jupyter Lab に
モデル構造を転送

3. Atoms オブジェクトを
生成する Python コードを
コピー&ペースト



Matlantis との連携機能をリリース (2023年11月)

- 株式会社 Preferred Computational Chemistry が提供する汎用原子レベルシミュレーションクラウドサービス Matlantis (<https://matlantis.com/ja/>) との連携機能をリリースしました。
- Advance/NanoLabo で作成したモデルを、Matlantis 上の Jupyter Lab へ転送して種々の解析が実施できます。



ライセンス

ライセンス形態

OS	ライセンス形態
Windows	ノードロック (リモートデスクトップ利用可)
Linux	フローティング
macOS	ノードロック (リモートデスクトップ利用可)

ライセンス価格

製品	年間(企業・国研)	年間(大学)	買取(企業・国研)	買取(大学)
Advance/NanoLabo	50 万円※2	25 万円※2	150 万円※2	75 万円※2
Advance/NanoLabo Pro※1	90 万円※2	45 万円※2	270 万円※2	135 万円※2
Jupyter Interface for NanoLabo※3	40 万円	20 万円	120 万円	60 万円

※1 Advance/NanoLabo Pro では不整合界面および高分子のモデリング機能がご利用になれます。

※2 3本以上の同時購入で、ライセンス価格がお得になります。詳細は、営業担当者までご連絡下さい。

※3 Jupyter Interface for NanoLabo をご利用頂くためには、Advance/NanoLabo または Advance/NanoLabo Pro のライセンスを事前または同時にご購入して頂く必要があります。

アドバンスソフト株式会社

詳しい情報をご希望の方は、まずはお問い合わせください。デモンストレーションも可能です。

〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台四丁目3番地 新お茶の水ビルディング 17階西

TEL: 03-6826-3971 FAX: 03-5283-6580 URL: <http://www.advancesoft.jp/>

E-mail: office@advancesoft.jp

