

# ChemInfoNavi

## ケムインフォナビ

大学発ケモインフォマティックスベンチャー

(有)ケムインフォナビは大学発ケモインフォマティックスベンチャーです。コンピュータ科学技術ソフトウェア(情報科学ソフトウェア)の開発・販売・レンタル、およびコンピュータ科学技術の研究会運営(CACフォーラム)を実施しています。ケモトリックスソフトChemInTool - Chemish Proをはじめとするケモインフォマティクス関連のプロダクトおよびサービスを提供します。ケモトリックス(データ解析)、反応設計、構造解析、構造活性相関(3D-QSAR)の研究に適用可能です。また、化学系データベース(化学反応DB等)の構築支援なども実施しております。

### 【情報化学ソフトウェア】 製品情報

ケモトリックスソフトウェア

**ChemInTool - Chemish Pro**



開発元: 東京大学 船津研究室

PCA、PLS、GAによる回帰式の最適化、その他基礎統計量の計算機能、計算結果のグラフィカルな表示などを行うWindows上で稼動するケモトリックス解析ソフトウェアです。解析により得られたモデルを用いて予測を行う機能も備えています。

分子設計トータルシステム

**ChemInTool - ToMoCo**



開発元: 東京大学 船津研究室

分子設計、構造活性相関解析を行うためのトータルシステムです。Windows上で動作します。Hopfieldニューラルネットワークによる分子構造重ね合わせ手法により、基本骨格が異なる分子でも重ね合わせが可能です。

反応設計システム

**ChemInTool - AIPHOS**

開発元: 東京大学 船津研究室

反応知識ベースを用いて化学反応設計を支援するシステムです(サーバー: Linux、クライアント: Windowsで稼動)。合成したい目的化合物を入力することにより、合成ルートを提案します。

構造解析システム

**ChemInTool - SEoN**

開発元: 東京大学 船津研究室

NMRスペクトルから、その化学構造を自動推定する構造解析システムです。Windows上で動作します。分子式から構造を自動的に生成する機能を用いて、可能性が高い構造を推定します。

構造検索機能を有する遷移状態データベース

**FIND-TSINFO**

開発元: 山口大学 堀研究室

遷移状態データベース

**TSLB**

開発元: 山口大学 堀研究室

Gaussian03のジョブスケジュール管理システム

**hag98**

開発元: 山口大学 堀研究室

### CACフォーラム (Computer Aided Chemistry Forum)

CHEMICS研究会の活動を基に実践分野の拡大を図るため、平成8年4月に新たにスタートした研究会です。構造解析、合成設計及びケモトリックスを中心としたコンピューターケミストリーに関する技術の普及、取得及び開発研究を目指し部会活動を中心に運営しています。詳しくは<http://www.cheminonavi.co.jp/cac/>をご覧ください。

### 会社概要

社名: 有限会社 ケムインフォナビ

住所: 〒441-8113 愛知県豊橋市西幸町333-9  
豊橋サイエンスコア 4F-401H

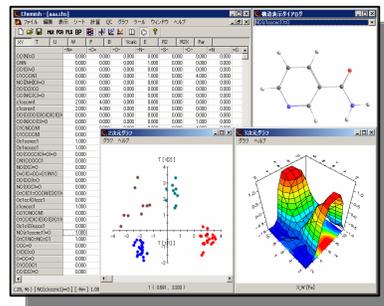
Tel : 050-3315-2837

Fax : 0532-44-1120

HP : <http://www.cheminonavi.co.jp/>

mail: [sales@cheminonavi.co.jp](mailto:sales@cheminonavi.co.jp)

Chemishはケモメトリクスに関する解析を効率的に行うための統合システムです  
動作環境：Windows 2000 / XP



**主な機能**

□ 統計計算

- ✓ 基礎統計量
- ✓ 相関行列、主成分分析 (PCA)

□ クラスタリング

- ✓ 階層型クラスタリング
- ✓ Kohonen ニューラルネットワーク
- ✓ SVM(搭載予定)

□ データモデリング

- ✓ 最小2乗法による線形重回帰分析
- ✓ PLS、QPLS
- ✓ BPニューラルネットワーク
- ✓ CPニューラルネットワーク

□ 予測、逆解析

□ 変数選択

- ✓ StepWise(変数増減/減増)法
- ✓ GAPLS、GAQPLS

□ 原子団寄与法(Group Contribution Method)

- ✓ 物性予測、逆解析(自動化学構造式生成)

□ 品質管理(QC)

- ✓ ヒストグラム、パレート図、各種管理図

□ チュートリアル

◆ データ解析

平均値や分散といった基本的な統計計算をはじめ、相関行列や主成分分析などを用いたデータ解析が可能です。また階層型クラスタリング手法やKohonenニューラルネットワークを用いることで、多変量データのクラスタリング解析を行うことができます。また計算結果をグラフ化することでデータの様子を視覚的にとらえることができます。

◆ データモデリング

最小2乗法およびPLS法を用いた線形回帰分析によって、説明変数と目的変数との関係をモデリングすることができます。また非線形のモデリング手法としてバックプロパゲーションニューラルネットワークなども実装されています。さらにStepWise法やGAPLS法による変数選択、モデル式を用いた予測値の計算や逆解析も可能となっています。

◆ 原子団寄与法 / 自動候補構造生成

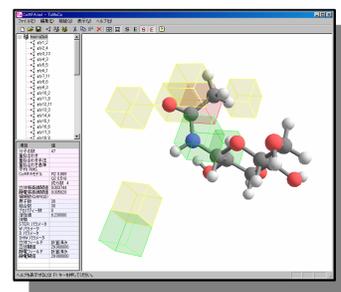
分子構造を入力することによって、原子団寄与法による解析を行うことができます。これにより物性推算や活性予測のためのQSAR/QSPRモデルが得られます。また、得られたモデルをもとに逆解析を行う機能を搭載しています。この機能を用いることによって希望する物性を示すと考えられる化学構造式を自動的に生成することができます。

この申込書を郵送またはFAXにてご送信下さい。また必要事項をご記入の上、メールでもお申し込みいただけます  
申込書到着後に担当者からご連絡させていただきます

《送付先》 有限会社 ケムインフォナビ FAX 0532-44-1120 / e-mail sales@cheminonavi.co.jp  
〒441-8113 愛知県豊橋市西幸町333-9 豊橋サイエンスコア 4F-401H TEL 050-3315-2837

お名前			
ご住所			
TEL		FAX	
E-mail アドレス			
希望商品	ライセンス数( ) ノードロック・コンカレント・サイトライセンス		
備考	CACフォーラム <input type="checkbox"/> 正会員 <input type="checkbox"/> 非会員		

ToMoCoは分子設計に関する解析を効率的に行うための統合システムです  
動作環境：Windows 2000 / XP



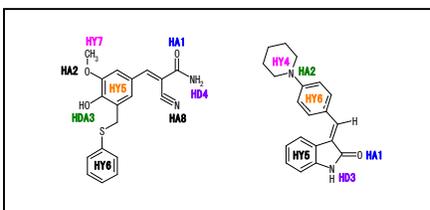
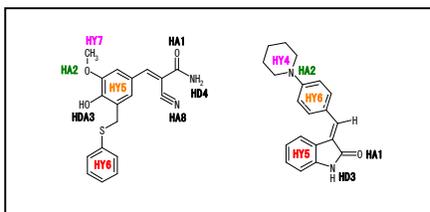
## HNNを用いた分子構造の重ね合わせ

CoMFA法をはじめとする多くの3次元構造活性相関(3D-QSAR)解析では、解析に用いる化合物をあらかじめ適切に重ね合わせおくことが要求されます。ToMoCoでは3D-QSAR解析に適した重ね合わせを行うことを目的として、Hopfield Neural Network(HNN)を用いた分子構造重ね合わせ手法を実現しています。基本骨格が大きく異なる分子構造についても適切な重ね合わせを行うことができます。また、各分子の配座解析を行った後に重ね合わせを実行することによって活性配座の推測も可能です。

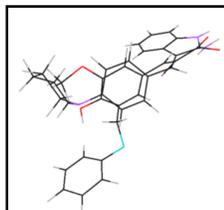
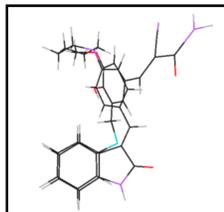
重ね合わせを行う2つの分子上に化学プロパティを設定し、HNNにより対応付けを行います。そして対応付けられたプロパティ間の距離を最小化することによって重ね合わせが実現されます。

HD : Hydrogen-bonding donor  
HA : Hydrogen-bonding acceptor  
HDA : Hydrogen-bonding donor/acceptor  
HY : Hydrophobic group

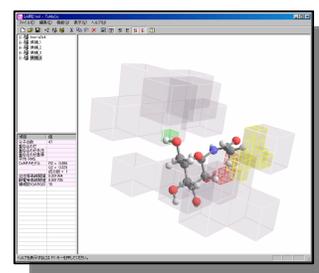
### プロパティの定義 / 対応付け



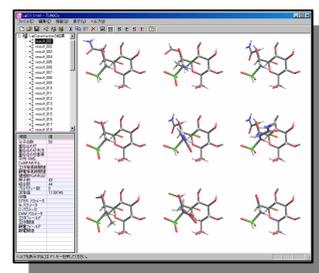
### 重ね合わせ



M. Arakawa, et. al., *Journal of Computer Aided Chemistry*, 3, 99-106, 2002



遺伝的アルゴリズムによる  
QSARモデルの最適化



進化的計算手法を用いた  
候補構造の自動生成

この申込書を郵送またはFAXにてご送信下さい。また必要事項をご記入の上、メールでもお申し込みいただけます  
申込書到着後に担当者からご連絡させていただきます

《送付先》 有限会社 ケムインフォナビ FAX 0532-44-1120 / e-mail sales@cheminfornavi.co.jp  
〒441-8113 愛知県豊橋市西幸町333-9 豊橋サイエンスコア 4F-401H TEL 050-3315-2837

## ToMoCo 見積依頼書

お名前			
ご住所			
TEL		FAX	
E-mail アドレス			
希望商品	ライセンス数( )	ノードロック	
備考			