

(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の開発・販売・レンタルを行っています。ケモメトリックス、反応設計、構造解析、構造活性相関(QSAR)など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、コンピュータ科学技術の研究会運営(CACフォーラム)なども行っています。

## 製品情報

### ケモメトリックスソフトウェア ChemInTool – Chemish Pro



Chemishは、回帰分析やクラスタリングなど化学データを対象とした統計処理を簡単に行うことが出来るケモメトリックス解析ソフトウェアです。PCA、ICA、PLS、KNN(SOM)、BPNNなどによる統計解析がWindows上で手軽に行えます。

### 構造解析システム ChemInTool – SEoN

構造未知の有機化合物の分子式やNMRスペクトルなどから、それに矛盾しない候補構造を組み立てて列挙する構造推定システムです。Windows上で動作します。

### 分子設計トータルシステム ChemInTool – ToMoCo



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。配座の重ね合わせから、CoMFA法による三次元構造活性相関解析、新規な分子構造の提案までをToMoCo上でシームレスに行うことが可能です。

### 反応設計システム ChemInTool – AIPHOS

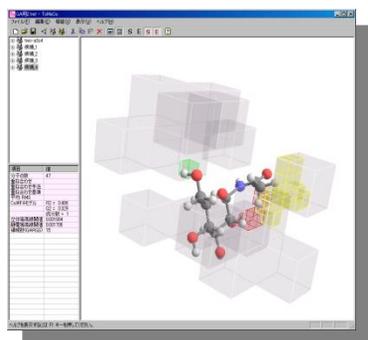
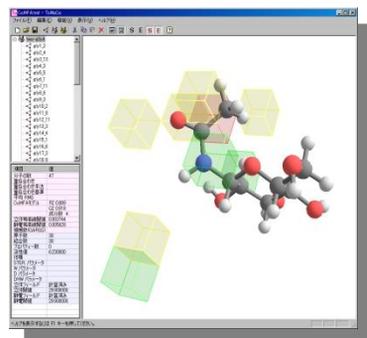
反応知識ベースを用いて合成経路設計を支援するシステムです。合成したい目的化合物を入力することにより、合成ルートを提案します。サーバーはLinux、クライアントはWindowsで動作します。



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。配座の重ね合わせから、CoMFA法による三次元構造活性相関解析、新規な分子構造の提案までをToMoCo上でシームレスに行うことが可能です。

## ■ CoMFA法による三次元構造活性相関解析

代表的な三次元構造活性相関解析手法であるCoMFA法による解析を手軽に行うことが出来ます。結果として得られる回帰係数値は図のように視覚的に解釈することが可能です。また、GA(遺伝的アルゴリズム)を利用してCoMFAモデルの最適化を行う手法(GARGS法)も実装されており、精度の高いQSARモデルを構築することが可能です。

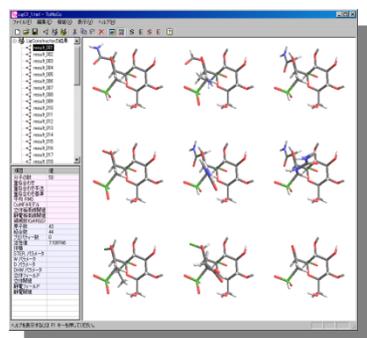


## ■ 分子構造の重ね合わせ

三次元構造活性相関解析の成功のためには、適切な分子構造の重ね合わせが必要です。ToMoCoには、通常のアトミを基準とした重ね合わせの他に、独自に開発したHopfieldニューラルネットワークによる重ね合わせ手法が実装されており、適切な重ね合わせおよび活性配座の推定を行うことが可能となっています。

## ■ 新規候補構造の自動生成

CoMFA法によって得られたQSARモデルを評価基準として、より高い活性を示すと思われる候補構造を自動的に生成することが可能です。進化的計算手法を用いて構造の進化を行い、CoMFAモデルに適合する化学構造を複数提案します。これにより、標的タンパク質の情報得られない場合においても効率的な分子設計が可能となります。



**販売価格** 年間ライセンス料金(税抜き) 1ノードロックライセンス 200万円～ 詳しくは下記までお問い合わせ下さい

有限会社 ケムインフォナビ

〒740-0018 岩国市麻里布町一丁目7-21-101  
Tel. 0827-52-7191 Fax. 0827-52-7192  
sales@cheminonavi.co.jp

 ChemInfoNavi  
ケムインフォナビ  
<http://www.cheminonavi.co.jp/>

**主な機能**

□ 統計計算

- ✓ 基礎統計量、相関行列
- ✓ 主成分分析 (PCA)、独立成分分析 (ICA)

□ 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 (Self-Organizing Map, SOM)

□ 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

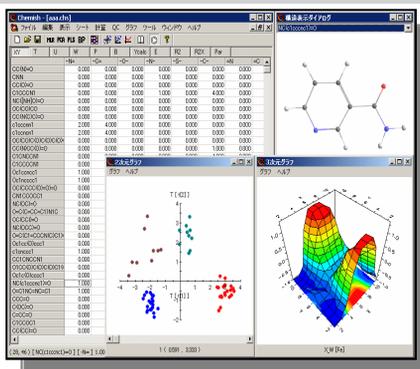
□ 原子団寄与法 (Group Contribution Method)

- ✓ 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

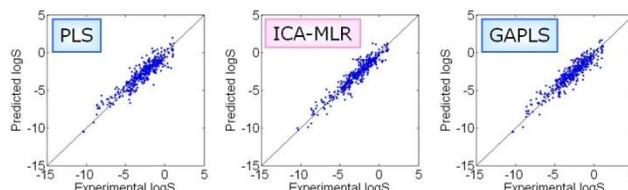


◆ データ解析

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。

**販売価格** 年間ライセンス料金 (税抜き)

1ノードロックライセンス	Chemish Std 5万円	Chemish Pro 8万円
1サイトライセンス	Chemish Std 125万円	Chemish Pro 160万円

**有限会社 ケムインフォナビ**

《送付先》 有限会社 ケムインフォナビ FAX 0827-52-7192 / e-mail sales@cheminfornavi.co.jp  
〒740-0018 岩国市麻里布町一丁目7-21-101 TEL 0827-52-7191

## 見積依頼書

年 月 日

会社名			
部署名			
お名前			
ご住所			
TEL		FAX	
E-mail アドレス			
希望商品	<input type="checkbox"/> ChemishPro・Standard <input type="checkbox"/> ToMoCo <input type="checkbox"/> AIPHOS <input type="checkbox"/> SEoN <input type="checkbox"/> その他( )		
ライセンス数・形態	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		
連絡事項			
備考			