

Jedním z klíčových problémů cheminformatiky je reprezentace chemických sloučenin. S touto prací je vytvořena klient-server aplikace, která umí spočítat velké množství takových reprezentací. Server umožňuje vkládání modulů, které využívají aplikace třetích stran ke spočítání reprezentací. Tyto aplikace můžeme spouštět přes příkazový řádek, nebo voláním metod webových služeb. Klient zobrazí možné typy reprezentací sloučenin. Uživatel si může vybrat množinu reprezentací a vstupní množinu molekul souboru a tento požadavek zašle serveru. Server potom zavolá moduly a nazpět zašle výsledek.