

Běžnou součástí vývoje léčiv je virtuální screening, který využívá metod podobnostního modelování a vyhledávání. Tyto metody většinou nejsou specifické pro daný makromolekulární cíl, nabízí se tedy možnost implementace nových metod, jenž by se byly schopné na daný cíl adaptovat. Nové metody však trpí dalšími problémy jako je dostupnost či neodpovídajícím benchmarking. Hlavní potíže s benchmarkingem spočívají ve špatném výběru referenčních metod, nedostatečné reprodukovatelnosti výsledků a použití nestandardních datových sad pro testování. Tyto potíže jsou navíc běžné i u benchmarkových studií, jenž se zaměřují na standardizované porovnání metod. Z těchto důvodů nové metody nejsou schopny získat důvěru doménových expertů, kteří tak často pracují se staršími metodami. V této práci se zaměříme na výše uvedené problémy. Nejprve představíme nové adaptivní metody pro virtuální screening. Dále představíme námi navržený nástroj pro virtuální screening, jenž by měl zlepšit dostupnost nově navržených metod. Nakonec představíme naši benchmarkovací platformu a kolekci datových sad, jenž je použitelná pro reprodukovatelné hodnocení metod virtuálního screeningu.