

Práce vychází ze SW projektu Molpher, který vznikl jako klient-server aplikace pro hledání cesty v chemickém prostoru mezi dvěma vstupními molekulami. Cílem diplomové práce bylo rozšířit funkcionalitu o techniku scaffold hopping, kdy je molekula reprezentována zjednodušenou formou (scaffoldem). Bylo potřeba definovat několik úrovní granularity daných scaffoldů a pro každou úroveň morfovací operátory. Serverová část aplikace byla upravena, aby se neporušila silná paralelizace. Součástí práce je i experimentální ověření schopnosti nalezení cesty mezi dvojicí molekul s touto funkcionalitou a bez ní.