

Cílem této práce bylo navrhnout a implementovat metodu hierarchické vizualizace chemického prostoru. Vizualizace chemických struktur je obtížné nicméně významné téma zasahující do mnoha oborů, od materiálového inženýrství po vývoj léčiv. Zvláště ve výzkumu léčiv moderní metody testování s vysokou propustností generují velké množství dat, pro jejichž zpracování je vhodná hierarchická analýza. Jeden možný přístup k hierarchické klasifikaci molekul je strukturální analýza za pomoci molekulárních scaffoldů. Tyto scaffoldy jsou široce užívány v medicíně pro seskupování molekul s podobnými vlastnostmi. Bylo navrženo několik přístupů hierarchické vizualizace založené na scaffoldech. Avšak pokud je nám známo, neexistuje žádný nástroj, který by nabízel hierarchickou scaffoldovou vizualizaci na pozadí známého chemického prostoru. Výsledkem této práce je právě takový nástroj. Nejprve byla navržena stromová hierarchie scaffoldů založená na uspořádání cyklů. Tato hierarchie byla použita k analýze četnosti scaffoldů získaných z molekul v databázi PubChem Compound. Následně byla data o četnosti využita jako pozadí pro vizualizaci datových sad molekul. Tato vizualizace je prováděna klient-server aplikací implementovanou jako součást této práce. Aplikace nabízí interaktivní zvětšovatelnou vizualizaci založenou na stromových mapách pro datové sady velikosti až stovek tisíc molekul. Aplikace je dostupná zdarma, publikována pod open source licencí.