

Nedávno byla publikována nová metoda pro virtuální screening. Tato metoda používá farmakoforové otisky a statistické metody pro vytvoření farmakoforového modelu, který je následně použit k predikci aktivity ligandů. Tato práce se zabývá dvěma možnými vylepšeními této metody. Prvním z nich je odstranění korelovaných farmakoforů, druhé je použití větších farmakoforů (původně byly použity jen tříbodové farmakofory). Obě úpravy byly implementovány spolu s nutným rozšířením chemoinformatického softwarového balíku RDKit. Nakonec byly obě metody experimentálně vyhodnoceny a porovnány s původní metodou. Na základě těchto výsledků byla navržena a vyhodnocena další modifikace – kombinace farmakoforového modelu s podobností otisků.