

V bakalářské práci jsem navrhl a vypracoval platformu pro testování ligand-based virtual screening (LBVS) metod, která umožňuje komunikaci pomocí webových stránek, spouštění testů na infrastruktuře Metacentrum nebo vzdálených počítačích pro urychlení zpracování testů, přidávat vlastní datové sady a LBVS metody. K programu je přiloženo několik základních metod a z internetových zdrojů zmíněných v textu lze stáhnout dva balíky základních datových sad. Požitelnost platformy byla ověřena na dvou vzorových případech užití. Prvním byla replikace a ověření správnosti publikovaného experimentu. Druhým příkladem bylo porovnání metody založené na počtu atomů v molekule s metodami z knihovny RDKit.