

Ligand based virtual screening může být realizován pomocí různých molekulárních reprezentací. Fragment-feature molekulární reprezentace reprezentuje molekulu jako množinu fragmentů, kde každému fragmentu přiřadíme vektor deskriptorů. První cíl práce je najít vhodnou podobnostní funkci pro takovou reprezentaci. Tato reprezentace může být také vylepšena přiřazením vah jednotlivým deskriptorům, které jim udávají prioritu v dané podobnostní funkci. Druhým cílem práce je prozkoumat možnosti simulovaného žíhání jako algoritmu použitého k nalezení vah. Experimentálně analyzujeme vliv použití různých typů fragmentů, typů deskriptorů, podobnostních funkcí, korelovaných deskriptorů, fragmentového šumu a parametrů simulovaného žíhání. Jelikož jsou experimenty výpočetně náročné, vyrobíme také nástroj vhodný pro rozsáhlé výpočty.