

Grafy jsou přirozeným způsobem reprezentace molekul. Přesto se grafové reprezentace a algoritmy běžně nepoužívají ke zjišťování podobnosti molekul ve virtuálním screeningu. V této práci testujeme grafové přístupy ve virtuálním screeningu založeném na ligandech. Podobnost molekulových grafů počítáme pomocí největšího společného podgrafu a grafové editační vzdálenosti. Používáme implementace `fmcs` z chemoinformatické knihovny `RDKit` pro určení největšího společného podgrafu a `GraphMatchingToolkit` od K. Riesena pro určení grafové editační vzdálenosti. Nalezli jsme vhodné kombinace parametrů pro aplikaci ve virtuálním screeningu. Výsledky ukazují, že grafové přístupy jsou kvalitativně srovnatelné se stávajícími metodami.