Dokowanie molekularne jest jedną z najpowszechniej stosowanych metod wirtualnych badań przesiewowych, na której firmy farmaceutyczne opierają swoje pierwsze decyzje w procesie projektowania leków. Niestety technika ta nie determinuje jednoznacznie aktywności związku, a jej wyniki w ogromnym stopniu zależą od umiejętnego przeprowadzenia procedury dokowania dla wybranego celu biologicznego oraz od poprawnej interpretacji przewidzianych pozycji ligandów. Proces analizy wyników dokowania molekularnego i wyboru najbardziej obiecujących związków chemicznych do dalszych badań jest żmudny i wymaga ekspertyzy w wielu dziedzinach, takich jak chemia medyczna i obliczeniowa, a także znajomości obsługi specjalistycznego oprogramowania komputerowego. Dlatego proponujemy platformę ViScrA, której celem będzie uproszczenie i zautomatyzowanie kluczowych kroków na drodze od przeprowadzenia dokowania molekularnego do wyboru najbardziej obiecujących kandydatów do testów laboratoryjnych. Interakcja z platformą będzie odbywać się przez rozmowę z wirtualnym asystentem opartym o duże modele językowe, który umożliwi łatwą konfigurację poszczególnych narzędzi cheminformatycznych przy użyciu poleceń sformułowanych w języku naturalnym. Wśród narzędzi zintegrowanych w platformie znajdzie się analiza jakości pozycji ligandów, przewidywanie własności molekularnych kluczowych na wczesnych etapach projektowania leków, filtrowanie przewidzianych pozycji pod kątem preferowanych oddziaływań z białkiem, a nawet automatyczne generowanie analogów analizowanych związków chemicznych. Efektem analizy przeprowadzonej z użyciem platformy ViScrA będzie wybór związków w taki sposób, aby zmaksymalizować prawdopodobieństwo znalezienia hitów oraz zminimalizować ryzyko niepowodzenia kolejnych etapów procesu projektowania leków. Skuteczność działania platformy zostanie zweryfikowana w projekcie przez testy biochemiczne i eksperymenty krystalograficzne.