

Detekce vazebných míst proteinů a ligandů hraje klíčovou roli nejen při porozumění funkce proteinů, ale také může být použita pro počítačový návrh léků. Vylepšení těchto detekčních metod může vést k rychlejšímu vývoji léčiv. V posledních letech bylo navrženo mnoho metod strojového učení pro tuto úlohu. Dnes se transformerová architektura stala jedním z nejvýznamnějších nástrojů pro nebiologická data. Její rozšíření pro obrázky, tzv. vision transformer, dosáhlo srovnatelných výsledků s nejlepšími algoritmy. Navíc lze tento vision transformer rozšířit do 3D prostoru. Cílem této práce je posoudit možnosti rozšíření transformerů do 3D prostředí pro biologická data, konkrétně pro detekci vazebných míst proteinů a ligandů, využívající vlastnosti mechanismu pozornosti.