

Interakce proteinů s různými molekulami jsou klíčové pro jejich funkci a následně pro celkové fungování organismů. Studium těchto interakcí je důležité v mnoha vědních oborech, včetně medicíny, kde má zásadní význam pro vývoj léků. Klíčovým typem těchto interakcí je vazba mezi proteinem a ligandem a významným cílem bioinformatiky je vyvinout spolehlivé modely pro predikci těchto vazebných míst. Nedávný nárůst databází proteinových struktur v kombinaci s výkonem moderních GPU umožnil vývoj mnoha modelů strojového učení. Zejména protein language modely, inspirované svými protějšky ve zpracování přirozeného jazyka, se úspěšně uplatňují v napříč bioinformatikou. V této práci jsme použili model proteinového jazyka pro predikci vazebných míst a snažili jsme se zvýšit jeho výkonnost začleněním různých trojrozměrných vlastností proteinů.