

Prakticky každý proces v živých organismech je zajišťován pomocí proteinů. Proteiny vykonávají svoji funkci buď vázáním se na další proteiny (protein-protein interakce), nebo na malé molekuly, tzv. ligandy (protein-ligand interakce). Aktivní místa pro protein-ligand interakce jsou tzv. kapsy v proteinové struktuře, kam se může ligand navázat. Predikce těchto kapes je obvykle prvním krokem ke studiu funkce daného proteinu a taky základem k strukturálně orientovanému vývoji léků. V této práci jsme udělali přehled existujících metod a představili naše vlastní vylepšení. Vyvinuli jsme novou funkci pro ranking kapes, která je založená na predikci ligandability (schopnosti vázat ligand) buď v kapsy jen na základě chemických a geometrických vlastností lokálního okolí daného bodu.