

Vyhodnocování podobnosti protein-ligand vazebných míst je důležité v mnoha oblastech, jako je výzkum nových využití stávajících léčiv nebo evoluční studie. Nejmodernější současné přístupy dosahují dobrých výsledků, ale pracují pouze s definovanými vazebnými místy, což není možné v nepředzpracovaných proteinových databázích. Pokud tato místa nejsou známá, je nejprve nutné prohledat proteinové struktury nástroji pro jejich predikci. To významně navyšuje cenu velkých databází podobných vazebných míst. Tato práce se zaměřuje na popis stávajících metod pro hodnocení podobnosti protein-ligand vazebných míst a zkoumá možnosti rychlého vyhledávání podobných míst ve velkých databázích příbuzných struktur. Je zde navržena jednoduchá metoda umožňující rychlejší než lineární vyhledávání bez nutnosti predikce potenciálních vazebných míst. Předběžné výsledky naznačují, že tento přístup je hoden další pozornosti, ačkoliv je stále zapotřebí více vzhledu do dané problematiky.