

The background features a complex, abstract molecular structure. It consists of various colored nodes (circles) in shades of blue, green, orange, and black, connected by thin, light-colored lines. Some nodes are larger and more prominent, while others are smaller. The overall shape is irregular and spread across the frame, with a higher density of nodes in the corners.

Построение графа для
фермента SOD1.

Интерпретация данных

	A4T	A4V
<u>4.A@N-20.A@O</u>	0.821	0.851
<u>5.A@N-150.A@O</u>	0.906	0.974
<u>6.A@N-18.A@O</u>	0.928	0.899

Столбец с информацией о ребрах: донор-акцептор

Донор

Акцептор

Столбцы, содержащие веса соответствующих ребер. Каждый столбец представляет информацию по одному пациенту.

Интерпретация данных

6.A@N

Позиция
аминокислотного
остатка

Имя субъединицы

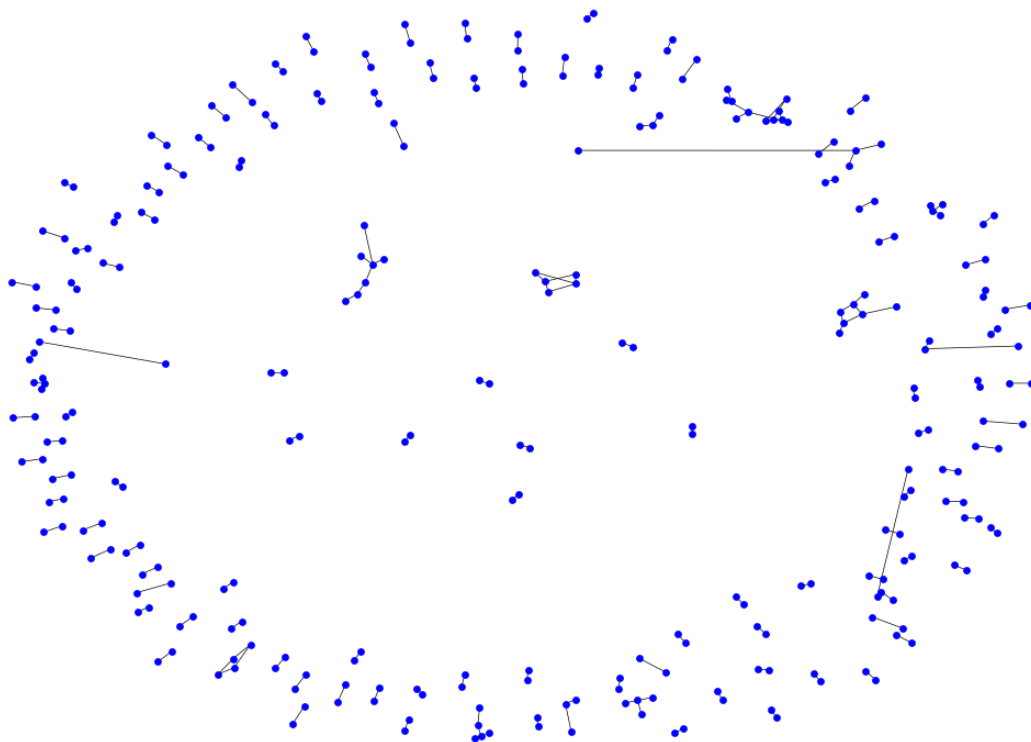
Название атома

Варианты построения графа

1. В качестве вершины
выступает водородная связь
полностью.



Пример графа для одного из пациентов



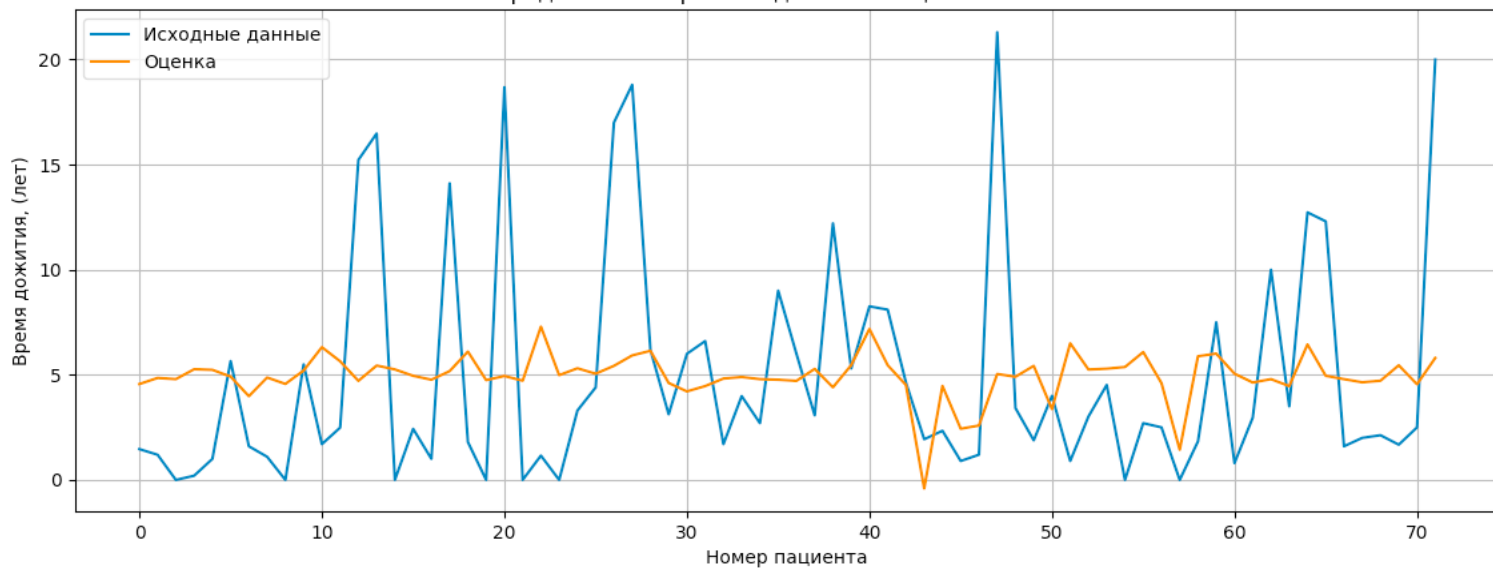


Характеристики, используемые для графа.

1. Количество вершин
2. Количество ребер
3. Плотность графа
4. Степень ассортативности графика
5. Индекс Эстрады
6. Размер наибольшего клика на графе

Результат

Предсказания времени дожития пациентов с БАС

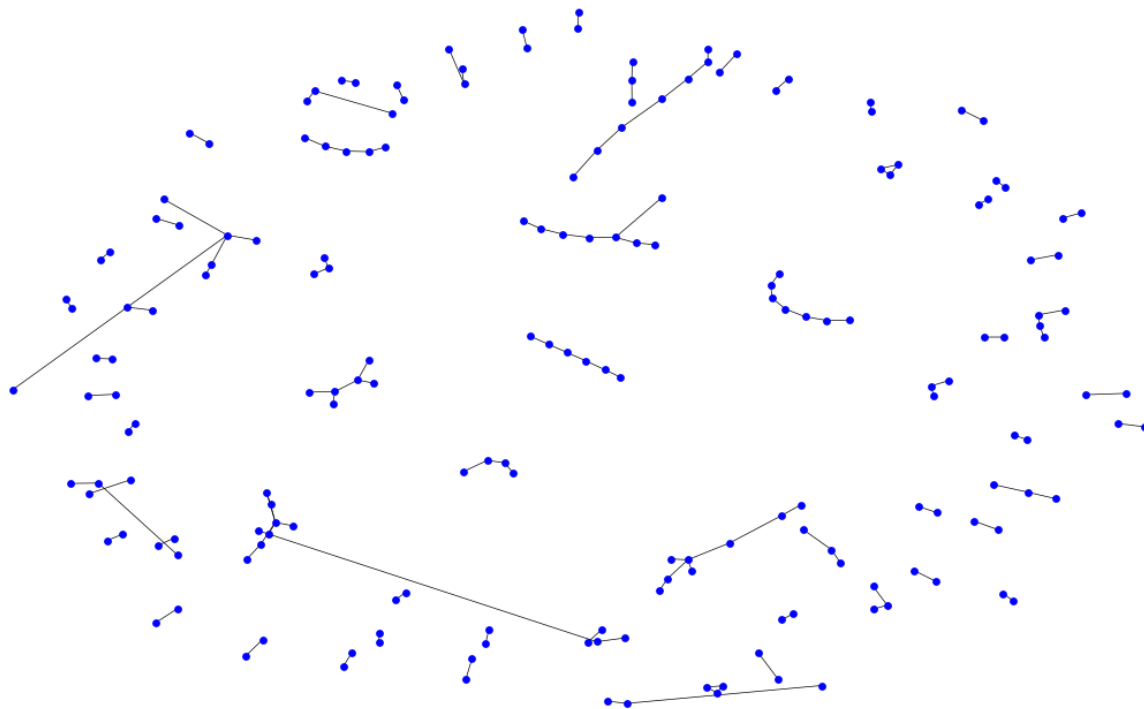


Варианты построения графа

2. В качестве вершины
выступает позиция
аминокислотного остатка с
субъединицей.



Пример графа для одного из пациентов





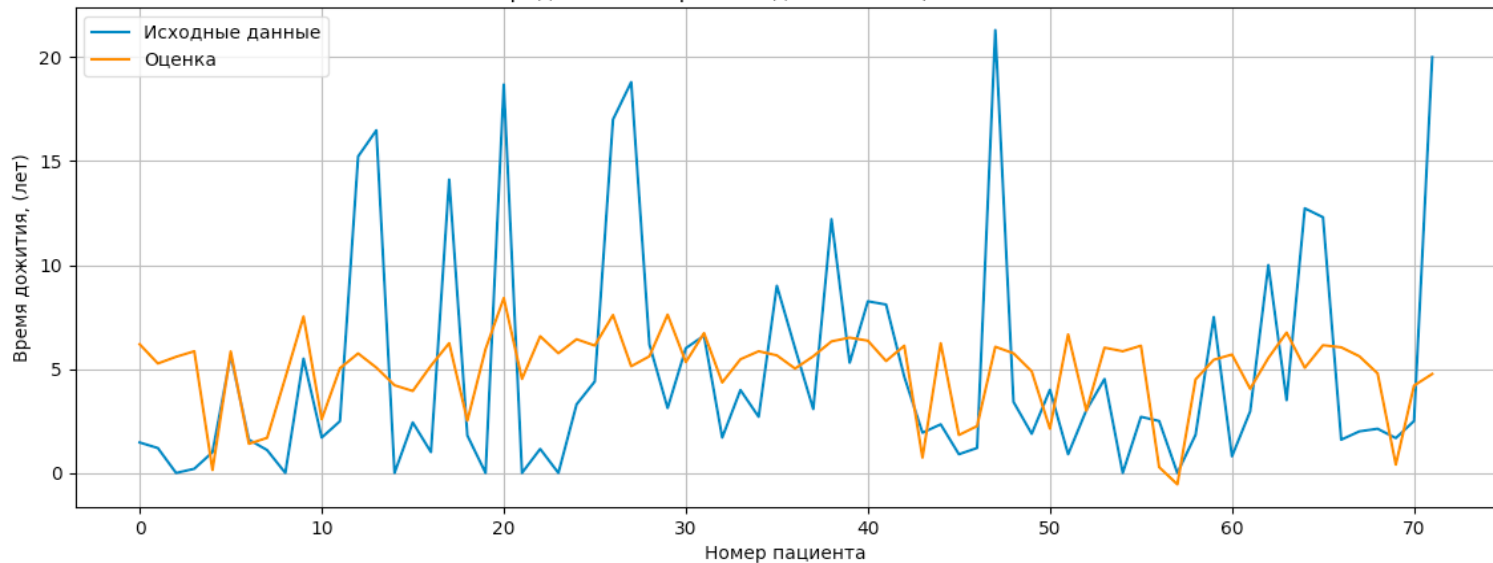
Характеристики, используемые для графа.



1. Количество вершин
2. Количество ребер
3. Плотность графа
4. Транзитивность
5. Средний коэффициент кластеризации
6. Степень ассортативности графика
7. Индекс Эстрады
8. Размер наибольшего клика на графе

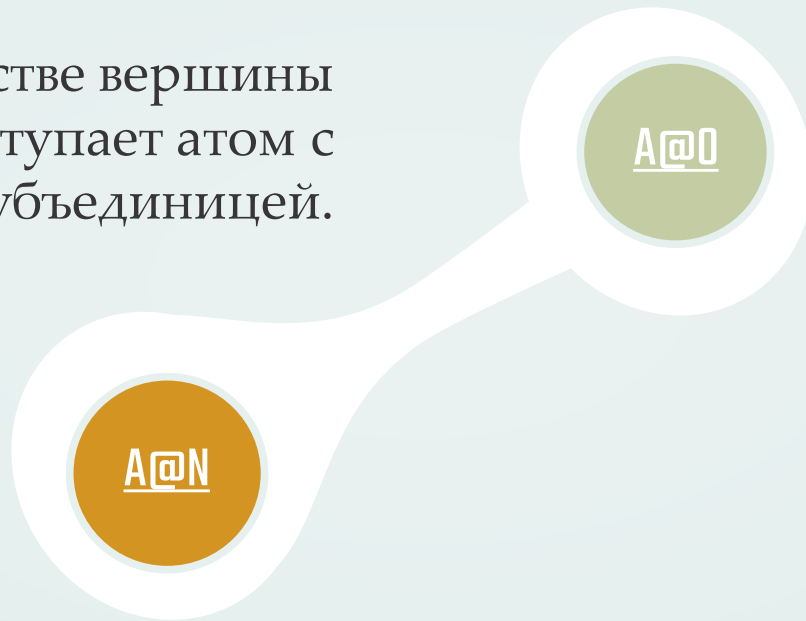
Результат

Предсказания времени дожития пациентов с БАС

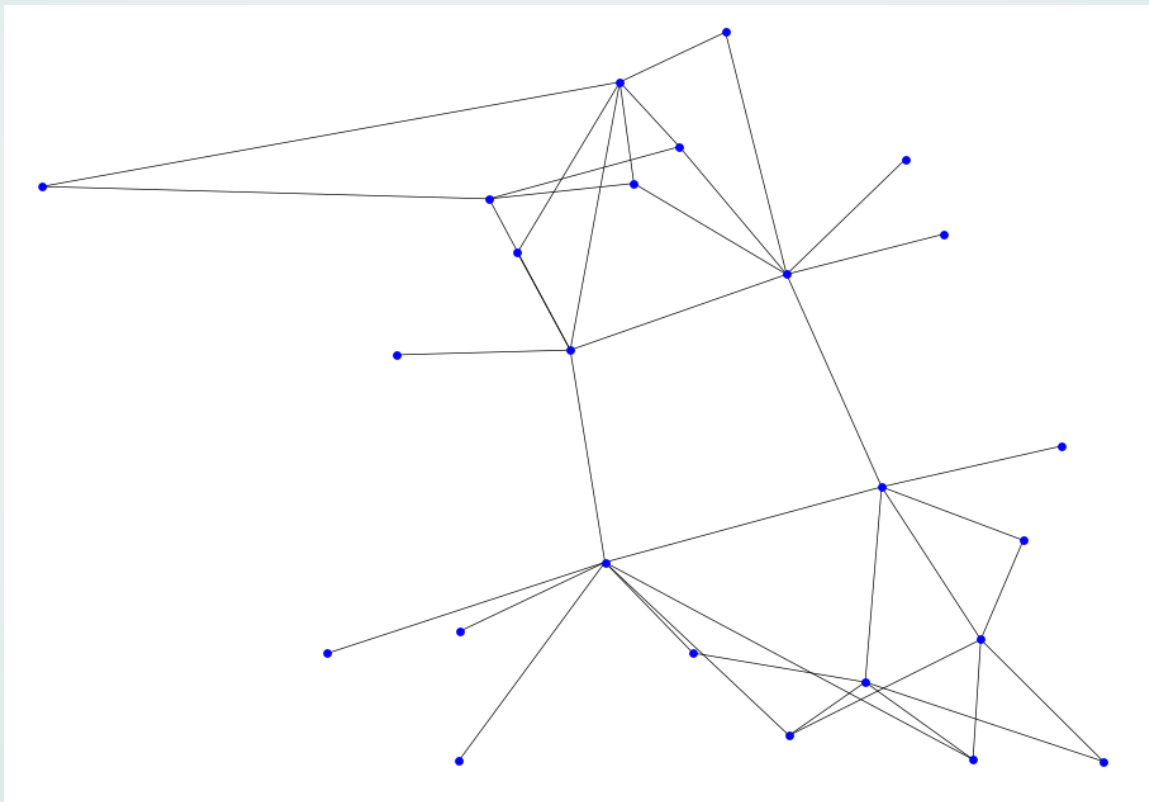



Варианты построения графа

3. В качестве вершины выступает атом с субъединицей.




Пример графа для одного из пациентов





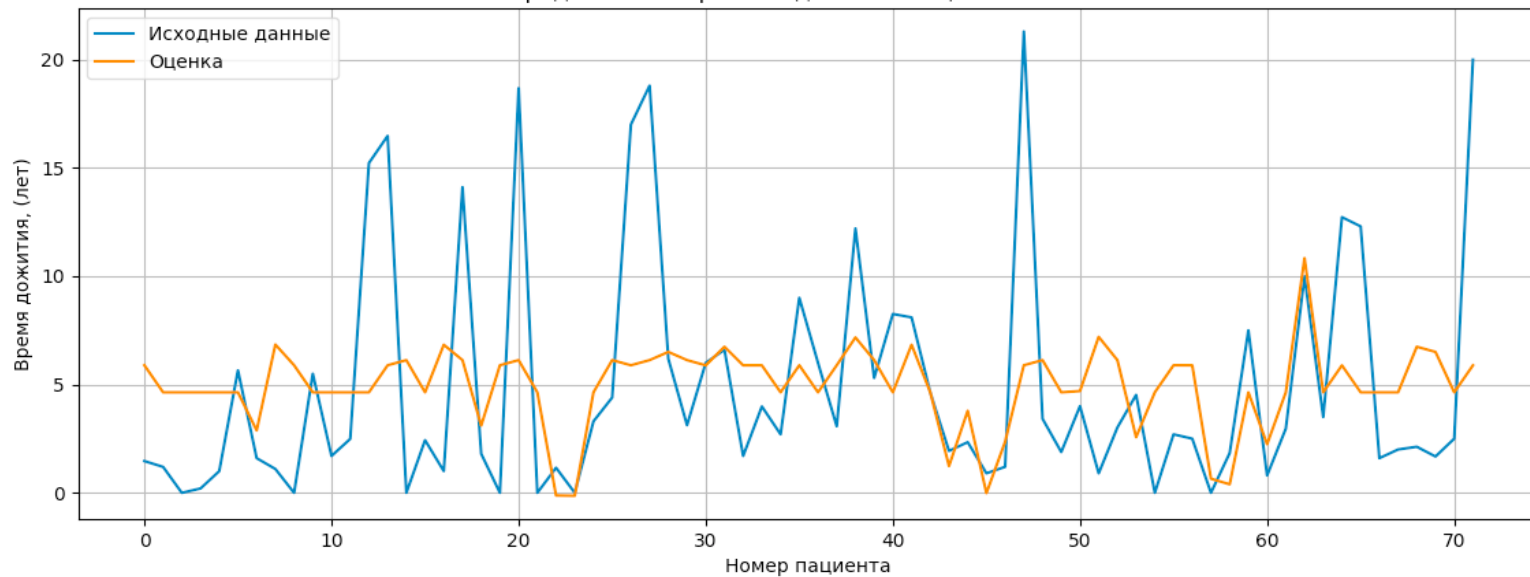
Характеристики, используемые для графа.



1. Количество вершин
2. Количество ребер
3. Плотность графа
4. Радиус графа
5. Диаметр графа
6. Транзитивность
7. Средний коэффициент кластеризации
8. Связность графа
9. Степень ассортативности графика
10. Индекс Эстрады
11. Размер наибольшего клика на графе

Результат

Предсказания времени дожития пациентов с БАС

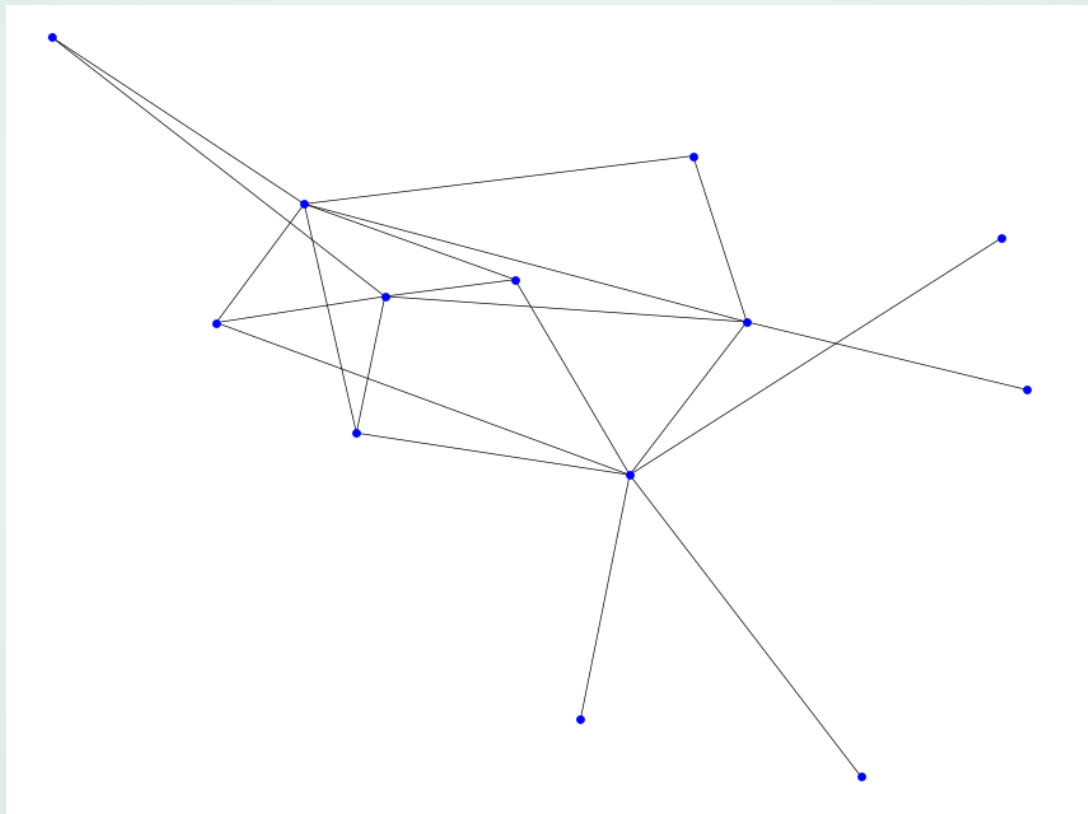



Варианты построения графа

4. В качестве вершины выступает атом без субъединицы.




Пример графа для одного из пациентов





Характеристики, используемые для графа.



1. Количество вершин
2. Количество ребер
3. Плотность графа
4. Радиус графа
5. Диаметр графа
6. Транзитивность
7. Средний коэффициент кластеризации
8. Связность графа
9. Степень ассортативности графика
10. Индекс Эстрады
11. Размер наибольшего клика на графе

Результат

Предсказания времени дожития пациентов с БАС

