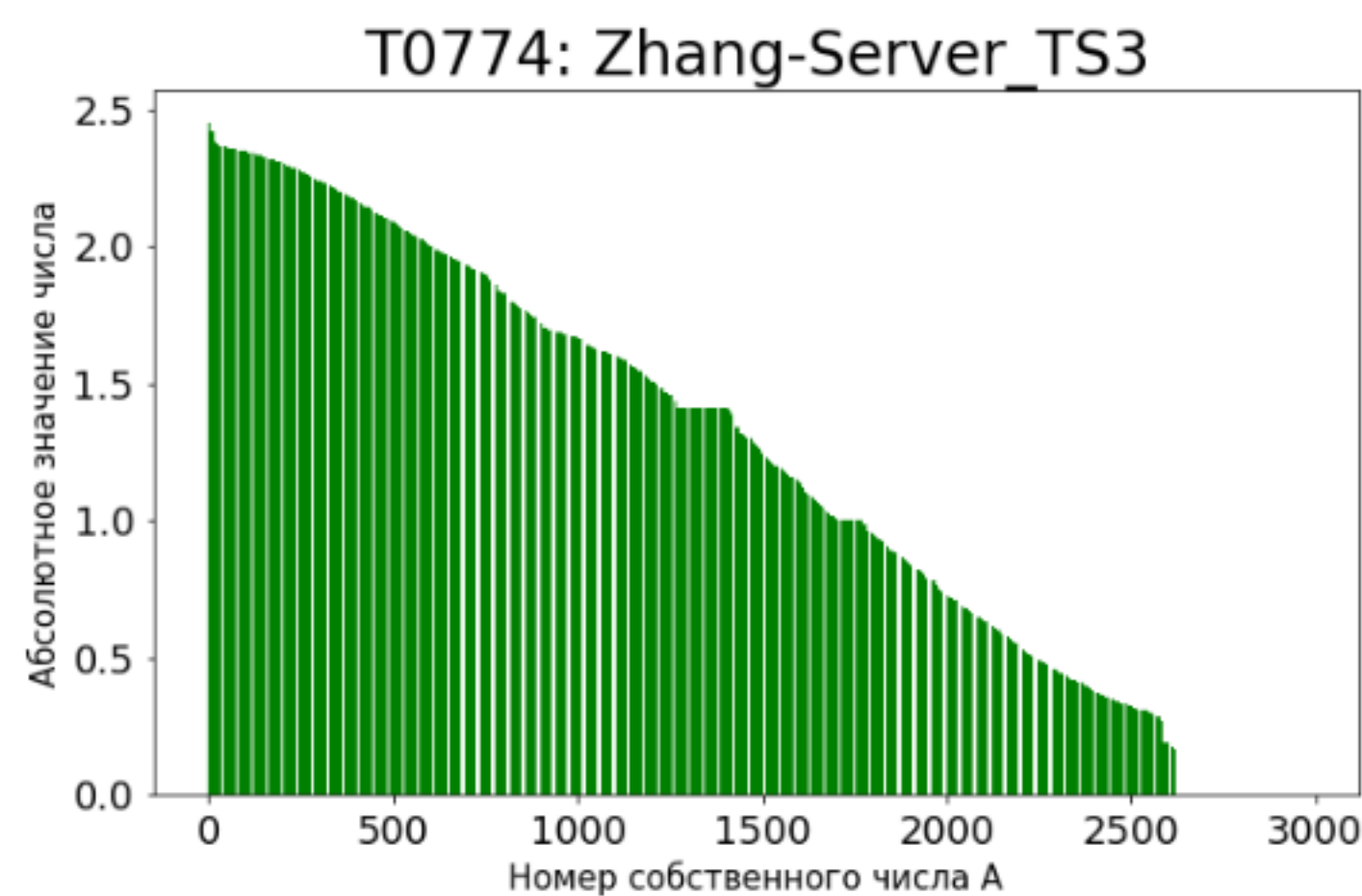


Нативная
структура

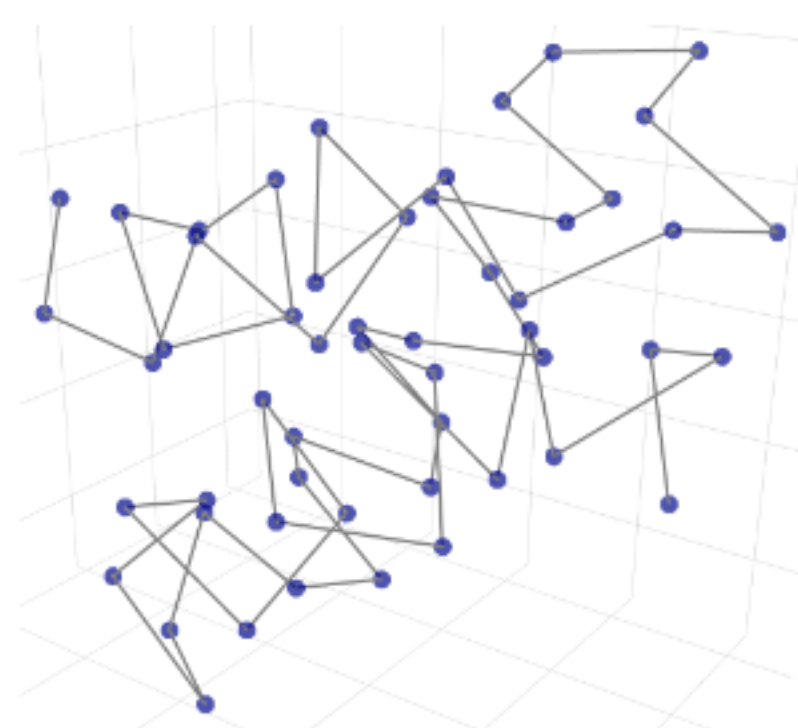
Истинный CAD-score \mathbf{y}

$$\|\hat{\mathbf{y}} - \mathbf{y}\|_2^2 \rightarrow \min$$

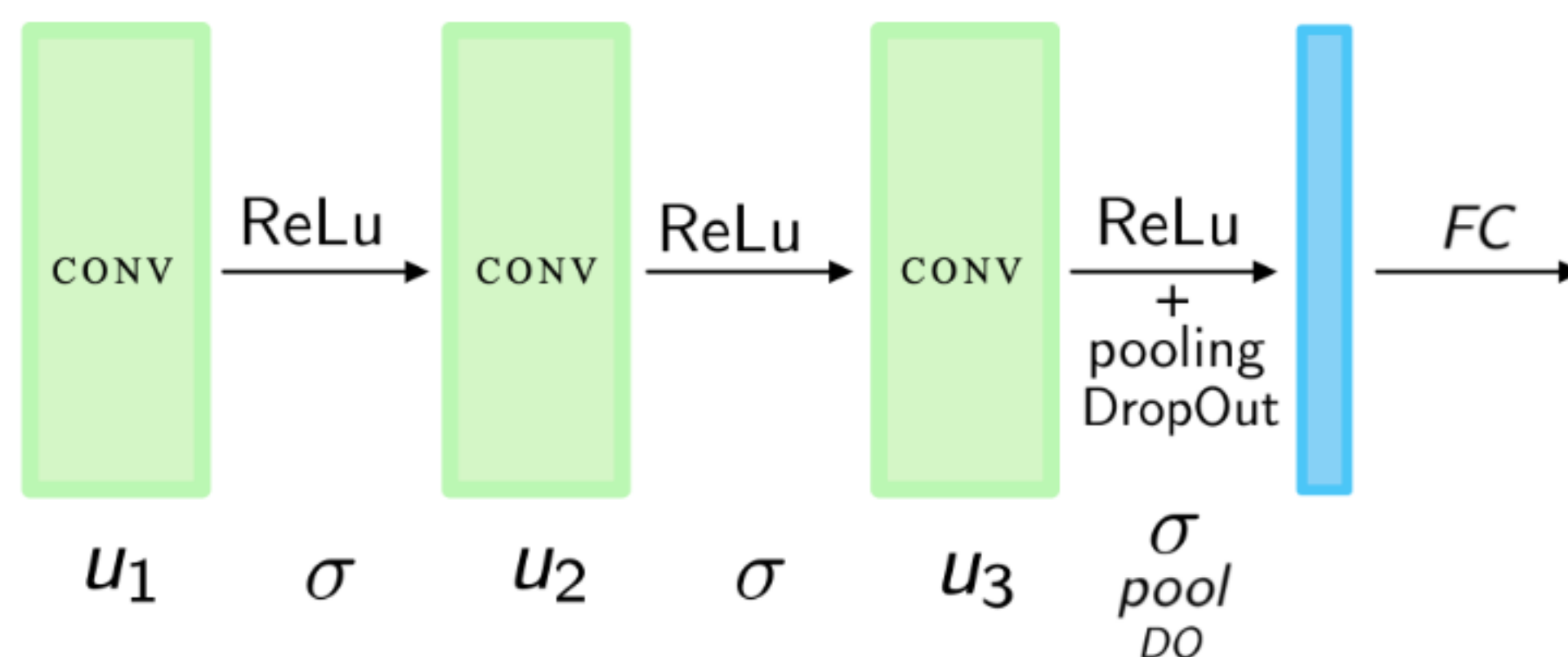
Смоделированная
структура .pdb



Спектральный анализ \mathbf{A}



Матрица смежности \mathbf{A} ,
Матрица координат
атомов \mathbf{X}



$$\mathbf{U}_k = \tilde{\mathbf{D}}^{-\frac{1}{2}} \tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{D}}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{XW}$$

Спрогнозированный
CAD-score
 $\hat{\mathbf{y}}$