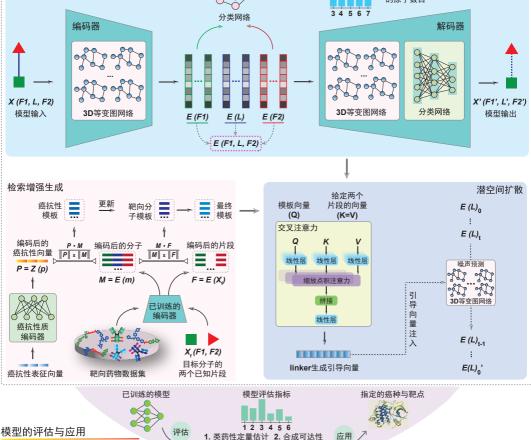
数据集的构建与数据的预处理 ZINC PROTAC-DB 4 ADCdb 基于linker设计 预处 靶向药物数据集 预处 药物的通用数据集 技术路线 变分自编码器 预测linker中 的原子数目 3 4 5 6 7 分类网络 编码器 解码器 X (F1, L, F2) X' (F1', L', F2') 模型输入 3D等变图网络 3D等变图网络 分类网络 模型输出 E (F1) E (L) E (F1, L, F2) 检索增强生成 潜空间扩散 给定两个 模板向量 片段的向量 癌抗性 $E(L)_0$ 模板 子模板 (Q) (K=V) 交叉注意力



3. linker中环的数目 4. 有效性 5. 独特性 6. 新颖性