IonovNS2020\_D3docking – папка, содержащая в себе файлы с результаты расчёта значений оценочной функции для соединений тестовой выборки. Результаты получены с помощью функции TargetPrediction модуля D3Docking.

IonovNS2020\_D3Similarity – папка, содержащая в себе файлы с результаты расчёта оценок сходства между соединениями тестовой выборки и БД CoVLigands. Результаты получены с помощью функции TargetPrediction модуля D3Similarity.

IonovNS2020\_D3docking - folder containing files with the results of calculating of values of the scoring function for the compounds of the test set. The results were obtained by the TargetPrediction function of the D3Docking module.

IonovNS2020\_D3Similarity - folder containing files with the results of calculating of the similarity score between the compounds of the test set and the CoVLigands database. The results were obtained by the TargetPrediction function of the D3Similarity module.