

atom-class	antibody-antigen	std.-dev.	enzyme-inhibitor	std.-dev.	others	std.-dev.
1	0,00	0,00	0,01	0,01	0,00	0,00
2	8,62	3,45	3,30	1,78	14,88	2,65
3	0,00	0,00	0,04	0,04	0,00	0,00
4	0,01	0,00	0,01	0,01	0,00	0,00
5	1,28	0,85	0,07	0,09	0,00	0,00
6	7,50	0,39	6,18	0,95	3,75	0,83
7	6,52	1,37	6,20	2,96	9,52	4,01
8	0,18	0,28	2,61	0,32	0,00	0,00
9	10,08	8,49	25,77	8,78	5,59	6,05
10	4,78	2,12	0,07	0,03	11,03	9,92
11	9,21	9,07	19,61	7,27	17,64	12,79
12	10,00	1,48	8,81	1,12	8,76	2,20
13	3,51	4,17	2,08	3,28	0,02	0,03
14	1,93	2,96	6,81	7,19	11,03	11,03
15	0,00	0,00	0,00	0,01	3,14	2,71
16	0,00	0,00	1,83	1,64	6,88	1,77
17	0,00	0,00	6,29	1,18	2,90	2,81
18	5,31	3,16	2,28	1,19	0,00	0,00
19	0,34	0,33	5,28	5,37	5,72	7,51
20	0,24	0,38	0,67	0,75	0,00	0,00
21	0,01	0,00	11,61	5,29	0,01	0,02
22	1,18	1,86	0,01	0,00	6,29	2,45
23	11,29	5,60	25,18	13,60	1,68	2,57
24	19,60	5,97	14,26	5,46	0,00	0,00
25	0,73	0,93	1,56	2,19	2,90	3,88
26	0,03	0,03	2,79	1,98	0,01	0,01
27	0,26	0,40	0,01	0,01	0,00	0,00
28	3,31	1,37	0,02	0,01	0,00	0,00
29	0,05	0,05	5,18	4,22	0,00	0,00
30	1,84	2,00	16,88	4,50	11,23	5,73
31	0,18	0,24	30,84	5,48	8,21	6,79
32	4,91	2,02	0,05	0,03	0,11	0,22
33	5,66	0,99	1,32	1,51	6,80	2,73
34	0,95	1,49	0,01	0,01	9,00	5,60
35	1,22	1,33	0,01	0,00	9,92	2,99
36	0,04	0,05	10,91	4,36	1,56	1,53
37	0,03	0,04	0,30	0,33	0,00	0,00
38	20,75	7,43	1,61	2,39	3,15	4,17
39	8,46	5,35	0,03	0,03	0,00	0,00
40	23,18	1,49	5,46	1,39	18,08	7,25
l1	-0,87	0,29	0,67	0,57	0,70	0,28

Optimised atom specific weighting factors

Optimised atom specific weighting factors for the 40 atom-types defined by Melo *et al.*[10] for all three complex classes and the standard deviation as derived from the 5-fold crossvalidation.