

Sheet1

Complex_PDB	Test dataset			MAE	Functional class
	Experimental ΔG	Predicted ΔG			
1KXQ	-11.54	-11.54	0	0	Ag-Ab
2P45	-9.46	-10.24	0.78	0.78	Ag-Ab
1G6V	-9.74	-11.62	1.88	1.88	Ag-Ab
1BUH	-9.7	-8.93	0.77	0.77	EI
1BVN	-15.06	-12.43	2.63	2.63	EI
1EZU	-13.77	-12.93	0.84	0.84	EI
1PXV	-12.97	-12.13	0.84	0.84	EI
1R0R	-14.17	-13.93	0.24	0.24	EI
1ZLI	-12.04	-9.98	2.06	2.06	EI
3N4I	-12.22	-10.93	1.29	1.29	EI
1JTD	-14.41	-13.76	0.65	0.65	EI
4HX3	-7.41	-8.12	0.71	0.71	EI
4IZ7	-9.44	-10.33	0.89	0.89	EI
1ZM4	-8.03	-9.1	1.07	1.07	OE
2A9K	-10.25	-10.58	0.33	0.33	OE
2OOB	-5.66	-5.16	0.5	0.5	OE
2OOR	-10.65	-8.52	2.13	2.13	OE
2PCC	-7.91	-9.89	1.98	1.98	OE
1J7D	-7.77	-8.37	0.6	0.6	OE
1U0S	-9.06	-8.35	0.71	0.71	OE
1VET	-10.77	-10.87	0.1	0.1	OE
1XDT	-10.91	-11.85	0.94	0.94	OE
2F4M	-9.8	-8.63	1.17	1.17	OE
3BEG	-9.96	-12.4	2.44	2.44	OE
3BLH	-8.89	-11.58	2.69	2.69	OE
1E3U	-8.18	-9.4	1.22	1.22	OE
1L4D	-9.14	-6.64	2.5	2.5	OE
2GAF	-12.17	-15.17	3	3	OE
3PC8	-9.54	-9.57	0.03	0.03	OE
2OT3	-7.84	-7.02	0.82	0.82	GC
3KUC	-8.67	-7.95	0.72	0.72	GC
1R8S	-5.21	-6.44	1.23	1.23	GC
1ZC3	-10.06	-9.21	0.85	0.85	GC
2FU5	-12.48	-8.7	3.78	3.78	GC
2RMK	-9.23	-7.39	1.84	1.84	GC
3VHX	-6.58	-6.45	0.13	0.13	GC
1PVH	-9.52	-8.68	0.84	0.84	RC
1T6B	-13.1	-13.07	0.03	0.03	RC
2HLE	-10.09	-7.79	2.3	2.3	RC
2I9B	-12.93	-13.47	0.54	0.54	RC
2NYZ	-12.69	-11.37	1.32	1.32	RC
1AXI	-10.71	-10.34	0.37	0.37	RC
1Y6K	-12.28	-11.75	0.53	0.53	RC
2J12	-10.5	-6.69	3.81	3.81	RC
3S9D	-11.63	-7.98	3.65	3.65	RC

Sheet1

4M76	-8.66	-9.5	0.84	RC
3SJH	-7.46	-8.54	1.08	M1
2VDB	-13.4	-10.06	3.34	M1
3T6G	-10.26	-8.51	1.75	M1
4JRA	-10.3	-7.99	2.31	M1
3IFQ	-9.46	-9.26	0.2	M1
1XQS	-7.08	-7.27	0.19	M1
1GO4	-8.16	-7.84	0.32	M1
4GH7	-11.23	-9.44	1.79	M2
4G59	-8.7	-8.79	0.09	M2
3U82	-10.59	-10.83	0.24	M2
3ONL	-6.71	-6.45	0.26	M2
1XD3	-8.9	-9.1	0.2	M2
2LXM	-13.77	-10.3	3.47	M2
1P3Q	-8.07	-7	1.07	M2
2I32	-8.03	-6.68	1.35	M2
3D5R	-10.53	-8.22	2.31	M2
2LD7	-10.96	-10.87	0.09	M3
2HTH	-5.43	-6.31	0.88	M3
4KT3	-13.07	-10.45	2.62	M3
2IJ0	-13.29	-9.91	3.38	M3
2IXQ	-8.39	-8.12	0.27	M3
2CJS	-9.54	-7.51	2.03	M3
2LFW	-11.25	-10.73	0.52	M3
2JJS	-8.07	-6.49	1.58	M3
3BX7	-10.98	-8.13	2.85	M3