

Computational Insights for Predicting the Binding and Selectivity of Peptidomimetic Plasmepsin IV Inhibitors against Cathepsin D

Lucas Sousa Martins¹, Hendrik G. Kruger², Tricia Naicker², Cláudio N. Alves¹, Jerônimo Lameira¹, and José Rogério A. Silva^{1,*}

Supplementary Material

Figure S1. RMSD plot for main-chain atoms in PlmIV systems.

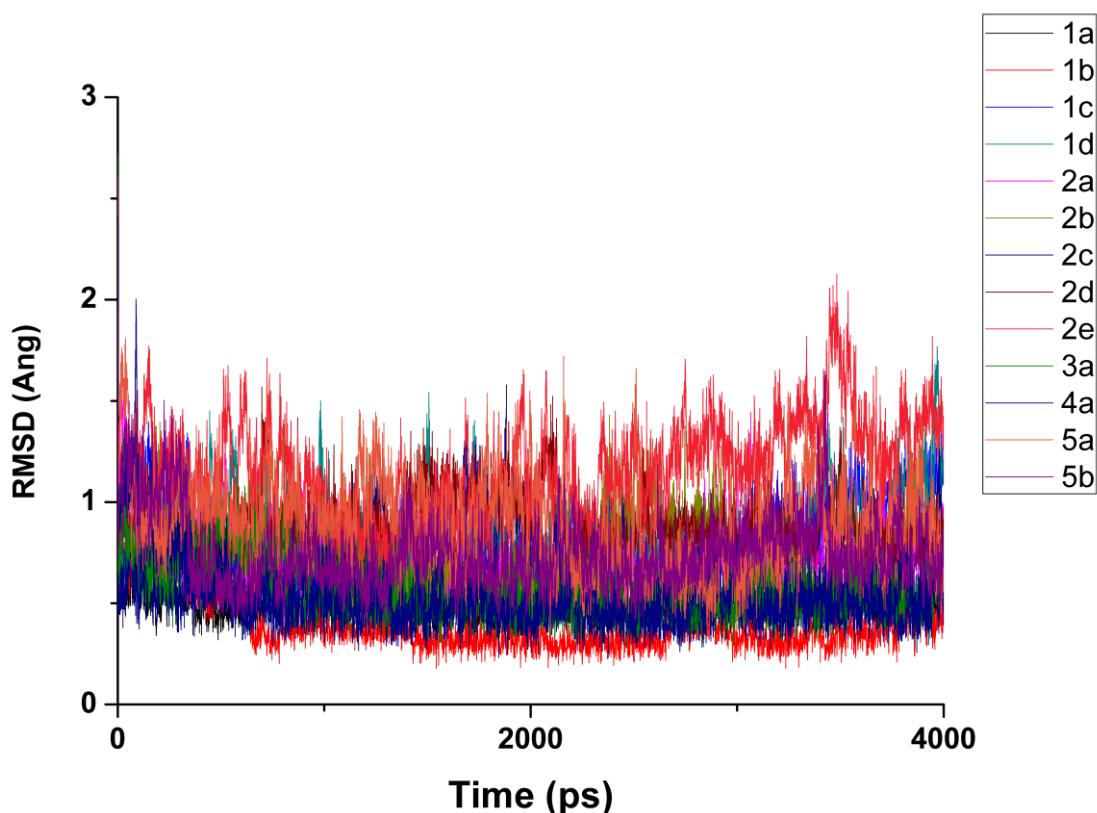


Figure S2. RMSD plot for main-chain atoms in CatD systems.

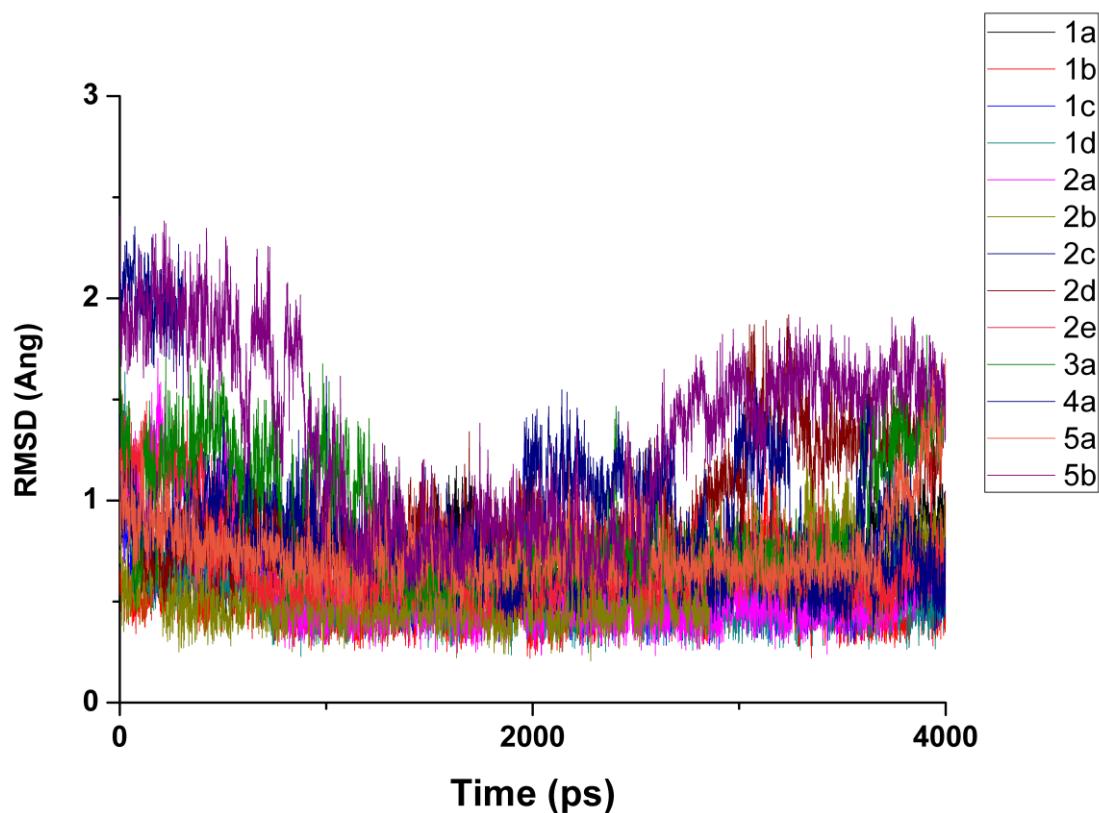


Table S1. The α and β parameters used for each simulated inhibitor.

Inhibitor	α	β
1a	0.18	0.37
1b	0.18	0.37
1c	0.18	0.37
1d	0.18	0.37
2a	0.18	0.37
2b	0.18	0.37
2c	0.18	0.33
2d	0.18	0.37
2e	0.18	0.37
3a	0.18	0.37
4a	0.18	0.37
5a	0.18	0.37
5b	0.18	0.37

Table S2. Values of S_{CALC} and S_{EXP} .

Inhibitor	S_{EXP}	S_{TEO}
1a	0.97	0.98
1b	0.96	0.94
1c	0.88	0.88
1d	0.93	0.95
2a	0.83	0.86
2b	0.89	0.88
2c	0.91	0.93
2d	0.94	0.95
2e	1.03	1.03
3a	0.77	0.73
4a	0.87	0.86
5a	0.76	0.77
5b	0.77	0.78

Table S3. Per-residue decomposition values (kcal/mol) for simulated inhibitor in PlmIV (Part 1)

Residue	1a		1b		1c		1d		2a		2b		2c		2d	
	Vvdw	Vele														
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01
3	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01
4	0	0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0
6	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0.01	0	0	0	-0.01	0.01	0	0.01
7	0	-0.02	0	-0.03	0	-0.01	0	-0.02	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.04	0	-0.03
8	-0.02	0.01	-0.02	0.04	-0.02	0.02	-0.01	0.03	-0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.02	0.05	-0.02	0.03
9	-0.01	-0.02	-0.01	-0.05	-0.01	-0.02	-0.01	-0.03	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.08	-0.01	-0.04
10	-0.03	0	-0.03	0	-0.02	0	-0.01	0.01	-0.02	0	-0.01	0.01	-0.03	0.04	-0.03	0.01
11	-0.07	0.03	-0.06	0.02	-0.04	0	-0.03	0	-0.03	0.01	-0.03	0	-0.06	0.01	-0.06	0.02
12	-0.03	0.04	-0.02	0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.05	-0.02	0.02
13	-0.54	-0.11	-0.15	-0.04	-0.18	-0.06	-0.07	0.02	-0.1	-0.06	-0.08	-0.05	-0.28	-0.22	-0.23	0.1
14	-0.48	0.21	-0.21	0.17	-0.23	0.12	-0.07	0.08	-0.12	0.12	-0.09	0.07	-0.57	0.47	-0.28	0.2
15	-2.48	0.37	-2.24	0.44	-2.07	-0.11	-0.7	0.32	-0.96	0.42	-0.8	0.25	-2.9	0.54	-1.93	0.25
16	-0.22	-0.02	-0.24	-0.12	-0.16	-0.02	-0.12	-0.06	-0.13	-0.02	-0.11	-0.05	-0.26	-0.22	-0.25	-0.1
17	-0.06	0.05	-0.07	0.08	-0.05	0.03	-0.04	0.03	-0.04	0.05	-0.04	0.02	-0.07	0.05	-0.06	0.06
18	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.04	-0.01	-0.03
19	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03	-0.01	-0.03	0	-0.04	0	-0.02	0	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.04
20	0	0	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	0

65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
66	0	0.01	0	0.02	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01
67	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01
68	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
69	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
70	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01
71	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01
72	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01
73	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0
74	-0.05	-0.05	-0.02	0.02	-0.02	-0.04	-0.02	-0.03	-0.02	0.01	-0.03	-0.02	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01
75	-0.82	-0.01	-0.17	0.05	-0.13	0.04	-0.14	0.06	-0.18	0.11	-0.22	0.01	-0.13	0.03	-0.19	0.07
76	-1.4	0.21	-0.36	-0.24	-0.33	-0.27	-0.27	-0.31	-0.4	-0.39	-1.35	-0.13	-0.32	-0.19	-0.41	-0.3
77	-7.29	-0.95	-5.8	-0.69	-5.11	-1.14	-4.84	-1.67	-6.26	-1.36	-7.22	-1.9	-4.98	-0.64	-6.22	-1.72
78	-2.21	-0.78	-4.07	-2.28	-5.17	-2.79	-4.52	-1.82	-5.01	-3.02	-4.26	-1.64	-4.49	-1.84	-4.5	-2.78
79	-1.81	-0.43	-1.56	-0.44	-4.66	-1.97	-3.99	-4.59	-5.03	-2.7	-3.75	-2.27	-2.02	-0.46	-4.94	-3.01
80	-0.23	0.14	-0.28	0.19	-0.38	0.5	-0.48	0.18	-0.5	0.39	-0.49	0.49	-0.24	0.23	-0.57	0.5
81	-0.1	0.02	-0.1	0.05	-0.1	0.17	-0.11	0.12	-0.13	0.08	-0.15	0.05	-0.08	0.07	-0.15	0.23
82	-0.1	0.02	-0.1	0.04	-0.08	0.04	-0.09	0.05	-0.11	0.02	-0.1	0.04	-0.07	0.05	-0.13	0.05
83	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	0	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01
84	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.02	0	0.01	0	0.01	0	0.02	0	0.02
85	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	0
86	-0.01	0.01	-0.01	0.02	0	0.01	0	0.02	-0.01	0.02	-0.01	0.01	0	0.01	-0.01	0.02
87	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.02	0	0	0	0	0	-0.01
88	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01
89	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0
90	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	0
91	0	0.01	0	0.02	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.02	0	0.02
92	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01
93	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0.01
94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0
95	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.02	0	0.01	0	0.01	0	0.02	0	0.01
96	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01
97	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
98	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01
99	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
100	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01
101	0	-0.02	0	-0.02	0	-0.02	0	-0.03	0	-0.03	0	-0.01	0	-0.02	0	-0.03
102	-0.01	0.02	-0.01	0.04	-0.01	0.03	-0.01	0.03	-0.01	0.04	-0.01	0.02	-0.01	0.04	-0.01	0.04
103	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.02
104	-0.01	0	0	0.02	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.02	-0.01	0.02
105	-0.02	-0.01	-0.02	0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0	-0.02	0
106	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.02	-0.01	-0.01
107	-0.01	0.02	-0.01	0	-0.01	0.03	-0.01	0.03	-0.01	0	-0.01	0.03	-0.01	0.02	-0.01	0.02
108	-0.03	0.03	-0.03	0.01	-0.03	0.05	-0.03	0.05	-0.03	0.02	-0.04	0.05	-0.02	0.05	-0.04	0.06
109	-0.02	0.04	-0.02	0.02	-0.02	0.02	-0.02	0.02	-0.02	0.02	-0.02	0.03	-0.02	0.02	-0.02	0.02

110	-0.08	-0.05	-0.08	0.07	-0.1	0.08	-0.1	0.05	-0.1	0.05	-0.11	0.06	-0.07	0.08	-0.13	0.08
111	-1.59	-0.17	-2.01	-0.11	-1.46	-0.06	-1.21	-0.2	-1.33	-0.1	-1.41	-0.04	-1.81	-0.27	-1.59	-0.11
112	-0.1	-0.02	-0.11	0.01	-0.16	0.03	-0.13	0.02	-0.12	0.02	-0.16	0.01	-0.09	0.08	-0.17	0.05
113	-0.14	0.02	-0.09	-0.05	-0.16	0	-0.1	-0.04	-0.09	-0.02	-0.15	-0.02	-0.08	-0.11	-0.14	-0.03
114	-2.87	-0.09	-1.88	-0.1	-3.38	-0.07	-2.58	-0.13	-2.15	-0.04	-3.49	-0.14	-1.72	-0.63	-3.04	-0.13
115	-0.39	-0.04	-0.43	-0.01	-0.4	-0.05	-0.5	-0.1	-0.42	-0.05	-0.59	-0.06	-0.34	-0.2	-0.51	-0.09
116	-0.05	0.02	-0.06	-0.01	-0.06	-0.01	-0.06	-0.02	-0.05	0	-0.05	-0.01	-0.05	-0.07	-0.06	-0.03
117	-0.12	0.05	-0.13	0.02	-0.14	-0.03	-0.12	-0.02	-0.09	0	-0.09	-0.02	-0.1	-0.15	-0.13	-0.01
118	-0.37	0.05	-0.86	0.05	-0.43	0.03	-0.34	0.1	-0.22	0.07	-0.24	0.08	-0.29	0.29	-0.55	0.11
119	-0.1	0.03	-0.12	0.05	-0.08	0.01	-0.07	0.03	-0.06	0.04	-0.07	0.03	-0.09	0.17	-0.11	0.05
120	-1.64	0.04	-2.13	-0.13	-1.87	0.09	-1.74	0.12	-1.49	0.04	-1.56	0.02	-1.87	0.06	-2.11	-0.06
121	-0.05	0.01	-0.06	0.01	-0.05	0.02	-0.05	0.02	-0.05	0.02	-0.05	0.01	-0.06	0	-0.06	0.03
122	-0.09	-0.03	-0.13	-0.07	-0.08	0.04	-0.09	0.02	-0.09	0.02	-0.08	-0.01	-0.12	-0.03	-0.09	-0.02
123	-1.87	0.1	-1.92	0.14	-1.54	0.17	-1.6	0.18	-1.88	0.11	-1.69	0.09	-1.83	0.2	-1.57	0.21
124	-0.09	-0.07	-0.1	-0.08	-0.07	-0.08	-0.08	-0.11	-0.08	-0.06	-0.06	-0.05	-0.09	-0.1	-0.07	-0.09
125	-0.08	0.16	-0.07	0.19	-0.05	0.18	-0.06	0.22	-0.06	0.2	-0.04	0.1	-0.06	0.13	-0.06	0.18
126	-0.06	0.09	-0.06	0.13	-0.05	0.12	-0.05	0.13	-0.05	0.1	-0.04	0.06	-0.06	0.1	-0.05	0.12
127	-0.04	0.03	-0.03	0.04	-0.02	0.05	-0.03	0.08	-0.03	0.09	-0.02	0.03	-0.03	-0.01	-0.03	0.04
128	-0.03	-0.08	-0.03	-0.08	-0.02	-0.06	-0.02	-0.09	-0.02	-0.12	-0.02	-0.02	-0.02	-0.05	-0.02	-0.08
129	-0.01	-0.03	-0.01	-0.03	-0.01	-0.02	-0.01	-0.04	-0.01	-0.06	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03
130	-0.03	-0.01	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0	-0.01	0.02	-0.01	0	-0.01	0.01
131	-0.73	-0.05	-0.22	-0.02	-0.17	0	-0.16	0	-0.23	-0.07	-0.22	0.04	-0.16	0.01	-0.23	-0.03
132	-0.08	0.07	-0.02	0.08	-0.02	0.05	-0.02	0.05	-0.02	0.07	-0.02	0.03	-0.02	0.06	-0.02	0.07
133	-0.38	-0.01	-0.04	-0.01	-0.03	-0.02	-0.03	-0.02	-0.04	0	-0.05	-0.02	-0.03	-0.02	-0.04	-0.02
134	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01
135	-0.01	0.03	0	0.04	0	0.03	0	0.05	0	0.06	0	0.01	0	0.02	0	0.04
136	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	-0.01
137	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01
138	-0.01	0.03	-0.01	0.04	0	0.03	0	0.04	-0.01	0.04	0	0.02	-0.01	0.03	-0.01	0.04
139	-0.01	0.02	-0.01	0.04	-0.01	0.03	-0.01	0.04	-0.01	0.03	0	0.02	-0.01	0.04	-0.01	0.04
140	0	0.02	0	0.03	0	0.03	0	0.04	0	0.03	0	0.02	0	0.03	0	0.03
141	0	0.01	0	0.02	0	0.02	0	0.03	0	0.02	0	0.01	0	0.02	0	0.02
142	0	0.02	0	0.03	0	0.03	0	0.04	0	0.03	0	0.02	0	0.03	0	0.03
143	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.02	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01
144	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.02	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01
145	0	0.01	0	0.02	0	0.01	0	0.02	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0.02
146	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	0.01
147	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	0
148	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01
149	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0
150	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
151	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01
152	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01
153	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01
154	-0.02	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	0

155	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.02	0	-0.01
156	-0.04	0.01	-0.04	0.02	-0.03	0.01	-0.03	0.01	-0.03	0.02	-0.02	0.01	-0.04	0.02	-0.03	0.02
157	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01
158	-0.02	-0.02	-0.02	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.02	0.01	-0.02	0
159	-0.01	0.02	-0.01	0.02	0	0.01	0	0.02	0	0.02	0	0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.02
160	-0.01	0	-0.01	-0.02	0	-0.01	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01
161	-0.01	-0.02	-0.01	-0.04	-0.01	-0.02	-0.01	-0.04	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.07	-0.01	-0.03
162	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
163	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
164	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01
165	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0.03	0	0.01
166	0	-0.02	0	0	0	0	0	0.02	0	-0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01
167	-0.01	0.01	-0.01	0.02	0	0.01	0	0.02	0	0.02	0	0.01	-0.01	0.03	0	0.02
168	-0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.02	-0.01	0.03	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.02
169	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0	0
170	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01
171	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01
172	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01
173	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
174	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
175	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
176	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
177	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0
178	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01
179	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
180	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01
181	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0
182	0	-0.01	0	0	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01
183	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
184	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0
185	0	-0.02	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.02	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.02	0	-0.02
186	0	0.02	0	0.02	0	0.01	0	0.01	0	0.02	0	0	0	0.02	0	0.01
187	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	0.01
188	-0.01	-0.03	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.05	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02
189	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0
190	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01
191	-0.07	-0.07	-0.05	-0.07	-0.04	-0.06	-0.04	-0.05	-0.05	-0.04	-0.05	-0.03	-0.04	-0.06	-0.05	-0.06
192	-1.03	0.02	-1.05	-0.01	-0.98	0.08	-0.9	0.15	-1.19	0.1	-1.04	0.05	-0.86	-0.01	-1.1	0.07
193	-0.05	0.08	-0.05	0.06	-0.05	0.05	-0.05	0.06	-0.05	0.07	-0.04	0.03	-0.05	0.05	-0.05	0.06
194	-0.03	-0.09	-0.04	-0.08	-0.03	-0.07	-0.03	-0.05	-0.04	-0.1	-0.03	0	-0.03	-0.07	-0.04	-0.08
195	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01
196	0	-0.02	0	-0.02	0	-0.02	0	-0.03	0	-0.03	0	-0.01	0	-0.02	0	-0.02
197	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0.01
198	0	0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01
199	0	-0.02	0	-0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0

200	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01
201	-0.01	-0.02	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	0
202	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
203	0	0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0
204	0	0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0
205	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
206	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0.01
207	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
208	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.01
209	0	-0.04	-0.01	-0.03	0	-0.02	0	-0.03	0	-0.04	0	-0.01	0	-0.03	0	-0.03
210	-0.02	0.06	-0.03	0.02	-0.02	0	-0.02	0	-0.03	0.06	-0.02	-0.04	-0.02	0.02	-0.03	0.02
211	-0.02	-0.07	-0.03	-0.03	-0.03	-0.03	-0.03	-0.02	-0.03	-0.06	-0.02	0.01	-0.03	-0.04	-0.03	-0.03
212	-0.52	0.15	-0.65	0.06	-0.71	0.08	-0.74	0.15	-0.72	0.12	-0.47	0.08	-0.57	0.06	-0.5	0.08
213	-0.11	-0.18	-0.11	-0.09	-0.1	-0.12	-0.12	-0.15	-0.09	-0.13	-0.08	-0.08	-0.11	-0.05	-0.11	-0.09
214	-2.11	-0.43	-2.11	-1.58	-2.12	0.09	-2.63	2.3	-1.5	-2.85	-1.58	-0.06	-1.66	-1.38	-2.36	-0.37
215	-0.43	0.22	-0.36	0.21	-0.37	0.21	-0.33	0.05	-0.4	0.21	-0.53	0.51	-0.42	0.07	-0.38	0.13
216	-3.33	-0.06	-3.68	-0.34	-2.65	0.57	-2.74	0.19	-3.63	0.88	-3.84	-0.31	-3.4	-1.53	-2.76	0.52
217	-5.49	-3.63	-6.65	-2.32	-6.04	-4.9	-5.98	-4.49	-6.7	-3.88	-6.86	-1.91	-5.86	-1.37	-6.59	-3.95
218	-0.89	-4.72	-1.04	-4.15	-1.64	-3.27	-1.23	-1.29	-1.5	-2.68	-1.2	-2.17	-1.92	-2.93	-1.48	-2.77
219	-2.63	-1.72	-2.22	-0.16	-2.94	-0.75	-1.26	0.1	-1.06	0.21	-0.87	0.04	-3.03	-0.26	-1.93	0.08
220	-0.33	0.25	-0.29	0.05	-0.33	0	-0.16	0.15	-0.15	0.04	-0.13	0.08	-0.19	0.02	-0.22	0.01
221	-1.19	-0.39	-1.6	0.16	-1.65	0.23	-0.79	-0.24	-0.8	0.04	-0.57	-0.05	-1.69	-0.16	-1.34	-0.15
222	-0.06	0.07	-0.08	0.02	-0.08	0	-0.05	0.06	-0.05	0.07	-0.04	0.01	-0.08	0.05	-0.08	0.03
223	-0.03	0.02	-0.04	-0.01	-0.04	0	-0.03	-0.02	-0.03	-0.02	-0.02	-0.01	-0.03	0	-0.04	-0.01
224	-0.02	0.01	-0.02	-0.02	-0.03	0	-0.02	-0.03	-0.02	-0.04	-0.02	-0.02	-0.02	-0.01	-0.02	-0.02
225	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.03	0	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.02
226	-0.01	-0.03	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02
227	-0.03	-0.01	-0.03	-0.02	-0.02	0	-0.02	-0.04	-0.02	-0.04	-0.02	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.02
228	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0	0	-0.01	0.01	-0.01	0
229	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0
230	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0	0	-0.02	0	-0.02	0	0	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01
231	-0.02	0	-0.02	-0.01	-0.02	0	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01
232	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01
233	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.02	0	-0.02	0	0	0	-0.02	0	-0.01
234	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
235	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01
236	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01
237	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0.01	0	0
238	-0.03	-0.04	-0.02	0	-0.02	0	-0.02	0.01	-0.02	0.01	-0.03	0.01	-0.03	0	-0.03	0
239	-0.01	-0.04	-0.01	0.02	-0.01	0	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	0.02	-0.01	0
240	-0.01	-0.06	-0.01	0.02	-0.01	0	-0.01	0.03	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	0.02	-0.01	0
241	-0.02	-0.07	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.01	-0.02	0	-0.01	0.02	-0.02	-0.01
242	-0.03	0.02	-0.02	0	-0.03	0.02	-0.02	0.01	-0.02	0.03	-0.03	0.02	-0.03	0.02	-0.03	0.03
243	-0.26	-0.07	-0.18	0.06	-0.19	-0.01	-0.17	0.05	-0.17	0.04	-0.28	0.01	-0.24	0.04	-0.28	0
244	-0.1	-0.1	-0.07	-0.02	-0.08	-0.01	-0.06	-0.03	-0.06	-0.03	-0.08	-0.01	-0.08	-0.03	-0.09	-0.03

245	-0.07	-0.07	-0.05	0.02	-0.05	0.01	-0.04	0.03	-0.04	0.01	-0.06	0	-0.05	0.02	-0.05	0
246	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	0.01
247	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0.01	0	0	0
248	0	0.02	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01
249	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0
250	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
251	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.02	0
252	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01
253	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
254	0	-0.02	0	-0.01	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0
255	0	0.02	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01
256	0	-0.02	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	0
257	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	0	0	0	-0.01	-0.01	-0.01
258	0	0.03	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.02	0	0	0	0.02	0	0.01
259	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	0
260	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01
261	0	0	0	0	0	0	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01
262	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	0
263	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
264	0	-0.01	0	0	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0
265	0	-0.02	0	-0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0
266	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
267	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.02	0	-0.01
268	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0
269	0	0.05	0	0.02	0	0.01	0	0.02	0	0.03	0	0	0	0.03	0	0.02
270	0	0.02	0	0.02	0	0.01	0	0.02	0	0.01	0	0.01	0	0.02	0	0.01
271	0	0.02	0	0.01	0	0	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01
272	-0.01	0.04	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.02
273	-0.02	0	-0.02	0.01	-0.02	0	-0.01	0.03	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.02	-0.02	0.01
274	-0.01	0.02	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0.01
275	-0.02	-0.06	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.02	-0.04	-0.01	-0.02
276	-0.01	0.02	0	0.03	0	0.01	0	0.02	0	0.01	0	0.01	0	0.04	0	0.02
277	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	0	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0
278	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
279	0	-0.02	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.02	0	-0.01
280	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
281	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01
282	0	0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	0
283	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
284	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0
285	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	-0.02	0	-0.01	-0.01
286	-0.06	-0.01	-0.05	-0.05	-0.06	-0.01	-0.02	0	-0.03	-0.01	-0.03	0	-0.08	-0.07	-0.06	-0.02
287	-0.04	-0.05	-0.03	0.02	-0.03	-0.02	-0.02	0.03	-0.02	-0.01	-0.02	0.01	-0.03	0.02	-0.03	0
288	-0.24	0.33	-0.19	0.04	-0.26	0	-0.12	-0.03	-0.16	0.03	-0.1	0.01	-0.32	-0.1	-0.21	0
289	-0.13	-0.17	-0.11	0.01	-0.08	-0.01	-0.06	-0.02	-0.07	-0.04	-0.07	0.01	-0.09	0	-0.1	-0.01

Table S4. Per-residue decomposition values (kcal/mol) for simulated inhibitor in PlmIV (Part 2).

2	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01
3	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01
4	0	-0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01
5	0	0.01	0	0	0	0	0	0.01	0	0.01
6	0	0	0	0.01	0	0	0	-0.01	0	0
7	0	-0.02	0	-0.02	0	-0.01	0	0.01	0	-0.01
8	-0.02	0.03	-0.01	0.02	-0.02	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.04
9	-0.01	-0.04	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	-0.03
10	-0.04	0	-0.02	0.01	-0.02	0	-0.01	0	-0.02	-0.01
11	-0.09	0.05	-0.03	0	-0.04	0.01	-0.02	0	-0.05	-0.01
12	-0.03	0	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03
13	-0.69	-0.07	-0.15	0.02	-0.18	0.07	-0.15	-0.04	-0.1	0.08
14	-0.6	0.06	-0.2	-0.01	-0.17	0.1	-0.11	0.01	-0.09	-0.12
15	-2.61	0.22	-1.56	0.11	-1.99	0.24	-0.69	0.08	-1.73	-0.39
16	-0.23	-0.14	-0.19	-0.04	-0.16	0	-0.09	0.07	-0.16	-0.1
17	-0.07	0.05	-0.04	0.02	-0.05	0.02	-0.03	-0.02	-0.05	0.05
18	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	0	-0.01	0.02	-0.01	-0.01
19	-0.01	-0.04	0	-0.02	0	-0.03	0	-0.02	0	-0.07
20	0	0	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.02
21	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.02
22	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.01
23	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0
24	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
25	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01
26	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.03
27	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0.01	0	-0.02
28	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.02
29	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02
30	-0.04	0.03	-0.02	0.02	-0.03	0.02	-0.02	0.04	-0.03	0.04
31	-0.09	0.02	-0.05	0.01	-0.06	0.06	-0.05	-0.01	-0.06	0.09
32	-1.58	0.13	-1.43	0.04	-1.7	-0.01	-1.36	-0.04	-1.56	0.13
33	-0.16	0.02	-0.14	0.05	-0.12	0.09	-0.11	0.05	-0.11	0.04
34	-0.7	11.76	-0.29	12.02	-1.1	-11.8	-0.61	-10.09	-1.21	13.49
35	-0.27	0.02	-0.48	0.67	-0.25	0.01	-0.54	0.33	-0.27	0.19
36	-1.92	1	-2.13	1.06	-2.11	0.76	-2.09	0.75	-1.8	1.21
37	-1.11	0.41	-0.91	0.39	-1.3	0.59	-0.68	0.23	-1.52	0.83
38	-0.06	-0.02	-0.06	-0.02	-0.07	0	-0.05	-0.02	-0.07	0
39	-0.07	-0.09	-0.05	-0.1	-0.06	-0.19	-0.05	-0.09	-0.08	-0.26
40	-0.03	0.02	-0.02	0.01	-0.03	0	-0.02	-0.01	-0.03	0.01
41	-0.39	-0.01	-0.32	-0.02	-0.25	0.03	-0.5	-0.01	-0.53	0
42	-0.02	0	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02
43	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01
44	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.03
45	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.01

46	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01
47	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.01
48	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01
49	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	-0.01
50	-0.01	-0.02	0	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	-0.02
51	-0.01	-0.03	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.03	-0.01	-0.02
52	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	-0.01
53	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.02	0	-0.02
54	-0.01	-0.01	0	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.02
55	-0.03	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	0	-0.02	0	-0.03	0.02
56	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0.03	-0.01	0.01
57	0	-0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	0
58	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
59	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01
60	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
61	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
62	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	0
63	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01
64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.01
66	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.02
67	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.01
68	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01
69	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01
70	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01
71	0	0	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01
72	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.02	0	-0.02
73	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0.01
74	-0.03	-0.03	-0.02	-0.03	-0.02	-0.04	-0.02	-0.06	-0.02	0.01
75	-0.22	0.02	-0.14	0.01	-0.17	0.08	-0.14	0.04	-0.21	0.1
76	-1.29	0.02	-0.43	-0.07	-0.49	-0.34	-0.23	-0.26	-0.4	-0.42
77	-6.84	-1.45	-5.4	-0.76	-5.69	-2.06	-4.48	-1.32	-6.34	-1.89
78	-4.12	-1.64	-4.65	-1.88	-4.34	-2.99	-3.59	-1.93	-3.96	-3.13
79	-2.97	-1.39	-2.32	-0.39	-3.94	-3.43	-3.76	-2.6	-4.07	-2.77
80	-0.42	0.2	-0.27	0.16	-0.41	0.32	-0.43	0.21	-0.44	0.42
81	-0.13	0.07	-0.09	0.05	-0.11	0.24	-0.1	0.09	-0.12	0.11
82	-0.11	0.04	-0.07	0.03	-0.08	0.05	-0.12	0.03	-0.13	0.05
83	-0.02	0	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.02	0
84	0	0.01	0	0.01	0	0.02	0	0.01	0	0.02
85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
86	-0.01	0.01	0	0.01	-0.01	0.02	0	0.01	-0.01	0.03
87	0	0	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01
88	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01
89	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	0
90	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0

91	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0.01
92	0	0	0	-0.01	0	0	0	0.01	0	0	0
93	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
95	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.02	
96	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
97	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
98	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	-0.01
99	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01	
100	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	-0.01
101	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.04	
102	-0.01	0.02	-0.01	0.02	-0.01	0.03	-0.01	0	-0.01	0.05	
103	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	-0.01	
104	-0.01	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.02	
105	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.03	-0.02	0	
106	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	
107	-0.01	0.02	-0.01	0.02	-0.01	0.04	-0.01	0.05	-0.01	0.01	
108	-0.04	0.05	-0.02	0.03	-0.03	0.07	-0.04	0.09	-0.03	0.05	
109	-0.02	-0.01	-0.01	0.03	-0.02	0.01	-0.02	0	-0.02	-0.02	
110	-0.1	0.05	-0.07	0.05	-0.08	0.09	-0.1	-0.02	-0.09	0.23	
111	-1.33	-0.16	-1.08	-0.1	-1.58	-0.17	-1.46	-0.13	-1.32	-0.12	
112	-0.15	0.09	-0.08	0.01	-0.09	0.05	-0.13	0.1	-0.09	0.08	
113	-0.11	-0.05	-0.07	-0.01	-0.09	-0.01	-0.09	0.02	-0.07	-0.06	
114	-1.85	-0.25	-2.09	-0.05	-3.49	-0.09	-3.32	-0.07	-3.33	-0.03	
115	-0.63	-0.11	-0.27	-0.06	-0.3	-0.09	-0.52	-0.08	-0.45	0.02	
116	-0.08	-0.04	-0.04	0	-0.05	-0.01	-0.05	-0.03	-0.06	-0.05	
117	-0.18	-0.01	-0.08	-0.02	-0.1	0.02	-0.1	-0.02	-0.14	0.02	
118	-0.59	0.08	-0.16	0.09	-0.67	0.03	-0.18	-0.09	-0.46	-0.13	
119	-0.13	0.05	-0.06	0.04	-0.08	-0.01	-0.05	-0.07	-0.16	-0.09	
120	-1.93	-0.1	-1.29	0.03	-1.84	0.16	-1.44	-0.01	-2.02	0.01	
121	-0.07	0.02	-0.04	0.01	-0.05	0.02	-0.05	0	-0.06	0.06	
122	-0.13	-0.03	-0.08	-0.02	-0.08	0.07	-0.08	0.06	-0.09	0	
123	-1.55	0.18	-2	0.09	-1.69	0.17	-1.72	0.09	-1.82	0.24	
124	-0.09	-0.08	-0.08	-0.07	-0.07	-0.06	-0.07	-0.04	-0.08	-0.1	
125	-0.06	0.14	-0.06	0.15	-0.06	0.22	-0.05	0.14	-0.07	0.29	
126	-0.05	0.09	-0.05	0.09	-0.05	0.13	-0.04	0.07	-0.05	0.16	
127	-0.03	0.01	-0.02	0.02	-0.02	0.08	-0.02	0.04	-0.03	0.11	
128	-0.02	-0.04	-0.02	-0.05	-0.02	-0.08	-0.02	-0.02	-0.02	-0.11	
129	-0.01	0	-0.01	-0.02	-0.01	-0.04	-0.01	0	-0.01	-0.05	
130	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	0.02	-0.01	0.02	-0.01	0.04	
131	-0.2	0.04	-0.17	0.01	-0.19	-0.02	-0.13	0.03	-0.22	-0.01	
132	-0.02	0.05	-0.02	0.04	-0.02	0.06	-0.01	0.01	-0.02	0.07	
133	-0.05	-0.01	-0.03	-0.01	-0.04	-0.02	-0.02	-0.02	-0.04	-0.02	
134	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	
135	0	0.01	0	0.02	0	0.04	0	0.01	0	0.07	

181	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
182	0	0.01	0	0	0	0	0	0.01	0	0.02
183	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.01
184	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.01
185	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01
186	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01
187	-0.01	0.01	-0.01	0	0	0.01	0	0.01	0	0.04
188	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	0	-0.01	0	0.01	-0.01	-0.01
189	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0.01
190	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	0
191	-0.05	-0.05	-0.04	-0.04	-0.04	-0.06	-0.03	-0.02	-0.04	-0.06
192	-1.08	-0.01	-0.95	0.04	-0.96	0.11	-0.75	0.08	-1.03	0.17
193	-0.05	0.03	-0.04	0.05	-0.04	0.06	-0.04	0.02	-0.04	0.05
194	-0.04	0	-0.03	-0.07	-0.03	-0.06	-0.03	0	-0.03	-0.04
195	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01
196	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.03
197	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
198	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.02
199	0	0	0	-0.01	0	0	0	0.01	0	0.01
200	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.01
201	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0
202	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
203	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.01
204	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.01
205	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.01
206	0	0	0	0.01	0	0	0	-0.01	0	0.01
207	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
208	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.01
209	0	0	0	-0.02	0	-0.02	0	0	0	-0.02
210	-0.03	-0.04	-0.02	0.03	-0.02	0	-0.02	-0.03	-0.02	-0.02
211	-0.03	0.01	-0.03	-0.05	-0.02	-0.03	-0.03	0.01	-0.02	0
212	-0.64	0.04	-0.44	0.09	-0.36	0.09	-0.72	0.04	-0.64	0.1
213	-0.11	-0.04	-0.1	-0.12	-0.07	-0.11	-0.12	-0.05	-0.08	-0.12
214	-1.53	-1.49	-2.13	-0.59	-1.87	0.14	-2.77	-0.35	-2	-0.46
215	-0.35	0.07	-0.39	0.16	-0.41	0.16	-0.27	0.07	-0.51	0.19
216	-3.06	-0.55	-3.17	-0.44	-3.4	1.12	-1.47	0.24	-4.02	-1.94
217	-6.84	-3.22	-4.91	-3.54	-6.22	-4.81	-4.22	-4.16	-5.61	-3.38
218	-1.55	-2.02	-1.53	-2.05	-1.45	-3.2	-1.02	-0.37	-2.07	-0.21
219	-2.11	0.11	-2.39	-2.12	-3.44	-0.75	-1.69	0.24	-0.62	-0.29
220	-0.23	0.04	-0.21	0.16	-0.21	0.07	-0.16	-0.06	-0.09	0.06
221	-1.05	-0.04	-0.73	0.12	-0.7	0.06	-0.77	0.05	-0.35	-0.07
222	-0.06	-0.02	-0.06	0.03	-0.04	0	-0.04	-0.03	-0.03	0.03
223	-0.03	0	-0.04	0	-0.03	0	-0.02	-0.02	-0.02	-0.01
224	-0.02	0	-0.03	0	-0.02	0	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02
225	0	0	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01

226	-0.01	0	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	-0.01
227	-0.02	0	-0.02	-0.01	-0.01	0	-0.02	0.02	-0.01	-0.02
228	0	0	-0.01	0	0	0	0	-0.03	0	0.01
229	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
230	-0.01	0	-0.01	-0.01	0	0	0	0.01	0	-0.01
231	-0.01	0	-0.02	-0.01	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	-0.01
232	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0
233	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	0.01	0	0
234	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
235	0	0	0	-0.01	0	0	0	0.01	0	0
236	0	0	0	-0.01	0	0	0	0.02	0	-0.01
237	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	0.01
238	-0.02	0.01	-0.03	0	-0.02	-0.01	-0.02	0	-0.01	0.01
239	-0.01	0	-0.01	0	0	-0.01	-0.01	-0.04	0	0.03
240	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.06	0	0.04
241	-0.01	0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.06	-0.01	0.06
242	-0.02	0	-0.03	0.03	-0.02	0.01	-0.04	0.04	-0.01	-0.04
243	-0.18	-0.01	-0.33	0.02	-0.24	-0.02	-0.7	-0.09	-0.05	0.01
244	-0.08	0.01	-0.13	-0.03	-0.07	-0.02	-0.2	0.01	-0.03	0.01
245	-0.05	0	-0.06	-0.01	-0.03	-0.01	-0.04	-0.05	-0.02	0.04
246	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	-0.01	0	0
247	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	0.01
248	0	0	0	0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01
249	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	0
250	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
251	0	0	0	-0.01	0	0	0	0.01	0	-0.01
252	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	0.01
253	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.01
254	0	0	0	-0.01	0	0	0	0.01	0	0
255	0	0	0	0.01	0	0	0	-0.01	0	0
256	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0
257	-0.01	0	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01
258	0	0	0	0.02	0	0.01	0	-0.01	0	-0.01
259	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0
260	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0
261	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.02
262	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.01
263	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
264	0	0.01	0	0	0	0	0	0.01	0	0.02
265	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0.01
266	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
267	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.02
268	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0	0.01
269	0	0	0	0.03	0	0.01	0	-0.01	0	-0.01
270	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	-0.01	0	0.01

271	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0
272	-0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.02	-0.01	0	0	-0.01
273	-0.02	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.01	-0.02	-0.01	0.03
274	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0	-0.01
275	-0.02	0.01	-0.02	-0.03	-0.01	-0.02	-0.02	0	-0.01	0.03
276	-0.01	0.02	-0.01	0	0	0.01	-0.01	-0.02	0	0.02
277	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	-0.01	0	0.02
278	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
279	0	0	0	-0.01	0	0	0	0.01	0	0
280	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	-0.01
281	0	0.01	0	0	0	0	0	-0.02	0	0.02
282	0	-0.01	0	0	0	0	0	0.01	0	-0.01
283	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	-0.01
284	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	-0.01
285	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0.01	0	0
286	-0.07	0.02	-0.06	-0.02	-0.05	0	-0.08	-0.04	-0.02	0.03
287	-0.03	0	-0.04	-0.04	-0.02	-0.03	-0.04	-0.06	-0.01	0.06
288	-0.29	0.06	-0.3	0.09	-0.16	0.05	-0.17	0.01	-0.06	-0.04
289	-0.11	0.03	-0.1	-0.05	-0.05	-0.02	-0.06	-0.02	-0.03	0.03
290	-1.3	0	-1.87	0.09	-0.93	0.05	-0.79	0.08	-0.21	-0.05
291	-0.46	-0.05	-0.35	-0.1	-0.11	-0.06	-0.12	-0.11	-0.08	0.04
292	-1.48	0.03	-2.75	-0.02	-1.64	0.1	-1.87	-0.06	-1.39	-0.08
293	-0.21	0.02	-0.28	-0.01	-0.42	-0.07	-0.16	0.02	-0.43	-0.01
294	-1.7	-0.03	-1.8	-0.1	-2.09	-0.11	-1.35	-0.02	-2.4	-0.04
295	-0.05	-0.01	-0.06	0.01	-0.06	0	-0.04	0	-0.08	0.03
296	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	0
297	-0.01	0.01	-0.02	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0.01
298	-0.1	0.01	-0.09	-0.01	-0.08	-0.01	-0.08	0.01	-0.09	0.02
299	-0.09	0.01	-0.09	-0.07	-0.07	-0.05	-0.09	-0.01	-0.07	-0.05
300	-1.67	0.07	-2.01	-0.03	-1.74	0.01	-2.26	0.02	-1.72	0.1
301	-0.13	-0.1	-0.13	0.08	-0.09	-0.01	-0.12	-0.06	-0.07	-0.1
302	-0.08	-0.01	-0.08	-0.08	-0.06	-0.08	-0.07	-0.02	-0.07	0.07
303	-0.17	-0.07	-0.14	-0.11	-0.18	-0.14	-0.08	-0.04	-0.14	-0.11
304	-0.07	-0.03	-0.08	-0.11	-0.07	-0.07	-0.05	0.02	-0.03	0.01
305	-0.02	0.02	-0.02	-0.07	-0.02	-0.03	-0.02	0.02	-0.01	0.06
306	-0.04	0.01	-0.03	-0.01	-0.03	0.02	-0.03	-0.01	-0.02	0.02
307	-0.07	-0.02	-0.04	-0.01	-0.03	-0.03	-0.04	-0.02	-0.03	0.01
308	0	0	0	-0.02	0	-0.01	0	0.01	0	0.01
309	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.02
310	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	0.01
311	-0.01	-0.02	-0.01	-0.04	-0.01	-0.02	-0.01	0	0	-0.04
312	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0
313	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0
314	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.02
315	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.02	0	0.01	-0.01	0.02

316	0	0	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01
317	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.02
318	0	0.01	0	0.01	0	0.02	0	0.01	0	0.03
319	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0
320	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0.02
321	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.03
322	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0
323	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	-0.02
324	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01
325	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0.02
326	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.01
327	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.01

Table S5. Per-residue decomposition values (kcal/mol) for simulated inhibitor in CatD (Part 1).

Residue	1a		1b		1c		1d		2a		2b		2c		2d	
	Vvdw	Vele														
1	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0
2	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01
3	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0
4	0	-0.04	0	0	0	-0.02	0	0	0	0	0	0.01	0	-0.01	0	-0.01
5	0	-0.03	0	-0.01	0	-0.02	0	0	0	-0.02	0	0.01	0	-0.01	0	-0.01
6	-0.01	0.06	-0.01	0.01	-0.01	0.04	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.02
7	-0.01	-0.05	-0.01	-0.01	-0.01	-0.04	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	-0.01	-0.04	-0.01	0
8	-0.02	-0.04	-0.02	0	-0.03	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	0.03	-0.01	0	-0.03	-0.01	-0.03	-0.03
9	-0.1	0	-0.09	0.01	-0.17	0	-0.08	0.06	-0.14	0.1	-0.04	0.01	-0.17	-0.04	-0.13	0.05
10	-0.06	0.06	-0.08	0.01	-0.15	0.03	-0.04	0.06	-0.05	0.07	-0.03	0.02	-0.08	-0.02	-0.06	0.01
11	-0.09	0.21	-0.11	0.08	-0.11	0.18	-0.06	0.1	-0.06	0.07	-0.05	0.07	-0.11	0.08	-0.08	0.07
12	-1.26	-0.55	-0.77	0.11	-1.23	-0.15	-0.46	0.28	-0.56	0.15	-0.24	0.09	-1.45	-0.3	-0.84	0.41
13	-1.35	0.43	-0.59	0.14	-1.5	0.27	-1.05	0.38	-1.62	-2.18	-0.42	0.09	-1.56	-1.25	-2	0.49
14	-0.17	-0.05	-0.12	-0.02	-0.14	-0.04	-0.14	0	-0.15	-0.04	-0.1	0	-0.19	-0.03	-0.17	-0.04
15	-0.07	0.05	-0.05	0	-0.06	0.03	-0.06	-0.01	-0.09	0.05	-0.05	-0.02	-0.08	0.02	-0.08	-0.02
16	-0.01	-0.06	-0.01	0	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01
17	0	0.01	0	0	0	0	0	0	-0.01	-0.01	0	0	0	0	0	0
18	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0
19	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.02	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01
20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
21	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01
22	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
23	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0
25	0	-0.02	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0.01	0	0	0	0
26	0	0.02	0	0.01	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0	0	0.02	0	0.01
27	-0.01	0.04	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01

28	-0.02	0.02	-0.01	0.02	-0.02	0.04	-0.02	-0.01	-0.02	0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.04	-0.02	0.01
29	-0.06	0.09	-0.04	0	-0.04	0.05	-0.05	-0.02	-0.06	0.02	-0.04	-0.04	-0.06	0.03	-0.06	-0.02
30	-0.97	0.1	-0.59	-0.02	-0.46	0.06	-0.9	0.03	-1.08	-0.04	-0.62	-0.01	-0.9	0.11	-0.94	0.01
31	-0.12	-0.08	-0.08	-0.01	-0.07	-0.03	-0.11	-0.01	-0.1	0	-0.09	0	-0.11	-0.06	-0.1	0.01
32	-2.14	0.34	-2.07	0.44	-1.92	0.4	-0.92	-2.44	-2.29	0.12	-1.73	-1.63	-2.67	0.7	-2.02	0.04
33	-0.24	0.12	-0.21	0.13	-0.2	0	-0.32	0	-0.24	0.13	-0.37	0.01	-0.25	0.14	-0.21	0.04
34	-1.83	0.93	-1.82	0	-1.59	0.5	-2.2	-0.04	-1.96	0.42	-2.39	0.11	-2.06	-0.2	-1.71	-0.36
35	-1.28	0.05	-0.76	-0.01	-0.87	0	-1.35	-0.02	-1.05	0.11	-1.69	-0.04	-1.17	-0.09	-0.85	0.12
36	-0.08	-0.01	-0.06	0	-0.06	0	-0.08	-0.01	-0.07	0.01	-0.11	-0.04	-0.07	-0.01	-0.06	0.01
37	-0.08	-0.09	-0.06	-0.1	-0.05	-0.13	-0.07	0.02	-0.07	-0.14	-0.09	0.03	-0.07	-0.09	-0.06	-0.07
38	-0.03	0.04	-0.02	0.01	-0.02	0.02	-0.03	0	-0.03	0	-0.03	-0.01	-0.03	0.02	-0.02	0
39	-0.21	0.04	-0.17	-0.02	-0.21	-0.04	-0.27	0.02	-0.27	-0.04	-0.21	-0.02	-0.21	-0.05	-0.25	0
40	-0.01	0.02	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.02	0	-0.01	0	-0.01	0.02	-0.01	0.01
41	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01
42	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
43	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0
44	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	-0.01	0	0.01	0	0
45	0	0.04	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.01
46	0	-0.03	0	-0.01	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.01	0	0.01	0	-0.01	0	-0.01
47	0	-0.02	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	-0.01
48	0	-0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	-0.01
49	-0.01	-0.02	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0.02	-0.01	0	-0.01	-0.01
50	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01
51	-0.01	0.02	-0.01	-0.02	-0.02	-0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03	-0.02	-0.03
52	0	0.02	0	-0.01	-0.01	-0.01	0	0.01	-0.01	0	0	-0.01	0	-0.02	-0.01	-0.01
53	0	0.01	0	-0.01	-0.01	0	0	0.01	-0.01	0	0	0	0	-0.01	0	0
54	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02
55	-0.02	-0.06	-0.02	-0.02	-0.03	-0.02	-0.02	-0.03	-0.05	0	-0.02	0	-0.02	-0.04	-0.03	-0.06
56	0	0.01	0	0.01	-0.01	0.02	0	-0.01	-0.01	0	0	0	0.02	-0.01	0.01	
57	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.01
58	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0
59	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.01
60	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
61	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
62	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
63	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
66	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	-0.01	0	0	0	0
67	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
68	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01
69	0	0.01	0	0.01	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0	0	0.02	0	0.01
70	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01
71	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
72	0	0.01	0	-0.02	0	-0.02	0	0	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.03	0	-0.02

73	-0.02	-0.01	-0.02	0	-0.02	0	-0.02	-0.01	-0.02	0	-0.02	0	-0.02	0	-0.02	-0.01
74	-0.03	0.03	-0.02	0.01	-0.02	0.01	-0.02	0.01	-0.02	0.01	-0.04	0	-0.02	0.01	-0.02	0.02
75	-0.2	0	-0.15	0.03	-0.17	0.04	-0.18	-0.03	-0.18	0.02	-0.27	0.01	-0.18	0.05	-0.16	0.04
76	-0.68	-0.11	-0.51	-0.48	-0.73	-0.63	-0.53	0.01	-0.55	-0.47	-1.38	-0.15	-0.6	-0.55	-0.53	-0.55
77	-5.88	-1.84	-6.05	-2.49	-7.18	-2.87	-6.06	-1.88	-6.87	-2.52	-7.95	-2.08	-5.71	-2.69	-6.45	-2.78
78	-2.72	-2.98	-4.32	-3.14	-5.06	-2.65	-4.71	-2.53	-5.07	-3.1	-4.11	-2.06	-3.98	-3.45	-4.65	-3.98
79	-6.05	0.38	-5.69	-1.9	-5.83	-1.95	-6.52	-0.42	-6.05	-2.84	-1.4	-0.56	-4.73	-4.11	-6.43	-1.06
80	-0.46	0.08	-0.52	0.37	-0.68	0.45	-0.57	0.18	-0.7	0.51	-0.47	0.07	-0.53	0.35	-0.52	0.41
81	-0.11	-0.04	-0.11	0.03	-0.15	-0.01	-0.12	-0.05	-0.15	-0.02	-0.15	0.01	-0.11	0.03	-0.12	0.03
82	-0.11	0.03	-0.1	0.07	-0.14	0.07	-0.13	0.02	-0.15	0.05	-0.14	0.03	-0.11	0.09	-0.11	0.08
83	-0.01	-0.03	-0.01	0.03	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.04	-0.01	0.03
84	0	0.01	0	0.02	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0	0	0.02	0	0.02
85	0	-0.02	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01
86	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01
87	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0.01
88	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0
89	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0
90	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
91	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	0.01	0	0
92	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0.01	0	-0.01	0	0
93	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0.01
94	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0.01
95	0	0.02	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0.01
96	0	0.03	0	0.01	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0	0	0.02	0	0.01
97	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
98	0	0.02	0	0.01	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01
99	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
100	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0
101	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0
102	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0
103	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
104	0	0.03	0	0.01	0	0.02	0	0	0	0.02	0	-0.01	0	0.01	0	0.01
105	0	-0.02	0	-0.02	0	-0.03	0	0	0	-0.02	0	0	0	-0.02	0	-0.02
106	-0.01	0.05	-0.01	0.01	-0.01	0.03	-0.01	0	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.01
107	-0.01	-0.02	0	-0.01	0	-0.02	0	0	-0.01	-0.01	-0.01	0	0	-0.02	0	-0.02
108	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0.01	-0.01	0	0	0	0	0.01	0	0.01
109	-0.01	0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.03	-0.01	-0.02
110	0	0.02	0	-0.01	0	0	0	0	-0.01	0	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01
111	-0.01	-0.02	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	0.02	-0.01	0	-0.01	0.01
112	-0.03	-0.14	-0.03	-0.05	-0.06	-0.07	-0.04	-0.05	-0.07	-0.04	-0.04	0.03	-0.04	-0.08	-0.05	-0.06
113	-0.03	-0.06	-0.03	0.06	-0.05	0.03	-0.03	-0.03	-0.04	0	-0.03	0.04	-0.03	0.09	-0.03	0.08
114	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.04	-0.02	-0.02	0.01	-0.04	0	-0.01	0.02	-0.02	-0.03	-0.03	-0.03
115	-0.08	-0.04	-0.1	-0.06	-0.27	-0.08	-0.1	-0.03	-0.27	-0.05	-0.05	-0.01	-0.08	-0.08	-0.17	-0.14
116	-0.54	-0.05	-1.11	-0.12	-2.55	-0.28	-1.34	-0.04	-3.08	-0.21	-0.91	-0.11	-1.1	-0.32	-1.59	-0.68
117	-0.65	-0.04	-1.17	-0.07	-1.58	-0.2	-1.36	-0.08	-2.07	-0.26	-1.42	-0.16	-1.64	-0.34	-1.69	0

118	-0.03	-0.03	-0.04	-0.01	-0.09	-0.01	-0.05	0.02	-0.12	0.03	-0.03	0.02	-0.04	-0.04	-0.1	-0.03
119	-0.05	0.06	-0.06	-0.02	-0.32	-0.12	-0.21	-0.12	-0.54	-0.04	-0.03	0.02	-0.07	0.02	-0.67	-0.35
120	-0.17	0.29	-0.12	0.03	-0.23	0.04	-0.19	0.04	-0.82	-0.01	-0.15	0	-0.19	0.08	-0.65	0.05
121	-0.06	0.17	-0.04	0.03	-0.08	0.07	-0.06	0.06	-0.13	-0.03	-0.04	0	-0.07	0.04	-0.11	0.1
122	-1.23	0.13	-0.83	0.05	-1.6	-0.03	-1.74	0.1	-1.58	-0.02	-1.12	-0.04	-1.21	0.08	-2.04	-0.1
123	-0.03	-0.04	-0.03	0.01	-0.04	0.02	-0.04	-0.02	-0.05	0.01	-0.03	0.01	-0.03	0.01	-0.04	0
124	-0.09	-0.09	-0.07	0	-0.07	-0.03	-0.11	-0.03	-0.11	0.01	-0.07	0.02	-0.08	-0.09	-0.11	-0.04
125	-1.45	0.07	-1.38	0.05	-1.46	0.15	-2.55	-0.03	-2.09	0.12	-1.85	-0.03	-1.54	0.04	-1.89	0.02
126	-0.08	-0.04	-0.06	-0.03	-0.05	-0.08	-0.09	0.02	-0.07	-0.04	-0.07	0.01	-0.08	-0.04	-0.08	-0.03
127	-0.07	0.1	-0.05	0.13	-0.04	0.14	-0.07	-0.01	-0.05	0.18	-0.06	0	-0.06	0.12	-0.05	0.12
128	-0.05	0.04	-0.04	0.09	-0.04	0.07	-0.05	-0.02	-0.05	0.11	-0.05	-0.01	-0.05	0.07	-0.04	0.07
129	-0.06	-0.03	-0.04	0.09	-0.04	0.05	-0.06	0.01	-0.05	0.09	-0.09	0.01	-0.05	0.1	-0.04	0.06
130	-0.03	-0.05	-0.02	-0.04	-0.02	-0.06	-0.02	0.01	-0.02	-0.06	-0.04	0.02	-0.02	-0.05	-0.02	-0.05
131	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01
132	-0.03	0.02	-0.02	0.05	-0.02	0.05	-0.02	0.01	-0.02	0.05	-0.03	0	-0.02	0.06	-0.02	0.04
133	-0.26	-0.03	-0.17	0.04	-0.16	0.02	-0.19	0.02	-0.18	0.03	-0.45	0.01	-0.18	0.05	-0.15	0.02
134	-0.03	0.03	-0.02	0.01	-0.02	0.02	-0.02	0	-0.02	0.02	-0.04	0	-0.02	0.01	-0.02	0.01
135	-0.04	-0.01	-0.03	-0.04	-0.03	-0.03	-0.03	-0.01	-0.03	-0.03	-0.08	-0.01	-0.03	-0.04	-0.03	-0.03
136	-0.01	0.02	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0
137	-0.01	-0.01	0	0.04	0	0.04	0	0	0	0.04	-0.01	-0.01	-0.01	0.05	0	0.03
138	-0.01	0.01	-0.01	-0.03	-0.01	-0.02	-0.01	0	-0.01	-0.03	-0.01	0	-0.01	-0.03	-0.01	-0.02
139	0	-0.02	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0
140	-0.01	0.04	-0.01	0.03	-0.01	0.04	-0.01	0	-0.01	0.04	-0.01	-0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.02
141	-0.01	0.04	-0.01	0.02	0	0.04	-0.01	0	-0.01	0.03	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.02
142	-0.01	0.03	0	0.03	0	0.05	-0.01	0	-0.01	0.04	-0.01	0	-0.01	0.04	-0.01	0.02
143	0	0.05	0	0.02	0	0.04	0	0	0	0.04	0	-0.01	0	0.02	0	0.02
144	0	0.05	0	0.02	0	0.03	0	0	0	0.03	0	-0.01	0	0.02	0	0.02
145	0	0.02	0	0.02	0	0.02	0	0	0	0.02	0	0	0	0.02	0	0.01
146	0	0.02	0	0.02	0	0.02	0	0	0	0.02	0	-0.01	0	0.02	0	0.01
147	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0.01
148	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0
149	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0
150	0	0	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0
151	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
152	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01
153	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0
154	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01
155	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.02	0	0.01
156	-0.01	0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01
157	0	0	0	0.02	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.02	0	0.01
158	-0.03	0.02	-0.02	-0.01	-0.02	0	-0.03	0	-0.03	-0.01	-0.02	-0.01	-0.03	0	-0.03	0
159	-0.01	-0.03	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01
160	-0.03	0.04	-0.02	0	-0.02	0.02	-0.03	0	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.03	0.02	-0.03	0.01
161	-0.01	-0.02	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	0	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01
162	-0.03	0.07	-0.04	0.02	-0.03	0.08	-0.03	0	-0.02	0.07	-0.03	0	-0.03	0.03	-0.03	-0.02

208	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
209	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
210	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	0	0	
211	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
212	0	-0.04	0	-0.01	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.01	0	0.01	0	-0.02	0	-0.02	0	
213	0	-0.05	0	-0.02	0	-0.03	0	-0.01	0	-0.02	0	0.01	0	-0.03	0	-0.02	0	
214	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	
215	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	
216	0	0.01	0	0.02	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0.02	0	0.01	0	
217	-0.01	-0.04	-0.01	-0.02	0	-0.02	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	0	
218	-0.04	0.05	-0.02	0.05	-0.01	0.05	-0.02	0.03	-0.02	0.04	-0.02	0.01	-0.02	0.06	-0.02	0.03	0	
219	-0.04	-0.03	-0.03	0.01	-0.02	0.01	-0.03	0.01	-0.02	0.01	-0.03	0.05	-0.03	0.02	-0.03	-0.02	0	
220	-1.15	0.07	-0.8	0.09	-0.66	0.09	-0.88	0.06	-0.78	0.11	-1.02	0.09	-0.78	0.12	-0.62	0.05	0	
221	-0.11	-0.04	-0.09	-0.06	-0.08	-0.03	-0.09	-0.01	-0.09	-0.07	-0.12	-0.02	-0.09	-0.07	-0.08	-0.04	0	
222	-1.33	⁻ 12.12	-1.61	-11.75	-1.55	-11.95	0.22	-9.65	-0.55	-12.07	-0.33	-11.9	-1.68	⁻ 11.61	-2.28	-5.99	0	
223	-0.36	-0.05	-0.33	-0.01	-0.3	-0.11	-0.37	-0.05	-0.36	-0.07	-0.44	-0.05	-0.38	-0.06	-0.28	-0.01	0	
224	-2.13	0.4	-2.32	1.12	-2.15	0.77	-3.05	0.98	-2.95	1.05	-2.62	-0.26	-2.4	0.91	-1.94	1.25	0	
225	-6.31	-1.86	-4.85	-2.26	-2.53	1.66	-6.83	-1.48	-3.4	1.12	-7.15	-0.55	-4.68	-3.45	-5.49	-4.51	0	
226	-0.76	-2.52	-1.86	-2.48	-2.06	-0.74	-0.57	-3.37	-1.77	0.17	-1.75	-1.74	-1.19	-3.67	-1.92	-2.39	0	
227	-1.16	-0.08	-1.86	-0.29	-0.91	-0.34	-0.77	-0.16	-0.64	-0.17	-2.64	-0.82	-0.74	-0.26	-0.8	-0.07	0	
228	-0.18	0	-0.19	0.08	-0.14	0.14	-0.13	0.06	-0.14	0.07	-0.24	0.09	-0.12	0.05	-0.16	0.02	0	
229	-1.55	-0.29	-0.86	-0.07	-0.68	-0.07	-1.58	-0.08	-0.87	-0.03	-2.54	-0.14	-0.78	-0.12	-1.39	-0.06	0	
230	-0.08	0.16	-0.06	0.04	-0.04	0.06	-0.07	0.06	-0.05	0.03	-0.1	0.01	-0.06	0.05	-0.07	0.04	0	
231	-0.04	-0.03	-0.04	-0.03	-0.03	0	-0.04	0	-0.03	0	-0.05	0.02	-0.04	-0.02	-0.05	-0.03	0	
232	-0.04	-0.03	-0.05	-0.03	-0.04	-0.01	-0.04	0	-0.03	-0.01	-0.04	0.02	-0.04	-0.02	-0.05	-0.02	0	
233	-0.01	-0.05	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	0	
234	-0.01	-0.07	-0.01	-0.03	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	-0.03	-0.01	-0.04	0	
235	-0.03	-0.08	-0.03	-0.02	-0.02	-0.04	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.03	0.01	-0.02	-0.03	-0.02	-0.03	0	
236	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0	
237	0	-0.05	0	-0.01	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.01	0	0.01	0	-0.01	0	-0.02	0	
238	-0.01	-0.05	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	0	
239	-0.01	-0.14	-0.02	-0.03	-0.01	-0.09	-0.01	-0.06	-0.01	-0.04	-0.01	0.01	-0.01	-0.07	-0.01	-0.05	0	
240	0	-0.03	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	
241	0	-0.02	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	
242	0	-0.02	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	
243	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	
244	0	-0.02	0	0	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	0.01	0	
245	0	0.03	-0.01	0	0	0.03	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	
246	-0.01	-0.04	-0.01	-0.01	-0.01	-0.04	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0
247	-0.04	-0.06	-0.06	0.02	-0.05	-0.07	-0.03	-0.03	-0.03	-0.02	-0.03	0.04	-0.03	-0.02	-0.04	0.03	0	
248	-0.16	0.08	-0.2	-0.03	-0.16	0.1	-0.1	0.05	-0.13	0.02	-0.06	-0.04	-0.14	0.01	-0.14	-0.02	0	
249	-2.32	0.26	-1.79	-0.05	-2.11	0.28	-1.43	-0.06	-0.2	0.03	-0.25	-0.18	-0.72	0.05	-1.5	-0.08	0	
250	-0.16	0.08	-0.3	0.05	-0.17	0.03	-0.15	0.02	-0.08	0.01	-0.09	0.01	-0.13	-0.02	-0.14	0.05	0	
251	-1.02	-0.16	-1.76	0.06	-0.85	-0.46	-0.83	0.13	-0.91	-0.03	-0.99	0.06	-0.91	0.07	-1.11	0.07	0	

252	-0.04	-0.01	-0.06	-0.01	-0.04	0.03	-0.03	0	-0.03	0.01	-0.04	-0.01	-0.03	0	-0.04	-0.02
253	-0.01	0.04	-0.02	0.01	-0.02	0.02	-0.01	0.03	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.03
254	0	0.01	-0.01	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	-0.01
255	0	0.01	0	0	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0
256	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	0
257	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
258	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	0
259	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.01
260	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.01
261	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
262	0	-0.02	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	-0.01	0
263	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	0
264	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	0.01	0	0.01
265	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01
266	0	0.01	0	0.01	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0	0	0.02	0	0.01
267	-0.01	-0.03	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	-0.01
268	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	0	0	0
269	0	-0.01	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.01	0	0
270	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.01
271	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
272	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
273	0	-0.02	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.01
274	0	0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0
275	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0
276	-0.01	0	-0.01	0	0	0	-0.01	-0.01	0	0	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	0
277	0	0.04	0	0	0	0.02	0	0.03	0	0.02	0	0.01	0	0	0	0
278	0	0.02	0	0	0	0.02	0	0.01	0	0.02	0	0.01	0	0	0	0
279	0	0	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.02	0	0.01	0	0	0	-0.01
280	-0.01	0.01	-0.01	0	0	0	0	0.02	0	0.01	0	0.02	0	-0.01	0	0
281	-0.01	0.05	-0.01	0.01	-0.01	0.04	-0.01	0.02	-0.01	0.02	-0.01	0	-0.01	0.02	-0.01	0.01
282	-0.01	-0.05	-0.01	-0.01	-0.01	-0.06	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03	-0.01	0.02	-0.01	-0.02	-0.01	0.01
283	-0.05	0.02	-0.1	0	-0.06	0.01	-0.03	-0.01	-0.03	-0.02	-0.05	-0.01	-0.05	0.02	-0.04	0.01
284	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02
285	-0.02	0	-0.04	0.02	-0.03	0	-0.01	0.01	-0.02	-0.02	-0.01	0.01	-0.02	0.02	-0.02	0.04
286	0	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0	-0.01	-0.01
287	-0.01	0.04	-0.01	0.02	-0.01	0.04	-0.01	0.04	-0.01	0.01	0	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.06
288	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	0.01	0	0.01
289	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0.01
290	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.02
291	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0.01
292	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0	0	-0.01	0	0	0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01
293	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0.01	-0.01	0.01
294	-0.07	-0.05	-0.22	0.01	-0.09	-0.07	-0.04	-0.01	-0.05	-0.03	-0.09	0.03	-0.06	-0.02	-0.06	0.02
295	-0.02	0.14	-0.04	0.02	-0.02	0.13	-0.02	0.08	-0.02	0.07	-0.03	0.02	-0.02	0.04	-0.02	0
296	-0.04	0.12	-0.05	0.02	-0.03	-0.04	-0.03	0.07	-0.03	0.01	-0.05	0.09	-0.03	0.02	-0.03	0.04

297	-0.06	-0.11	-0.08	-0.04	-0.05	-0.04	-0.05	-0.01	-0.05	-0.01	-0.08	-0.02	-0.05	-0.03	-0.06	-0.06
298	-2.32	0.56	-2.9	-0.44	-2.56	0.19	-1.43	0.03	-1.5	0.21	-2.91	-0.11	-1.74	0.2	-1.84	0.22
299	-0.25	0.05	-0.18	-0.02	-0.13	0.05	-0.16	0.02	-0.07	0.02	-0.14	-0.02	-0.09	0.02	-0.13	-0.01
300	-1.89	0.4	-3.4	-0.12	-2.5	-0.25	-3.01	-0.25	-2.46	-0.19	-2.09	-0.05	-2.69	-0.07	-2.93	-0.06
301	-0.17	0.02	-0.61	0.08	-0.24	0.01	-0.45	-0.04	-0.39	-0.03	-0.43	0.01	-0.78	0.04	-0.77	-0.14
302	-2.44	-0.29	-3.29	-0.3	-1.77	-0.11	-2.62	0.02	-2.14	-0.08	-2.46	0.07	-3.53	-0.39	-3.75	-0.37
303	-1.59	0.65	-1.18	-0.07	-0.38	0.03	-0.5	0	-0.55	0.05	-0.35	0	-1.35	-0.04	-1.06	0.04
304	-0.32	-0.1	-0.08	0.06	-0.03	0.05	-0.03	-0.01	-0.03	0.03	-0.04	0	-0.09	0.08	-0.05	0.06
305	-0.25	-0.05	-0.06	-0.01	-0.02	-0.02	-0.03	0.01	-0.03	-0.02	-0.04	-0.02	-0.06	-0.02	-0.03	-0.02
306	-1.37	-0.42	-0.3	-0.11	-0.11	-0.14	-0.12	0	-0.11	-0.11	-0.2	-0.09	-0.3	-0.18	-0.16	-0.15
307	-0.68	-0.26	-0.09	-0.1	-0.04	-0.06	-0.05	-0.03	-0.04	-0.05	-0.05	0.05	-0.09	-0.11	-0.06	-0.11
308	-0.15	-0.11	-0.05	-0.08	-0.03	-0.05	-0.04	-0.04	-0.03	-0.04	-0.04	0.02	-0.05	-0.08	-0.05	-0.07
309	-0.9	0.11	-0.29	0.1	-0.17	0.08	-0.26	0.07	-0.19	0.06	-0.29	0.02	-0.35	0.11	-0.27	0.08
310	-0.14	-0.07	-0.11	-0.04	-0.08	-0.04	-0.11	-0.06	-0.09	-0.05	-0.13	-0.1	-0.1	-0.05	-0.1	0
311	-2.47	0.1	-1.95	0.14	-1.72	0.16	-2.15	0.15	-1.91	0.14	-1.89	0.18	-1.8	0.17	-2.03	0.03
312	-0.11	-0.13	-0.09	-0.12	-0.07	-0.13	-0.09	-0.07	-0.07	-0.12	-0.1	-0.1	-0.08	-0.13	-0.08	-0.06
313	-0.12	-0.08	-0.11	-0.01	-0.08	0.04	-0.1	-0.14	-0.08	-0.03	-0.12	-0.2	-0.1	0.01	-0.1	0
314	-0.25	0.09	-0.24	-0.31	-0.19	0.05	-0.25	-0.29	-0.19	-0.23	-0.21	-0.05	-0.33	0.06	-0.26	-0.22
315	-0.05	-0.14	-0.06	-0.04	-0.04	-0.06	-0.04	-0.07	-0.04	-0.04	-0.06	-0.07	-0.05	-0.04	-0.04	-0.04
316	-0.02	-0.02	-0.02	0.03	-0.02	0.04	-0.02	-0.02	-0.02	0.03	-0.02	-0.01	-0.02	0.04	-0.02	0
317	-0.03	0.03	-0.04	0.04	-0.03	0.06	-0.04	-0.01	-0.03	0.03	-0.03	-0.01	-0.04	0.06	-0.03	0.02
318	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.03	0	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	0	-0.01	0
319	0	-0.02	0	0	0	0	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0
320	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	-0.01	0	0	-0.01	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01
321	0	0.03	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	0.01	0	0.01
322	-0.01	-0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.03	-0.01	0.02	-0.01	0.03	-0.01	0
323	0	0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0
324	-0.02	-0.02	-0.02	0.01	-0.02	0	-0.02	0.01	-0.02	0	-0.02	0.01	-0.02	0.01	-0.02	0
325	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
326	-0.01	-0.01	0	-0.04	0	-0.04	-0.01	0	0	-0.05	-0.01	0	-0.01	-0.05	0	-0.03
327	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0	0	0.01	0	0
328	0	0.02	0	0.02	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0	0	0.02	0	0.01
329	0	0.03	0	0.05	0	0.05	0	0.01	0	0.05	0	0.01	0	0.06	0	0.03
330	0	-0.01	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.01
331	-0.01	0.02	-0.01	0.02	0	0.03	-0.01	0	-0.01	0.02	-0.01	0	-0.01	0.03	-0.01	0.01
332	0	-0.01	0	-0.02	0	-0.03	0	0	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.03	0	-0.01
333	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	0
334	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.02	0	0	0	-0.01	0	0	0	-0.02	0	-0.01
335	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0	0
336	0	0.02	0	0.01	0	0.02	0	0	0	0.01	0	0	0	0.02	0	0.01
337	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01

Table S6. Per-residue decomposition values (kcal/mol) for simulated inhibitor in CatD (Part 2).

Residue	2e	3a	4a	5a	5b
---------	----	----	----	----	----

	Vvdw	Vele								
1	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	0.01
2	0	-0.02	0	-0.01	0	0	0	0	0	-0.01
3	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0.01
4	-0.01	-0.01	0	0	0	0.01	0	0.01	0	0.01
5	0	-0.02	0	-0.02	0	0.01	0	0.01	0	-0.01
6	-0.02	0.04	-0.01	0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.02	-0.01	0
7	-0.02	-0.06	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.02	-0.01	-0.02
8	-0.04	0	-0.02	0.02	-0.02	0.01	-0.01	0.01	-0.02	0.03
9	-0.21	-0.02	-0.12	0.09	-0.08	0.02	-0.06	0.02	-0.07	0.04
10	-0.25	0.19	-0.05	0.1	-0.05	0.01	-0.03	0.01	-0.05	0.07
11	-0.43	0.29	-0.07	0.12	-0.06	-0.01	-0.05	-0.02	-0.07	0.08
12	-2.41	-0.09	-0.56	0.22	-0.47	0.14	-0.38	0.13	-0.42	0.06
13	-2.26	0.56	-1.6	0	-0.79	0.06	-0.51	-0.01	-2.76	-1.07
14	-0.26	-0.07	-0.15	0.01	-0.09	0.02	-0.09	0.04	-0.1	-0.03
15	-0.1	0.02	-0.08	0.05	-0.04	-0.04	-0.04	-0.02	-0.04	0.03
16	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.02	-0.01	0.01
17	-0.01	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	-0.01
18	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0.01
19	0	-0.02	0	-0.01	0	0.01	0	0	0	-0.01
20	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0
21	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0
22	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
23	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24	0	0.01	0	0.01	0	-0.01	0	0	0	0.01
25	0	0	0	-0.01	0	0.01	0	0.01	0	0
26	0	0.02	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	0.01
27	-0.01	-0.01	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01
28	-0.02	0.07	-0.02	0	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.03
29	-0.07	0.01	-0.06	0.02	-0.04	-0.05	-0.04	-0.04	-0.04	0.01
30	-1.36	0.01	-0.99	-0.02	-0.41	0.01	-0.43	-0.03	-0.47	-0.03
31	-0.12	-0.04	-0.11	0.03	-0.08	-0.02	-0.08	0.01	-0.08	0.03
32	-2.43	-1.66	-1.92	-0.19	0.43	-4.29	-0.2	-3.35	-1.87	0.77
33	-0.27	0.16	-0.31	0.01	-0.28	0	-0.29	-0.05	-0.28	0.05
34	-1.89	0.75	-2.13	-0.87	-2.53	0.15	-1.82	-0.37	-1.98	0.55
35	-1.19	-0.58	-2.04	-0.09	-1.12	-0.12	-2.14	-0.29	-0.71	0.01
36	-0.08	0.03	-0.12	0.05	-0.07	-0.07	-0.13	-0.01	-0.05	0
37	-0.07	-0.2	-0.1	-0.12	-0.06	0.1	-0.09	0.03	-0.05	-0.02
38	-0.03	0	-0.03	-0.01	-0.02	0	-0.03	-0.01	-0.02	0
39	-0.19	-0.05	-0.29	-0.01	-0.2	0.03	-0.22	0.02	-0.25	-0.03
40	-0.01	-0.02	-0.02	0	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	-0.01
41	-0.01	-0.03	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	-0.02
42	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0
43	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0
44	0	0.01	0	0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0

45	0	-0.01	0	0.02	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.01
46	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0
47	0	0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	0
48	0	0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0
49	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0
50	-0.01	-0.02	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	0
51	-0.01	-0.04	-0.02	0.02	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	-0.01
52	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	0	0	0	0	0	-0.01
53	0	-0.02	-0.01	0.01	0	0	0	0	0	-0.01
54	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0
55	-0.03	0	-0.03	-0.02	-0.02	0	-0.02	0.01	-0.02	0.01
56	-0.01	0.03	-0.01	0	0	-0.01	0	-0.01	0	0.01
57	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
58	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
59	0	0	0	0	0	-0.01	0	0	0	0
60	0	0	0	0	0	-0.01	0	0	0	0
61	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0
62	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0
63	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
64	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
65	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
66	0	0.01	0	0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0
67	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0
68	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	-0.01
69	0	0.02	0	0.01	0	0	0	0	0	0.01
70	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0
71	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
72	0	-0.03	0	0	0	0	0	0	0	-0.02
73	-0.02	0.02	-0.02	0.01	-0.02	-0.02	-0.02	0	-0.02	0
74	-0.02	-0.02	-0.03	-0.01	-0.02	0.03	-0.03	0	-0.02	0.01
75	-0.17	0.09	-0.27	0.04	-0.18	-0.07	-0.29	-0.01	-0.16	0.01
76	-0.71	-0.39	-0.73	-0.15	-0.41	-0.14	-1.32	-0.25	-0.25	-0.22
77	-6.84	-2.09	-6.24	-1.84	-6.21	-2.16	-7.84	-2.52	-5.15	-2.21
78	-4.46	-1.53	-2.99	-2.36	-3.11	-2.83	-3.7	-2.9	-3.92	-2.37
79	-3.32	-0.33	-6.35	-0.92	-3.73	0.17	-4.71	-1.27	-4.33	-2.36
80	-0.48	0.01	-0.59	0.17	-0.68	0.19	-0.56	0.19	-0.76	0.67
81	-0.12	0.08	-0.14	-0.02	-0.16	-0.05	-0.14	0	-0.15	0
82	-0.1	0.04	-0.16	0.01	-0.13	0.03	-0.14	0.02	-0.12	0.05
83	-0.01	0.05	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	0.03
84	0	0.02	0	0	0	0	0	0	0	0.01
85	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
86	0	0.02	0	0.01	0	-0.01	0	0	0	0.01
87	0	0	0	-0.01	0	0.01	0	0	0	0
88	0	0.02	0	0.01	0	-0.01	0	0	0	0.01
89	0	-0.01	0	-0.01	0	0.01	0	0	0	0

90	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
91	0	0.01	0	0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0
92	0	-0.01	0	-0.01	0	0.01	0	0.01	0	-0.01
93	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0
94	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
95	0	0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	0
96	0	0.02	0	0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0.01
97	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
98	0	0.01	0	0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	0.01
99	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
100	0	0.01	0	0.01	0	-0.01	0	0	0	0
101	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0.01
102	0	-0.02	0	-0.01	0	0	0	0	0	-0.01
103	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0
104	0	0.03	0	0.03	0	-0.02	0	-0.01	0	0.02
105	0	-0.03	0	-0.01	0	0.01	0	0	0	-0.02
106	-0.01	0.03	-0.01	0.02	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	0.01
107	0	-0.01	-0.01	0	0	0	-0.01	0	0	-0.01
108	0	-0.01	-0.01	0	0	0	0	0	0	0
109	-0.01	-0.02	-0.01	0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02
110	0	0	0	0.01	0	-0.02	0	-0.01	0	-0.01
111	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.01
112	-0.04	0.01	-0.06	-0.05	-0.04	0	-0.04	0.01	-0.04	0.01
113	-0.03	0.09	-0.04	-0.03	-0.03	0.01	-0.03	0.02	-0.03	0.04
114	-0.02	-0.02	-0.03	-0.01	-0.02	0.04	-0.02	0.02	-0.02	0.02
115	-0.1	-0.03	-0.22	-0.04	-0.1	0.02	-0.09	0.01	-0.08	0.02
116	-1.44	-0.07	-2.12	-0.13	-1.22	-0.04	-1.1	-0.01	-1.15	-0.03
117	-1.81	-0.03	-1.73	-0.2	-1.23	-0.1	-1.01	-0.05	-1.57	-0.19
118	-0.06	-0.04	-0.09	0.02	-0.04	0.04	-0.04	0.02	-0.04	0.01
119	-0.12	-0.08	-0.21	0.07	-0.06	0.05	-0.08	0	-0.06	0
120	-0.36	0.01	-0.43	0.1	-0.19	-0.01	-0.09	-0.05	-0.17	-0.03
121	-0.1	0.07	-0.09	0.03	-0.05	-0.02	-0.04	-0.03	-0.04	-0.03
122	-1.52	0.14	-1.79	0.09	-0.85	-0.06	-1.03	0.04	-1.06	-0.01
123	-0.04	0.05	-0.05	-0.02	-0.03	0	-0.03	0	-0.03	0.03
124	-0.1	0.03	-0.11	-0.01	-0.06	0.01	-0.07	0.03	-0.06	0.03
125	-1.89	0.17	-2.34	0.05	-1.52	-0.07	-2.07	-0.03	-1.8	0.11
126	-0.08	-0.05	-0.09	-0.03	-0.06	0.01	-0.07	0.03	-0.06	-0.08
127	-0.06	0.22	-0.08	0.15	-0.05	-0.07	-0.07	-0.03	-0.04	0.16
128	-0.05	0.13	-0.06	0.11	-0.05	-0.05	-0.05	-0.02	-0.04	0.1
129	-0.06	0.11	-0.08	0.09	-0.06	-0.02	-0.08	0.03	-0.05	0.08
130	-0.02	-0.08	-0.04	-0.06	-0.02	0.04	-0.03	0.02	-0.02	-0.05
131	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	0.02	-0.01	0	-0.01	0.01
132	-0.02	0.06	-0.03	0.03	-0.02	0	-0.03	0.01	-0.01	0.05
133	-0.21	0.02	-0.54	-0.02	-0.2	0.04	-0.54	0.02	-0.14	0.04
134	-0.02	0.02	-0.04	0.01	-0.02	-0.01	-0.04	-0.01	-0.02	0.01

180	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	0
181	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	0.01
182	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0
183	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0
184	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0
185	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	0
186	0	0.02	0	0	0	0	0	0	0	0.01
187	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	-0.01
188	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	0.01
189	0	-0.02	0	-0.01	0	0	0	0	0	-0.01
190	0	-0.01	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01
191	0	0.04	-0.01	0.02	-0.01	0	-0.01	0.01	0	0.03
192	0	-0.01	-0.01	-0.01	0	0.01	0	0	0	0
193	-0.03	-0.09	-0.06	0	-0.03	0.01	-0.03	-0.02	-0.02	-0.03
194	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.01	-0.01	0.02
195	-0.03	-0.03	-0.07	-0.07	-0.03	0.02	-0.05	0.02	-0.03	-0.04
196	-2.06	0.15	-3.37	0.35	-1.78	-0.09	-1.53	0.13	-1.45	0.24
197	-0.06	0.04	-0.08	0.04	-0.06	-0.03	-0.06	-0.02	-0.06	0.03
198	-0.03	-0.09	-0.06	-0.03	-0.04	0.02	-0.04	-0.01	-0.04	-0.04
199	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01
200	0	0	-0.01	0	0	-0.01	0	0	0	-0.01
201	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	0
202	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
203	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	0
204	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0
205	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
206	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	0
207	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	0
208	0	0	0	-0.01	0	0	0	0	0	0
209	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
210	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	0
211	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
212	0	-0.02	0	-0.01	0	0.01	0	0.01	0	0
213	0	-0.03	0	-0.02	0	0.01	0	0	0	-0.01
214	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	0
215	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	0
216	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0.01
217	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0	-0.01	-0.01
218	-0.02	0.06	-0.03	0.04	-0.02	-0.01	-0.02	0	-0.02	0.03
219	-0.02	0	-0.04	0	-0.03	0.04	-0.02	0.03	-0.03	0.02
220	-0.78	0.15	-0.93	0.13	-0.98	-0.05	-0.59	0.03	-1	0.09
221	-0.09	-0.12	-0.11	-0.12	-0.1	0.04	-0.08	-0.01	-0.13	-0.09
222	-0.41	12.61	0.17	-8.2	-0.46	-8.42	-0.73	-6.79	-1.41	10.75
223	-0.47	-0.07	-0.47	-0.05	-0.34	0	-0.35	-0.04	-0.38	-0.07

269	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	0.01
270	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
271	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
272	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
273	0	-0.01	0	-0.01	0	0	0	0	0	0
274	0	-0.01	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01
275	0	-0.01	0	0	0	0	0	0	0	-0.01
276	-0.01	0	0	-0.01	0	0	0	0	-0.01	0
277	0	0.03	0	0.04	0	-0.01	0	0	0	0.01
278	0	0.03	0	0.02	0	-0.01	0	0	0	0.01
279	0	0.03	0	0.02	0	0	0	0	0	0.02
280	-0.01	0.02	0	0.03	0	0	0	0.01	0	0.01
281	-0.02	0.03	-0.01	0.03	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	0
282	-0.02	-0.05	-0.01	-0.02	-0.01	0.02	-0.01	0.02	-0.01	-0.01
283	-0.54	-0.04	-0.04	-0.02	-0.04	-0.01	-0.04	-0.02	-0.08	-0.03
284	-0.03	0.03	-0.01	0.02	-0.01	0	-0.01	0.01	-0.01	0.02
285	-0.11	-0.03	-0.02	-0.01	-0.02	0.01	-0.02	0.01	-0.04	-0.04
286	-0.01	0.02	0	0.01	0	-0.01	0	0	-0.01	0.01
287	-0.02	0.02	-0.01	0.02	-0.01	0.02	-0.01	0.01	-0.01	-0.03
288	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0
289	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.01
290	0	0.01	0	0	0	0	0	0	0	0.01
291	0	-0.01	0	-0.01	0	0.01	0	0	0	-0.01
292	-0.01	0.01	0	0	-0.01	0.01	0	0.01	-0.01	0.02
293	-0.01	-0.04	0	-0.02	0	0	0	0	-0.01	-0.02
294	-0.48	-0.03	-0.05	-0.02	-0.07	0.03	-0.07	0.03	-0.29	-0.02
295	-0.06	0.09	-0.02	0.1	-0.02	-0.03	-0.02	-0.01	-0.03	0.03
296	-0.07	0.01	-0.03	0.07	-0.03	-0.01	-0.03	0	-0.04	0
297	-0.08	-0.03	-0.06	0	-0.06	0.02	-0.05	0.01	-0.06	0.02
298	-1.62	-0.2	-1.6	0.04	-2.16	0.01	-1.9	-0.09	-1.57	-0.21
299	-0.1	0.03	-0.13	0.01	-0.1	-0.02	-0.07	-0.05	-0.06	-0.04
300	-2.34	-0.07	-1.81	0.01	-2.36	-0.52	-2.01	-0.54	-2.09	-0.36
301	-0.19	0.05	-0.17	-0.05	-0.65	-0.13	-0.2	0.02	-0.35	-0.16
302	-1.84	-0.14	-1.95	-0.17	-2.99	-0.16	-1.82	-0.09	-2.35	-0.15
303	-0.44	-0.03	-0.56	0.12	-0.36	0.04	-0.34	0.03	-0.55	0.07
304	-0.04	0.05	-0.07	-0.02	-0.03	0.01	-0.03	0.02	-0.03	0.03
305	-0.03	0	-0.07	0.01	-0.02	-0.02	-0.03	-0.01	-0.02	-0.02
306	-0.24	-0.12	-0.76	-0.14	-0.12	-0.03	-0.16	-0.05	-0.14	-0.03
307	-0.06	-0.08	-0.14	-0.06	-0.05	0	-0.05	-0.01	-0.05	-0.04
308	-0.03	-0.07	-0.06	-0.05	-0.04	0	-0.03	0	-0.04	-0.03
309	-0.23	0.1	-0.77	0.08	-0.29	0.01	-0.25	0.01	-0.26	0.06
310	-0.09	-0.09	-0.12	-0.07	-0.16	0.04	-0.08	-0.02	-0.13	-0.03
311	-1.73	0.19	-1.65	0.1	-2.05	0.09	-1.66	0.08	-2.17	0.12
312	-0.08	-0.16	-0.08	-0.1	-0.06	0.01	-0.07	-0.04	-0.11	-0.11
313	-0.11	-0.12	-0.1	-0.2	-0.07	0.07	-0.08	-0.04	-0.11	-0.05

314	-0.39	-0.59	-0.25	-0.72	-0.18	-0.06	-0.16	-0.14	-0.2	-0.49
315	-0.1	-0.1	-0.04	-0.1	-0.05	0.01	-0.04	0	-0.05	-0.02
316	-0.03	0.02	-0.02	-0.02	-0.02	0.03	-0.02	0.01	-0.02	0.03
317	-0.04	0.04	-0.03	-0.01	-0.03	0.01	-0.03	0	-0.03	0.03
318	-0.01	-0.03	-0.01	-0.05	0	0	0	-0.01	-0.01	-0.02
319	-0.01	-0.02	0	-0.03	0	0.01	0	0	0	-0.01
320	-0.01	-0.01	-0.01	0	0	0	0	0	-0.01	-0.01
321	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01
322	-0.01	0.04	-0.01	0.03	-0.01	0.01	-0.01	0.02	-0.01	0.04
323	0	0	0	0	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01
324	-0.02	0.01	-0.02	0	-0.02	0.01	-0.02	0.01	-0.02	0.01
325	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
326	-0.01	-0.06	-0.01	-0.04	0	0.02	-0.01	0	0	-0.04
327	0	0.01	0	0.01	0	0	0	0	0	0.01
328	0	0.02	0	0.01	0	0	0	0	0	0.01
329	0	0.07	0	0.04	0	-0.01	0	0	0	0.05
330	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
331	-0.01	0.03	-0.01	0.01	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0.02
332	0	-0.03	0	-0.01	0	0	0	0	0	-0.02
333	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0	-0.01	0
334	0	-0.02	0	0	0	0	0	0	0	-0.01
335	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
336	0	0.02	0	0	0	0	0	-0.01	0	0.01
337	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0