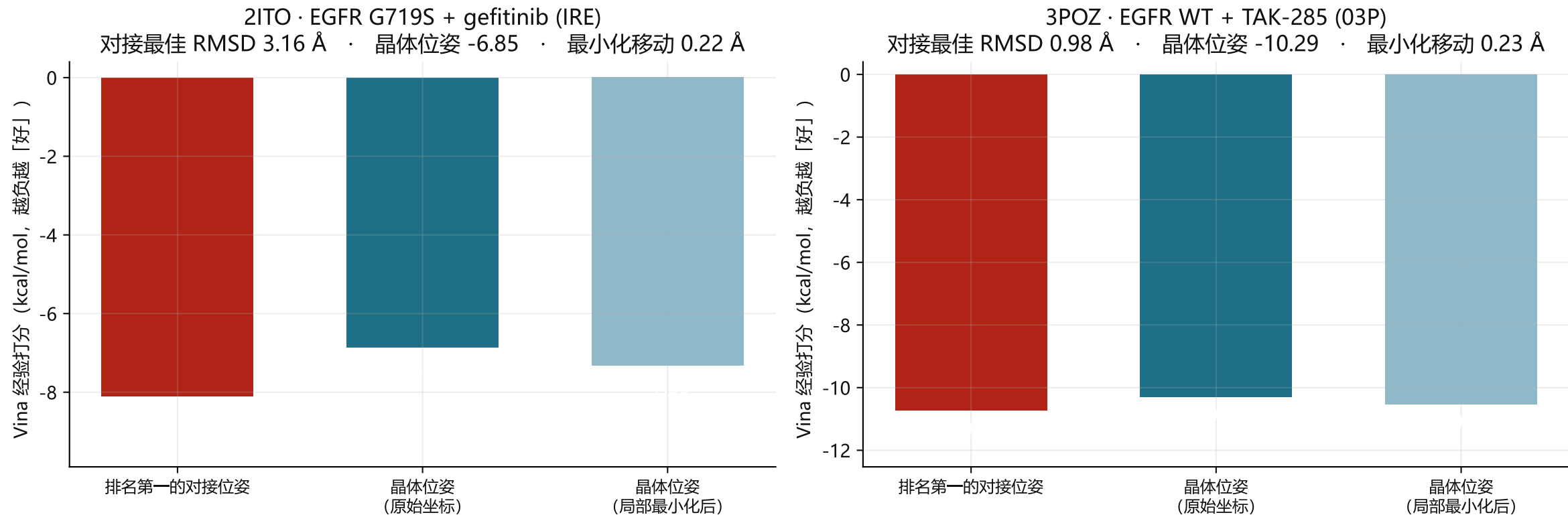


图组 2 | 经验打分是否偏爱实验观测到的几何？



经验打分不是亲和力实测值。本次局部优化把晶体位姿移动约 0.22 / 0.23 Å（独立计算，坐标已保存）；
单次局部优化不足以证明它是打分函数的局部极小点。打分与几何不一致只说明存在分歧，不足以单独判定原因。