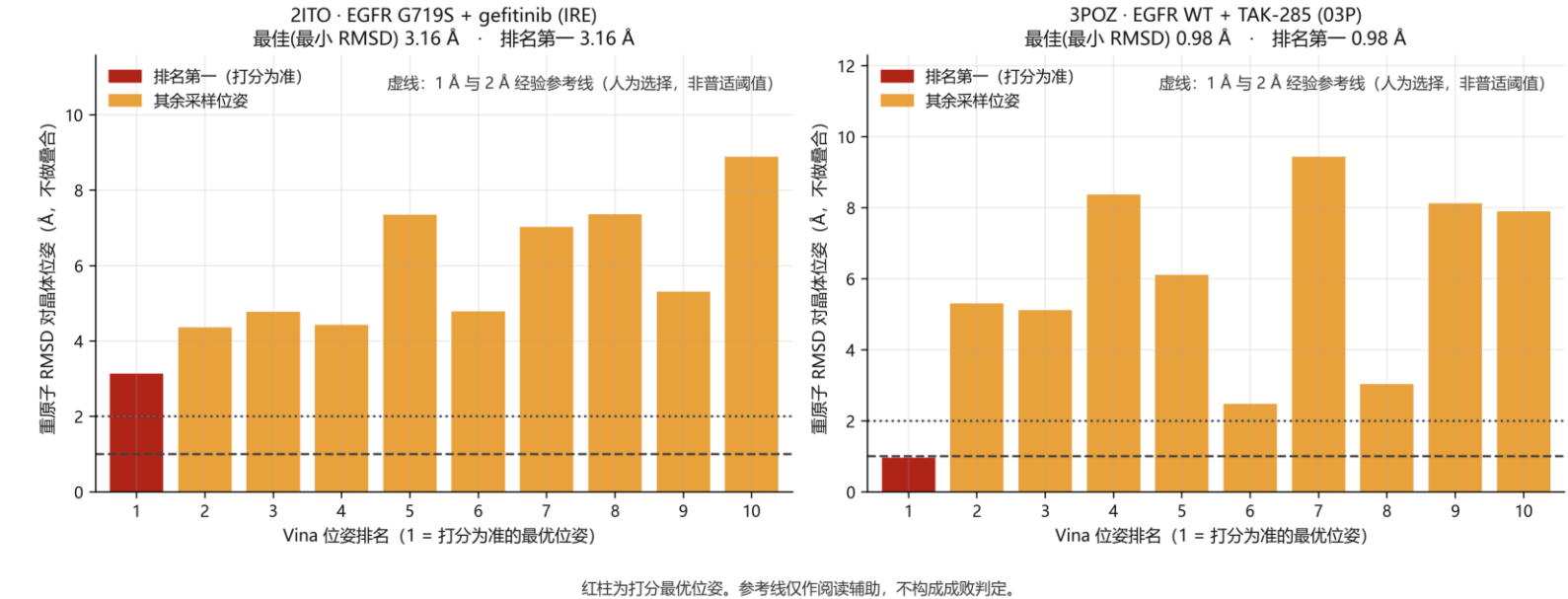


定量证据：位姿找回、经验打分与相互作用指纹

两个案例，同一受体定义与同一套固定对接参数（Vina seed 42 / exhaustiveness 8 / 每次 10 个位姿）

A 对接位姿与晶体位姿的偏差

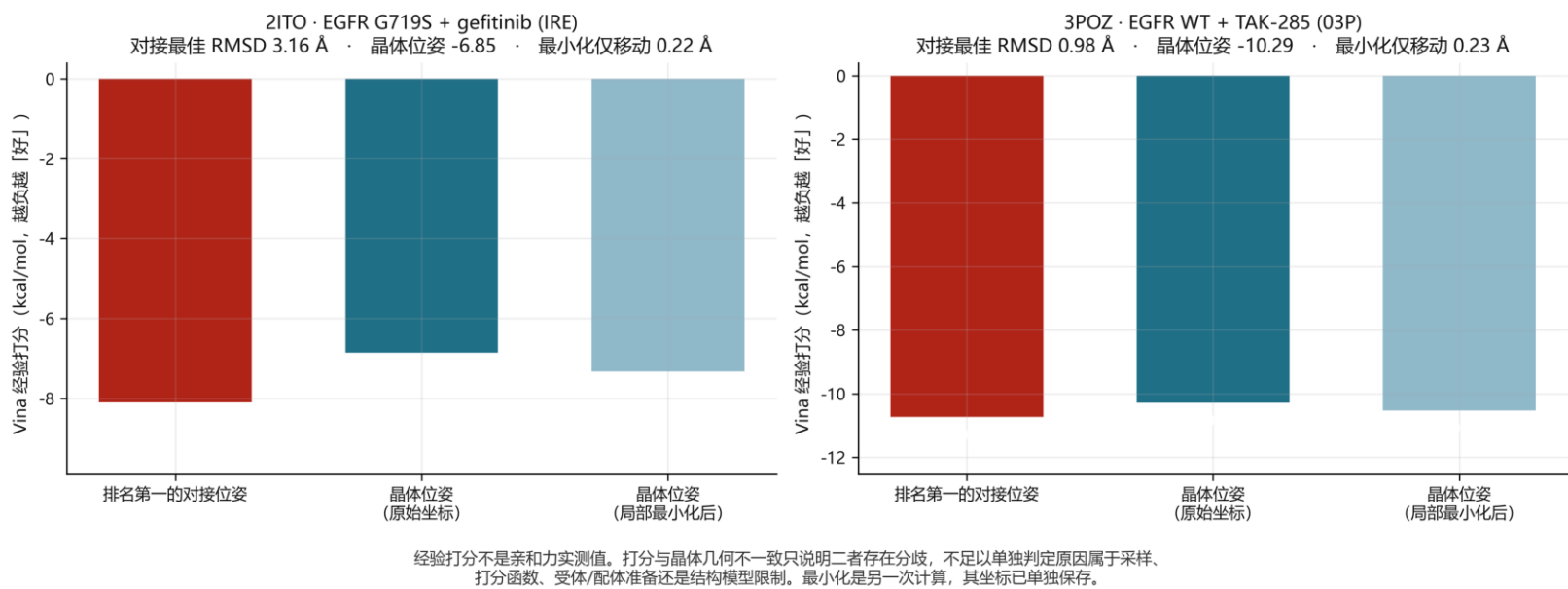
图组 1 | 重对接能否找回晶体位姿？（同一受体坐标系，只更换配体输入）



每柱为一个采样位姿对晶体位姿的重原子 RMSD（图匹配、不做叠合）。红柱为打分为准的第一名。虚线 1 / 2 Å 是文献常用经验线，属人为选择，不是普适成败阈值。

B 经验打分与实验几何是否一致

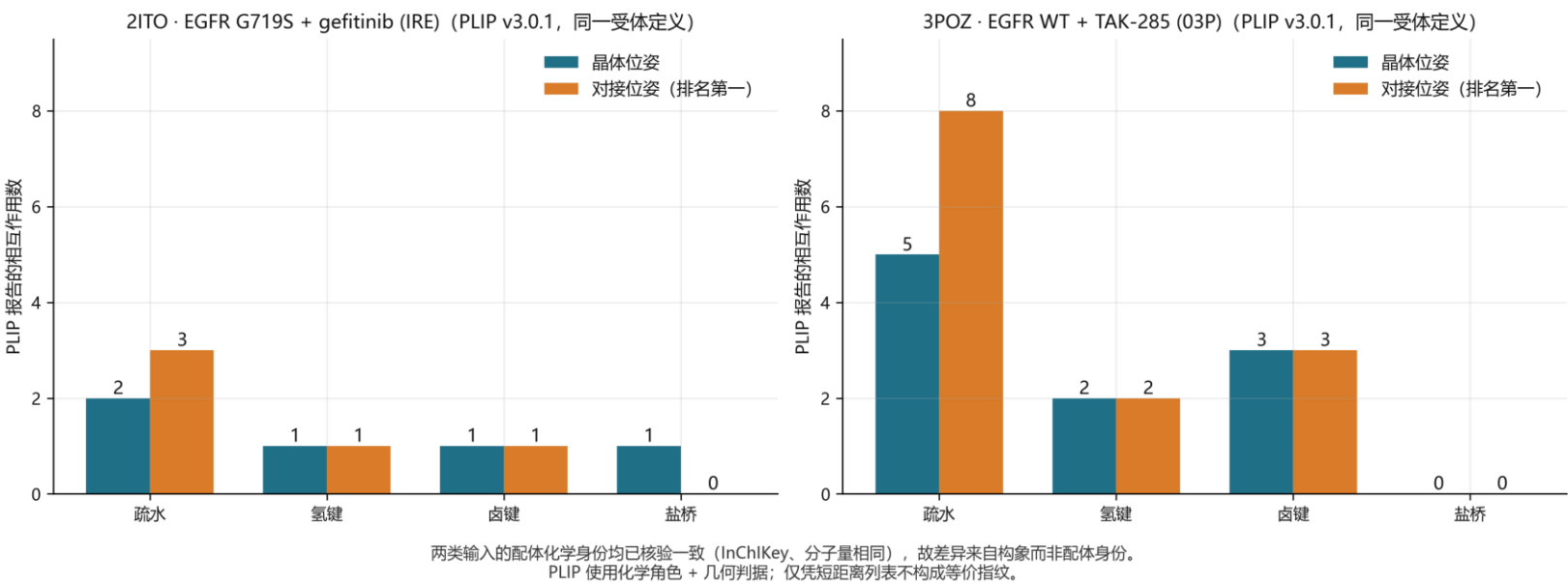
图组 2 | 经验打分是否偏爱实验观测到的几何？



用同一套受体与格点给晶体位姿打分。晶体位姿在自身附近是局部极小（最小化仅移动约 0.22 Å），但 2ITO 的打分仍偏好非天然位姿。打分与几何不一致只能说明存在分歧，不足以单独判定原因。

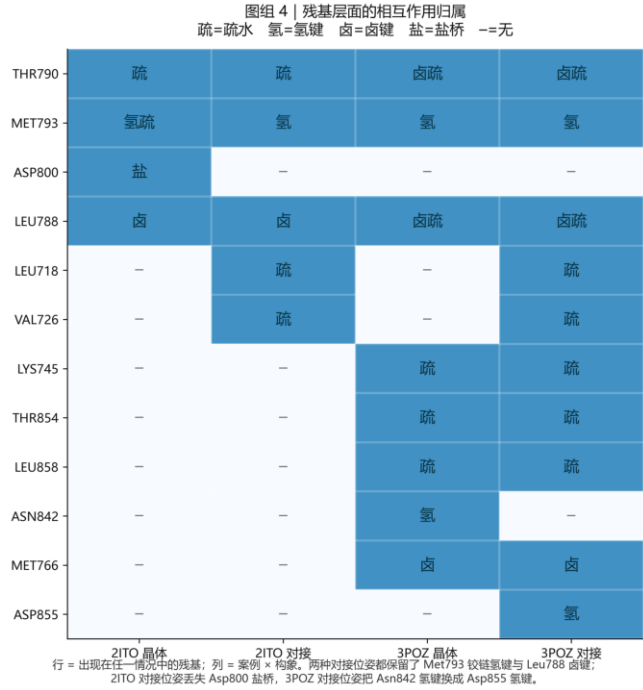
C PLIP 相互作用指纹

图组 3 | PLIP 相互作用指纹：晶体位姿 vs 对接位姿



晶体与对接两类输入的配体化学身份核验一致（InChIKey、分子量相同），排除了配体身份差异这一项；但指纹差异还受位姿几何与准备条件（质子化、水与离子、受体坐标）影响，不能只归因于构象。本次为 PLIP 3.0.1 重算，计数与上游教程保存输出不同。

D 残基层面的相互作用归属



行 = 出现在任一情况中的残基，列 = 案例 × 构象。两种对接位姿都保留 Met793 铰链氢键与 Leu788 卤键；2ITO 对接位姿丢失 Asp800 盐桥；3POZ 对接位姿虽保留同类相互作用，但氢键伙伴由 Asn842 变为 Asp855，指纹并未完全恢复。