

Results of prediction				Descriptive Statistics						Specific research questions			
Acceptor	Donor	Competitor/Modulator	n (exp.)	log10 (KD1)		log10(KD2)/log10(KD1)		DFRETmax		Boots-trapping	Kolmogorov-Smirnov	Paired t-Test	
Fig.2				Mean	STABW	Mean	STABW	Mean	STABW			p-value	p-value
F (bimolecular)												log10(KD)	DFRETmax
PEX5(TPR)	PTS1 (SCP2)		9	4,4747	0,3738			0,1778	0,0169			PTS1 - SCP2	0,001537
PEX5(TPR)	SCP2		9	3,7641	0,6942			0,1620	0,0144			SCP2 - SCPx	0,002219
PEX5(TPR)	SCPx		4	4,9275	1,4824			0,1103	0,0434				0,050357
J (bimolecular)													
PEX5(TPR)	SCP2		4	3,2430	0,2909			0,1677	0,0150				log10(KD)
PEX5(TPR)	SCP2 (AKV)		4	4,4205	0,7370			0,1663	0,0293			SCP2 - AKV	0,034106
PEX5(TPR)	SCP2 (G139P)		4	3,6413	0,4920			0,1515	0,0085			SCP2 - G139L	0,083741
N (bimolecular)												log10(KD)	DFRETmax
PEX5(TPR)	PTS1 (AGXT)		5	5,5759	1,0299			0,2012	0,1094			PTS1(AGXT) - AGXT	0,072347
PEX5(TPR)	AGXT		5	4,8759	0,3204			0,1478	0,0354				0,232384
Fig.3													
H (bimolecular)											Kol.Smir.		
PEX5(TPR)	PTS1(ACOX3)		14	3,8337	0,5669			0,1802	0,0196		not sign.		
PEX5(TPR)	PTS1(ACOX3)	PTS1(ACOX3)	11			1,1061	0,0814	0,1814	0,0168		not sign.		
Fig.4													
F (competition)										Boots-trapping			
PEX5(TPR)	PTS1(ACOX3)	PTS1 (ACOX3)	3			1,1067	0,0486	0,1909	0,0159	p = 0.000076			
PEX5(TPR)	PTS1(ACOX3)	PTS1 (ACOX3 K-1E)	3			1,2667	0,0897	0,2014	0,0406				
PEX5(TPR)	PTS1(ACOX3)	PTS1 (ACOX3 LK/SE)	3			1,3767	0,1115	0,2033	0,0408				
PEX5(TPR)	PTS1(ACOX3)	PTS1 (Hs55)	3			1,1934	0,0470	0,1986	0,0356				
PEX5(TPR)	PTS1(ACOX3)	PTS1 (Hs57)	3			1,2960	0,1174	0,2071	0,0509				
K (competition)												log10(KD2)/log10(KD1)	
PEX5(TPR)	PTS1(SCP2)	PTS1(SCP2)	5			1,0408	0,0086	0,2005	0,0276			PTS1(SCP2) - SCP2	0,000261
PEX5(TPR)	PTS1(SCP2)	SCP2	5			0,8545	0,0326	0,1961	0,0308			SCP2 - SCPx	0,007986
PEX5(TPR)	PTS1(SCP2)	SCPx	5			1,0436	0,0597	0,1866	0,0119			PTS1(SCP2) - SCPx	0,92533
O (competition)												log10(KD2)/log10(KD1)	
PEX5(TPR)	PTS1(SCP2)	SCP2	4			0,8528	0,0373	0,1990	0,0347			SCP2 - SCP2(AKV)	0,001389
PEX5(TPR)	PTS1(SCP2)	SCP2 (AKV)	4			1,1752	0,0358	0,2063	0,0296			SCP2 - SCP2(G139L)	0,055223
PEX5(TPR)	PTS1(SCP2)	SCP2 (G139L)	4			0,9156	0,0505	0,2051	0,0362				
PEX5(TPR)	PTS1(SCP2)	SCPx	4			1,0545	0,0629	0,1855	0,0134			SCPx - SCPx(AKV)	3,68E-05
PEX5(TPR)	PTS1(SCP2)	SCPx (AKV)	4			1,1688	0,0637	0,1922	0,0207			SCPx - SCPx(G139L)	0,996597

PEX5(TPR)	PTS1(SCP2)	SCPx (G139L)	4	1,0544	0,0816	0,1945	0,0244
-----------	------------	--------------	---	--------	--------	--------	--------

Fig.5

D (competition)

PEX5(TPR)	PTS1(ACOX3)	AGXT	4	1,6529	0,1498	0,1722	0,0092
PEX5(TPR)	PTS1(ACOX3)	ACOX3	4	1,2812	0,1150	0,1754	0,0047
PEX5(TPR)	PTS1(ACOX3)	DAO	4	1,4943	0,1400	0,1753	0,0054
PEX5(TPR)	PTS1(ACOX3)	GSTK1	4	1,6719	0,1007	0,1748	0,0047
PEX5(TPR)	PTS1(ACOX3)	PerCR-SRL	4	1,3893	0,1046	0,1740	0,0027

Boots-trapping

p = 3.72e-4

G (bimolecular)

PEX5(TPR)	PTS1 (SCP2)	3	4,3916	0,1898	0,1800	0,0020
PEX5(TPR)	PTS1 (AGXT)	3	5,8787	0,7610	0,1700	0,0849
PEX5(TPR)	PTS1 (ACOX3)	3	3,3979	0,6892	0,1773	0,0050
PEX5(TPR)	PTS1 (DAO)	3	5,0725	0,0628	0,1556	0,0065
PEX5(TPR)	PTS1 (GSTK1)	3	4,7235	0,0996	0,1676	0,0051
PEX5(TPR)	PTS1 (PerCR-SRL)	3	5,0157	0,0669	0,1800	0,0087

Boots-trapping

p = 2e-6

Fig.6

C (bimolecular)

PEX5 (TPR)	PTS1 (ACOX3)	4	3,8364	0,1725	0,1685	0,0030
PEX5 (N-TPR)	PTS1 (ACOX3)	4	3,9563	0,1918	0,1607	0,0078
PEX5 (TPR)	PTS1 (SCP2)	3	4,3084	0,2317	0,1698	0,0144
PEX5 (N-TPR)	PTS1 (SCP2)	3	4,4992	0,2354	0,1507	0,0162

log10(KD) DFRETmax

TPR - (N-TPR) 0,338971 0,149158

TPR - (N-TPR) 0,000435 0,006958

F (bimolecular)

PEX5 (N-TPR)	PTS1	3	4,7235	0,0996	0,1616	0,0014
PEX5 (N-TPR)	SCP2	3	3,2377	0,1916	0,1320	0,0053
PEX5 (N-TPR)	SCP2 (E35K/K38E)	3	4,3336	0,0269	0,1440	0,0035

log10(KD) DFRETmax

PTS1(SCP2) - SCP2 0,00226 0,005772
SCP2 - SCP2(E35K/K38E) 0,012517

J (competition)

PEX5 (N-TPR)	PTS1(ACOX3)	AGXT	3	1,6468	0,1258	0,1658	0,0008
PEX5 (N-TPR)	PTS1(ACOX3)	ACOX3	3	1,1857	0,1180	0,1649	0,3994
PEX5 (N-TPR)	PTS1(ACOX3)	DAO	3	1,5577	0,1886	0,1677	0,3002
PEX5 (N-TPR)	PTS1(ACOX3)	GSTK1	3	1,6652	0,1714	0,1655	0,1476
PEX5 (N-TPR)	PTS1(ACOX3)	PerCR-SRL	3	1,3205	0,0676	0,1612	0,1152

Boots-trapping

p = 8.04e-4

Fig.7

B (bimolecular)

PEX5 (N-TPR)	Pex14(N)	3	4,6414	0,2805	0,2196	0,0156
--------------	----------	---	--------	--------	--------	--------

C&D (bimolecular)

PEX5 (N-TPR)	Pex14(N)	Cerulean	3	4,5985	0,0173	0,2329	0,0094
PEX5 (N-TPR)	Pex14(N)	PTS1 (ACOX3)	3	4,5017	0,1598	0,2258	0,0049

log10(KD)

Cerulean - PTS1(ACOX3) 0,360461

N (bimolecular)

PEX5(TPR)	PTS1(ACOX3)	Cerulean	3	3,5585	0,5829	0,1762	0,0050
PEX5(TPR)	PTS1(ACOX3)	PEX14(N)	3	3,5297	0,6960	0,1764	0,0034
PEX5(TPR)	PTS1(ACOX3)	PTS1 (ACOX3)	3	4,7639	0,1774	0,1376	0,0107
PEX5 (N-TPR)	PTS1(ACOX3)	Cerulean	3	3,6301	0,5241	0,1700	0,0040
PEX5 (N-TPR)	PTS1(ACOX3)	PEX14(N)	3	2,7730	0,5165	0,1031	0,0090
PEX5 (N-TPR)	PTS1(ACOX3)	PTS1 (ACOX3)	3	4,5525	0,2120	0,1196	0,0032

		log10(KD)	DFRETmax
TPR	Ceru.-PEX14(N)	0,866323	0,90241
	Ceru.-PTS1(ACOX3)	0,039575	0,013495
N-TPR	Ceru.-PEX14(N)	0,0121	0,004419
	Ceru.-PTS1(ACOX3)	0,077505	0,005791
PEX14	TPR - (N-TPR)	0,105827	0,002005
PTS1(ACOX3)	TPR - (N-TPR)	0,124782	0,054231