

Paired t-test (% of NOE distance restraints satisfied)

ensemble GaMD	1	0.49	1	1	1	0.41	1	0
ensemble cMD	0.005	1	0	0.006	0.012	1	1	0.12
RDKit best	0.013	0	1	1	1	0	0.002	0
RDKit LICUV 10	0.13	0	0.14	1	1	0.001	0.005	0
RDKit NAMFIS 10	0.049	0	0.38	0.6	1	0	0.002	0
RDKit low_energy 10	0.004	0.98	0	0	0	1	1	0.1
RDKit random 10	0.097	0.15	0	0	0	0.012	1	0.001
RDKit random 1	0	0.001	0	0	0	0.001	0	1

Wilcoxon signed rank test (% of NOE distance restraints satisfied)

ensemble GaMD	1	1	1	1	1	0.54	1	0
ensemble cMD	0.014	1	0.004	0.026	0.024	1	1	0.16
RDKit best	0.013	0	1	1	1	0.001	0.004	0
RDKit LICUV 10	0.049	0	0.61	1	1	0.003	0.014	0
RDKit NAMFIS 10	0.031	0	0.43	0.42	1	0.002	0.004	0
RDKit low_energy 10	0.006	0.88	0	0	0	1	1	0.079
RDKit random 10	0.2	0.3	0	0	0	0.019	1	0.003
RDKit random 1	0	0.002	0	0	0	0.001	0	1

Paired t-test (RMSD)

ensemble GaMD	1	0.01	0.31	0.32	1	1	1	0
ensemble cMD	0	1	0	0	0.02	1	1	0.037
RDKit best	0.004	0	1	1	1	0.044	0.013	0
RDKit LICUV 10	0.004	0	0.56	1	1	0.043	0.002	0
RDKit NAMFIS 10	0.081	0	0.92	0.81	1	0.42	0.88	0
RDKit low_energy 10	0.073	0.09	0	0	0.005	1	1	0
RDKit random 10	0.13	0.052	0	0	0.012	0.22	1	0
RDKit random 1	0	0	0	0	0	0	0	1

Wilcoxon signed rank test (RMSD)

ensemble GaMD	1	0.049	0.61	0.9	0.027	1	1	0
ensemble cMD	0	1	0	0	0	1	1	0.029
RDKit best	0.008	0	1	1	1	0.014	0.042	0
RDKit LICUV 10	0.013	0	0.95	1	0.49	0.001	0.001	0
RDKit NAMFIS 10	0	0	0.22	0.006	1	0.006	0.006	0
RDKit low_energy 10	0.11	0.15	0	0	0	1	1	0
RDKit random 10	0.15	0.073	0	0	0	0.35	1	0
RDKit random 1	0	0	0	0	0	0	0	1

ensemble GaMD

ensemble cMD

RDKit best

RDKit LICUV 10

RDKit NAMFIS 10

RDKit low_energy 10

RDKit random 10

RDKit random 1

ensemble GaMD

ensemble cMD

RDKit best

RDKit LICUV 10

RDKit NAMFIS 10

RDKit low_energy 10

RDKit random 10

RDKit random 1