

**Table 2:** Values of  $R_{\text{free}}$  (as a percentage; upper value in each cell) and  $-LL_{\text{free}}$  (lower value) obtained for a matrix of value pairs of  $W_{\text{Biso}}$  and  $W_{\text{X-ray}}$  relative to the respective global minimum values of  $R_{\text{free}}$  and  $-LL_{\text{free}}$  (0.2071 and 7421.9) for the 2UV4 data. The global minimum in  $R_{\text{free}}$  is located at  $W_{\text{Biso}} = 0.29$ ,  $W_{\text{X-ray}} = 0.95$ , and the global minimum in  $-LL_{\text{free}}$  is located at  $W_{\text{Biso}} = 0.17$ ,  $W_{\text{X-ray}} = 1.40$ .

$W_{\text{X-ray}} =$	<b>0.4</b>	<b>0.6</b>	<b>0.8</b>	<b>1.0</b>	<b>1.2</b>	<b>1.4</b>	<b>1.6</b>	<b>1.8</b>	<b>2.0</b>	<b>2.2</b>	<b>2.4</b>	<b>2.6</b>	<b>2.8</b>	<b>3.0</b>
<b><math>W_{\text{Biso}} = 0.01</math></b>	0.25 10.2	0.11 4.7	0.08 3.0	0.08 2.8	0.06 2.3	0.06 2.7	0.09 3.3	0.09 3.8	0.11 4.0	0.10 4.5	0.11 4.7	0.13 5.2	0.14 5.9	0.15 6.3
<b>0.05</b>	0.20 7.5	0.09 3.8	0.06 2.2	0.06 1.8	0.05 1.4	0.06 1.4	0.07 2.0	0.08 2.6	0.10 3.1	0.10 3.4	0.11 3.9	0.13 4.3	0.13 4.6	0.15 5.6
<b>0.09</b>	0.16 7.3	0.08 3.1	0.05 1.5	0.04 0.8	0.03 0.6	0.03 0.7	0.04 1.4	0.06 2.4	0.07 2.7	0.08 3.3	0.09 3.4	0.11 4.0	0.12 4.3	0.13 4.9
<b>0.13</b>	0.15 7.4	0.07 3.0	0.02 0.9	0.03 0.5	0.03 0.3	0.02 0.3	0.03 1.1	0.04 2.2	0.05 2.3	0.06 2.8	0.07 3.5	0.08 3.8	0.09 4.3	0.11 5.3
<b>0.17</b>	0.15 7.7	0.06 3.8	0.01 1.2	0.03 0.6	0.02 0.2	0.02 0.0	0.01 0.5	0.03 1.6	0.04 1.9	0.03 2.2	0.04 3.0	0.06 3.7	0.06 3.8	0.08 4.4
<b>0.21</b>	0.15 8.4	0.06 3.9	0.01 1.9	0.01 0.6	0.03 0.4	0.02 0.2	0.02 0.7	0.03 1.2	0.03 1.6	0.03 2.0	0.03 2.3	0.03 2.8	0.04 3.4	0.06 4.2
<b>0.25</b>	0.14 8.9	0.06 4.3	0.00 1.5	0.00 0.5	0.02 0.6	0.03 0.3	0.01 0.1	0.02 0.8	0.03 1.6	0.02 2.2	0.02 1.9	0.02 2.6	0.04 3.2	0.07 3.3
<b>0.29</b>	0.13 9.4	0.06 4.7	0.00 2.2	0.00 1.1	0.01 0.7	0.01 0.4	0.02 0.5	0.02 0.8	0.02 1.1	0.02 1.7	0.02 2.1	0.03 2.5	0.05 3.2	0.06 2.4
<b>0.33</b>	0.13 10.1	0.06 5.2	0.01 2.2	0.00 1.2	0.01 1.2	0.02 0.9	0.02 0.4	0.02 0.7	0.03 1.5	0.02 1.8	0.03 2.3	0.03 2.5	0.05 1.7	0.06 2.5
<b>0.37</b>	0.14 10.7	0.07 5.9	0.02 2.8	0.01 1.7	0.02 1.5	0.02 1.0	0.02 0.9	0.03 1.3	0.04 1.4	0.03 2.0	0.02 2.3	0.03 5.3	0.03 5.5	0.05 6.1
<b>0.41</b>	0.13 11.4	0.09 6.2	0.04 3.3	0.02 2.3	0.02 1.5	0.02 1.5	0.02 1.0	0.03 1.3	0.05 1.9	0.06 5.3	0.04 4.8	0.04 5.6	0.04 5.7	0.05 6.4
<b>0.45</b>	0.14 12.2	0.10 7.0	0.03 3.4	0.03 2.4	0.03 1.9	0.04 1.8	0.03 1.5	0.05 1.9	0.08 4.9	0.06 5.2	0.05 5.4	0.05 5.6	0.04 6.0	0.05 6.7
<b>0.49</b>	0.16 12.8	0.09 7.2	0.04 4.1	0.04 3.0	0.04 2.3	0.04 2.3	0.04 2.2	0.08 4.7	0.09 5.4	0.07 5.6	0.07 5.8	0.06 6.1	0.05 6.4	0.06 6.7
<b>0.53</b>	0.15 13.2	0.10 7.8	0.06 4.8	0.05 3.4	0.05 2.9	0.06 2.8	0.08 5.2	0.09 5.0	0.10 5.6	0.07 6.0	0.07 6.1	0.06 6.6	0.06 6.5	0.06 7.1