

# RexDash: A Comprehensive Dashboard for Analyzing REMD Simulation Performance

Aspiring Scientists
Summer Internship
Program

## Soham Jain, Christopher Lockhart

School of Systems Biology, College of Science, George Mason University

#### Abstract

Replica exchange molecular dynamics (REMD) simulations have emerged as an effective tool to explore the conformational ensemble of **biomolecular systems**. By initiating several molecular dynamics simulations under different conditions and periodically swapping structures generated from adjacent conditions, REMD enhances sampling from simulations and facilitates the computation of thermodynamic properties. However, despite REMD's advantages, there is neither a standardized technique nor a widely adopted toolkit to ensure that REMD simulations are performing as expected. We address these limitations by developing **RexDash**, an extensive **dashboard** that features various metrics for assessing the technical performance of REMD simulations. Currently, the dashboard implements Python as the front-end framework to display plots for exchange rates, replica mixing parameters, replica trajectories, and potential energy distributions. RexDash utilizes the **Plotly** graphing library to render these metrics for REMD data supplied by the user in comma-separated value format. In addition, RexDash employs HTML and Flask, a backend web framework that enables visualization of REMD simulation results by deploying the webpage as an **online server**. To validate and test metrics generated by the dashboard, we conducted REMD simulations of alanine dipeptide, a standard model system for molecular simulations. RexDash will provide future researchers and simulation practitioners with a readily available resource to analyze the technical setup of their REMD simulations and, therefore, is an important first step in the **standardization** of REMD results.

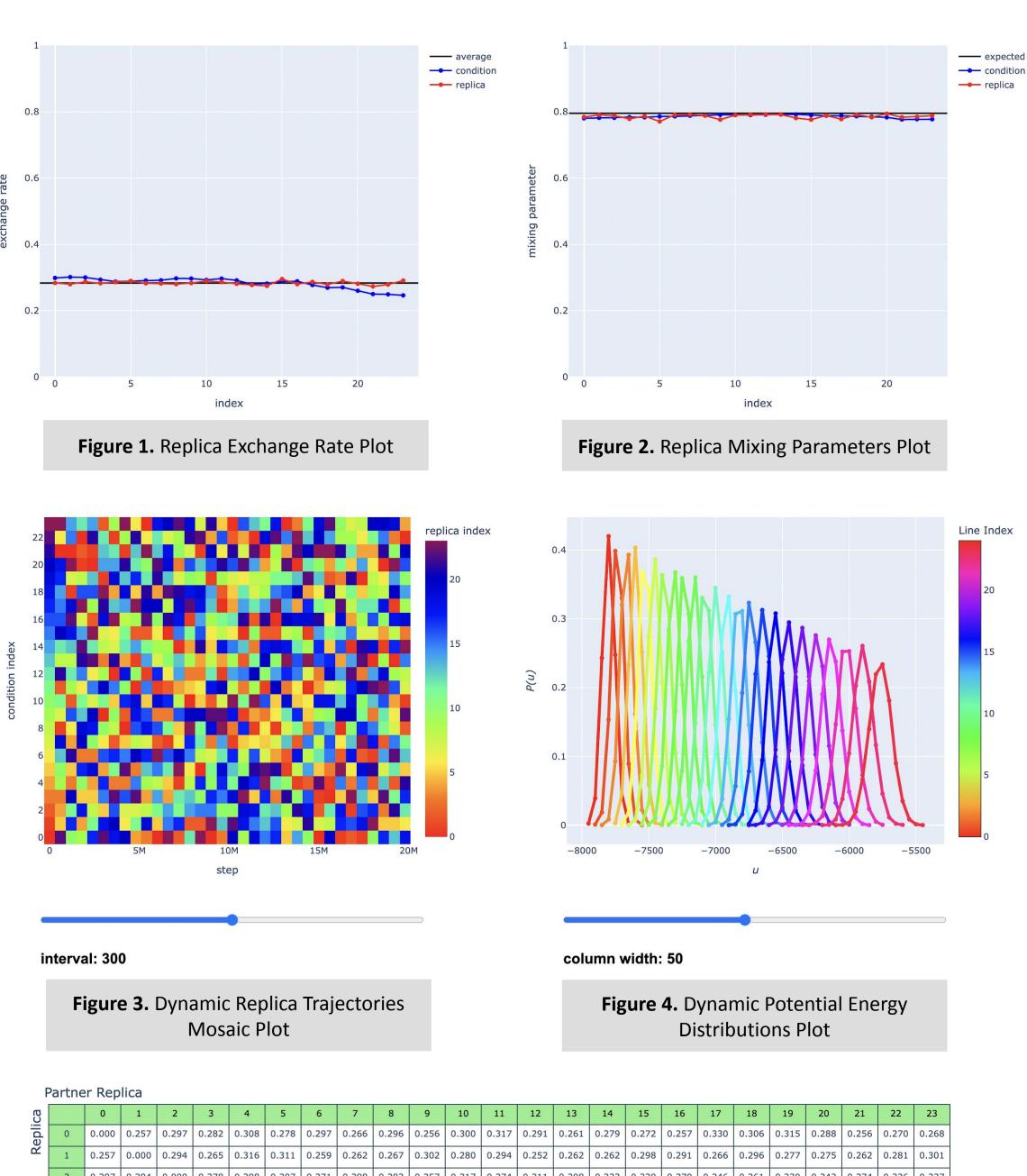
### **Materials and Methods**

- Microsoft **Visual Studio Code** is the source-code editor used for programming and debugging RexDash.
- RexDash employs **Plotly**, a **Python** graphing library to render replica exchange metrics on the dashboard. The figures provide comprehensive data to assess the simulation's technical performance.
- HTML and Flask were implemented as backend web frameworks to deploy the webpage as an online server.

  Currently, the server can be accessed via local host.
- The dashboard was tested and validated using comma-separated-value data of REMD simulations on alanine dipeptide, a conventional model system for molecular dynamics simulations.

## Results

RexDash features **five metrics** for assessing the technical performance of REMD simulations. The plots display data for **exchange rates**, **replica mixing parameters**, **replica trajectories**, and **potential energy distributions**.



| 0.000 0.278<br>0.278 0.000<br>0.298 0.297<br>0.307 0.301<br>0.271 0.295<br>0.298 0.302<br>0.282 0.279<br>0.257 0.243<br>0.317 0.273<br>0.274 0.307 | 0.308<br>0.316<br>0.298<br>0.297<br>0.000<br>0.304<br>0.226<br>0.274<br>0.285<br>0.295<br>0.284<br>0.271 | 0.278<br>0.311<br>0.307<br>0.301<br>0.304<br>0.000<br>0.305<br>0.322<br>0.320<br>0.273<br>0.295<br>0.292   | 0.297<br>0.259<br>0.271<br>0.295<br>0.226<br>0.305<br>0.000<br>0.291<br>0.257<br>0.313<br>0.294   | 0.266<br>0.262<br>0.298<br>0.302<br>0.274<br>0.322<br>0.291<br>0.000<br>0.290<br>0.271<br>0.269<br>0.321  | 0.296<br>0.267<br>0.282<br>0.279<br>0.285<br>0.320<br>0.257<br>0.290<br>0.000<br>0.294<br>0.319   | 0.302<br>0.257<br>0.243<br>0.295<br>0.273<br>0.313<br>0.271<br>0.294  | 0.300<br>0.280<br>0.317<br>0.273<br>0.284<br>0.295<br>0.294<br>0.269<br>0.319<br>0.282<br>0.000   | 0.317<br>0.294<br>0.274<br>0.307<br>0.271<br>0.292<br>0.309<br>0.321<br>0.259   | 0.291<br>0.252<br>0.311<br>0.305<br>0.292<br>0.315<br>0.282<br>0.285<br>0.248   | 0.261<br>0.262<br>0.308<br>0.249<br>0.279<br>0.296<br>0.289<br>0.266<br>0.302<br>0.287  | 0.279 0.262 0.232 0.244 0.261 0.252 0.296 0.288 0.259 0.300   | 0.272<br>0.298<br>0.320<br>0.280<br>0.256<br>0.280<br>0.263<br>0.309<br>0.309   | 0.257<br>0.291<br>0.270<br>0.282<br>0.272<br>0.288<br>0.281<br>0.288  | 0.330<br>0.266<br>0.246<br>0.281<br>0.293<br>0.268<br>0.311<br>0.281   | 0.306<br>0.296<br>0.261<br>0.273<br>0.237<br>0.275<br>0.266<br>0.287   | 0.315<br>0.277<br>0.330<br>0.312<br>0.316<br>0.310<br>0.327<br>0.291  | 0.288<br>0.275<br>0.243<br>0.311<br>0.319<br>0.285<br>0.282<br>0.241<br>0.271  | 0.256<br>0.262<br>0.274<br>0.248<br>0.262<br>0.267<br>0.257  | 0.270<br>0.281<br>0.326<br>0.247<br>0.292<br>0.288<br>0.281   | 0.268<br>0.301<br>0.337<br>0.314<br>0.320<br>0.243<br>0.256<br>0.273  |
|--|--|--|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|--|--|---|--|--|---|---|
| 0.000 0.278<br>0.278 0.000<br>0.298 0.297<br>0.307 0.301<br>0.271 0.295<br>0.298 0.302<br>0.282 0.279<br>0.257 0.243<br>0.317 0.273<br>0.274 0.307 | 0.298<br>0.297<br>0.000<br>0.304<br>0.226<br>0.274<br>0.285<br>0.295<br>0.295                            | 0.307<br>0.301<br>0.304<br>0.000<br>0.305<br>0.322<br>0.320<br>0.273<br>0.295  | 0.271<br>0.295<br>0.226<br>0.305<br>0.000<br>0.291<br>0.257<br>0.313  | 0.298<br>0.302<br>0.274<br>0.322<br>0.291<br>0.000<br>0.290<br>0.271<br>0.269   | 0.282<br>0.279<br>0.285<br>0.320<br>0.257<br>0.290<br>0.000   | 0.257<br>0.243<br>0.295<br>0.273<br>0.313<br>0.271<br>0.294   | 0.317<br>0.273<br>0.284<br>0.295<br>0.294<br>0.269<br>0.319   | 0.274<br>0.307<br>0.271<br>0.292<br>0.309<br>0.321<br>0.259   | 0.311<br>0.305<br>0.292<br>0.315<br>0.282<br>0.285  | 0.308<br>0.249<br>0.279<br>0.296<br>0.289<br>0.266  | 0.232<br>0.244<br>0.261<br>0.252<br>0.296<br>0.288  | 0.320<br>0.280<br>0.256<br>0.280<br>0.263<br>0.309  | 0.270<br>0.282<br>0.272<br>0.288<br>0.281<br>0.288  | 0.246<br>0.281<br>0.293<br>0.268<br>0.311<br>0.281   | 0.261<br>0.273<br>0.237<br>0.275<br>0.266<br>0.287   | 0.330<br>0.312<br>0.316<br>0.310<br>0.327<br>0.291  | 0.243<br>0.311<br>0.319<br>0.285<br>0.282<br>0.241   | 0.274<br>0.248<br>0.262<br>0.267<br>0.257  | 0.326<br>0.247<br>0.292<br>0.288<br>0.281   | 0.337<br>0.314<br>0.320<br>0.243<br>0.256   |
| 0.278 0.000<br>0.298 0.297<br>0.307 0.301<br>0.271 0.295<br>0.298 0.302<br>0.282 0.279<br>0.257 0.243<br>0.317 0.273<br>0.274 0.307<br>0.311 0.305 | 0.297<br>0.000<br>0.304<br>0.226<br>0.274<br>0.285<br>0.295<br>0.284                                     | 0.301<br>0.304<br>0.000<br>0.305<br>0.322<br>0.320<br>0.273<br>0.295   | 0.295<br>0.226<br>0.305<br>0.000<br>0.291<br>0.257<br>0.313   | 0.302<br>0.274<br>0.322<br>0.291<br>0.000<br>0.290<br>0.271   | 0.279<br>0.285<br>0.320<br>0.257<br>0.290<br>0.000  | 0.243<br>0.295<br>0.273<br>0.313<br>0.271<br>0.294  | 0.273<br>0.284<br>0.295<br>0.294<br>0.269<br>0.319  | 0.307<br>0.271<br>0.292<br>0.309<br>0.321<br>0.259  | 0.305<br>0.292<br>0.315<br>0.282<br>0.285<br>0.248  | 0.249<br>0.279<br>0.296<br>0.289<br>0.266<br>0.302  | 0.244<br>0.261<br>0.252<br>0.296<br>0.288<br>0.259  | 0.280<br>0.256<br>0.280<br>0.263<br>0.309<br>0.309  | 0.282<br>0.272<br>0.288<br>0.281<br>0.288   | 0.281<br>0.293<br>0.268<br>0.311<br>0.281  | 0.273<br>0.237<br>0.275<br>0.266<br>0.287  | 0.312<br>0.316<br>0.310<br>0.327<br>0.291   | 0.311<br>0.319<br>0.285<br>0.282<br>0.241  | 0.248<br>0.262<br>0.267<br>0.257   | 0.247<br>0.292<br>0.288<br>0.281  | 0.314<br>0.320<br>0.243<br>0.256<br>0.273   |
| 0.298 0.297<br>0.307 0.301<br>0.271 0.295<br>0.298 0.302<br>0.282 0.279<br>0.257 0.243<br>0.317 0.273<br>0.274 0.307<br>0.311 0.305                | 0.000<br>0.304<br>0.226<br>0.274<br>0.285<br>0.295<br>0.284  | 0.304<br>0.000<br>0.305<br>0.322<br>0.320<br>0.273<br>0.295  | 0.226<br>0.305<br>0.000<br>0.291<br>0.257<br>0.313  | 0.274<br>0.322<br>0.291<br>0.000<br>0.290<br>0.271  | 0.285<br>0.320<br>0.257<br>0.290<br>0.000<br>0.294  | 0.295<br>0.273<br>0.313<br>0.271<br>0.294<br>0.000  | 0.284<br>0.295<br>0.294<br>0.269<br>0.319<br>0.282  | 0.271<br>0.292<br>0.309<br>0.321<br>0.259   | 0.292<br>0.315<br>0.282<br>0.285<br>0.248   | 0.279<br>0.296<br>0.289<br>0.266<br>0.302   | 0.261<br>0.252<br>0.296<br>0.288<br>0.259   | 0.256<br>0.280<br>0.263<br>0.309<br>0.309   | 0.272<br>0.288<br>0.281<br>0.288  | 0.293<br>0.268<br>0.311<br>0.281   | 0.237<br>0.275<br>0.266<br>0.287   | 0.316<br>0.310<br>0.327<br>0.291  | 0.319<br>0.285<br>0.282<br>0.241   | 0.262<br>0.267<br>0.257<br>0.255   | 0.292<br>0.288<br>0.281   | 0.320<br>0.243<br>0.256<br>0.273  |
| 0.307 0.301<br>0.271 0.295<br>0.298 0.302<br>0.282 0.279<br>0.257 0.243<br>0.317 0.273<br>0.274 0.307<br>0.311 0.305                               | 0.304<br>0.226<br>0.274<br>0.285<br>0.295<br>0.284   | 0.000<br>0.305<br>0.322<br>0.320<br>0.273<br>0.295   | 0.305<br>0.000<br>0.291<br>0.257<br>0.313<br>0.294  | 0.322<br>0.291<br>0.000<br>0.290<br>0.271<br>0.269  | 0.320<br>0.257<br>0.290<br>0.000<br>0.294   | 0.273<br>0.313<br>0.271<br>0.294<br>0.000   | 0.295<br>0.294<br>0.269<br>0.319<br>0.282   | 0.292<br>0.309<br>0.321<br>0.259<br>0.260   | 0.315<br>0.282<br>0.285<br>0.248  | 0.296<br>0.289<br>0.266<br>0.302  | 0.252<br>0.296<br>0.288<br>0.259  | 0.280<br>0.263<br>0.309<br>0.309  | 0.288<br>0.281<br>0.288   | 0.268<br>0.311<br>0.281  | 0.275<br>0.266<br>0.287  | 0.310<br>0.327<br>0.291   | 0.285<br>0.282<br>0.241  | 0.267<br>0.257<br>0.255  | 0.288   | 0.243<br>0.256<br>0.273   |
| 0.271 0.295<br>0.298 0.302<br>0.282 0.279<br>0.257 0.243<br>0.317 0.273<br>0.274 0.307<br>0.311 0.305  | 0.226<br>0.274<br>0.285<br>0.295<br>0.284<br>0.271   | 0.305<br>0.322<br>0.320<br>0.273<br>0.295<br>0.292   | 0.000<br>0.291<br>0.257<br>0.313<br>0.294   | 0.291<br>0.000<br>0.290<br>0.271<br>0.269   | 0.257<br>0.290<br>0.000<br>0.294  | 0.313<br>0.271<br>0.294<br>0.000  | 0.294<br>0.269<br>0.319<br>0.282  | 0.309<br>0.321<br>0.259<br>0.260  | 0.282<br>0.285<br>0.248   | 0.289<br>0.266<br>0.302   | 0.296<br>0.288<br>0.259   | 0.263<br>0.309<br>0.309   | 0.281   | 0.311  | 0.266  | 0.327   | 0.282  | 0.257  | 0.281   | 0.256   |
| 0.298 0.302<br>0.282 0.279<br>0.257 0.243<br>0.317 0.273<br>0.274 0.307<br>0.311 0.305   | 0.274<br>0.285<br>0.295<br>0.284<br>0.271  | 0.322<br>0.320<br>0.273<br>0.295<br>0.292  | 0.291<br>0.257<br>0.313<br>0.294  | 0.000<br>0.290<br>0.271<br>0.269  | 0.290<br>0.000<br>0.294   | 0.271<br>0.294<br>0.000   | 0.269<br>0.319<br>0.282   | 0.321<br>0.259<br>0.260   | 0.285   | 0.266   | 0.288   | 0.309   | 0.288   | 0.281  | 0.287  | 0.291   | 0.241  | 0.255  |   | 0.273   |
| 0.282 0.279<br>0.257 0.243<br>0.317 0.273<br>0.274 0.307<br>0.311 0.305  | 0.285<br>0.295<br>0.284<br>0.271   | 0.320<br>0.273<br>0.295<br>0.292   | 0.257<br>0.313<br>0.294   | 0.290<br>0.271<br>0.269   | 0.000   | 0.294   | 0.319   | 0.259   | 0.248   | 0.302   | 0.259   | 0.309   |   |  |  |   |  |  | 0.274   | 2 8   |
| 0.257 0.243<br>0.317 0.273<br>0.274 0.307<br>0.311 0.305   | 0.295<br>0.284<br>0.271  | 0.273<br>0.295<br>0.292  | 0.313   | 0.271   | 0.294   | 0.000   | 0.282   | 0.260   |   |   | - 150   | 2 2 22  | 0.249   | 0.281  | 0.261  | 0.288   | 0.271  | transcription and a second   |   | 0.273   |
| 0.317 0.273<br>0.274 0.307<br>0.311 0.305  | 0.284  | 0.295  | 0.294   | 0.269   |   |   | 200   | 3 22  | 0.284   | 0.287   | 0.300   | 0.340   |   |  | -  | 3 - 57  | 0.271  | 0.320  | 0.254   | 0.270   |
| 0.274 0.307  | 0.271  | 0.292  |   | - 22  | 0.319   | 0.282   | 0.000   | 0 202   |   |   | 10.10   | 0.0.0   | 0.287   | 0.306  | 0.286  | 0.277   | 0.292  | 0.288  | 0.260   | 0.302   |
| 0.311 0.305  |  |  | 0.309   | 0.321   |   |   | 8 6 56  | 0.293   | 0.288   | 0.320   | 0.276   | 0.271   | 0.268   | 0.322  | 0.269  | 0.300   | 0.278  | 0.273  | 0.278   | 0.336   |
| 2 2 2 2 2 2 2  | 0.292  | 0.215  |   | 0.321   | 0.259   | 0.260   | 0.293   | 0.000   | 0.266   | 0.252   | 0.259   | 0.373   | 0.248   | 0.296  | 0.282  | 0.274   | 0.282  | 0.283  | 0.302   | 0.319   |
| .308 0.249   |  | 0.315  | 0.282   | 0.285   | 0.248   | 0.284   | 0.288   | 0.266   | 0.000   | 0.256   | 0.253   | 0.311   | 0.277   | 0.277  | 0.234  | 0.299   | 0.259  | 0.307  | 0.300   | 0.279   |
|  | 0.279  | 0.296  | 0.289   | 0.266   | 0.302   | 0.287   | 0.320   | 0.252   | 0.256   | 0.000   | 0.274   | 0.292   | 0.260   | 0.311  | 0.295  | 0.254   | 0.297  | 0.279  | 0.250   | 0.284   |
| 0.232 0.244  | 0.261  | 0.252  | 0.296   | 0.288   | 0.259   | 0.300   | 0.276   | 0.259   | 0.253   | 0.274   | 0.000   | 0.304   | 0.297   | 0.303  | 0.273  | 0.269   | 0.279  | 0.281  | 0.288   | 0.293   |
| 0.320 0.280  | 0.256  | 0.280  | 0.263   | 0.309   | 0.309   | 0.340   | 0.271   | 0.373   | 0.311   | 0.292   | 0.304   | 0.000   | 0.261   | 0.301  | 0.320  | 0.268   | 0.286  | 0.302  | 0.301   | 0.323   |
| 0.270 0.282  | 0.272  | 0.288  | 0.281   | 0.288   | 0.249   | 0.287   | 0.268   | 0.248   | 0.277   | 0.260   | 0.297   | 0.261   | 0.000   | 0.276  | 0.288  | 0.307   | 0.301  | 0.271  | 0.296   | 0.334   |
| 0.246 0.281  | 0.293  | 0.268  | 0.311   | 0.281   | 0.281   | 0.306   | 0.322   | 0.296   | 0.277   | 0.311   | 0.303   | 0.301   | 0.276   | 0.000  | 0.296  | 0.318   | 0.295  | 0.260  | 0.281   | 0.251   |
| 0.261 0.273  | 0.237  | 0.275  | 0.266   | 0.287   | 0.261   | 0.286   | 0.269   | 0.282   | 0.234   | 0.295   | 0.273   | 0.320   | 0.288   | 0.296  | 0.000  | 0.305   | 0.278  | 0.243  | 0.289   | 0.277   |
| 0.330 0.312  | 0.316  | 0.310  | 0.327   | 0.291   | 0.288   | 0.277   | 0.300   | 0.274   | 0.299   | 0.254   | 0.269   | 0.268   | 0.307   | 0.318  | 0.305  | 0.000   | 0.249  | 0.304  | 0.270   | 0.265   |
| 0.243 0.311  | 0.319  | 0.285  | 0.282   | 0.241   | 0.271   | 0.292   | 0.278   | 0.282   | 0.259   | 0.297   | 0.279   | 0.286   | 0.301   | 0.295  | 0.278  | 0.249   | 0.000  | 0.276  | 0.256   | 0.298   |
| 0.248  | 0.262  | 0.267  | 0.257   | 0.255   | 0.320   | 0.288   | 0.273   | 0.283   | 0.307   | 0.279   | 0.281   | 0.302   | 0.271   | 0.260  | 0.243  | 0.304   | 0.276  | 0.000  | 0.274   | 0.269   |
| 0.326 0.247  | 0.292  | 0.288  | 0.281   | 0.274   | 0.254   | 0.260   | 0.278   | 0.302   | 0.300   | 0.250   | 0.288   | 0.301   | 0.296   | 0.281  | 0.289  | 0.270   | 0.256  | 0.274  | 0.000   | 0.276   |
| 0.314  | 0.320  | 0.243  | 0.256   | 0.273   | 0.273   | 0.302   | 0.336   | 0.319   | 0.279   | 0.284   | 0.293   | 0.323   | 0.334   | 0.251  | 0.277  | 0.265   | 0.298  | 0.269  | 0.276   | 0.000   |
| 0.3  | 270 0.282<br>246 0.281<br>261 0.273<br>330 0.312<br>243 0.311<br>274 0.248<br>326 0.247                  | 270 0.282 0.272<br>246 0.281 0.293<br>261 0.273 0.237<br>330 0.312 0.316<br>243 0.311 0.319<br>274 0.248 0.262<br>326 0.247 0.292<br>337 0.314 0.320 | 270 0.282 0.272 0.288<br>246 0.281 0.293 0.268<br>261 0.273 0.237 0.275<br>330 0.312 0.316 0.310<br>243 0.311 0.319 0.285<br>274 0.248 0.262 0.267<br>326 0.247 0.292 0.288 | 270     0.282     0.272     0.288     0.281       246     0.281     0.293     0.268     0.311       261     0.273     0.237     0.275     0.266       330     0.312     0.316     0.310     0.327       243     0.311     0.319     0.285     0.282       274     0.248     0.262     0.267     0.257       326     0.247     0.292     0.288     0.281       337     0.314     0.320     0.243     0.256 | 270     0.282     0.272     0.288     0.281     0.288       246     0.281     0.293     0.268     0.311     0.281       261     0.273     0.237     0.275     0.266     0.287       330     0.312     0.316     0.310     0.327     0.291       243     0.311     0.319     0.285     0.282     0.241       274     0.248     0.262     0.267     0.257     0.255       326     0.247     0.292     0.288     0.281     0.274 | 270     0.282     0.272     0.288     0.281     0.288     0.249       246     0.281     0.293     0.268     0.311     0.281     0.281       261     0.273     0.237     0.275     0.266     0.287     0.261       330     0.312     0.316     0.310     0.327     0.291     0.288       243     0.311     0.319     0.285     0.282     0.241     0.271       274     0.248     0.262     0.267     0.257     0.255     0.320       326     0.247     0.292     0.288     0.281     0.274     0.254 | 270     0.282     0.272     0.288     0.281     0.288     0.249     0.287       246     0.281     0.293     0.268     0.311     0.281     0.281     0.306       261     0.273     0.237     0.275     0.266     0.287     0.261     0.286       330     0.312     0.316     0.310     0.327     0.291     0.288     0.277       243     0.311     0.319     0.285     0.282     0.241     0.271     0.292       274     0.248     0.262     0.267     0.257     0.255     0.320     0.288       326     0.247     0.292     0.288     0.281     0.274     0.254     0.260 | 270     0.282     0.272     0.288     0.281     0.288     0.249     0.287     0.268       246     0.281     0.293     0.268     0.311     0.281     0.281     0.306     0.322       261     0.273     0.237     0.275     0.266     0.287     0.261     0.286     0.269       330     0.312     0.316     0.310     0.327     0.291     0.288     0.277     0.300       243     0.311     0.319     0.285     0.282     0.241     0.271     0.292     0.278       274     0.248     0.262     0.267     0.257     0.255     0.320     0.288     0.273       326     0.247     0.292     0.288     0.281     0.274     0.254     0.260     0.278 | 270         0.282         0.272         0.288         0.281         0.288         0.249         0.287         0.268         0.248           246         0.281         0.293         0.268         0.311         0.281         0.281         0.306         0.322         0.296           261         0.273         0.237         0.275         0.266         0.287         0.261         0.286         0.269         0.282           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.291         0.288         0.277         0.300         0.274           243         0.311         0.319         0.285         0.282         0.241         0.271         0.292         0.278         0.282           274         0.248         0.262         0.267         0.257         0.255         0.320         0.288         0.273         0.283           326         0.247         0.292         0.288         0.281         0.274         0.254         0.260         0.278         0.302 | 270         0.282         0.272         0.288         0.281         0.288         0.249         0.287         0.268         0.248         0.277           246         0.281         0.293         0.268         0.311         0.281         0.306         0.322         0.296         0.277           261         0.273         0.237         0.275         0.266         0.287         0.261         0.286         0.269         0.282         0.234           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.291         0.288         0.277         0.300         0.274         0.299           243         0.311         0.319         0.285         0.282         0.241         0.271         0.292         0.278         0.282         0.259           274         0.248         0.262         0.267         0.257         0.255         0.320         0.288         0.273         0.283         0.307           326         0.247         0.292         0.288         0.281         0.274         0.254         0.260         0.278         0.302         0.300 | 270       0.282       0.272       0.288       0.281       0.288       0.249       0.287       0.268       0.248       0.277       0.260         246       0.281       0.293       0.268       0.311       0.281       0.306       0.322       0.296       0.277       0.311         261       0.273       0.237       0.275       0.266       0.287       0.261       0.286       0.269       0.282       0.234       0.295         330       0.312       0.316       0.310       0.327       0.291       0.288       0.277       0.300       0.274       0.299       0.254         243       0.311       0.319       0.285       0.282       0.241       0.271       0.292       0.278       0.282       0.259       0.297         274       0.248       0.262       0.267       0.257       0.255       0.320       0.288       0.273       0.283       0.307       0.279         326       0.247       0.292       0.288       0.281       0.274       0.254       0.260       0.278       0.302       0.300       0.250 | 270         0.282         0.272         0.288         0.281         0.288         0.249         0.287         0.268         0.248         0.277         0.260         0.297           246         0.281         0.293         0.268         0.311         0.281         0.306         0.322         0.296         0.277         0.311         0.303           261         0.273         0.237         0.275         0.266         0.287         0.261         0.286         0.269         0.282         0.234         0.295         0.273           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.291         0.288         0.277         0.300         0.274         0.299         0.254         0.269           243         0.311         0.319         0.282         0.241         0.271         0.292         0.278         0.282         0.259         0.279         0.279         0.279           274         0.248         0.262         0.267         0.257         0.255         0.320         0.288         0.273         0.283         0.307         0.279         0.281           326         0.247         0.292         0.288         0.281         0.254         0.264 | 270         0.282         0.272         0.288         0.281         0.288         0.249         0.287         0.268         0.248         0.277         0.260         0.297         0.261           246         0.281         0.293         0.268         0.311         0.281         0.306         0.322         0.296         0.277         0.311         0.303         0.301           261         0.273         0.237         0.275         0.266         0.287         0.261         0.286         0.269         0.282         0.234         0.295         0.273         0.320           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.291         0.288         0.277         0.300         0.274         0.299         0.254         0.269         0.268           243         0.311         0.319         0.285         0.282         0.241         0.271         0.292         0.278         0.282         0.259         0.297         0.296           274         0.248         0.262         0.267         0.257         0.255         0.320         0.288         0.273         0.283         0.307         0.279         0.281         0.302           326         0.247 | 270         0.282         0.272         0.288         0.281         0.288         0.249         0.287         0.268         0.248         0.277         0.260         0.297         0.261         0.000           246         0.281         0.293         0.268         0.311         0.281         0.306         0.322         0.296         0.277         0.311         0.303         0.301         0.276           261         0.273         0.237         0.275         0.266         0.287         0.261         0.286         0.269         0.282         0.234         0.295         0.273         0.320         0.288           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.291         0.288         0.277         0.300         0.274         0.299         0.254         0.269         0.268         0.307           243         0.311         0.319         0.285         0.282         0.241         0.271         0.292         0.278         0.282         0.259         0.297         0.296         0.301           274         0.248         0.262         0.267         0.257         0.255         0.320         0.288         0.273         0.283         0.307         0.279 <th>270         0.282         0.272         0.288         0.281         0.288         0.249         0.287         0.268         0.248         0.277         0.260         0.297         0.261         0.000         0.276           246         0.281         0.293         0.268         0.311         0.281         0.306         0.322         0.296         0.277         0.311         0.303         0.301         0.276         0.000           261         0.273         0.237         0.275         0.266         0.287         0.261         0.286         0.269         0.282         0.234         0.295         0.273         0.320         0.288         0.296           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.291         0.288         0.277         0.300         0.274         0.299         0.254         0.269         0.268         0.301         0.318           243         0.311         0.319         0.285         0.282         0.241         0.271         0.292         0.278         0.282         0.259         0.297         0.286         0.301         0.295           274         0.248         0.262         0.267         0.257         0.255         0.320<th>270         0.282         0.272         0.288         0.281         0.288         0.249         0.287         0.268         0.248         0.277         0.260         0.297         0.261         0.000         0.276         0.288           246         0.281         0.293         0.268         0.311         0.281         0.306         0.322         0.296         0.277         0.311         0.303         0.301         0.276         0.000         0.296           261         0.273         0.237         0.275         0.266         0.287         0.261         0.286         0.269         0.282         0.234         0.295         0.273         0.320         0.288         0.296         0.000           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.291         0.288         0.277         0.300         0.274         0.299         0.254         0.269         0.268         0.301         0.302         0.318         0.305           243         0.311         0.319         0.282         0.241         0.271         0.292         0.278         0.282         0.259         0.279         0.279         0.286         0.301         0.295         0.278           274<th>270         0.282         0.272         0.288         0.281         0.288         0.249         0.287         0.268         0.248         0.277         0.260         0.297         0.261         0.000         0.276         0.288         0.307           246         0.281         0.293         0.268         0.311         0.281         0.306         0.322         0.296         0.277         0.311         0.303         0.301         0.276         0.000         0.296         0.318           261         0.273         0.237         0.275         0.266         0.287         0.261         0.286         0.269         0.282         0.234         0.295         0.273         0.320         0.288         0.296         0.303           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.291         0.288         0.277         0.300         0.274         0.299         0.254         0.269         0.268         0.301         0.302         0.318         0.305           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.288         0.277         0.300         0.274         0.299         0.254         0.269         0.268         0.301         0.302         0.</th><th>270         0.282         0.272         0.288         0.281         0.288         0.281         0.287         0.268         0.248         0.277         0.260         0.297         0.261         0.000         0.276         0.288         0.307         0.301           246         0.281         0.293         0.268         0.311         0.281         0.306         0.322         0.296         0.277         0.311         0.303         0.301         0.276         0.000         0.296         0.318         0.295           261         0.273         0.237         0.275         0.266         0.287         0.261         0.269         0.282         0.234         0.295         0.273         0.320         0.288         0.296         0.318         0.295           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.281         0.277         0.300         0.274         0.299         0.254         0.269         0.268         0.301         0.327         0.300         0.278         0.282         0.254         0.269         0.268         0.307         0.318         0.305         0.000         0.249           243         0.311         0.319         0.285         0.282         0.</th><th>0.282 0.272 0.288 0.281 0.288 0.281 0.288 0.249 0.287 0.268 0.248 0.277 0.260 0.297 0.261 0.000 0.276 0.288 0.307 0.301 0.271 0.260 0.281 0.293 0.268 0.311 0.281 0.281 0.306 0.322 0.296 0.277 0.311 0.303 0.301 0.276 0.000 0.296 0.318 0.295 0.260 0.273 0.273 0.237 0.237 0.237 0.237 0.237 0.266 0.287 0.261 0.286 0.269 0.282 0.234 0.295 0.273 0.320 0.288 0.296 0.000 0.305 0.278 0.243 0.312 0.316 0.310 0.327 0.291 0.288 0.277 0.300 0.274 0.299 0.254 0.269 0.268 0.307 0.318 0.305 0.000 0.249 0.304 0.243 0.311 0.319 0.285 0.282 0.241 0.271 0.292 0.278 0.282 0.259 0.297 0.279 0.286 0.301 0.295 0.278 0.249 0.000 0.276 0.274 0.248 0.262 0.267 0.257 0.255 0.320 0.288 0.273 0.283 0.307 0.279 0.281 0.302 0.271 0.260 0.243 0.304 0.276 0.000 0.274 0.292 0.278 0.249 0.207 0.279 0.286 0.301 0.295 0.278 0.249 0.000 0.276 0.274 0.248 0.262 0.267 0.257 0.255 0.320 0.288 0.273 0.283 0.307 0.279 0.281 0.302 0.271 0.260 0.243 0.304 0.276 0.000 0.274 0.292 0.278 0.297 0.292 0.288 0.301 0.296 0.281 0.289 0.270 0.256 0.274</th><th>0.282 0.272 0.288 0.281 0.288 0.249 0.287 0.268 0.248 0.277 0.260 0.297 0.261 0.000 0.276 0.288 0.307 0.301 0.271 0.296 0.281 0.281 0.293 0.268 0.311 0.281 0.281 0.306 0.322 0.296 0.277 0.311 0.303 0.301 0.276 0.000 0.296 0.318 0.295 0.260 0.281 0.273 0.273 0.273 0.275 0.266 0.287 0.261 0.286 0.269 0.282 0.234 0.295 0.273 0.320 0.288 0.296 0.000 0.305 0.278 0.243 0.289 0.310 0.312 0.316 0.310 0.327 0.291 0.288 0.277 0.300 0.274 0.299 0.254 0.269 0.268 0.307 0.318 0.305 0.000 0.249 0.304 0.270 0.243 0.311 0.319 0.285 0.282 0.241 0.271 0.292 0.278 0.282 0.259 0.297 0.297 0.279 0.286 0.301 0.295 0.278 0.249 0.000 0.276 0.256 0.274 0.248 0.262 0.267 0.257 0.255 0.320 0.288 0.273 0.283 0.307 0.279 0.281 0.302 0.271 0.260 0.243 0.304 0.276 0.000 0.274 0.209 0.249</th></th></th> | 270         0.282         0.272         0.288         0.281         0.288         0.249         0.287         0.268         0.248         0.277         0.260         0.297         0.261         0.000         0.276           246         0.281         0.293         0.268         0.311         0.281         0.306         0.322         0.296         0.277         0.311         0.303         0.301         0.276         0.000           261         0.273         0.237         0.275         0.266         0.287         0.261         0.286         0.269         0.282         0.234         0.295         0.273         0.320         0.288         0.296           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.291         0.288         0.277         0.300         0.274         0.299         0.254         0.269         0.268         0.301         0.318           243         0.311         0.319         0.285         0.282         0.241         0.271         0.292         0.278         0.282         0.259         0.297         0.286         0.301         0.295           274         0.248         0.262         0.267         0.257         0.255         0.320 <th>270         0.282         0.272         0.288         0.281         0.288         0.249         0.287         0.268         0.248         0.277         0.260         0.297         0.261         0.000         0.276         0.288           246         0.281         0.293         0.268         0.311         0.281         0.306         0.322         0.296         0.277         0.311         0.303         0.301         0.276         0.000         0.296           261         0.273         0.237         0.275         0.266         0.287         0.261         0.286         0.269         0.282         0.234         0.295         0.273         0.320         0.288         0.296         0.000           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.291         0.288         0.277         0.300         0.274         0.299         0.254         0.269         0.268         0.301         0.302         0.318         0.305           243         0.311         0.319         0.282         0.241         0.271         0.292         0.278         0.282         0.259         0.279         0.279         0.286         0.301         0.295         0.278           274<th>270         0.282         0.272         0.288         0.281         0.288         0.249         0.287         0.268         0.248         0.277         0.260         0.297         0.261         0.000         0.276         0.288         0.307           246         0.281         0.293         0.268         0.311         0.281         0.306         0.322         0.296         0.277         0.311         0.303         0.301         0.276         0.000         0.296         0.318           261         0.273         0.237         0.275         0.266         0.287         0.261         0.286         0.269         0.282         0.234         0.295         0.273         0.320         0.288         0.296         0.303           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.291         0.288         0.277         0.300         0.274         0.299         0.254         0.269         0.268         0.301         0.302         0.318         0.305           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.288         0.277         0.300         0.274         0.299         0.254         0.269         0.268         0.301         0.302         0.</th><th>270         0.282         0.272         0.288         0.281         0.288         0.281         0.287         0.268         0.248         0.277         0.260         0.297         0.261         0.000         0.276         0.288         0.307         0.301           246         0.281         0.293         0.268         0.311         0.281         0.306         0.322         0.296         0.277         0.311         0.303         0.301         0.276         0.000         0.296         0.318         0.295           261         0.273         0.237         0.275         0.266         0.287         0.261         0.269         0.282         0.234         0.295         0.273         0.320         0.288         0.296         0.318         0.295           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.281         0.277         0.300         0.274         0.299         0.254         0.269         0.268         0.301         0.327         0.300         0.278         0.282         0.254         0.269         0.268         0.307         0.318         0.305         0.000         0.249           243         0.311         0.319         0.285         0.282         0.</th><th>0.282 0.272 0.288 0.281 0.288 0.281 0.288 0.249 0.287 0.268 0.248 0.277 0.260 0.297 0.261 0.000 0.276 0.288 0.307 0.301 0.271 0.260 0.281 0.293 0.268 0.311 0.281 0.281 0.306 0.322 0.296 0.277 0.311 0.303 0.301 0.276 0.000 0.296 0.318 0.295 0.260 0.273 0.273 0.237 0.237 0.237 0.237 0.237 0.266 0.287 0.261 0.286 0.269 0.282 0.234 0.295 0.273 0.320 0.288 0.296 0.000 0.305 0.278 0.243 0.312 0.316 0.310 0.327 0.291 0.288 0.277 0.300 0.274 0.299 0.254 0.269 0.268 0.307 0.318 0.305 0.000 0.249 0.304 0.243 0.311 0.319 0.285 0.282 0.241 0.271 0.292 0.278 0.282 0.259 0.297 0.279 0.286 0.301 0.295 0.278 0.249 0.000 0.276 0.274 0.248 0.262 0.267 0.257 0.255 0.320 0.288 0.273 0.283 0.307 0.279 0.281 0.302 0.271 0.260 0.243 0.304 0.276 0.000 0.274 0.292 0.278 0.249 0.207 0.279 0.286 0.301 0.295 0.278 0.249 0.000 0.276 0.274 0.248 0.262 0.267 0.257 0.255 0.320 0.288 0.273 0.283 0.307 0.279 0.281 0.302 0.271 0.260 0.243 0.304 0.276 0.000 0.274 0.292 0.278 0.297 0.292 0.288 0.301 0.296 0.281 0.289 0.270 0.256 0.274</th><th>0.282 0.272 0.288 0.281 0.288 0.249 0.287 0.268 0.248 0.277 0.260 0.297 0.261 0.000 0.276 0.288 0.307 0.301 0.271 0.296 0.281 0.281 0.293 0.268 0.311 0.281 0.281 0.306 0.322 0.296 0.277 0.311 0.303 0.301 0.276 0.000 0.296 0.318 0.295 0.260 0.281 0.273 0.273 0.273 0.275 0.266 0.287 0.261 0.286 0.269 0.282 0.234 0.295 0.273 0.320 0.288 0.296 0.000 0.305 0.278 0.243 0.289 0.310 0.312 0.316 0.310 0.327 0.291 0.288 0.277 0.300 0.274 0.299 0.254 0.269 0.268 0.307 0.318 0.305 0.000 0.249 0.304 0.270 0.243 0.311 0.319 0.285 0.282 0.241 0.271 0.292 0.278 0.282 0.259 0.297 0.297 0.279 0.286 0.301 0.295 0.278 0.249 0.000 0.276 0.256 0.274 0.248 0.262 0.267 0.257 0.255 0.320 0.288 0.273 0.283 0.307 0.279 0.281 0.302 0.271 0.260 0.243 0.304 0.276 0.000 0.274 0.209 0.249</th></th> | 270         0.282         0.272         0.288         0.281         0.288         0.249         0.287         0.268         0.248         0.277         0.260         0.297         0.261         0.000         0.276         0.288           246         0.281         0.293         0.268         0.311         0.281         0.306         0.322         0.296         0.277         0.311         0.303         0.301         0.276         0.000         0.296           261         0.273         0.237         0.275         0.266         0.287         0.261         0.286         0.269         0.282         0.234         0.295         0.273         0.320         0.288         0.296         0.000           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.291         0.288         0.277         0.300         0.274         0.299         0.254         0.269         0.268         0.301         0.302         0.318         0.305           243         0.311         0.319         0.282         0.241         0.271         0.292         0.278         0.282         0.259         0.279         0.279         0.286         0.301         0.295         0.278           274 <th>270         0.282         0.272         0.288         0.281         0.288         0.249         0.287         0.268         0.248         0.277         0.260         0.297         0.261         0.000         0.276         0.288         0.307           246         0.281         0.293         0.268         0.311         0.281         0.306         0.322         0.296         0.277         0.311         0.303         0.301         0.276         0.000         0.296         0.318           261         0.273         0.237         0.275         0.266         0.287         0.261         0.286         0.269         0.282         0.234         0.295         0.273         0.320         0.288         0.296         0.303           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.291         0.288         0.277         0.300         0.274         0.299         0.254         0.269         0.268         0.301         0.302         0.318         0.305           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.288         0.277         0.300         0.274         0.299         0.254         0.269         0.268         0.301         0.302         0.</th> <th>270         0.282         0.272         0.288         0.281         0.288         0.281         0.287         0.268         0.248         0.277         0.260         0.297         0.261         0.000         0.276         0.288         0.307         0.301           246         0.281         0.293         0.268         0.311         0.281         0.306         0.322         0.296         0.277         0.311         0.303         0.301         0.276         0.000         0.296         0.318         0.295           261         0.273         0.237         0.275         0.266         0.287         0.261         0.269         0.282         0.234         0.295         0.273         0.320         0.288         0.296         0.318         0.295           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.281         0.277         0.300         0.274         0.299         0.254         0.269         0.268         0.301         0.327         0.300         0.278         0.282         0.254         0.269         0.268         0.307         0.318         0.305         0.000         0.249           243         0.311         0.319         0.285         0.282         0.</th> <th>0.282 0.272 0.288 0.281 0.288 0.281 0.288 0.249 0.287 0.268 0.248 0.277 0.260 0.297 0.261 0.000 0.276 0.288 0.307 0.301 0.271 0.260 0.281 0.293 0.268 0.311 0.281 0.281 0.306 0.322 0.296 0.277 0.311 0.303 0.301 0.276 0.000 0.296 0.318 0.295 0.260 0.273 0.273 0.237 0.237 0.237 0.237 0.237 0.266 0.287 0.261 0.286 0.269 0.282 0.234 0.295 0.273 0.320 0.288 0.296 0.000 0.305 0.278 0.243 0.312 0.316 0.310 0.327 0.291 0.288 0.277 0.300 0.274 0.299 0.254 0.269 0.268 0.307 0.318 0.305 0.000 0.249 0.304 0.243 0.311 0.319 0.285 0.282 0.241 0.271 0.292 0.278 0.282 0.259 0.297 0.279 0.286 0.301 0.295 0.278 0.249 0.000 0.276 0.274 0.248 0.262 0.267 0.257 0.255 0.320 0.288 0.273 0.283 0.307 0.279 0.281 0.302 0.271 0.260 0.243 0.304 0.276 0.000 0.274 0.292 0.278 0.249 0.207 0.279 0.286 0.301 0.295 0.278 0.249 0.000 0.276 0.274 0.248 0.262 0.267 0.257 0.255 0.320 0.288 0.273 0.283 0.307 0.279 0.281 0.302 0.271 0.260 0.243 0.304 0.276 0.000 0.274 0.292 0.278 0.297 0.292 0.288 0.301 0.296 0.281 0.289 0.270 0.256 0.274</th> <th>0.282 0.272 0.288 0.281 0.288 0.249 0.287 0.268 0.248 0.277 0.260 0.297 0.261 0.000 0.276 0.288 0.307 0.301 0.271 0.296 0.281 0.281 0.293 0.268 0.311 0.281 0.281 0.306 0.322 0.296 0.277 0.311 0.303 0.301 0.276 0.000 0.296 0.318 0.295 0.260 0.281 0.273 0.273 0.273 0.275 0.266 0.287 0.261 0.286 0.269 0.282 0.234 0.295 0.273 0.320 0.288 0.296 0.000 0.305 0.278 0.243 0.289 0.310 0.312 0.316 0.310 0.327 0.291 0.288 0.277 0.300 0.274 0.299 0.254 0.269 0.268 0.307 0.318 0.305 0.000 0.249 0.304 0.270 0.243 0.311 0.319 0.285 0.282 0.241 0.271 0.292 0.278 0.282 0.259 0.297 0.297 0.279 0.286 0.301 0.295 0.278 0.249 0.000 0.276 0.256 0.274 0.248 0.262 0.267 0.257 0.255 0.320 0.288 0.273 0.283 0.307 0.279 0.281 0.302 0.271 0.260 0.243 0.304 0.276 0.000 0.274 0.209 0.249</th> | 270         0.282         0.272         0.288         0.281         0.288         0.249         0.287         0.268         0.248         0.277         0.260         0.297         0.261         0.000         0.276         0.288         0.307           246         0.281         0.293         0.268         0.311         0.281         0.306         0.322         0.296         0.277         0.311         0.303         0.301         0.276         0.000         0.296         0.318           261         0.273         0.237         0.275         0.266         0.287         0.261         0.286         0.269         0.282         0.234         0.295         0.273         0.320         0.288         0.296         0.303           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.291         0.288         0.277         0.300         0.274         0.299         0.254         0.269         0.268         0.301         0.302         0.318         0.305           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.288         0.277         0.300         0.274         0.299         0.254         0.269         0.268         0.301         0.302         0. | 270         0.282         0.272         0.288         0.281         0.288         0.281         0.287         0.268         0.248         0.277         0.260         0.297         0.261         0.000         0.276         0.288         0.307         0.301           246         0.281         0.293         0.268         0.311         0.281         0.306         0.322         0.296         0.277         0.311         0.303         0.301         0.276         0.000         0.296         0.318         0.295           261         0.273         0.237         0.275         0.266         0.287         0.261         0.269         0.282         0.234         0.295         0.273         0.320         0.288         0.296         0.318         0.295           330         0.312         0.316         0.310         0.327         0.281         0.277         0.300         0.274         0.299         0.254         0.269         0.268         0.301         0.327         0.300         0.278         0.282         0.254         0.269         0.268         0.307         0.318         0.305         0.000         0.249           243         0.311         0.319         0.285         0.282         0. | 0.282 0.272 0.288 0.281 0.288 0.281 0.288 0.249 0.287 0.268 0.248 0.277 0.260 0.297 0.261 0.000 0.276 0.288 0.307 0.301 0.271 0.260 0.281 0.293 0.268 0.311 0.281 0.281 0.306 0.322 0.296 0.277 0.311 0.303 0.301 0.276 0.000 0.296 0.318 0.295 0.260 0.273 0.273 0.237 0.237 0.237 0.237 0.237 0.266 0.287 0.261 0.286 0.269 0.282 0.234 0.295 0.273 0.320 0.288 0.296 0.000 0.305 0.278 0.243 0.312 0.316 0.310 0.327 0.291 0.288 0.277 0.300 0.274 0.299 0.254 0.269 0.268 0.307 0.318 0.305 0.000 0.249 0.304 0.243 0.311 0.319 0.285 0.282 0.241 0.271 0.292 0.278 0.282 0.259 0.297 0.279 0.286 0.301 0.295 0.278 0.249 0.000 0.276 0.274 0.248 0.262 0.267 0.257 0.255 0.320 0.288 0.273 0.283 0.307 0.279 0.281 0.302 0.271 0.260 0.243 0.304 0.276 0.000 0.274 0.292 0.278 0.249 0.207 0.279 0.286 0.301 0.295 0.278 0.249 0.000 0.276 0.274 0.248 0.262 0.267 0.257 0.255 0.320 0.288 0.273 0.283 0.307 0.279 0.281 0.302 0.271 0.260 0.243 0.304 0.276 0.000 0.274 0.292 0.278 0.297 0.292 0.288 0.301 0.296 0.281 0.289 0.270 0.256 0.274 | 0.282 0.272 0.288 0.281 0.288 0.249 0.287 0.268 0.248 0.277 0.260 0.297 0.261 0.000 0.276 0.288 0.307 0.301 0.271 0.296 0.281 0.281 0.293 0.268 0.311 0.281 0.281 0.306 0.322 0.296 0.277 0.311 0.303 0.301 0.276 0.000 0.296 0.318 0.295 0.260 0.281 0.273 0.273 0.273 0.275 0.266 0.287 0.261 0.286 0.269 0.282 0.234 0.295 0.273 0.320 0.288 0.296 0.000 0.305 0.278 0.243 0.289 0.310 0.312 0.316 0.310 0.327 0.291 0.288 0.277 0.300 0.274 0.299 0.254 0.269 0.268 0.307 0.318 0.305 0.000 0.249 0.304 0.270 0.243 0.311 0.319 0.285 0.282 0.241 0.271 0.292 0.278 0.282 0.259 0.297 0.297 0.279 0.286 0.301 0.295 0.278 0.249 0.000 0.276 0.256 0.274 0.248 0.262 0.267 0.257 0.255 0.320 0.288 0.273 0.283 0.307 0.279 0.281 0.302 0.271 0.260 0.243 0.304 0.276 0.000 0.274 0.209 0.249 |

## **Conclusions and Future Research**

In this study, we created an **online dashboard** that displays metrics for assessing the technical performance of replica exchange molecular dynamics simulations.

Our research is the first step in the **standardization** of REMD results. RexDash streamlines the process of data submission by ensuring that users upload their REMD simulation results in a **consistent** and **uniform** format. The specific structure for **comma-separated-value** (CSV) data guarantees accurate generation of five standard metrics (see Figures 1-5).

Through generating these metrics, RexDash offers future simulation practitioners and researchers with a convenient tool to analyze their simulation's technical setup. The dashboard incorporates interactive plots for all five metrics and dynamic rescaling for replica trajectories and potential energy distributions, which allow users to visualize and analyze data more effectively.

Although RexDash is currently accessible on a **local host** server, we intend to host the dashboard on a **public domain** in future research.

#### References

A description of RexDash metrics are available in:

Smith, A. K., Lockhart, C., & Klimov, D. K. (2016). Does Replica Exchange with Solute Tempering Efficiently Sample Aβ Peptide Conformational Ensembles? *J. Chem. Theory Comput.* 12(10): 5201–5214.

# Acknowledgements

This research was made possible through the support of George Mason University's College of Science, which supports the ASSIP Program.