

SUPPORTING INFORMATION

## **6 $\beta$ -hydroxygeniposide, a potent $\alpha$ -glucosidase inhibitor from *Gardenia jasminoides* growing in Viet Nam**

**Vu Dinh Hoang<sup>1,\*</sup>, Nguyen Khac Hung<sup>1</sup>, Pham Quang Duong<sup>2</sup>,  
Nguyen Thi Viet Thanh<sup>1</sup>, Dinh Thi Phuong Anh<sup>1</sup>, Chu Van Tan<sup>3</sup>, Cao Duc Tuan<sup>4</sup>,  
Tran Hong Ngoc<sup>5</sup>, Truong Gia Bao<sup>6</sup>, Tran Dai Lam<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Hanoi University of Science and Technology, 1 Dai Co Viet street, Bach Mai ward, Ha Noi, Viet Nam*

<sup>2</sup>*Institute of Materials Science, Vietnam Academy of Science and Technology,  
18 Hoang Quoc Viet, Nghia Do ward, Ha Noi, Viet Nam*

<sup>3</sup>*Center for High Technology Innovation, Vietnam Academy of Science and Technology,  
18 Hoang Quoc Viet, Nghia Do ward, Ha Noi, Viet Nam*

<sup>4</sup>*Hai Phong University of Medicine and Pharmacy, 72A Nguyen Binh Khiem,  
Gia Vien ward, Hai Phong, Viet Nam*

<sup>5</sup>*Faculty of Pharmacy, Phenikaa University, Duong Noi ward, Ha Noi, Viet Nam*

<sup>6</sup>*Gifted Class for Chemistry, High School for Gifted Students, Hanoi University of Science,  
Vietnam National University, Ha Noi, Viet Nam*

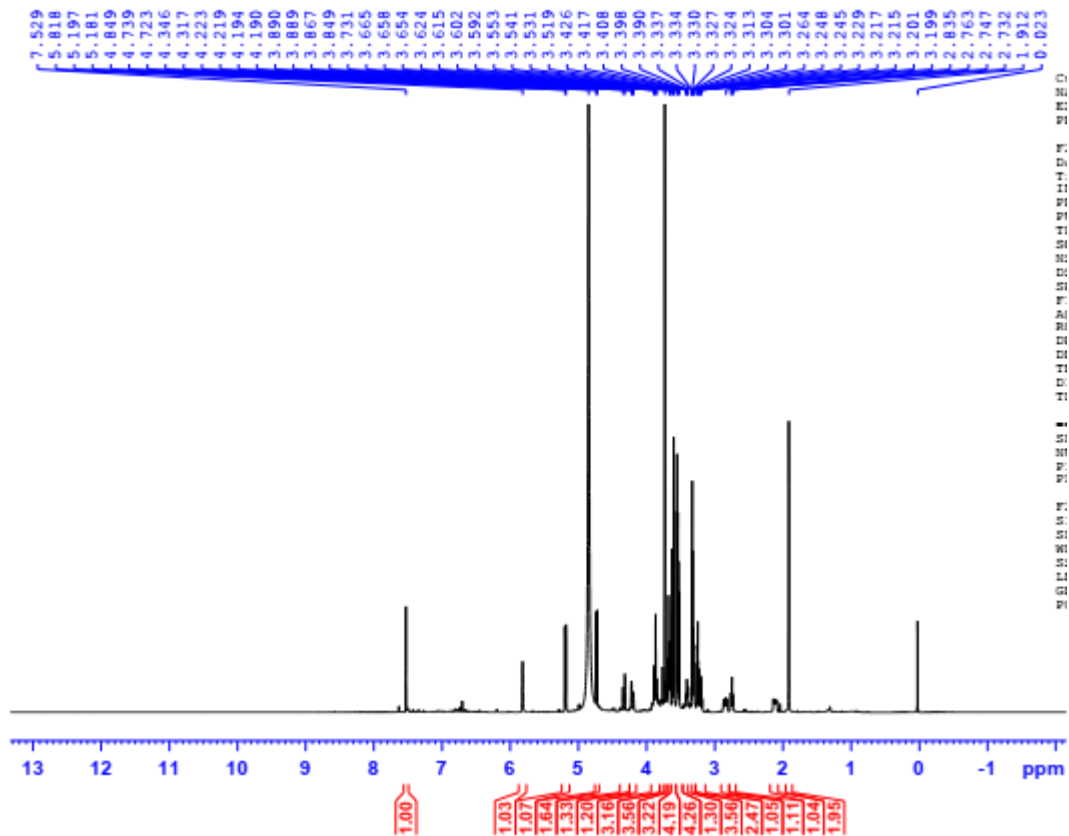
\*Email: [hoang.vudinh@hust.edu.vn](mailto:hoang.vudinh@hust.edu.vn)

Received: 27 January 2024; Accepted for publication: 23 March 2024

**Abstract.** According to the statistics of WHO in 2019, diabetes was one of the top 10 causes of death in Viet Nam and the incidence increasing day by day has required more effective treatment methods. For a long time, natural products have played an important role in drug screening programs. *Gardenia jasminoides* belongs to the *Gardenia* genus of the Rubiaceae family, in which previous research showed potential ability in diabetes treatment through various mechanisms. In this study, 3 iridoids were isolated from *G. jasminoides* collected in Viet Nam and the  $\alpha$ -glucosidase inhibitory activity was evaluated for the first time. The results showed that 6 $\beta$ -hydroxygeniposide (**2**) expressed the strongest activity with IC<sub>50</sub> at  $6.38 \pm 0.12$   $\mu$ M, while geniposide (**1**) and 6 $\alpha$ -hydroxygeniposide (**3**) were inactive. The inhibitory mechanism of 6 $\beta$ -hydroxygeniposide was revealed by molecular docking and molecular dynamics. 6 $\beta$ -Hydroxygeniposide competed and blocked p-nitrophenyl- $\alpha$ -D-glucopyranoside substrate reaching the reaction center of the enzyme, which was expressed through lower non-bonding interaction energy and stable binding affinity.

**Keywords:** 6 $\beta$ -hydroxygeniposide, anti  $\alpha$ -glucosidase, diabetes, *Gardenia jasminoides*, molecular docking, molecular dynamic simulation.

**Classification numbers:** 1.2.1, 1.2.4, 4.8.5.



**Figure S1.** <sup>1</sup>H-NMR spectrum of compound **1** in CD<sub>3</sub>OD at 500 MHz

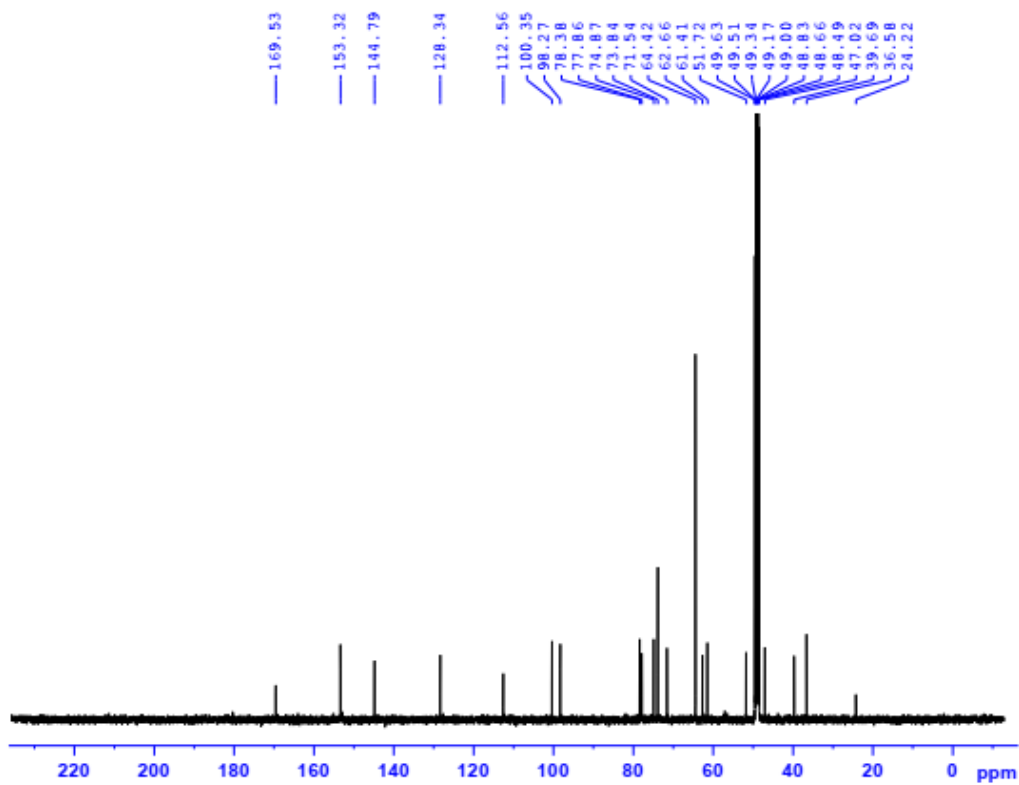


Figure S2.  $^{13}\text{C}$ -NMR spectrum of compound 1 in  $\text{CD}_3\text{OD}$  at 125 MHz

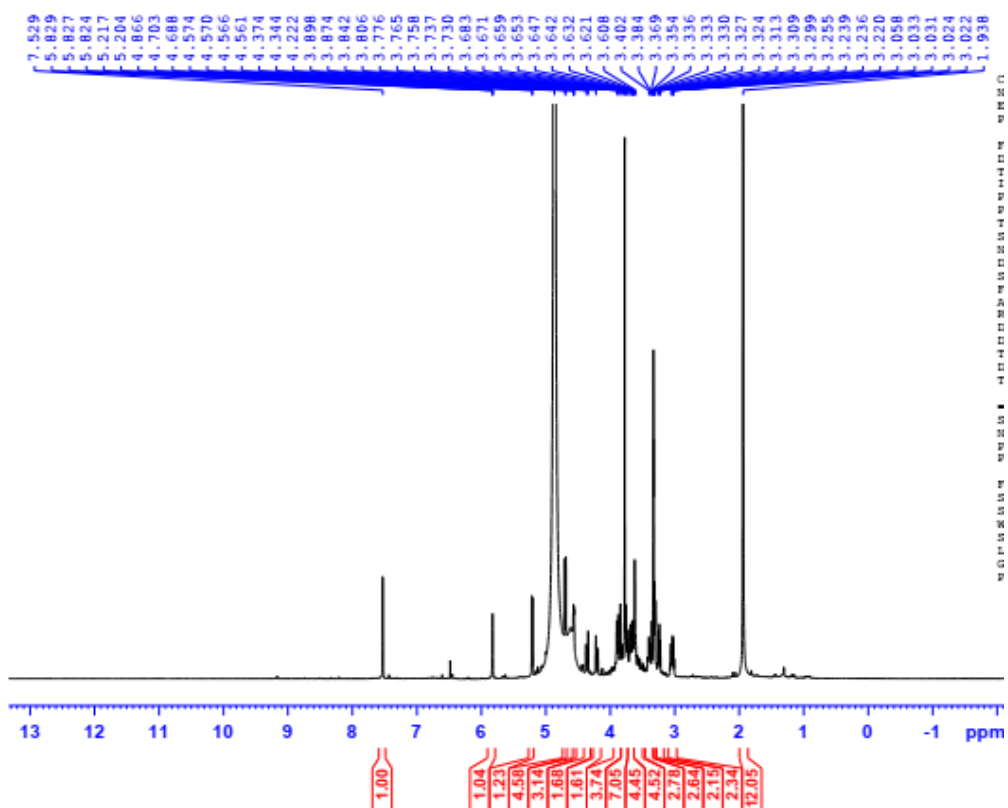


Figure S3.  $^1\text{H}$ -NMR spectrum of compound 2 in  $\text{CD}_3\text{OD}$  at 500 MHz



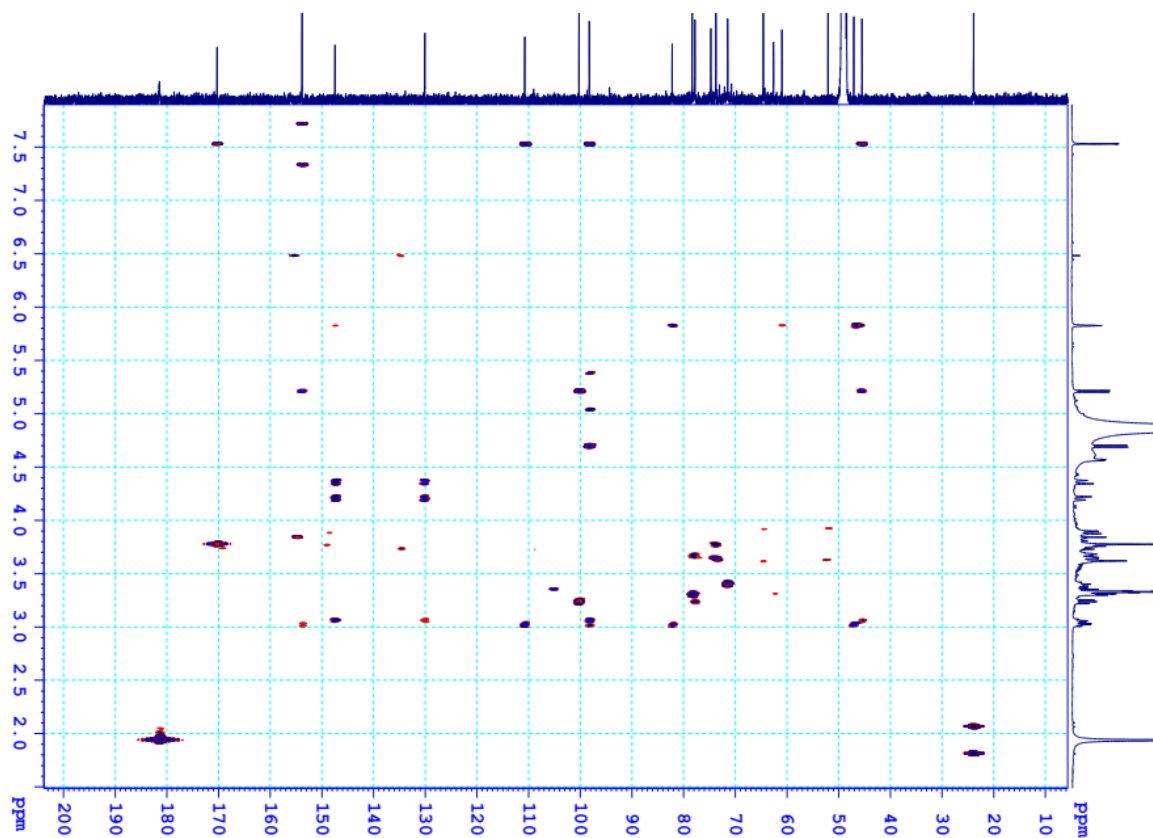


Figure S6. HMBC spectrum of compound 2 in CD<sub>3</sub>OD

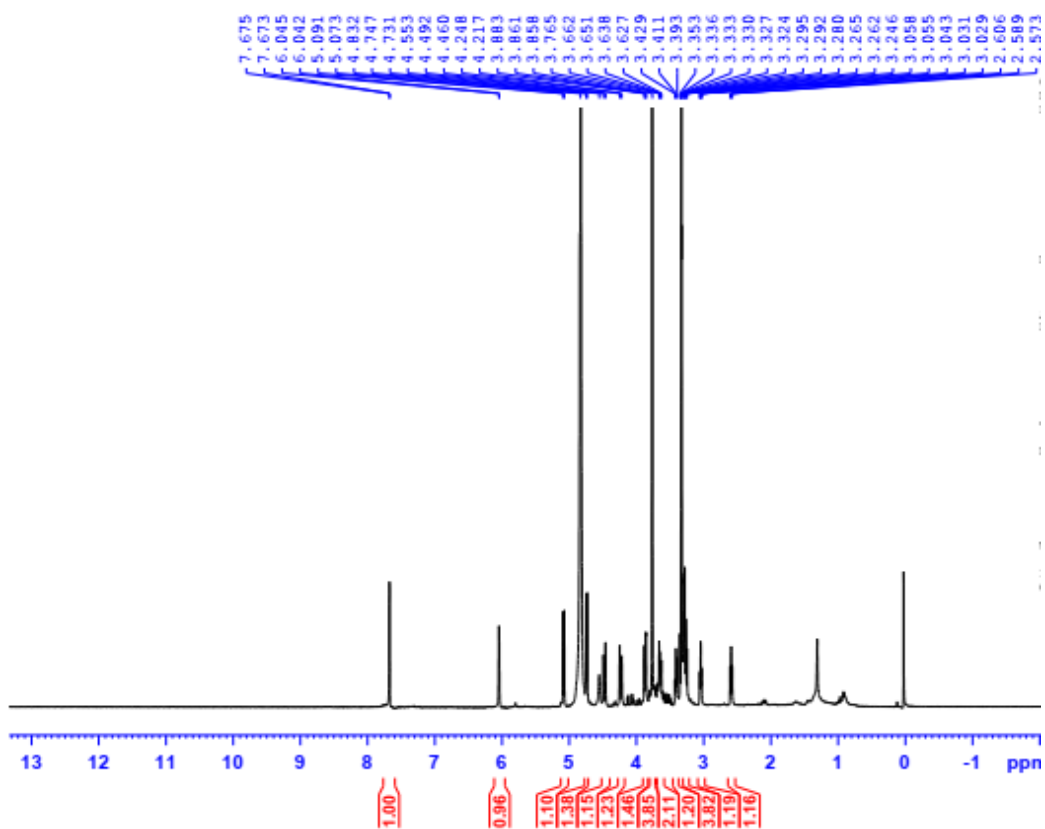


Figure S7. HMBC spectrum of compound 3

**Table S1.** PubChem CID ID and anti  $\alpha$ -glucosidase ( $IC_{50}$ ) of active compound used in docking validation

CID ID	Name	$IC_{50}$ ( $\mu M$ )
441314	Miglitol	2.2387
5281670	Morin	3.1623
3846708	4-((2-Nitrophenyl)amino)phenol	10
6603107	Miglustat hydrochloride	2.5119
5388680	(E)-2-cyano-3-(3,4,5-trihydroxyphenyl)prop-2-enamide	5.0119
3064801	Carbamic acid, (5-((diethylamino)acetyl)-10,11-dihydro-5H-dibenz(b,f)azepin-3-yl)-, ethyl ester, monohydrochloride	8.9125
654283	1-(3,4-Dihydroxy-phenyl)-2-(5-phenyl-4H-[1,2,4]triazol-3-ylsulfanyl)-ethanone	10
20969430	5-[[4-(4-Acetylphenyl)-1-piperazinyl]sulfonyl]-1,3-dihydroindol-2-one	0.7492
36649951	5-[4-(4-Acetylphenyl)piperazin-1-yl]sulfonyl-6-chloro-1,3-dihydroindol-2-one	3.6588
44825289	5-[4-(4-Nitrophenyl)piperazin-1-yl]sulfonyl-1,3-dihydroindol-2-one	3.6588
44825290	4-[4-[(2-Oxo-1,3-dihydroindol-5-yl)sulfonyl]piperazin-1-yl]benzotrile	2.9063
44825297	5-[4-(4-Hydroxyphenyl)piperazin-1-yl]sulfonyl-1,3-dihydroindol-2-one	1.8818
44825298	5-[4-[3-(Trifluoromethyl)phenyl]piperazin-1-yl]sulfonyl-1,3-dihydroindol-2-one	8.4057
44825302	Methyl 4-[4-[(2-oxo-1,3-dihydroindol-5-yl)sulfonyl]piperazin-1-yl]benzoate	1.157
44825307	4-[4-[(2-Oxo-1,3-dihydroindol-5-yl)sulfonyl]piperazin-1-yl]benzaldehyde	3.6588
44825310	4-[4-[(2-Oxo-1,3-dihydroindol-5-yl)sulfonyl]piperazin-1-yl]benzoic acid	1.2982
2805611	1-(3-Chloro-2-cyanophenyl)piperidine-4-carboxamide	4.4327
1540564	Ethyl 2-[2-[[5,6-dichloro-2-(trifluoromethyl)-1,3-benzodioxol-2-yl]carbamoylamino]-1,3-thiazol-4-yl]acetate	8.8445
3124718	2-(N-benzyl-2,4-dinitroanilino)ethanol	10
15988003	N~1~(3,4-Difluorophenyl)-4-(4-methyl-5-oxo-4,5-dihydrothieno[2,3-E][1,2,4]triazolo[4,3-A]pyrimidin-1-YL)butanamide	1.9953
9624368	2-chloro-5-[(2E)-2-[[4-(2-fluorobenzoyl)oxy-3-methoxyphenyl]methylidene]hydrazinyl]benzoic acid	5.6234
890962	2-[[4-(4-Hydroxyphenyl)amino]methylene]cyclohexanone	8.8445
377886	2-[[[4-(3,4-Dichlorophenyl)-1,3-thiazol-2-yl]amino]methylidene]propanediamide;hydrochloride	7.0795
5310850	7,8-Dihydroxy-2-methyl-3-(1-phenylpyrazol-4-yl)chromen-4-one	5.6234
135460565	2-(6-methoxy-2-methyl-quinolin-4-yl)sulfanyl-N"-[(Z)-(3-oxidanyl-4-oxidanylidene-cyclohexa-2,5-dien-1-ylidene)methyl]ethanehydrazide	7.0254
16013483	6-methyl-N-{4-[(2-methylpiperidin-1-yl)sulfonyl]phenyl}-4-oxo-4H-chromene-2-carboxamide	7.0795
16016147	N-(4-acetylphenyl)-2-[2-(3-methyl-1,2,4-oxadiazol-5-yl)phenoxy]acetamide	7.0795
5415554	5-(4-Hydroxy-3-methoxybenzylidene)-3-methyl-2-thioxo-4-imidazolidinone	10
16009662	2-(3-benzyl-2,4-dioxo-3,4-dihydro[1]benzothieno[3,2-d]pyrimidin-1(2H)-yl)-N-phenylacetamide	7.9433
16021225	1-[(5-Bromothiophen-2-YL)sulfonyl]-4-[3-(2,4-dimethylphenyl)-1H-pyrazole-5-carbonyl]piperazine	8.9125
5935482	6-chloro-N-[(Z)-(5-methylfuran-2-yl)methylideneamino]-1H-benzimidazol-2-amine	6.2614

**Table S2.** List of protein-ligand interactions

<i>6 <math>\alpha</math>-hydroxy geniposide</i>										
<b>Hydrogen bonds</b>										
<----- A T O M 1 ----->					<----- A T O M 2 ----->					
Atom	Atom	Res	Res	Chain	Atom	Atom	Res	Res	Chain	Distance
no	name	name	no	no	no	name	name	no	Chain	Distance
1	17	O9	6a	590 B	---	31	O	SER	311 A	2.871
2	15	O8	6a	590 B	---	31	O	SER	311 A	3.290
3	15	O8	6a	590 B	---	45	O	THR	310 A	3.793
4	19	O10	6a	590 B	---	41	OD2	ASP	242 A	2.737
<b>Non-bonded contacts</b>										
<----- A T O M 1 ----->					<----- A T O M 2 ----->					
Atom	Atom	Res	Res	Chain	Atom	Atom	Res	Res	Chain	Distance
no	name	name	no	no	no	name	name	no	Chain	Distance
1	17	O9	6a	590 B	---	67	CA	ARG	315 A	3.892
2	24	C14	6a	590 B	---	62	O	PRO	312 A	3.881
3	15	O8	6a	590 B	---	60	CA	PRO	312 A	3.334
4	15	O8	6a	590 B	---	59	N	PRO	312 A	3.819
5	24	C14	6a	590 B	---	31	O	SER	311 A	3.326
6	15	O8	6a	590 B	---	30	C	SER	311 A	3.771
7	17	O9	6a	590 B	---	47	CG2	THR	310 A	3.714
8	7	O4	6a	590 B	---	58	NE2	HSD	280 A	3.559
9	6	C4	6a	590 B	---	56	ND1	HSD	280 A	3.848
10	9	O5	6a	590 B	---	55	CD2	HSD	280 A	3.776
11	7	O4	6a	590 B	---	55	CD2	HSD	280 A	3.782
12	1	O1	6a	590 B	---	53	CB	HSD	280 A	3.667
13	26	C16	6a	590 B	---	41	OD2	ASP	242 A	3.484

**Table S2.** List of protein-ligand interactions

<i>6 β-hydroxy geniposide</i>															
Hydrogen bonds															
<----- ATOM 1 ----->						<----- ATOM 2 ----->									
Atom	Atom	Res	Res	Atom	Atom	Res	Res	Atom	Atom	Res	Res				
no	name	name	no	Chain	no	name	name	no	Chain	no	name	name	no	Chain	Distance
1	109	NE2	GLN	353	A	---	18	O9	6b	590	B				3.406
2	38	NH1	ARG	315	A	---	18	O9	6b	590	B				3.871
3	38	NH1	ARG	315	A	---	16	O8	6b	590	B				3.062
4	54	OG1	THR	310	A	---	14	O7	6b	590	B				3.272
5	4	O2	6b	590	B	---	58	O	PRO	312	A				3.841
6	2	O1	6b	590	B	---	81	OD2	ASP	242	A				3.071
7	2	O1	6b	590	B	---	87	OG	SER	240	A				2.999
Non-bonded contacts															
<----- ATOM 1 ----->						<----- ATOM 2 ----->									
Atom	Atom	Res	Res	Atom	Atom	Res	Res	Atom	Atom	Res	Res				
no	name	name	no	Chain	no	name	name	no	Chain	no	name	name	no	Chain	Distance
1	120	CE2	PHE	303	A	---	28	C17	6b	590	B				3.772
2	151	NE2	GLN	279	A	---	27	C16	6b	590	B				3.464
3	69	CD2	TYR	158	A	---	27	C16	6b	590	B				3.801
4	68	CD1	TYR	158	A	---	27	C16	6b	590	B				3.860
5	67	CG	TYR	158	A	---	27	C16	6b	590	B				3.705
6	56	CA	PRO	312	A	---	26	C15	6b	590	B				3.698
7	91	O	SER	311	A	---	26	C15	6b	590	B				3.362
8	90	C	SER	311	A	---	26	C15	6b	590	B				3.616
9	54	OG1	THR	310	A	---	26	C15	6b	590	B				3.296
10	52	CB	THR	310	A	---	26	C15	6b	590	B				3.708
11	51	O	THR	310	A	---	26	C15	6b	590	B				3.207
12	50	C	THR	310	A	---	26	C15	6b	590	B				3.619
13	47	OD2	ASP	307	A	---	26	C15	6b	590	B				3.411
14	91	O	SER	311	A	---	21	C11	6b	590	B				3.636
15	47	OD2	ASP	307	A	---	21	C11	6b	590	B				3.067
16	46	OD1	ASP	307	A	---	21	C11	6b	590	B				3.899
17	45	CG	ASP	307	A	---	21	C11	6b	590	B				3.879
18	143	CZ	PHE	178	A	---	20	O10	6b	590	B				3.760
19	141	CE1	PHE	178	A	---	20	O10	6b	590	B				3.658
20	68	CD1	TYR	158	A	---	20	O10	6b	590	B				3.731
21	67	CG	TYR	158	A	---	20	O10	6b	590	B				3.547
22	66	CB	TYR	158	A	---	20	O10	6b	590	B				3.685
23	39	NH2	ARG	315	A	---	18	O9	6b	590	B				3.595
24	37	CZ	ARG	315	A	---	18	O9	6b	590	B				3.812
25	121	CZ	PHE	303	A	---	18	O9	6b	590	B				3.736
26	120	CE2	PHE	303	A	---	18	O9	6b	590	B				3.759
27	33	CB	ARG	315	A	---	17	C9	6b	590	B				3.787
28	30	CA	ARG	315	A	---	17	C9	6b	590	B				3.553
29	29	N	ARG	315	A	---	17	C9	6b	590	B				3.252
30	124	C	PHE	314	A	---	17	C9	6b	590	B				3.693
31	37	CZ	ARG	315	A	---	16	O8	6b	590	B				3.631
32	35	CD	ARG	315	A	---	16	O8	6b	590	B				3.647
33	47	OD2	ASP	307	A	---	16	O8	6b	590	B				3.819
34	46	OD1	ASP	307	A	---	16	O8	6b	590	B				3.856
35	45	CG	ASP	307	A	---	16	O8	6b	590	B				3.786
36	47	OD2	ASP	307	A	---	15	C8	6b	590	B				3.634
37	30	CA	ARG	315	A	---	14	O7	6b	590	B				3.722
38	29	N	ARG	315	A	---	14	O7	6b	590	B				3.771
39	125	O	PHE	314	A	---	14	O7	6b	590	B				3.448
40	124	C	PHE	314	A	---	14	O7	6b	590	B				3.587
41	91	O	SER	311	A	---	14	O7	6b	590	B				3.484
42	53	CG2	THR	310	A	---	14	O7	6b	590	B				3.865
43	52	CB	THR	310	A	---	14	O7	6b	590	B				3.178
44	47	OD2	ASP	307	A	---	14	O7	6b	590	B				3.334
45	46	OD1	ASP	307	A	---	14	O7	6b	590	B				3.409
46	45	CG	ASP	307	A	---	14	O7	6b	590	B				3.769
47	57	C	PRO	312	A	---	12	O6	6b	590	B				3.858
48	56	CA	PRO	312	A	---	12	O6	6b	590	B				3.706
49	91	O	SER	311	A	---	12	O6	6b	590	B				3.544
50	47	OD2	ASP	307	A	---	12	O6	6b	590	B				3.205
51	58	O	PRO	312	A	---	9	C5	6b	590	B				3.228
52	57	C	PRO	312	A	---	9	C5	6b	590	B				3.894
53	33	CB	ARG	315	A	---	6	O3	6b	590	B				3.826
54	29	N	ARG	315	A	---	6	O3	6b	590	B				3.491
55	97	O	LEU	313	A	---	5	C3	6b	590	B				3.709
56	96	C	LEU	313	A	---	5	C3	6b	590	B				3.757
57	95	CA	LEU	313	A	---	5	C3	6b	590	B				3.746
58	58	O	PRO	312	A	---	5	C3	6b	590	B				3.209
59	97	O	LEU	313	A	---	3	C2	6b	590	B				3.727
60	86	CB	SER	240	A	---	2	O1	6b	590	B				3.421
61	97	O	LEU	313	A	---	1	C1	6b	590	B				3.514
62	81	OD2	ASP	242	A	---	1	C1	6b	590	B				3.844

**Table S3.** RMSD of simulated system over 500 picoseconds in nm

Simulation time (picoseconds)	Geniposide	6 $\alpha$ -hydroxygeniposide	6 $\beta$ -hydroxygeniposide	PNG
0	0.1078777	0.1011762	0.0721568	0.1595145
10	0.1829446	0.1711208	0.1211449	0.340907
20	0.2405851	0.13364	0.1064313	0.4101054
30	0.2792282	0.1487982	0.1065375	0.4677535
40	0.3463559	0.1564174	0.1535607	0.3571902
50	0.2844848	0.1682981	0.1100228	0.4063169
60	0.3511328	0.1588181	0.146316	0.4132814
70	0.3316833	0.1740103	0.0913327	0.3677072
80	0.3231408	0.1763809	0.1675889	0.3624753
90	0.3447027	0.2115045	0.1791231	0.4705592
100	0.2947998	0.1900493	0.1461465	0.3199095
110	0.3366263	0.2271724	0.1913769	0.4105963
120	0.3449441	0.2443165	0.1345614	0.3641499
130	0.298938	0.2556816	0.1965988	0.4256258
140	0.2967486	0.2248774	0.16717	0.3572765
150	0.3230179	0.2050786	0.1749362	0.5407835
160	0.3172166	0.2355349	0.1887765	0.5678816
170	0.4258703	0.1973747	0.156012	0.6830673
180	0.396741	0.2033241	0.1381956	0.8405548
190	0.4332037	0.1903132	0.1319849	0.8076169
200	0.4647063	0.2309313	0.1362691	0.8009729
210	0.4940499	0.2214818	0.1543433	0.751211
220	0.5442046	0.1975587	0.1189131	0.6563967
230	0.647756	0.2446601	0.1465971	0.702768
240	0.7071351	0.2080349	0.134131	0.6144142
250	0.7216383	0.2026111	0.1614174	0.6933096
260	0.6924611	0.1763059	0.1178342	0.6514601
270	0.7717224	0.2067489	0.0997213	0.6567559
280	0.7614992	0.1831284	0.1338809	0.718546
290	0.811605	0.2133789	0.1628873	0.6801447
300	0.7989515	0.1981748	0.1453476	0.5907256
310	0.9427138	0.2194861	0.1701503	0.7400492
320	0.9641181	0.214576	0.1455412	0.8070938
330	0.9465531	0.2024517	0.1376971	0.7710376
340	0.9978642	0.1948994	0.154711	0.6970568
350	0.8844213	0.1783258	0.151977	0.6880667
360	0.9919795	0.1240017	0.1654883	0.7699288
370	1.0815135	0.1545047	0.1560477	0.8860993
380	1.1850569	0.2147371	0.1676898	0.9052384
390	1.1983458	0.1711026	0.1338022	0.95578
400	1.139999	0.2423166	0.1731809	0.9308562
410	1.1593674	0.2178299	0.1928447	0.9079698
420	1.1361006	0.215066	0.1525027	1.0053351
430	1.1818097	0.2215249	0.1557586	0.9998945
440	1.1572409	0.2191342	0.2094951	0.8728569
450	1.3000827	0.2136445	0.1439444	0.7870201
460	1.1757259	0.2268842	0.1523866	0.8923632
470	1.1538306	0.2003983	0.1647752	0.8864713
480	1.2461356	0.2682391	0.2139143	0.8837863
490	1.0957742	0.2494318	0.1391051	0.8784311
500	1.2354739	0.2851869	0.2184017	0.8936012

**Table S4.** Root mean square fluctuation of backbone (nm)

<b>Amino acid</b>	<b>Geniposide</b>	<b>6a -hydroxygeniposide</b>	<b>6b -hydroxygeniposide</b>	<b>PNG</b>
4	0.1263	0.1088	0.1189	0.2659
5	0.1567	0.1252	0.2073	0.2108
6	0.162	0.1408	0.2429	0.1671
7	0.1156	0.066	0.1385	0.0776
8	0.0824	0.0607	0.0815	0.0747
9	0.0838	0.0716	0.0684	0.0852
10	0.0754	0.0537	0.0614	0.0641
11	0.0721	0.0575	0.059	0.07
12	0.0686	0.0609	0.0577	0.0689
13	0.0631	0.0524	0.0472	0.0576
14	0.0643	0.0458	0.0476	0.0475
15	0.0581	0.0388	0.0414	0.039
16	0.0477	0.0394	0.0403	0.0415
17	0.0476	0.0466	0.0389	0.0482
18	0.0513	0.0447	0.0462	0.0504
19	0.0385	0.0363	0.0333	0.0383
20	0.0378	0.0336	0.0314	0.0335
21	0.0315	0.0293	0.03	0.031
22	0.0324	0.0274	0.0268	0.0313
23	0.0355	0.0316	0.0325	0.0366
24	0.0401	0.0347	0.0371	0.0407
25	0.0522	0.0342	0.0379	0.0384
26	0.0408	0.0398	0.0373	0.0473
27	0.0351	0.0362	0.0323	0.0448
28	0.0366	0.0374	0.0336	0.0444
29	0.0419	0.0417	0.0368	0.0467
30	0.0495	0.049	0.0458	0.0485
31	0.0672	0.0585	0.0575	0.0572
32	0.1191	0.0871	0.081	0.0681
33	0.1093	0.0704	0.064	0.0698
34	0.0952	0.0752	0.0658	0.0754
35	0.0689	0.0626	0.0528	0.0594
36	0.0642	0.0514	0.0493	0.0554
37	0.0597	0.0438	0.045	0.0628
38	0.0588	0.0477	0.0463	0.0582
39	0.0575	0.0442	0.0461	0.0525
40	0.0621	0.0509	0.0516	0.0582
41	0.0547	0.051	0.046	0.0547
42	0.0477	0.047	0.042	0.0454
43	0.0518	0.0479	0.0456	0.0516
44	0.0571	0.054	0.0518	0.0596
45	0.0482	0.0466	0.0444	0.0521
46	0.045	0.0478	0.0421	0.0527
47	0.0445	0.0518	0.0568	0.0669
48	0.0409	0.0506	0.0525	0.0632
49	0.0382	0.0417	0.0369	0.0447
50	0.0433	0.047	0.0416	0.0536

51	0.0485	0.0508	0.0541	0.0641
52	0.0435	0.042	0.0508	0.0528
53	0.0475	0.0502	0.0507	0.0565
54	0.0414	0.0372	0.0391	0.0407
55	0.0397	0.04	0.0386	0.039
56	0.0373	0.0393	0.0403	0.0368
57	0.0354	0.0383	0.0362	0.0381
58	0.0332	0.0316	0.0329	0.0383
59	0.0328	0.0325	0.0313	0.042
60	0.0349	0.0327	0.0286	0.0398
61	0.0339	0.0347	0.0356	0.036
62	0.0346	0.0351	0.0382	0.0378
63	0.0374	0.0361	0.039	0.0354
64	0.037	0.0369	0.0409	0.0302
65	0.0469	0.0409	0.045	0.0428
66	0.0428	0.0455	0.0394	0.043
67	0.0436	0.0422	0.0382	0.0435
68	0.0429	0.0381	0.0402	0.0429
69	0.0392	0.0333	0.0408	0.0416
70	0.0432	0.0429	0.0422	0.0472
71	0.0432	0.048	0.045	0.0499
72	0.0443	0.0375	0.0394	0.0363
73	0.037	0.0306	0.0346	0.032
74	0.036	0.0327	0.036	0.0347
75	0.0356	0.0365	0.0349	0.0366
76	0.0359	0.0373	0.0431	0.0359
77	0.0351	0.0358	0.042	0.0337
78	0.0357	0.0396	0.0503	0.0369
79	0.0418	0.0423	0.0462	0.0403
80	0.0432	0.0372	0.0427	0.0394
81	0.0437	0.0359	0.0403	0.037
82	0.0546	0.048	0.0532	0.0464
83	0.0532	0.0489	0.0522	0.0525
84	0.0466	0.0457	0.0458	0.049
85	0.051	0.0532	0.0532	0.0535
86	0.0533	0.0472	0.052	0.0515
87	0.0499	0.0475	0.0554	0.053
88	0.0502	0.0489	0.0549	0.0577
89	0.0477	0.049	0.0555	0.0558
90	0.0464	0.0446	0.0469	0.0501
91	0.0524	0.0483	0.0464	0.0492
92	0.0538	0.0496	0.0537	0.0543
93	0.0473	0.0438	0.0517	0.0551
94	0.0457	0.0479	0.0465	0.0528
95	0.0486	0.0553	0.0483	0.0533
96	0.0463	0.0532	0.05	0.0573
97	0.0409	0.0469	0.0447	0.0538
98	0.0439	0.0541	0.0495	0.0615
99	0.0512	0.0591	0.0508	0.0686

100	0.0575	0.0583	0.0639	0.0791
101	0.0596	0.064	0.0761	0.0887
102	0.0429	0.0428	0.0498	0.0519
103	0.039	0.0374	0.0497	0.0382
104	0.0409	0.0376	0.0391	0.0377
105	0.0456	0.0373	0.0358	0.0386
106	0.0555	0.033	0.0436	0.0358
107	0.0495	0.0313	0.037	0.0414
108	0.0567	0.0367	0.0426	0.0735
109	0.0448	0.0301	0.0395	0.0439
110	0.0356	0.0351	0.0505	0.0407
111	0.0396	0.0368	0.0405	0.0475
112	0.0514	0.0338	0.043	0.0526
113	0.0504	0.0377	0.0447	0.0525
114	0.0407	0.0335	0.0351	0.0374
115	0.0432	0.0374	0.0389	0.0396
116	0.0448	0.0416	0.0412	0.043
117	0.0436	0.0363	0.0404	0.0392
118	0.0473	0.0482	0.05	0.0497
119	0.0473	0.0435	0.0422	0.0435
120	0.0438	0.0422	0.0363	0.039
121	0.0473	0.048	0.0449	0.0487
122	0.0506	0.0466	0.0458	0.0485
123	0.0508	0.0433	0.0395	0.0473
124	0.0541	0.0435	0.0431	0.051
125	0.063	0.0571	0.054	0.0673
126	0.061	0.0645	0.0491	0.0768
127	0.0729	0.0777	0.0602	0.11
128	0.0857	0.0821	0.0642	0.124
129	0.0771	0.0694	0.0574	0.0959
130	0.0906	0.0732	0.0774	0.0913
131	0.0612	0.0519	0.051	0.0518
132	0.0588	0.0484	0.0489	0.0516
133	0.0515	0.0438	0.0508	0.0512
134	0.0468	0.0426	0.0414	0.0356
135	0.0443	0.0404	0.0359	0.0383
136	0.052	0.0412	0.0364	0.0379
137	0.0588	0.0467	0.0386	0.0414
138	0.0651	0.0487	0.0487	0.0465
139	0.0807	0.0594	0.0609	0.0556
140	0.0878	0.0616	0.0657	0.0628
141	0.1159	0.0728	0.075	0.0837
142	0.1299	0.1044	0.0937	0.1068
143	0.1459	0.1238	0.1144	0.115
144	0.1584	0.1539	0.1386	0.1311
145	0.1927	0.2266	0.1779	0.1852
146	0.2013	0.2082	0.1825	0.1741
147	0.1835	0.1598	0.1655	0.1528
148	0.1446	0.1168	0.12	0.113

149	0.1129	0.0849	0.0864	0.0845
150	0.097	0.0741	0.0783	0.0774
151	0.0871	0.0599	0.0606	0.0649
152	0.0845	0.0532	0.0577	0.0661
153	0.0805	0.0466	0.0496	0.0663
154	0.0798	0.0432	0.0441	0.0577
155	0.0697	0.0393	0.04	0.0523
156	0.0663	0.04	0.0417	0.0487
157	0.0572	0.0356	0.0425	0.0425
158	0.0629	0.0441	0.0478	0.0462
159	0.065	0.0526	0.0603	0.0546
160	0.0681	0.0522	0.0626	0.0545
161	0.0706	0.0509	0.0534	0.06
162	0.0646	0.0438	0.0494	0.0547
163	0.0556	0.0364	0.043	0.0487
164	0.0562	0.0401	0.0471	0.0463
165	0.051	0.041	0.0454	0.0476
166	0.0544	0.0451	0.0499	0.0519
167	0.055	0.0487	0.0497	0.0542
168	0.0682	0.0646	0.0673	0.0678
169	0.0653	0.0635	0.0657	0.0627
170	0.0665	0.0559	0.058	0.0564
171	0.0695	0.0569	0.0593	0.0554
172	0.0628	0.048	0.0506	0.0481
173	0.055	0.038	0.0425	0.0427
174	0.0467	0.0349	0.0348	0.0373
175	0.0421	0.0317	0.0324	0.0378
176	0.0423	0.0359	0.0368	0.0381
177	0.0471	0.037	0.0422	0.0422
178	0.047	0.039	0.0456	0.0424
179	0.0452	0.041	0.0443	0.0486
180	0.0427	0.0412	0.0422	0.0462
181	0.0408	0.0389	0.0354	0.0416
182	0.0381	0.0326	0.0327	0.0376
183	0.0383	0.0356	0.0308	0.0358
184	0.0387	0.0341	0.0343	0.0394
185	0.0442	0.0352	0.0373	0.036
186	0.0473	0.0395	0.0382	0.0405
187	0.0497	0.0394	0.0583	0.0433
188	0.055	0.0497	0.0717	0.0476
189	0.0546	0.0453	0.0527	0.0475
190	0.0595	0.054	0.0519	0.0509
191	0.0599	0.0497	0.0531	0.0506
192	0.0518	0.0435	0.0462	0.0457
193	0.0467	0.0397	0.0508	0.0457
194	0.0515	0.0406	0.0585	0.0466
195	0.0498	0.0429	0.0509	0.0461
196	0.0424	0.0429	0.0464	0.0483
197	0.0402	0.0424	0.044	0.0438

198	0.0469	0.0421	0.0472	0.043
199	0.0484	0.0399	0.0471	0.0445
200	0.0601	0.0558	0.046	0.0539
201	0.0475	0.0371	0.042	0.0452
202	0.0477	0.0422	0.0447	0.0432
203	0.0462	0.0392	0.0436	0.0416
204	0.0409	0.0381	0.0387	0.0399
205	0.0423	0.0406	0.0377	0.0353
206	0.0485	0.043	0.0465	0.0418
207	0.0535	0.0473	0.0477	0.0471
208	0.0533	0.0546	0.0517	0.0521
209	0.0424	0.0378	0.0358	0.0384
210	0.0413	0.0386	0.0347	0.0315
211	0.0455	0.04	0.0395	0.0399
212	0.0407	0.0356	0.0356	0.0379
213	0.042	0.0335	0.0331	0.0366
214	0.0396	0.0373	0.0418	0.0395
215	0.0375	0.0323	0.0396	0.0361
216	0.0393	0.0353	0.0378	0.0468
217	0.0405	0.037	0.0407	0.0522
218	0.042	0.0357	0.0374	0.048
219	0.0437	0.0362	0.0357	0.0604
220	0.0447	0.0403	0.0435	0.0714
221	0.0458	0.0406	0.0407	0.0691
222	0.0527	0.05	0.0471	0.0701
223	0.0656	0.0624	0.0561	0.0752
224	0.0792	0.0822	0.0685	0.0814
225	0.0835	0.076	0.0659	0.0766
226	0.073	0.057	0.0562	0.065
227	0.0822	0.0758	0.0606	0.0705
228	0.0905	0.0664	0.0534	0.063
229	0.1027	0.0674	0.0529	0.0775
230	0.1386	0.0866	0.0658	0.1106
231	0.1519	0.0825	0.0601	0.1154
232	0.1638	0.0992	0.0674	0.15
233	0.142	0.1212	0.0686	0.1242
234	0.1443	0.1441	0.0775	0.1311
235	0.1392	0.1499	0.0832	0.1125
236	0.1246	0.0872	0.0978	0.0924
237	0.1128	0.0638	0.0845	0.079
238	0.0863	0.0469	0.0478	0.0578
239	0.0865	0.0465	0.0452	0.0618
240	0.0914	0.0528	0.0547	0.0695
241	0.0756	0.0609	0.0472	0.0733
242	0.0912	0.0659	0.0517	0.0674
243	0.0921	0.0732	0.0676	0.0724
244	0.0689	0.0532	0.0571	0.0682
245	0.066	0.0502	0.0501	0.0712
246	0.0656	0.0474	0.0478	0.0749

247	0.0752	0.0491	0.0412	0.072
248	0.0784	0.0523	0.0519	0.0842
249	0.0801	0.0608	0.0499	0.0895
250	0.0607	0.0452	0.0419	0.0702
251	0.0513	0.0379	0.0406	0.0681
252	0.0529	0.0436	0.0411	0.059
253	0.0532	0.0445	0.0465	0.0672
254	0.0468	0.0386	0.0478	0.0595
255	0.0437	0.0362	0.0408	0.0523
256	0.0395	0.0363	0.039	0.0593
257	0.0371	0.0379	0.0411	0.0516
258	0.0377	0.0382	0.0387	0.0453
259	0.0418	0.0423	0.0386	0.0505
260	0.0431	0.0445	0.0432	0.0559
261	0.0443	0.0405	0.0381	0.0467
262	0.0523	0.0454	0.0388	0.0503
263	0.0644	0.0559	0.0459	0.0601
264	0.0637	0.0529	0.0473	0.0629
265	0.0557	0.0459	0.0443	0.0526
266	0.0611	0.0514	0.0466	0.0507
267	0.0784	0.093	0.0553	0.0699
268	0.0784	0.082	0.0637	0.0672
269	0.0765	0.0801	0.0657	0.0686
270	0.0603	0.0594	0.0546	0.0478
271	0.058	0.0585	0.0495	0.0446
272	0.0502	0.0454	0.04	0.0404
273	0.0456	0.046	0.0391	0.0402
274	0.041	0.0359	0.0378	0.0444
275	0.0421	0.0375	0.0363	0.0395
276	0.0422	0.0453	0.0495	0.056
277	0.0455	0.0362	0.0421	0.0423
278	0.0547	0.0454	0.0423	0.0513
279	0.0557	0.0514	0.0439	0.0543
280	0.0731	0.047	0.0462	0.0659
281	0.0599	0.0511	0.0485	0.0702
282	0.0578	0.0539	0.0464	0.0689
283	0.0547	0.0496	0.0443	0.0627
284	0.0582	0.0494	0.0448	0.0676
285	0.0505	0.0441	0.0407	0.0654
286	0.0402	0.0385	0.0364	0.0549
287	0.0404	0.0386	0.0378	0.0581
288	0.0454	0.045	0.0427	0.065
289	0.0409	0.0393	0.0368	0.0515
290	0.0367	0.0345	0.0349	0.0435
291	0.0434	0.0423	0.0375	0.0546
292	0.0615	0.0474	0.0519	0.0627
293	0.0597	0.0515	0.0584	0.0705
294	0.062	0.0453	0.0484	0.0615
295	0.0844	0.0495	0.0635	0.0605

296	0.0522	0.0407	0.0458	0.0454
297	0.0376	0.0331	0.0365	0.039
298	0.0369	0.0353	0.0365	0.0355
299	0.0379	0.0353	0.0372	0.0357
300	0.0368	0.0357	0.0361	0.0348
301	0.0388	0.0371	0.0399	0.0363
302	0.0425	0.0455	0.0412	0.0463
303	0.0415	0.0507	0.0507	0.0467
304	0.045	0.0571	0.0592	0.0554
305	0.0438	0.0552	0.0608	0.0672
306	0.046	0.0568	0.0542	0.0649
307	0.0613	0.0533	0.0537	0.0964
308	0.0619	0.0473	0.0601	0.0635
309	0.0732	0.0585	0.0547	0.0754
310	0.0781	0.0577	0.0571	0.0716
311	0.0961	0.0535	0.0692	0.0791
312	0.1142	0.0724	0.0754	0.1023
313	0.1166	0.0676	0.0733	0.0968
314	0.1071	0.0603	0.0569	0.077
315	0.0838	0.0522	0.045	0.0707
316	0.0775	0.0473	0.0475	0.0709
317	0.0804	0.0494	0.0544	0.0715
318	0.0799	0.0498	0.0536	0.0684
319	0.0865	0.0579	0.0653	0.077
320	0.0949	0.076	0.0932	0.0882
321	0.0779	0.0805	0.0909	0.0766
322	0.068	0.0841	0.1045	0.0706
323	0.0553	0.0634	0.0863	0.0661
324	0.0516	0.0539	0.0682	0.0637
325	0.0557	0.0652	0.0741	0.0592
326	0.0506	0.0533	0.0632	0.0538
327	0.048	0.0521	0.054	0.0522
328	0.0566	0.0569	0.0615	0.0599
329	0.0609	0.0537	0.0572	0.06
330	0.064	0.0554	0.0576	0.0547
331	0.072	0.0569	0.0601	0.0541
332	0.0645	0.0537	0.0631	0.0544
333	0.0642	0.0534	0.0594	0.0576
334	0.0727	0.0642	0.0545	0.058
335	0.0709	0.0552	0.0505	0.0609
336	0.0544	0.0423	0.0485	0.0594
337	0.0533	0.0411	0.0492	0.0582
338	0.0736	0.0682	0.062	0.0915
339	0.0777	0.0693	0.0674	0.0923
340	0.061	0.0543	0.0542	0.0741
341	0.0508	0.0418	0.0459	0.0618
342	0.0431	0.0355	0.039	0.048
343	0.0408	0.0338	0.0359	0.0394
344	0.0408	0.0367	0.0395	0.041

345	0.0363	0.0355	0.0378	0.036
346	0.0344	0.0321	0.0338	0.0331
347	0.038	0.0363	0.0331	0.0357
348	0.0323	0.034	0.0335	0.0343
349	0.0312	0.0335	0.0309	0.0353
350	0.0327	0.0329	0.0345	0.0346
351	0.0351	0.0362	0.0385	0.0376
352	0.0377	0.0367	0.0372	0.042
353	0.0376	0.0396	0.0482	0.0475
354	0.0357	0.0424	0.0473	0.0418
355	0.0349	0.0323	0.0348	0.0377
356	0.0394	0.0351	0.0378	0.04
357	0.0417	0.0345	0.0361	0.0398
358	0.0436	0.0346	0.0359	0.0418
359	0.0416	0.0365	0.0439	0.041
360	0.0447	0.0447	0.0483	0.0447
361	0.0481	0.0461	0.0517	0.0464
362	0.0489	0.0534	0.047	0.0456
363	0.0463	0.0469	0.0459	0.0436
364	0.0525	0.0587	0.0546	0.0546
365	0.0613	0.0643	0.0607	0.0578
366	0.0586	0.0787	0.0682	0.0582
367	0.0471	0.0529	0.0489	0.0436
368	0.0453	0.0402	0.0416	0.0415
369	0.0433	0.0434	0.0412	0.0402
370	0.0434	0.0391	0.0376	0.0375
371	0.0433	0.037	0.0383	0.0392
372	0.0426	0.0409	0.0391	0.0374
373	0.0398	0.036	0.037	0.0334
374	0.0382	0.0344	0.032	0.0326
375	0.0387	0.0375	0.0381	0.0358
376	0.0404	0.0355	0.0415	0.0398
377	0.0399	0.0356	0.0356	0.0394
378	0.0395	0.0413	0.0371	0.0442
379	0.0415	0.0431	0.0417	0.048
380	0.0418	0.043	0.0433	0.0554
381	0.0396	0.0466	0.0431	0.0592
382	0.0393	0.0444	0.0427	0.0433
383	0.0379	0.0342	0.0329	0.036
384	0.0368	0.0338	0.0369	0.0409
385	0.0343	0.0286	0.0332	0.0319
386	0.0307	0.0286	0.0327	0.0308
387	0.0263	0.0312	0.0319	0.0324
388	0.0298	0.0307	0.0319	0.0323
389	0.0298	0.0306	0.0297	0.0332
390	0.0327	0.0338	0.0305	0.0353
391	0.037	0.0463	0.0396	0.0488
392	0.0313	0.0336	0.0346	0.0374
393	0.0343	0.035	0.0359	0.0408

394	0.0367	0.0392	0.0377	0.0403
395	0.0388	0.0397	0.0468	0.0409
396	0.0357	0.0357	0.04	0.0355
397	0.038	0.0356	0.0416	0.0383
398	0.0389	0.0385	0.0397	0.0402
399	0.0413	0.0533	0.0493	0.0432
400	0.0558	0.0777	0.051	0.058
401	0.0778	0.122	0.0672	0.0768
402	0.0667	0.0831	0.0554	0.0551
403	0.0713	0.0736	0.0677	0.0635
404	0.0717	0.0674	0.0647	0.06
405	0.0719	0.0778	0.069	0.0669
406	0.0597	0.0668	0.054	0.0549
407	0.0569	0.0484	0.0445	0.0452
408	0.0578	0.0465	0.0495	0.0465
409	0.056	0.0362	0.0429	0.0413
410	0.0587	0.0395	0.0449	0.0433
411	0.0705	0.0404	0.0446	0.0434
412	0.0609	0.0381	0.042	0.0396
413	0.066	0.0484	0.0508	0.0472
414	0.0846	0.0481	0.0469	0.0498
415	0.0948	0.0404	0.045	0.0471
416	0.0961	0.0461	0.0495	0.048
417	0.108	0.0533	0.0538	0.0522
418	0.1303	0.049	0.0519	0.0542
419	0.1395	0.0495	0.0565	0.0536
420	0.1512	0.0562	0.0646	0.0604
421	0.1696	0.0621	0.0706	0.0672
422	0.1921	0.064	0.0819	0.0691
423	0.1976	0.0648	0.0821	0.0641
424	0.2025	0.0697	0.0874	0.0679
425	0.2089	0.0831	0.0893	0.0748
426	0.1946	0.0896	0.0972	0.0896
427	0.1785	0.0655	0.084	0.0802
428	0.1626	0.0626	0.0888	0.087
429	0.1469	0.0587	0.0727	0.0739
430	0.1347	0.0498	0.0568	0.0623
431	0.1262	0.0499	0.0718	0.0725
432	0.1108	0.0459	0.0728	0.0708
433	0.0943	0.0415	0.0523	0.053
434	0.093	0.0453	0.0618	0.0532
435	0.0902	0.0439	0.0732	0.0675
436	0.0673	0.0401	0.0552	0.0626
437	0.0549	0.0414	0.0489	0.053
438	0.0536	0.0488	0.0587	0.0559
439	0.0465	0.0466	0.0506	0.0443
440	0.0429	0.0401	0.0412	0.0447
441	0.0381	0.0383	0.0343	0.0389
442	0.0358	0.0385	0.0333	0.0376

443	0.0354	0.0338	0.0346	0.0395
444	0.037	0.0378	0.0369	0.0395
445	0.0367	0.0453	0.0409	0.0498
446	0.0341	0.0362	0.0392	0.0467
447	0.0363	0.0421	0.0418	0.0527
448	0.0369	0.0356	0.0367	0.0458
449	0.037	0.0352	0.036	0.0432
450	0.0382	0.0445	0.0401	0.0451
451	0.0461	0.0477	0.0434	0.046
452	0.0513	0.0513	0.0486	0.0501
453	0.0592	0.0577	0.052	0.0544
454	0.0714	0.0722	0.0663	0.0765
455	0.0814	0.0679	0.0634	0.0703
456	0.0785	0.0748	0.0677	0.0814
457	0.0593	0.0574	0.0537	0.0624
458	0.054	0.0533	0.0509	0.0578
459	0.0574	0.0592	0.0538	0.0661
460	0.0527	0.0502	0.0464	0.0579
461	0.0606	0.0539	0.0511	0.0598
462	0.078	0.0663	0.0684	0.0704
463	0.0977	0.0921	0.0846	0.0873
464	0.1065	0.0977	0.1013	0.0988
465	0.0813	0.0732	0.0676	0.0626
466	0.0652	0.0682	0.0585	0.0549
467	0.0497	0.0553	0.0454	0.0501
468	0.0428	0.0533	0.0456	0.055
469	0.0398	0.0463	0.0434	0.046
470	0.0411	0.0485	0.0423	0.0534
471	0.0483	0.0487	0.0461	0.063
472	0.0452	0.053	0.044	0.0481
473	0.0467	0.0644	0.048	0.0499
474	0.0444	0.0559	0.0412	0.0429
475	0.0503	0.0512	0.0421	0.0463
476	0.0657	0.0632	0.0531	0.0582
477	0.0647	0.0669	0.0574	0.0582
478	0.0593	0.0672	0.0614	0.0547
479	0.0422	0.0452	0.0424	0.0413
480	0.0368	0.0399	0.0379	0.038
481	0.0404	0.0428	0.0413	0.0377
482	0.0476	0.0468	0.0535	0.0422
483	0.0528	0.049	0.0534	0.0487
484	0.0509	0.0439	0.0456	0.0411
485	0.0631	0.0679	0.0571	0.0508
486	0.08	0.0978	0.0694	0.0742
487	0.0785	0.1048	0.0902	0.0764
488	0.0854	0.1204	0.1202	0.0926
489	0.0695	0.0992	0.1066	0.0877
490	0.0504	0.0489	0.0475	0.0458
491	0.0401	0.0386	0.0395	0.0357

492	0.0397	0.0385	0.0376	0.0377
493	0.0434	0.0462	0.0422	0.0414
494	0.0405	0.0424	0.0401	0.035
495	0.0401	0.0405	0.0403	0.0373
496	0.0464	0.0465	0.0437	0.0393
497	0.0489	0.042	0.044	0.0413
498	0.0457	0.0401	0.0395	0.0412
499	0.0459	0.0404	0.0422	0.0436
500	0.0477	0.0416	0.0443	0.0492
501	0.0456	0.04	0.0406	0.0445
502	0.0496	0.0448	0.0382	0.0432
503	0.0502	0.0417	0.0461	0.0458
504	0.0595	0.0498	0.0474	0.0524
505	0.0539	0.0469	0.0448	0.0549
506	0.0516	0.0425	0.0379	0.0511
507	0.0531	0.0437	0.0406	0.0532
508	0.0582	0.0449	0.0439	0.0599
509	0.054	0.042	0.0412	0.0478
510	0.0533	0.0403	0.0362	0.0453
511	0.0577	0.0413	0.0372	0.0532
512	0.0555	0.0451	0.045	0.053
513	0.055	0.0444	0.0446	0.0543
514	0.06	0.0516	0.0577	0.0595
515	0.0611	0.0474	0.0477	0.0499
516	0.0558	0.0484	0.051	0.0515
517	0.0639	0.0534	0.0537	0.054
518	0.053	0.0502	0.0553	0.0496
519	0.0592	0.0642	0.0753	0.0601
520	0.0559	0.073	0.0721	0.0643
521	0.0562	0.0785	0.0905	0.075
522	0.0547	0.066	0.0794	0.0702
523	0.0543	0.079	0.0798	0.0748
524	0.0493	0.0691	0.07	0.0819
525	0.0448	0.057	0.0548	0.0655
526	0.0412	0.0498	0.0494	0.0509
527	0.0409	0.0396	0.0416	0.0421
528	0.0443	0.0382	0.0427	0.0411
529	0.0448	0.0409	0.0427	0.0477
530	0.0464	0.0454	0.0397	0.0448
531	0.0548	0.0514	0.0525	0.0571
532	0.0628	0.048	0.0484	0.058
533	0.0751	0.0699	0.0647	0.0824
534	0.0884	0.0954	0.0791	0.0967
535	0.0703	0.0649	0.0554	0.0692
536	0.058	0.0541	0.0477	0.0576
537	0.0483	0.0464	0.0414	0.0499
538	0.0423	0.0431	0.0426	0.0459
539	0.0399	0.0393	0.0437	0.0452
540	0.0403	0.0416	0.0454	0.0447

541	0.0396	0.0384	0.0424	0.0418
542	0.0433	0.045	0.0481	0.0492
543	0.0532	0.0532	0.0556	0.0561
544	0.0594	0.0595	0.061	0.0677
545	0.0673	0.0661	0.0687	0.0737
546	0.0692	0.084	0.0787	0.0723
547	0.0605	0.0744	0.073	0.0691
548	0.0569	0.0697	0.0699	0.0674
549	0.058	0.0722	0.0688	0.0646
550	0.057	0.0716	0.065	0.0631
551	0.0619	0.0908	0.067	0.0729
552	0.0635	0.0842	0.0695	0.074
553	0.0761	0.0854	0.0892	0.0922
554	0.0973	0.101	0.0977	0.1002
555	0.0849	0.0875	0.0785	0.0805
556	0.1128	0.0928	0.0903	0.098
557	0.103	0.1021	0.0978	0.1072
558	0.0866	0.0841	0.0861	0.0935
559	0.0636	0.0674	0.0604	0.0669
560	0.0553	0.0683	0.0535	0.0631
561	0.0513	0.0555	0.0489	0.0546
562	0.05	0.0564	0.0487	0.0522
563	0.0423	0.0486	0.0438	0.0497
564	0.0439	0.0462	0.0483	0.0469
565	0.0437	0.0453	0.0436	0.0435
566	0.0541	0.0582	0.0556	0.0757
567	0.0717	0.0794	0.0795	0.1229
568	0.0782	0.0884	0.1033	0.134
569	0.084	0.1152	0.1362	0.1453
570	0.0755	0.1083	0.1179	0.1215
571	0.0615	0.0775	0.0709	0.0772
572	0.0658	0.087	0.0811	0.0847
573	0.0676	0.0853	0.0755	0.0817
574	0.0689	0.0834	0.0775	0.0771
575	0.0628	0.0771	0.078	0.0738
576	0.0615	0.0731	0.0773	0.0689
577	0.0596	0.0683	0.0718	0.0646
578	0.0561	0.0561	0.0572	0.0557
579	0.0569	0.0584	0.0555	0.0604
580	0.0562	0.0577	0.0572	0.063
581	0.0504	0.0464	0.046	0.0534
582	0.0442	0.0462	0.0442	0.0447
583	0.0416	0.0434	0.0426	0.0455
584	0.0388	0.0437	0.0418	0.0437
585	0.0396	0.0409	0.0399	0.0425
586	0.0464	0.0448	0.0458	0.0444
587	0.0532	0.0501	0.0451	0.0557
588	0.0678	0.0613	0.058	0.0697
589	0.0982	0.0888	0.0874	0.1

**Table S5.** Root mean square fluctuation of side chain (nm)

<b>Amino acid</b>	<b>Geniposide</b>	<b>6a -hydroxygeniposide</b>	<b>6b -hydroxygeniposide</b>	<b>PNG</b>
4	0.1552	0.1177	0.1628	0.3026
5	0.2245	0.1927	0.3191	0.2907
6	0.1968	0.1813	0.2872	0.2244
7	0.1569	0.1159	0.2191	0.0939
8	0.0988	0.078	0.1169	0.0968
9	0.1233	0.0889	0.0996	0.1108
10	0.1231	0.0575	0.0713	0.0738
11	0.1235	0.1143	0.0947	0.1587
12	0.0922	0.0804	0.0714	0.0919
13	0.0794	0.0886	0.0852	0.0841
14	0.1185	0.0521	0.0531	0.0485
15	0.0676	0.0485	0.0454	0.0528
16	0.059	0.0535	0.0493	0.0605
17	0.0946	0.0796	0.0545	0.0923
18	0.0733	0.0546	0.0555	0.0629
19	0.0646	0.0629	0.0563	0.0729
20	0.0611	0.0508	0.054	0.061
21	0.0373	0.0434	0.0424	0.0436
22	0.0398	0.0365	0.0348	0.038
23	0.0603	0.0528	0.0645	0.064
24	0.0698	0.0485	0.0555	0.1184
25	0.0752	0.0459	0.0451	0.0546
26	0.0572	0.049	0.047	0.0584
27	0.0408	0.0432	0.0441	0.0561
28	0.0495	0.051	0.0499	0.0594
29	0.0776	0.0554	0.0635	0.0868
30	0.0666	0.0691	0.0591	0.0616
31	0.0885	0.067	0.0696	0.0857
32	0.17	0.1691	0.1261	0.0993
33	0.152	0.1055	0.0865	0.0997
34	0.1301	0.1368	0.119	0.1453
36	0.0738	0.0709	0.0711	0.0678
38	0.1115	0.0645	0.0928	0.0724
39	0.0886	0.0792	0.0616	0.0809
40	0.1318	0.1134	0.1269	0.1003
42	0.0549	0.0576	0.0518	0.1127
43	0.0577	0.054	0.0549	0.1339
44	0.0823	0.0723	0.0674	0.0611
45	0.0673	0.0639	0.0591	0.0681
46	0.0603	0.063	0.0567	0.0739

47	0.1148	0.1215	0.1179	0.0786
48	0.0443	0.0606	0.0811	0.0805
49	0.0465	0.0515	0.0457	0.0735
50	0.0723	0.0911	0.083	0.1282
51	0.118	0.1363	0.1303	0.0835
52	0.0526	0.0641	0.0712	0.0621
54	0.0461	0.0472	0.0519	0.1042
55	0.108	0.1034	0.0576	0.1817
56	0.0486	0.0499	0.0543	0.0801
57	0.0482	0.1229	0.1139	0.0701
58	0.0433	0.0414	0.0421	0.066
59	0.0614	0.0466	0.0641	0.0597
60	0.0616	0.0476	0.0488	0.0524
61	0.0446	0.042	0.0406	0.0617
62	0.0526	0.0506	0.0568	0.0469
63	0.0542	0.0529	0.0637	0.0626
64	0.0559	0.0505	0.058	0.0563
65	0.0485	0.0421	0.084	0.0444
66	0.0513	0.0507	0.0513	0.0566
67	0.0723	0.0693	0.0683	0.0561
68	0.0579	0.0572	0.0584	0.0532
69	0.0494	0.0458	0.0647	0.0492
70	0.0754	0.0711	0.0694	0.0567
72	0.0514	0.0519	0.0463	0.0947
73	0.0405	0.0391	0.0379	0.0579
74	0.0449	0.0405	0.0461	0.0509
75	0.0426	0.0459	0.0398	0.0784
76	0.0729	0.046	0.0599	0.0623
77	0.0566	0.0444	0.083	0.0649
78	0.0589	0.0579	0.0934	0.0384
79	0.1377	0.0897	0.0704	0.0469
80	0.0496	0.0434	0.052	0.0563
81	0.0587	0.0492	0.0509	0.0571
82	0.0713	0.0655	0.0685	0.0548
83	0.0838	0.069	0.0717	0.0585
84	0.0473	0.0448	0.0473	0.0884
86	0.0658	0.0571	0.0608	0.0611
87	0.0662	0.0605	0.07	0.0556
88	0.177	0.1312	0.1456	0.06
89	0.0542	0.0579	0.0688	0.0892
90	0.0578	0.0581	0.0519	0.0535
91	0.0722	0.058	0.0608	0.0645
92	0.0607	0.0559	0.0637	0.0689

93	0.0616	0.0693	0.0674	0.0805
94	0.0556	0.0591	0.0534	0.1408
95	0.1374	0.1122	0.1067	0.0645
96	0.162	0.0767	0.1159	0.0605
97	0.045	0.0519	0.0523	0.0605
98	0.0592	0.0819	0.0683	0.0743
99	0.1396	0.1323	0.1076	0.106
100	0.0885	0.0716	0.086	0.0656
102	0.0567	0.0565	0.0852	0.1034
103	0.0661	0.0555	0.0949	0.1267
104	0.0771	0.0641	0.0607	0.061
105	0.0549	0.0521	0.0499	0.0837
106	0.0862	0.0431	0.0539	0.1219
107	0.0687	0.0402	0.0476	0.1087
108	0.0911	0.0612	0.0725	0.0999
109	0.065	0.0477	0.0574	0.0993
110	0.0559	0.0472	0.0984	0.092
111	0.0564	0.0563	0.059	0.0655
112	0.0729	0.0726	0.1	0.0571
113	0.0986	0.0514	0.0969	0.0476
114	0.0421	0.0375	0.0402	0.0553
115	0.0588	0.0538	0.051	0.1152
116	0.093	0.1168	0.117	0.0864
117	0.0494	0.0426	0.0519	0.0609
118	0.1396	0.1022	0.0804	0.0882
119	0.0663	0.0541	0.0657	0.1687
120	0.0498	0.043	0.0414	0.0916
121	0.0883	0.0719	0.0747	0.044
122	0.0937	0.0999	0.0951	0.0519
123	0.0527	0.0447	0.0424	0.1206
124	0.0627	0.0588	0.0554	0.0462
125	0.0952	0.072	0.0667	0.1105
126	0.0767	0.0903	0.0602	0.0613
127	0.107	0.098	0.0983	0.045
128	0.1079	0.1114	0.0852	0.1142
129	0.0992	0.0647	0.063	0.097
130	0.1195	0.0932	0.0955	0.0441
131	0.0646	0.0548	0.0568	0.0637
132	0.0621	0.0494	0.0471	0.0767
133	0.1466	0.0716	0.1164	0.0992
134	0.0588	0.0504	0.0517	0.1862
135	0.0482	0.0465	0.0462	0.1681
136	0.0637	0.0552	0.054	0.0997

137	0.0562	0.0467	0.0461	0.1248
138	0.0854	0.068	0.0671	0.0618
139	0.1129	0.0827	0.0841	0.0532
140	0.0901	0.07	0.0773	0.1067
141	0.1366	0.1001	0.1021	0.0452
143	0.1796	0.1442	0.1338	0.0444
144	0.1575	0.1604	0.1624	0.0675
145	0.2121	0.2596	0.2001	0.0475
146	0.248	0.2633	0.2256	0.0812
148	0.2029	0.1834	0.1872	0.0811
149	0.1281	0.0965	0.0954	0.072
150	0.1145	0.0944	0.0969	0.1324
151	0.1002	0.0737	0.071	0.1188
152	0.0832	0.0583	0.0646	0.1431
153	0.0745	0.0537	0.0535	0.1356
154	0.0949	0.0569	0.0538	0.2103
155	0.0714	0.0505	0.0467	0.221
156	0.1016	0.0741	0.0833	0.1615
157	0.0581	0.0413	0.0475	0.1686
158	0.1336	0.0772	0.066	0.0999
159	0.0675	0.0616	0.061	0.0963
162	0.0736	0.0815	0.0771	0.0728
163	0.0607	0.0423	0.0518	0.0725
164	0.0646	0.0458	0.053	0.0831
165	0.0564	0.0498	0.0537	0.0692
166	0.0722	0.0558	0.0668	0.0634
167	0.0582	0.0555	0.0581	0.0859
168	0.1562	0.134	0.1388	0.0478
169	0.1342	0.1072	0.1889	0.0953
170	0.0646	0.0545	0.0619	0.0627
171	0.1784	0.0896	0.1489	0.0606
172	0.1073	0.0936	0.0782	0.0685
173	0.0751	0.0541	0.0579	0.0714
174	0.0598	0.0532	0.0447	0.0688
175	0.0538	0.0426	0.0485	0.0522
176	0.0537	0.0512	0.0531	0.0514
177	0.0624	0.0618	0.0778	0.0632
178	0.1165	0.0986	0.0712	0.062
179	0.0728	0.0588	0.0803	0.1244
180	0.0563	0.0543	0.0667	0.1186
181	0.0502	0.054	0.0442	0.0658
182	0.0575	0.0693	0.0634	0.0937
183	0.05	0.0447	0.0407	0.0909

184	0.0422	0.0432	0.043	0.0562
185	0.0507	0.0446	0.0454	0.0489
186	0.0595	0.0528	0.0548	0.08
187	0.0496	0.0471	0.0951	0.0556
188	0.0923	0.0975	0.0879	0.0815
189	0.0766	0.0712	0.0726	0.0656
190	0.1313	0.1295	0.1165	0.0997
191	0.1063	0.1014	0.0756	0.0569
192	0.0552	0.061	0.0532	0.0567
193	0.0516	0.0486	0.0556	0.0761
194	0.129	0.0988	0.1422	0.0538
195	0.0602	0.0478	0.0554	0.1261
196	0.1001	0.052	0.0637	0.0555
197	0.0512	0.0495	0.0545	0.0511
198	0.0761	0.0983	0.0945	0.0557
199	0.0496	0.0414	0.0563	0.1074
200	0.0653	0.0626	0.0529	0.0727
201	0.0531	0.0482	0.055	0.1173
203	0.0692	0.0597	0.0625	0.1031
204	0.0486	0.0504	0.052	0.0592
205	0.0542	0.0499	0.0454	0.0497
206	0.0569	0.0532	0.0611	0.1334
207	0.0734	0.0619	0.0681	0.0529
209	0.0537	0.045	0.0427	0.0635
210	0.0485	0.092	0.049	0.0528
212	0.0567	0.0474	0.0528	0.0938
213	0.0498	0.0408	0.0435	0.0509
214	0.0744	0.089	0.0977	0.0711
215	0.0551	0.0676	0.0604	0.0682
216	0.0576	0.0521	0.0504	0.0501
218	0.0685	0.0483	0.0489	0.0565
219	0.0628	0.1029	0.0503	0.0468
220	0.0469	0.0441	0.0499	0.0565
221	0.0582	0.0488	0.054	0.0503
222	0.0521	0.0759	0.0537	0.0692
223	0.0809	0.068	0.0692	0.0624
224	0.137	0.1097	0.1005	0.058
226	0.0745	0.064	0.0651	0.0436
227	0.0934	0.0871	0.0706	0.0499
228	0.1289	0.1169	0.11	0.0496
229	0.1031	0.0708	0.0599	0.0421
230	0.1658	0.112	0.0786	0.0937
231	0.1586	0.1019	0.0729	0.0717

232	0.1885	0.1468	0.081	0.1189
233	0.1605	0.1547	0.088	0.063
234	0.2292	0.232	0.1504	0.0591
235	0.1863	0.2661	0.1123	0.0837
236	0.1612	0.0868	0.1299	0.1025
237	0.1599	0.0734	0.1317	0.0881
238	0.0857	0.062	0.0624	0.0897
239	0.1175	0.0734	0.058	0.0845
240	0.1399	0.0724	0.0721	0.1101
241	0.0911	0.077	0.0657	0.0847
242	0.159	0.0955	0.065	0.0764
243	0.1127	0.0891	0.0778	0.0824
244	0.0974	0.0903	0.076	0.1184
245	0.0761	0.0591	0.0595	0.0835
246	0.1015	0.0731	0.0681	0.1406
247	0.0988	0.0615	0.0515	0.1393
249	0.0952	0.0737	0.0673	0.1776
250	0.0765	0.0743	0.07	0.148
251	0.0618	0.0503	0.0596	0.2206
252	0.0739	0.1793	0.2194	0.1474
253	0.153	0.1395	0.1055	0.109
254	0.0626	0.052	0.0654	0.1015
255	0.062	0.0504	0.056	0.0667
256	0.0736	0.0657	0.0682	0.0836
257	0.052	0.0472	0.0512	0.0912
258	0.0777	0.0874	0.081	0.0901
259	0.0624	0.0788	0.0701	0.1104
260	0.0913	0.0724	0.1549	0.0928
261	0.0545	0.0535	0.052	0.1032
262	0.0594	0.055	0.0476	0.083
263	0.1561	0.1476	0.1733	0.145
264	0.1125	0.0922	0.098	0.081
265	0.0597	0.053	0.0494	0.0958
266	0.0652	0.0637	0.0984	0.1134
267	0.1689	0.2115	0.1101	0.0872
268	0.0841	0.088	0.0767	0.1229
270	0.0581	0.0553	0.0542	0.2131
271	0.0852	0.1356	0.097	0.1322
272	0.0535	0.0527	0.0463	0.0696
273	0.0877	0.0968	0.1073	0.0671
274	0.0767	0.0936	0.1041	0.134
275	0.049	0.0422	0.0469	0.0594
277	0.054	0.0599	0.078	0.1279

278	0.0805	0.0497	0.0502	0.0863
279	0.1221	0.066	0.0749	0.0948
280	0.1022	0.0769	0.089	0.0562
281	0.0817	0.0599	0.0571	0.0662
282	0.0791	0.0653	0.0575	0.191
283	0.0729	0.068	0.0944	0.0989
284	0.2022	0.1226	0.1528	0.0511
285	0.0686	0.0545	0.0559	0.0705
286	0.0465	0.048	0.0495	0.1332
287	0.0581	0.0656	0.059	0.0714
288	0.0805	0.0726	0.0731	0.0763
289	0.064	0.0468	0.0519	0.0527
290	0.0439	0.0397	0.0443	0.1009
291	0.0486	0.0462	0.0418	0.0526
292	0.0699	0.0548	0.0628	0.0601
293	0.0714	0.0628	0.0759	0.0919
294	0.0683	0.0603	0.0614	0.0527
295	0.1446	0.1065	0.1495	0.0709
296	0.1008	0.0496	0.0583	0.0805
297	0.066	0.0529	0.0736	0.0757
298	0.0547	0.0432	0.0445	0.0845
299	0.0489	0.0446	0.0458	0.1157
300	0.0456	0.052	0.0472	0.0888
301	0.0699	0.0479	0.0561	0.0862
302	0.059	0.1376	0.0638	0.0706
303	0.0561	0.0826	0.0736	0.1098
304	0.0581	0.0851	0.0816	0.0816
305	0.0556	0.0712	0.064	0.0569
306	0.0553	0.0867	0.0612	0.0902
307	0.156	0.0657	0.0703	0.0968
308	0.0706	0.0588	0.0933	0.0613
310	0.0767	0.0983	0.06	0.0491
311	0.1144	0.0589	0.0855	0.0652
312	0.1297	0.0984	0.0917	0.0783
313	0.1505	0.1132	0.1287	0.079
314	0.1252	0.0792	0.0661	0.0755
315	0.092	0.0645	0.0581	0.123
316	0.075	0.0507	0.0557	0.0608
317	0.1114	0.1293	0.0767	0.0856
318	0.0761	0.0601	0.0714	0.0459
319	0.0949	0.0684	0.0792	0.042
320	0.1197	0.0866	0.1167	0.0604
321	0.0796	0.1018	0.1171	0.0763

322	0.0762	0.1438	0.1138	0.1018
323	0.0588	0.1274	0.1673	0.0787
324	0.0703	0.0798	0.1022	0.0784
325	0.0685	0.1224	0.1173	0.0885
326	0.0622	0.0828	0.0938	0.0801
327	0.0494	0.0784	0.0747	0.1906
328	0.0796	0.0678	0.0794	0.09
329	0.0641	0.0586	0.0618	0.0861
330	0.0692	0.0768	0.0794	0.0838
331	0.0889	0.066	0.0674	0.087
332	0.0792	0.0682	0.1321	0.1236
333	0.071	0.0954	0.0822	0.1375
334	0.0769	0.0707	0.0516	0.0848
335	0.1387	0.0925	0.0966	0.1184
336	0.0525	0.0468	0.0504	0.0839
337	0.0605	0.0537	0.0578	0.1158
338	0.1269	0.1204	0.0942	0.0796
340	0.1123	0.0988	0.0906	0.0929
341	0.0679	0.0531	0.06	0.1106
342	0.0418	0.0429	0.045	0.0877
343	0.0458	0.0405	0.0392	0.0961
344	0.0497	0.0551	0.049	0.0837
345	0.044	0.0498	0.0474	0.0876
346	0.0574	0.0563	0.0428	0.0811
347	0.0533	0.0559	0.0641	0.08
348	0.0511	0.0488	0.0529	0.0677
349	0.0369	0.039	0.0406	0.076
350	0.0404	0.0465	0.0509	0.0717
351	0.0435	0.041	0.0455	0.0857
352	0.0446	0.0421	0.0574	0.0627
353	0.065	0.0811	0.1215	0.0612
354	0.0535	0.0588	0.0534	0.082
355	0.0383	0.0397	0.0435	0.069
356	0.0442	0.0431	0.0457	0.1343
357	0.0482	0.0518	0.0638	0.058
358	0.0487	0.0437	0.0421	0.0662
359	0.0509	0.0519	0.077	0.1374
360	0.0609	0.0616	0.0638	0.1
362	0.0662	0.0776	0.0644	0.1076
363	0.0585	0.0647	0.0576	0.0725
364	0.0689	0.071	0.0638	0.0631
365	0.0782	0.0811	0.0755	0.0439
366	0.1666	0.1878	0.158	0.0481

367	0.0664	0.0713	0.0615	0.0489
368	0.0595	0.0543	0.0568	0.0506
369	0.0495	0.0607	0.0517	0.0582
370	0.0495	0.0474	0.0506	0.0611
371	0.0479	0.0434	0.0722	0.0451
373	0.0493	0.0478	0.0504	0.0453
374	0.0534	0.0593	0.0583	0.0433
375	0.0512	0.0546	0.0541	0.0512
376	0.0561	0.0482	0.0518	0.0949
377	0.0446	0.0637	0.0493	0.0583
378	0.0641	0.0673	0.0659	0.0472
379	0.0621	0.0603	0.0656	0.048
380	0.0519	0.045	0.0501	0.0713
381	0.0541	0.0636	0.0649	0.0512
382	0.0535	0.0593	0.052	0.075
383	0.0453	0.0397	0.04	0.0641
385	0.0407	0.0334	0.0383	0.052
386	0.0446	0.0425	0.0433	0.0641
387	0.0387	0.0411	0.0416	0.0501
388	0.047	0.0423	0.0471	0.069
389	0.0364	0.0389	0.0401	0.0719
390	0.0423	0.043	0.0418	0.0918
392	0.0378	0.0412	0.0505	0.0618
393	0.0452	0.0616	0.0538	0.0552
394	0.0511	0.049	0.0472	0.0577
396	0.0458	0.0564	0.0588	0.0529
397	0.0652	0.0608	0.0633	0.0447
398	0.0401	0.0477	0.0452	0.0441
399	0.0509	0.0607	0.0886	0.0506
400	0.0626	0.1199	0.0636	0.0518
401	0.1454	0.2114	0.127	0.0538
402	0.0756	0.1108	0.0564	0.0476
403	0.0831	0.0925	0.078	0.065
404	0.0882	0.0827	0.0739	0.0732
405	0.1731	0.1459	0.126	0.08
406	0.0706	0.178	0.0656	0.0847
407	0.0641	0.0495	0.0564	0.0953
408	0.1223	0.1057	0.1288	0.0614
409	0.0589	0.0411	0.0488	0.0497
410	0.0742	0.0584	0.0626	0.047
411	0.1021	0.0535	0.0563	0.0366
412	0.0598	0.0468	0.0537	0.0513
413	0.0769	0.1137	0.0797	0.0375

414	0.0988	0.0868	0.0924	0.0559
415	0.1041	0.0497	0.0606	0.0421
416	0.1179	0.0812	0.0831	0.0461
417	0.112	0.0889	0.0813	0.0593
418	0.1359	0.0525	0.0566	0.0481
419	0.1385	0.064	0.0691	0.0657
420	0.1763	0.1146	0.1226	0.0593
421	0.193	0.1052	0.1148	0.0482
422	0.2474	0.0791	0.1009	0.0517
423	0.1972	0.087	0.1017	0.0641
425	0.2746	0.149	0.1486	0.0442
426	0.2275	0.1393	0.1832	0.0498
427	0.1761	0.0628	0.0752	0.0659
428	0.1825	0.1648	0.1407	0.1184
429	0.1819	0.1022	0.1216	0.0657
430	0.1556	0.0637	0.0681	0.0795
431	0.1938	0.0866	0.1365	0.0818
432	0.1496	0.0695	0.1608	0.1242
433	0.0895	0.0536	0.057	0.0819
434	0.1263	0.0623	0.083	0.0527
435	0.1667	0.0688	0.1472	0.1089
436	0.0725	0.044	0.058	0.0458
437	0.0647	0.0559	0.063	0.0583
438	0.0654	0.0559	0.0741	0.0794
439	0.0593	0.0576	0.07	0.0626
440	0.0539	0.0525	0.0551	0.07
441	0.0451	0.0451	0.0397	0.1007
442	0.0398	0.0409	0.0412	0.0715
443	0.0474	0.0378	0.0427	0.0843
444	0.0469	0.0469	0.0494	0.0968
445	0.0494	0.0584	0.0488	0.0718
446	0.0387	0.0421	0.0522	0.0706
447	0.0546	0.062	0.0712	0.102
448	0.0438	0.049	0.042	0.1338
449	0.0474	0.0537	0.0592	0.0922
450	0.0619	0.0665	0.0545	0.0824
451	0.0497	0.0519	0.0473	0.0738
452	0.0774	0.0942	0.0609	0.1505
453	0.136	0.1346	0.0698	0.1354
454	0.17	0.1548	0.1514	0.0782
455	0.1412	0.0863	0.1244	0.1753
456	0.0943	0.0955	0.0823	0.123
457	0.0615	0.0631	0.0607	0.0735

458	0.0546	0.0536	0.0548	0.127
460	0.0533	0.0531	0.0459	0.1761
461	0.0633	0.0631	0.0539	0.0646
463	0.1279	0.1167	0.0994	0.079
464	0.141	0.1226	0.1303	0.1243
465	0.083	0.0759	0.072	0.0746
466	0.1325	0.1167	0.0953	0.0762
467	0.0638	0.0711	0.0542	0.0819
468	0.0451	0.0527	0.0479	0.0651
469	0.0483	0.0598	0.0461	0.0649
470	0.0584	0.0821	0.0702	0.0447
471	0.0656	0.0697	0.0546	0.046
472	0.0588	0.077	0.0562	0.045
473	0.0889	0.1235	0.0809	0.0448
474	0.0506	0.0661	0.0494	0.0747
475	0.0628	0.0621	0.0561	0.0521
476	0.1107	0.0834	0.0895	0.0774
477	0.1114	0.1139	0.1076	0.0581
479	0.0518	0.0577	0.0516	0.0645
480	0.0467	0.0472	0.0485	0.0538
481	0.0482	0.0513	0.0484	0.0571
482	0.1369	0.1064	0.1048	0.0997
483	0.1023	0.0614	0.0678	0.1137
484	0.0545	0.0519	0.0643	0.1697
485	0.0879	0.1261	0.1092	0.1192
486	0.1348	0.1274	0.1203	0.1066
487	0.1338	0.1294	0.1293	0.0668
488	0.1215	0.1585	0.1615	0.0633
489	0.1027	0.2025	0.1679	0.073
490	0.052	0.0511	0.0541	0.0582
491	0.0484	0.0441	0.0505	0.0601
492	0.0567	0.0481	0.046	0.076
493	0.1431	0.0826	0.07	0.1041
494	0.0481	0.0466	0.0489	0.1291
495	0.0592	0.0522	0.0547	0.0787
496	0.1065	0.0678	0.0569	0.1801
497	0.1044	0.0675	0.0673	0.0573
498	0.0473	0.0472	0.0442	0.0586
499	0.0563	0.0555	0.0529	0.0634
500	0.0728	0.0653	0.0714	0.0846
501	0.0588	0.0566	0.0543	0.1177
502	0.0619	0.1101	0.1052	0.0644
503	0.0857	0.0739	0.0758	0.0956

504	0.0723	0.06	0.0571	0.0439
505	0.0822	0.0844	0.0722	0.0654
506	0.0707	0.0646	0.0576	0.1548
507	0.0992	0.0838	0.0823	0.1119
508	0.0781	0.067	0.0583	0.0671
509	0.0552	0.0474	0.0451	0.0622
510	0.0628	0.0542	0.0468	0.0473
511	0.0547	0.0472	0.0435	0.0524
513	0.0726	0.0591	0.0631	0.1041
514	0.1265	0.0785	0.0834	0.064
515	0.104	0.069	0.0633	0.0521
516	0.1255	0.1378	0.1528	0.0705
517	0.1105	0.0814	0.081	0.1754
518	0.0741	0.0698	0.0736	0.1249
519	0.1093	0.1238	0.119	0.1277
520	0.0767	0.0908	0.0922	0.1468
521	0.0893	0.1114	0.1364	0.0489
522	0.0701	0.0855	0.0919	0.058
523	0.0852	0.1372	0.1406	0.0694
524	0.0895	0.1099	0.1084	0.0764
525	0.0553	0.071	0.0654	0.0446
526	0.0607	0.0877	0.0843	0.053
527	0.0429	0.0459	0.0474	0.0778
528	0.0551	0.0535	0.0621	0.0592
529	0.0526	0.0514	0.1195	0.0606
530	0.0526	0.0565	0.0502	0.0631
531	0.0839	0.0969	0.1015	0.067
532	0.0893	0.0647	0.0636	0.0669
533	0.0811	0.0864	0.0842	0.0683
534	0.1342	0.1465	0.1304	0.0805
535	0.0947	0.0865	0.0752	0.0653
536	0.067	0.067	0.0594	0.0862
537	0.055	0.0619	0.0707	0.0879
538	0.0492	0.0475	0.0643	0.0783
539	0.0512	0.0475	0.05	0.086
540	0.0482	0.0551	0.0551	0.0514
541	0.0701	0.0789	0.0779	0.0665
542	0.05	0.0598	0.058	0.0602
543	0.0543	0.0709	0.0799	0.0594
544	0.0643	0.0665	0.0663	0.0766
545	0.0946	0.0712	0.078	0.0835
546	0.1078	0.1171	0.1267	0.0703
547	0.0668	0.0857	0.0865	0.1518

548	0.097	0.0955	0.1084	0.1234
549	0.0814	0.1207	0.0968	0.0805
550	0.0564	0.0609	0.0653	0.1296
551	0.1114	0.2128	0.1336	0.0828
552	0.0663	0.0934	0.0752	0.0981
553	0.0878	0.0879	0.0979	0.0953
554	0.1597	0.1539	0.1533	0.093
555	0.0795	0.0921	0.1113	0.1239
556	0.1126	0.1228	0.1547	0.0901
557	0.1323	0.1322	0.13	0.0929
558	0.1011	0.0881	0.0948	0.0472
559	0.0696	0.0743	0.0725	0.0629
560	0.1018	0.1835	0.0997	0.1129
561	0.0606	0.0692	0.0592	0.077
562	0.102	0.1191	0.0954	0.111
563	0.0713	0.0559	0.0594	0.077
565	0.0449	0.0469	0.0448	0.1129
566	0.0734	0.0643	0.0625	0.1438
567	0.0851	0.0961	0.0951	0.0928
568	0.1281	0.1326	0.1758	0.0742
569	0.1705	0.222	0.2234	0.0736
570	0.1443	0.1931	0.1726	0.075
571	0.0639	0.0733	0.0823	0.0596
572	0.091	0.1149	0.1258	0.0581
573	0.0761	0.0974	0.0823	0.0915
574	0.0837	0.0915	0.0913	0.0637
575	0.0622	0.0957	0.0918	0.0645
576	0.068	0.0812	0.0852	0.078
577	0.0665	0.086	0.0997	0.129
578	0.0575	0.0628	0.0603	0.0907
579	0.1435	0.1104	0.1127	0.0893
580	0.0656	0.0657	0.0667	0.1087
581	0.064	0.0728	0.0717	0.0865
582	0.0493	0.0521	0.051	0.0663
584	0.049	0.0573	0.0605	0.164
585	0.0486	0.0562	0.0515	0.0869
586	0.0496	0.0537	0.0525	0.1156
587	0.0629	0.0986	0.0623	0.1559
588	0.0827	0.0773	0.0737	0.0845
589	0.1482	0.1444	0.1856	0.1522

Table S6. non-bond interacting energies during simulation (kJ/mol)

Simulation time (picoseconds)	Geniposide			6a-hydroxygeniposide			6b-hydroxygeniposide			PNG		
	Coulombic interaction energy	Lennard-Jones interaction energy	Total energy	Coulombic interaction energy	Lennard-Jones interaction energy	Total energy	Coulombic interaction energy	Lennard-Jones interaction energy	Total energy	Coulombic interaction energy	Lennard-Jones interaction energy	Total energy
0	-1.429138	-97.350929	-98.780067	-96.996582	-109.377029	-206.373611	-173.554047	-116.775436	-290.329483	-18.783226	-15.039795	-33.823021
10	-39.111771	-85.953613	-125.065384	-109.159691	-102.456345	-211.616036	-146.610474	-125.931267	-272.541741	-95.572403	-17.229151	-112.801554
20	-81.666595	-76.653358	-158.319953	-89.929276	-94.662727	-184.592003	-170.458801	-117.098297	-287.557098	-111.475838	-18.154787	-129.630625
30	-78.743568	-89.371277	-168.114845	-70.716111	-87.652687	-158.368797	-124.506692	-129.254852	-253.761772	-131.016296	-21.525158	-152.541454
40	-61.635689	-77.279083	-138.914772	-66.485382	-84.267258	-150.75264	-130.526611	-145.556976	-276.083587	-138.951523	-17.247534	-156.199057
50	-63.784901	-81.468712	-145.253613	-57.598534	-80.977539	-138.576073	-114.058334	-125.031296	-239.08963	-140.708618	-11.001968	-151.710586
60	-83.486198	-54.909809	-138.396007	-26.854158	-95.087914	-121.942072	-170.4216	-104.853333	-275.274933	-143.396149	-19.770573	-163.166722
70	-65.002983	-71.409729	-136.412712	-9.714314	-104.162354	-113.876668	-146.171692	-128.210907	-274.382599	-188.580583	-12.445961	-201.031044
80	-90.047058	-79.076096	-169.123154	-21.54287	-96.368805	-117.911675	-108.148117	-133.032166	-241.180283	-203.487411	-7.842201	-211.329612
90	-80.088142	-76.276794	-156.364936	-35.28326	-91.455269	-126.738529	-104.838539	-113.679016	-218.517555	-211.450439	-17.841202	-229.291641
100	-93.188843	-63.398888	-156.587731	-27.661287	-99.669159	-127.330446	-99.144989	-112.9814	-212.126389	-210.069824	-8.053864	-218.123688
110	-105.146698	-55.883522	-161.03022	-48.271164	-99.910248	-148.181412	-50.825863	-130.863266	-181.689129	-194.604446	-42.38364	-236.988086
120	-31.038567	-74.721924	-105.760491	-32.741577	-75.726776	-108.468353	-88.442276	-132.529694	-220.97197	-194.360199	-12.449243	-206.809442
130	-69.287468	-71.515984	-140.803452	-27.713293	-89.893867	-117.60716	-30.916924	-129.385559	-160.302483	-204.170944	-16.826693	-220.997637
140	-49.570507	-90.887817	-140.458324	-29.111685	-88.736862	-117.848547	-30.165239	-119.945213	-150.110452	-155.234344	-21.955791	-177.190135
150	-61.656151	-80.365707	-142.021858	-25.20145	-84.366302	-109.567752	-59.658524	-120.397171	-180.055695	-121.611931	-30.125187	-151.737118
160	-10.918866	-78.667	-89.585866	-16.72506	-68.759293	-85.484353	-45.707047	-131.666077	-177.373124	-128.397125	-20.731237	-149.128362
170	-14.010815	-52.427006	-66.437821	-17.007645	-84.571831	-101.579476	-83.771484	-131.759644	-215.531128	-83.78902	-18.988398	-98.827418
180	-13.789919	-73.015808	-86.805727	-16.376041	-85.600845	-101.976886	-97.012138	-132.806915	-229.819053	-74.343613	-33.380405	-107.724018
190	-16.539745	-62.183792	-78.723537	-17.59289	-84.017067	-101.609957	-95.2267	-123.235535	-218.462235	-99.120743	-23.703941	-122.824684
200	-9.609722	-58.494797	-68.104519	-17.642632	-74.362152	-92.004784	-103.323227	-132.900803	-236.22403	-96.717255	-26.962223	-166.679478
210	-11.123284	-55.064568	-66.187852	-5.939955	-82.339828	-88.279783	-88.106628	-138.190384	-226.297012	-89.491531	-7.733484	-97.225015
220	4.553379	-45.431465	-40.878086	-21.325624	-97.128723	-118.454347	-162.861145	-122.380753	-285.241898	-112.929771	-26.926651	-139.856422
230	7.572563	-47.396912	-39.824349	-22.364059	-79.280869	-101.644928	-131.258116	-133.325195	-264.583511	-44.080185	-27.196972	-171.277157
240	-17.712755	-32.542	-50.254755	-49.677708	-89.841835	-139.519543	-111.765388	-122.272446	-234.037834	-68.705338	-25.777168	-94.482506
250	-3.252367	-29.953356	-33.205723	-61.65641	-97.904289	-159.560699	-140.380524	-112.912262	-253.292786	-126.502815	-21.500837	-148.003652
260	0.306739	-49.712975	-49.406236	-55.246655	-94.095787	-149.342442	-154.446106	-120.066414	-274.51252	-138.996567	-3.023265	-142.019832
270	-15.734077	-33.979698	-49.713775	-32.50293	-96.81015	-129.31308	-116.379868	-122.617981	-238.997849	-145.454514	7.28482	-138.169694
280	-19.797897	-31.561424	-51.359321	-11.025698	-91.965652	-102.99135	-93.889931	-123.822266	-217.712197	-140.784225	-8.77307	-149.557295
290	-28.957787	-18.548815	-47.506602	-47.024235	-93.688766	-140.713001	-177.074265	-121.648117	-298.722382	-111.772209	-15.528579	-127.300788
300	-0.99439	-18.851997	-19.846387	-49.795444	-98.299316	-148.09476	-180.464279	-126.321175	-286.785454	-129.125397	1.935355	-127.190042
310	-34.391724	-15.559274	-49.950998	-27.239208	-89.834541	-117.073749	-145.055664	-114.935921	-259.991585	-101.846115	-20.546955	-122.39307
320	-56.817131	-6.697282	-63.514413	-59.318619	-87.909843	-147.228462	-163.73645	-116.100143	-279.836593	-139.362259	-1.38738	-140.749639
330	-91.449165	-6.996157	-98.445322	-15.428925	-94.102325	-109.53125	-122.770187	-129.990768	-252.760955	-75.7015	-16.144413	-91.845913
340	-27.241617	-8.481759	-35.723376	-33.051994	-82.374557	-115.426551	-161.845108	-120.937866	-282.782974	-144.243912	-3.912262	-148.156174
350	1.962827	-15.452486	-13.489659	-50.237911	-97.428444	-147.666355	-85.507675	-123.529221	-209.036896	-36.960033	-12.75481	-49.714843
360	0.905054	-10.464995	-9.559941	-72.914185	-78.024826	-150.939011	-69.37825	-125.741661	-195.119911	-57.041679	-14.741386	-71.783065
370	3.994214	-5.641475	-1.647261	-33.706024	-97.384338	-131.090362	-59.418171	-133.793549	-193.21172	-103.858681	0.584003	-103.274678
380	-0.524675	-3.893203	-4.417878	-38.445	-87.819061	-126.264061	-108.683388	-130.816147	-239.499535	-101.724739	-9.492046	-111.216785
390	0.209561	-3.903664	-3.694103	-54.015953	-84.447601	-138.463554	-138.46788	-124.235794	-262.703674	-112.952583	-3.862325	-116.814908
400	-4.599933	-6.009831	-10.609764	-48.142254	-89.426956	-137.56921	-106.080566	-113.816422	-219.896988	-139.962906	14.514527	-125.448379
410	3.761015	-3.169409	0.591606	-45.736977	-87.196396	-132.933373	-112.064873	-130.284943	-242.349816	-139.169571	4.691166	-134.478405
420	8.900082	-6.827314	2.072768	-81.815979	-87.356735	-169.172714	-96.92057	-130.664886	-227.585456	-148.865509	4.841471	-144.024038
430	3.180241	-3.395129	-0.214888	-18.959703	-78.826263	-97.785966	-145.063522	-117.672211	-262.735733	-64.704674	-15.199027	-79.903701
440	-0.310645	-4.318161	-4.628806	-14.691421	-76.425705	-91.117126	-115.906647	-119.036758	-234.943405	-180.580109	21.699783	-158.880326
450	1.065404	-2.653714	-1.58831	-12.68709	-98.354645	-111.041735	-143.510849	-122.053131	-265.56398	-76.481812	-17.70239	-93.752051
460	-12.023882	-2.156597	-14.180479	-10.952435	-80.774178	-91.726613	-97.650009	-141.578415	-239.228424	-69.824677	-3.725839	-73.550516
470	-8.449419	-6.584294	-15.033713	-66.991028	-83.962952	-150.95398	-111.452194	-118.711243	-230.163437	-78.197433	-1.383241	-79.580674
480	-2.771108	-2.423957	-5.195065	-83.923714	-77.93779	-161.861504	-108.968994	-107.433121	-216.403015	-78.688187	-9.427739	-88.115926
490	-30.47159	-7.01328	-37.48487	-76.724518	-73.98465	-150.709168	-47.717464	-132.824844	-180.542308	-56.779205	-15.987999	-72.767204
500	0.880898	-5.237599	-4.356701	-96.621521	-67.603409	-164.22493	-85.107735	-137.525665	-222.6334	-67.024521	-8.091094	-75.115615
Average	-28.41342771	-40.02420461	-68.43763231	-42.32329565	-88.32574037	-130.649036	-112.8514332	-124.5712652	-237.4226984	-118.1119429	-12.77440408	-130.886347
Error	33.21621974	31.82051803	56.79873198	26.21670903	9.108441986	28.26270496	38.34027662	8.795040184	35.38281819	47.12778257	11.95869717	46.50395412

**Table S6.** non-bond interacting energies during simulation (kJ/mol)

Simulation time (picoseconds)	Geniposide			6a-hydroxygeniposide		
	Coulombic interaction energy	Lennard-Jones interaction energy	Total energy	Coulombic interaction energy	Lennard-Jones interaction energy	Total energy
0	-1.429138	-97.350929	-98.780067	-96.996582	-109.377029	-206.373611
10	-39.111771	-85.953613	-125.065384	-109.159691	-102.456345	-211.616036
20	-81.666595	-76.653358	-158.319953	-89.929276	-94.662727	-184.592003
30	-78.743568	-89.371277	-168.114845	-70.71611	-87.652687	-158.368797
40	-61.635689	-77.279083	-138.914772	-66.485382	-84.267258	-150.75264
50	-63.784901	-81.468712	-145.253613	-57.598534	-80.977539	-138.576073
60	-83.486198	-54.909809	-138.396007	-26.854158	-95.087914	-121.942072
70	-65.002983	-71.409729	-136.412712	-9.714314	-104.162354	-113.876668
80	-90.047058	-79.076096	-169.123154	-21.54287	-96.368805	-117.911675
90	-80.088142	-76.276794	-156.364936	-35.28326	-91.455269	-126.738529
100	-93.188843	-63.398888	-156.587731	-27.661287	-99.669159	-127.330446
110	-105.146698	-55.883522	-161.03022	-48.271164	-99.910248	-148.181412
120	-31.038567	-74.721924	-105.760491	-32.741577	-75.726776	-108.468353
130	-69.287468	-71.515984	-140.803452	-27.713293	-89.893867	-117.60716
140	-49.570507	-90.887817	-140.458324	-29.111685	-88.736862	-117.848547
150	-61.656151	-80.365707	-142.021858	-25.20145	-84.366302	-109.567752
160	-10.918866	-78.667	-89.585866	-16.72506	-68.759293	-85.484353
170	-14.010815	-52.427006	-66.437821	-17.007645	-84.571831	-101.579476
180	-13.789919	-73.015808	-86.805727	-16.376041	-85.600845	-101.976886
190	-16.539745	-62.183792	-78.723537	-17.59289	-84.017067	-101.609957
200	-9.609722	-58.494797	-68.104519	-17.642632	-74.362152	-92.004784
210	-11.123284	-55.064568	-66.187852	-5.939955	-82.339828	-88.279783
220	4.553379	-45.431465	-40.878086	-21.325624	-97.128723	-118.454347
230	7.572563	-47.396912	-39.824349	-22.364059	-79.280869	-101.644928
240	-17.712755	-32.542	-50.254755	-49.677708	-89.841835	-139.519543
250	-3.252367	-29.953356	-33.205723	-61.65641	-97.904289	-159.560699

260	0.306739	-49.712975	-49.406236	-55.246655	-94.095787	-149.342442
270	-15.734077	-33.979698	-49.713775	-32.50293	-96.81015	-129.31308
280	-19.797897	-31.561424	-51.359321	-11.025698	-91.965652	-102.99135
290	-28.957787	-18.548815	-47.506602	-47.024235	-93.688766	-140.713001
300	-0.99439	-18.851997	-19.846387	-49.795444	-98.299316	-148.09476
310	-34.391724	-15.559274	-49.950998	-27.239208	-89.834541	-117.073749
320	-56.817131	-6.697282	-63.514413	-59.318619	-87.909843	-147.228462
330	-91.449165	-6.996157	-98.445322	-15.428925	-94.102325	-109.53125
340	-27.241617	-8.481759	-35.723376	-33.051994	-82.374557	-115.426551
350	1.962827	-15.452486	-13.489659	-50.237911	-97.428444	-147.666355
360	0.905054	-10.464995	-9.559941	-72.914185	-78.024826	-150.939011
370	3.994214	-5.641475	-1.647261	-33.706024	-97.384338	-131.090362
380	-0.524675	-3.893203	-4.417878	-38.445	-87.819061	-126.264061
390	0.209561	-3.903664	-3.694103	-54.015953	-84.447601	-138.463554
400	-4.599933	-6.009831	-10.609764	-48.142254	-89.426956	-137.56921
410	3.761015	-3.169409	0.591606	-45.736977	-87.196396	-132.933373
420	8.900082	-6.827314	2.072768	-81.815979	-87.356735	-169.172714
430	3.180241	-3.395129	-0.214888	-18.959703	-78.826263	-97.785966
440	-0.310645	-4.318161	-4.628806	-14.691421	-76.425705	-91.117126
450	1.065404	-2.653714	-1.58831	-12.68709	-98.354645	-111.041735
460	-12.023882	-2.156597	-14.180479	-10.952435	-80.774178	-91.726613
470	-8.449419	-6.584294	-15.033713	-66.991028	-83.962952	-150.95398
480	-2.771108	-2.423957	-5.195065	-83.923714	-77.93779	-161.861504
490	-30.47159	-7.01328	-37.48487	-76.724518	-73.98465	-150.709168
500	0.880898	-5.237599	-4.356701	-96.621521	-67.603409	-164.22493
<b>Average</b>	<b>-28.41342771</b>	<b>-40.02420461</b>	<b>-68.43763231</b>	<b>-42.32329565</b>	<b>-88.32574037</b>	<b>-130.649036</b>
<b>Error</b>	<b>33.21621974</b>	<b>31.82051803</b>	<b>56.79873198</b>	<b>26.21670903</b>	<b>9.108441986</b>	<b>28.26270496</b>

**Table S6.** non-bond interacting energies during simulation (kJ/mol)

Simulation time (picoseconds)	6b-hydroxygeniposide			PNG		
	Coulombic interaction energy	Lennard-Jones interaction energy	Total energy	Coulombic interaction energy	Lennard-Jones interaction energy	Total energy
0	-173.554047	-116.775436	-290.329483	-18.783226	-15.039795	-33.823021
10	-146.610474	-125.931267	-272.541741	-95.572403	-17.229151	-112.801554
20	-170.458801	-117.098297	-287.557098	-111.475838	-18.154787	-129.630625
30	-124.50692	-129.254852	-253.761772	-131.016296	-21.525158	-152.541454
40	-130.526611	-145.556976	-276.083587	-138.951523	-17.247534	-156.199057
50	-114.058334	-125.031296	-239.08963	-140.708618	-11.001968	-151.710586
60	-170.4216	-104.853333	-275.274933	-143.396149	-19.770573	-163.166722
70	-146.171692	-128.210907	-274.382599	-188.585083	-12.445961	-201.031044
80	-108.148117	-133.032166	-241.180283	-203.487411	-7.842201	-211.329612
90	-104.838539	-113.679016	-218.517555	-211.450439	-17.841202	-229.291641
100	-99.144989	-112.9814	-212.126389	-210.069824	-8.053864	-218.123688
110	-50.825863	-130.863266	-181.689129	-194.604446	-42.38364	-236.988086
120	-88.442276	-132.529694	-220.97197	-194.360199	-12.449243	-206.809442
130	-30.916924	-129.385559	-160.302483	-204.170944	-16.826693	-220.997637
140	-30.165239	-119.945213	-150.110452	-155.234344	-21.955791	-177.190135
150	-59.658524	-120.397171	-180.055695	-121.611931	-30.125187	-151.737118
160	-45.707047	-131.666077	-177.373124	-128.397125	-20.731237	-149.128362
170	-83.771484	-131.759644	-215.531128	-79.83902	-18.988398	-98.827418
180	-97.012138	-132.806915	-229.819053	-74.343613	-33.380405	-107.724018
190	-95.2267	-123.235535	-218.462235	-99.120743	-23.703941	-122.824684
200	-103.323227	-132.900803	-236.22403	-96.717255	-29.962223	-126.679478
210	-88.106628	-138.190384	-226.297012	-89.491531	-7.733484	-97.225015
220	-162.861145	-122.380753	-285.241898	-112.929771	-26.926651	-139.856422
230	-131.258316	-133.325195	-264.583511	-44.080185	-27.196972	-71.277157
240	-111.765388	-122.272446	-234.037834	-68.705338	-25.777168	-94.482506

250	-140.380524	-112.912262	-253.292786	-126.502815	-21.500837	-148.003652
260	-154.446106	-120.066414	-274.51252	-138.996567	-3.023265	-142.019832
270	-116.379868	-122.617981	-238.997849	-145.454514	7.28482	-138.169694
280	-93.889931	-123.822266	-217.712197	-140.784225	-8.77307	-149.557295
290	-177.074265	-121.648117	-298.722382	-111.772209	-15.528579	-127.300788
300	-180.464279	-106.321175	-286.785454	-129.125397	1.935355	-127.190042
310	-145.055664	-114.935921	-259.991585	-101.846115	-20.546955	-122.39307
320	-163.73645	-116.100143	-279.836593	-139.362259	-1.38738	-140.749639
330	-122.770187	-129.990768	-252.760955	-75.7015	-16.144413	-91.845913
340	-161.845108	-120.937866	-282.782974	-144.243912	-3.912262	-148.156174
350	-85.507675	-123.529221	-209.036896	-36.960033	-12.75481	-49.714843
360	-69.37825	-125.741661	-195.119911	-57.041679	-14.741386	-71.783065
370	-59.418171	-133.793549	-193.21172	-103.858681	0.584003	-103.274678
380	-108.683388	-130.816147	-239.499535	-101.724739	-9.492046	-111.216785
390	-138.46788	-124.235794	-262.703674	-112.952583	-3.862325	-116.814908
400	-106.080566	-113.816422	-219.896988	-139.962906	14.514527	-125.448379
410	-112.064873	-130.284943	-242.349816	-139.169571	4.691166	-134.478405
420	-96.92057	-130.664886	-227.585456	-148.865509	4.841471	-144.024038
430	-145.063522	-117.672211	-262.735733	-64.704674	-15.199027	-79.903701
440	-115.906647	-119.036758	-234.943405	-180.580109	21.699783	-158.880326
450	-143.510849	-122.053131	-265.56398	-76.481812	-17.270239	-93.752051
460	-97.650009	-141.578415	-239.228424	-69.824677	-3.725839	-73.550516
470	-111.452194	-118.711243	-230.163437	-78.197433	-1.383241	-79.580674
480	-108.969894	-107.433121	-216.403015	-78.688187	-9.427739	-88.115926
490	-47.717464	-132.824844	-180.542308	-56.779205	-15.987999	-72.767204
500	-85.107735	-137.525665	-222.6334	-67.024521	-8.091094	-75.115615
<b>Average</b>	<b>-112.8514332</b>	<b>-124.5712652</b>	<b>-237.4226984</b>	<b>-118.1119429</b>	<b>-12.77440408</b>	<b>-130.886347</b>
<b>Error</b>	<b>38.34027662</b>	<b>8.795040184</b>	<b>35.38281819</b>	<b>47.12778257</b>	<b>11.95869717</b>	<b>46.50395412</b>