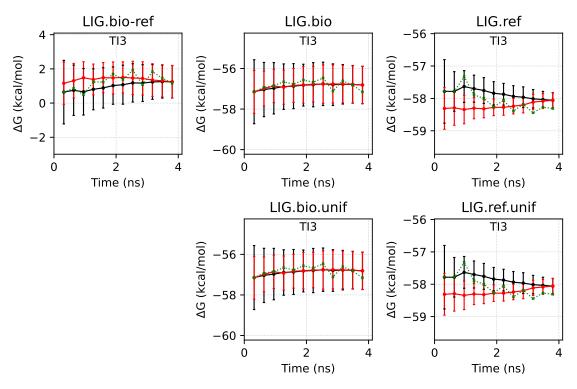
```
TI
             Calculation
                                                   TI3
                                                                 BAR
                                                                             MBAR\max \tau
                            Excluding the first 0/12 of the simulations
                           1.19 \pm 0.49 1.25 \pm 0.48 1.23 \pm 0.47 1.28 \pm 0.36
             LIG.bio-ref
                                                                                        162
             LIG.bio
                          -56.82 \pm 0.47 - 56.81 \pm 0.47 - 56.82 \pm 0.46 - 56.69 \pm 0.35
                                                                                        162
             LIG.ref
                          -58.01 \pm 0.12 - 58.06 \pm 0.12 - 58.05 \pm 0.09 - 57.97 \pm 0.10
                                                                                         17
                            Excluding the first 3/12 of the simulations
                           1.38 \pm 0.50 1.44 \pm 0.50 1.43 \pm 0.46 1.46 \pm 0.37
             LIG.bio-ref
                                                                                        110
             LIG.bio
                          \text{-56.78} \, \pm \, 0.49\text{-56.76} \, \pm \, 0.48\text{-56.76} \, \pm \, 0.45\text{-56.65} \, \pm \, 0.36
                                                                                        110
{\bf LIG.bio\text{-}ref\ LIG.ref}
                          -58.15 \pm 0.12 - 58.20 \pm 0.13 - 58.19 \pm 0.10 - 58.11 \pm 0.09
                                                                                          9
                            Excluding the first 4/12 of the simulations
             LIG.bio-ref
                           1.40 \pm 0.50 1.47 \pm 0.50 1.45 \pm 0.47 1.48 \pm 0.37
                                                                                        103
             LIG.bio
                          -56.79 \pm 0.49 -56.77 \pm 0.48 -56.78 \pm 0.46 -56.67 \pm 0.36
                                                                                        103
             LIG.ref
                          -58.19 \pm 0.12 - 58.24 \pm 0.12 - 58.23 \pm 0.09 - 58.15 \pm 0.08
                                                                                         11
                            Excluding the first 6/12 of the simulations
                            1.40 \pm 0.48 1.47 \pm 0.48 1.45 \pm 0.46 1.49 \pm 0.36
                                                                                         80
             LIG.bio-ref
             LIG.bio
                          -56.83 \pm 0.46 -56.81 \pm 0.46 -56.82 \pm 0.45 -56.71 \pm 0.35
                                                                                         80
             LIG.ref
                          -58.23 \pm 0.13 -58.28 \pm 0.13 -58.27 \pm 0.09 -58.20 \pm 0.07
                                                                                         13
                                             TI
                                                          TI3
              Calculation
                                                                                   MBAR\max \tau
                                Excluding the first 0/12 of the simulations
              LIG.bio.unif.t01-55.90 \pm 0.16-55.88 \pm 0.16-55.88 \pm 0.11-55.99 \pm 0.08
                                                                                                72
              LIG.bio.unif.t02-56.66 \pm 0.25-56.70 \pm 0.25-56.65 \pm 0.13-56.51 \pm 0.09
                                                                                              150
              LIG.bio.unif.t03-57.98 \pm 0.17-57.97 \pm 0.17-58.01 \pm 0.12-57.61 \pm 0.10
                                                                                               162
              LIG.bio.unif.t04-56.74 \pm 0.16-56.70 \pm 0.16-56.72 \pm 0.11-56.63 \pm 0.09
                                                                                                63
                                Excluding the first 3/12 of the simulations
              LIG.bio.unif.t01-55.71 \pm 0.20-55.70 \pm 0.20-55.68 \pm 0.09-55.79 \pm 0.07
                                                                                                70
              LIG.bio.unif.t02-56.71 \pm 0.33-56.73 \pm 0.33-56.69 \pm 0.13-56.54 \pm 0.10
                                                                                               109
              LIG.bio.unif.t03-57.80 \pm 0.19-57.76 \pm 0.17-57.81 \pm 0.12-57.48 \pm 0.11
                                                                                               110
LIG.bio.unif LIG.bio.unif.t04-56.89 \pm 0.17-56.84 \pm 0.17-56.86 \pm 0.12-56.78 \pm 0.10
                                                                                                86
                                Excluding the first 4/12 of the simulations
              LIG.bio.unif.t01-55.71 \pm 0.18-55.70 \pm 0.18-55.69 \pm 0.11-55.81 \pm 0.08
                                                                                                52
              LIG.bio.unif.t02-56.74 \pm 0.31-56.76 \pm 0.31-56.72 \pm 0.14-56.56 \pm 0.10
                                                                                               103
              LIG.bio.unif.t03-57.83 \pm 0.22-57.79 \pm 0.22-57.84 \pm 0.13-57.50 \pm 0.11
                                                                                                81
              LIG.bio.unif.t04-56.88 \pm 0.19-56.83 \pm 0.18-56.85 \pm 0.13-56.80 \pm 0.11
                                                                                                93
                                Excluding the first 6/12 of the simulations
              LIG.bio.unif.t01-55.82 \pm 0.18-55.80 \pm 0.18-55.78 \pm 0.10-55.88 \pm 0.08
                                                                                                37
              LIG.bio.unif.t02-56.91 \pm 0.25-56.93 \pm 0.25-56.89 \pm 0.12-56.70 \pm 0.08
                                                                                                80
              LIG.bio.unif.t03-57.87 \pm 0.15-57.81 \pm 0.14-57.89 \pm 0.10-57.54 \pm 0.08
                                                                                                59
              LIG.bio.unif.t04-56.72 \pm 0.20-56.69 \pm 0.20-56.70 \pm 0.14-56.71 \pm 0.12
                                                                                                36
              Calculation
                                                         TI3
                                                                                   MBAR\max \tau
                                Excluding the first 0/12 of the simulations
              LIG.ref.unif.t01-57.97 \pm 0.11-58.01 \pm 0.12-57.99 \pm 0.07-57.87 \pm 0.05
                                                                                               17
              LIG.ref.unif.t02-57.98 \pm 0.10-58.04 \pm 0.10-58.01 \pm 0.06-57.92 \pm 0.05
                                                                                                9
              LIG.ref.unif.t03-57.92 \pm 0.11-57.96 \pm 0.11-57.96 \pm 0.07-57.88 \pm 0.05
                                                                                               11
              LIG.ref.unif.t04-58.17 \pm 0.10-58.22 \pm 0.10-58.23 \pm 0.07-58.21 \pm 0.06
                                                                                               12
                               Excluding the first 3/12 of the simulations
              LIG.ref.unif.t01-58.11 \pm 0.11-58.15 \pm 0.11-58.13 \pm 0.08-58.02 \pm 0.06
                                                                                                8
                                                                                                7
              LIG.ref.unif.t02-58.23 \pm 0.10-58.30 \pm 0.10-58.26 \pm 0.07-58.14 \pm 0.05
              LIG.ref.unif.t03-58.02 \pm 0.12-58.06 \pm 0.12-58.05 \pm 0.08-57.98 \pm 0.06
                                                                                                9
LIG.ref.unif LIG.ref.unif.t04-58.25 \pm 0.11-58.29 \pm 0.11-58.31 \pm 0.08-58.30 \pm 0.06
                                                                                                9
                               Excluding the first 4/12 of the simulations
              LIG.ref.unif.t01-58.24 \pm 0.11-58.27 \pm 0.11-58.25 \pm 0.07-58.14 \pm 0.06
                                                                                               11
              LIG.ref.unif.t02-58.19 \pm 0.10-58.26 \pm 0.10-58.23 \pm 0.07-58.13 \pm 0.06
                                                                                                7
              LIG.ref.unif.t03-58.08 \pm 0.12-58.12 \pm 0.12-58.11 \pm 0.08-58.05 \pm 0.06
                                                                                                6
              LIG.ref.unif.t04-58.26 \pm 0.12-58.31 \pm 0.12-58.32 \pm 0.08-58.29 \pm 0.06
                                                                                               10
                               Excluding the first 6/12 of the simulations
              LIG.ref.unif.t01-58.22 \pm 0.12-58.25 \pm 0.13-58.23 \pm 0.08-58.14 \pm 0.06
                                                                                               13
                                                                                                6
              LIG.ref.unif.t02-58.29 \pm 0.12-58.36 \pm 0.12-58.33 \pm 0.08-58.21 \pm 0.06
              LIG.ref.unif.t03-58.19 \pm 0.14-58.23 \pm 0.14-58.24 \pm 0.09-58.22 \pm 0.07
                                                                                                7
              LIG.ref.unif.t04-58.22 \pm 0.12-58.27 \pm 0.12-58.27 \pm 0.08-58.23 \pm 0.06
                                                                                               11
```



 ${\bf LIG. bio\text{-}ref}$

