

Table 1: Results

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1a57 698	Classic	2.096×10^{-11}		2.1776×10^{-3}	
	Quaternion	2.092×10^{-11}	1.8861×10^{-12}	1.9520×10^{-2}	8.964
pdb1b4c 1108	Classic	5.070×10^{-13}		7.4999×10^{-3}	
	Quaternion	5.498×10^{-13}	1.0757×10^{-12}	7.3369×10^{-2}	9.783
pdb1ba5 320	Classic	9.359×10^{-13}		6.7488×10^{-4}	
	Quaternion	1.070×10^{-12}	4.1376×10^{-12}	5.8032×10^{-3}	8.599
pdb1d1n 594	Classic	1.005×10^{-11}		1.0656×10^{-3}	
	Quaternion	9.672×10^{-12}	1.2689×10^{-12}	8.5745×10^{-3}	8.047
pdb1dp3 332	Classic	7.704×10^{-13}		7.4402×10^{-4}	
	Quaternion	8.939×10^{-13}	1.4697×10^{-12}	4.6511×10^{-3}	6.251
pdb1du1 122	Classic	8.225×10^{-13}		2.5619×10^{-4}	
	Quaternion	1.258×10^{-12}	1.2376×10^{-12}	1.3982×10^{-3}	5.458
pdb1eii 806	Classic	1.393×10^{-11}		1.4345×10^{-3}	
	Quaternion	1.365×10^{-11}	1.1331×10^{-11}	1.1576×10^{-2}	8.070
pdb1fcl 338	Classic	4.542×10^{-12}		7.9944×10^{-4}	
	Quaternion	4.515×10^{-12}	8.0786×10^{-13}	5.2158×10^{-3}	6.524
pdb1fd6 344	Classic	3.182×10^{-12}		8.3560×10^{-4}	
	Quaternion	3.193×10^{-12}	3.3846×10^{-13}	5.1707×10^{-3}	6.188
pdb1hf9 496	Classic	1.157×10^{-11}		1.1324×10^{-2}	
	Quaternion	1.180×10^{-11}	3.9332×10^{-12}	1.0545×10^{-1}	9.312
pdb1i2u 266	Classic	5.562×10^{-13}		6.2236×10^{-4}	
	Quaternion	5.607×10^{-13}	1.5136×10^{-13}	3.2973×10^{-3}	5.298
pdb1i2v 266	Classic	2.418×10^{-13}		6.7944×10^{-4}	
	Quaternion	2.519×10^{-13}	6.9127×10^{-14}	4.3471×10^{-3}	6.398
pdb1ijc 380	Classic	1.408×10^{-11}		7.1535×10^{-4}	
	Quaternion	1.426×10^{-11}	2.4877×10^{-12}	5.2579×10^{-3}	7.350
pdb1jlz 140	Classic	5.594×10^{-13}		3.0421×10^{-4}	
	Quaternion	5.965×10^{-13}	1.3105×10^{-12}	1.6439×10^{-3}	5.404
pdb1jw3 842	Classic	5.936×10^{-13}		1.5196×10^{-3}	
	Quaternion	5.897×10^{-13}	3.9013×10^{-13}	1.1864×10^{-2}	7.808
pdb1k0v 440	Classic	1.893×10^{-13}		8.3030×10^{-4}	
	Quaternion	1.894×10^{-13}	1.3433×10^{-13}	6.7415×10^{-3}	8.119
pdb1k2h 1120	Classic	5.491×10^{-13}		5.2181×10^{-3}	
	Quaternion	5.199×10^{-13}	2.2039×10^{-13}	5.4853×10^{-2}	10.512
pdb1k36 278	Classic	8.820×10^{-12}		6.3208×10^{-4}	
	Quaternion	1.081×10^{-11}	2.8981×10^{-11}	3.5126×10^{-3}	5.557
pdb1k37 278	Classic	4.711×10^{-13}		6.6330×10^{-4}	
	Quaternion	4.988×10^{-13}	1.5479×10^{-13}	4.2238×10^{-3}	6.368
pdb1kuw 62	Classic	9.229×10^{-14}		1.4396×10^{-4}	
	Quaternion	1.130×10^{-13}	7.3457×10^{-14}	7.8927×10^{-4}	5.483
pdb1kz0 98	Classic	4.404×10^{-14}		2.2484×10^{-4}	
	Quaternion	5.880×10^{-14}	2.4335×10^{-13}	1.2091×10^{-3}	5.378
pdb1kz2 98	Classic	2.119×10^{-14}		2.3952×10^{-4}	
	Quaternion	2.886×10^{-14}	2.6112×10^{-14}	1.2985×10^{-3}	5.421
pdb1kz5 74	Classic	4.081×10^{-14}		1.7391×10^{-4}	
	Quaternion	4.738×10^{-14}	4.8348×10^{-14}	9.4645×10^{-4}	5.442
pdb1lvz 68	Classic	6.336×10^{-14}		1.5427×10^{-4}	
	Quaternion	7.315×10^{-14}	7.3919×10^{-14}	8.4386×10^{-4}	5.470
pdb1m4e 122	Classic	5.949×10^{-13}		2.7747×10^{-4}	
	Quaternion	5.972×10^{-13}	1.1702×10^{-13}	1.4951×10^{-3}	5.388
pdb1ma2 104	Classic	8.695×10^{-12}		2.5179×10^{-4}	
	Quaternion	8.758×10^{-12}	4.7062×10^{-13}	1.4088×10^{-3}	5.595
pdb1ma4 104	Classic	7.247×10^{-14}		6.4890×10^{-4}	
	Quaternion	7.981×10^{-14}	1.8851×10^{-13}	4.4951×10^{-3}	6.927
pdb1ma5	Classic	8.169×10^{-13}		2.3503×10^{-4}	

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
104	Quaternion	9.044×10^{-13}	5.0234×10^{-13}	1.2854×10^{-3}	5.469
pdblma6	Classic	6.283×10^{-13}		2.1833×10^{-4}	
104	Quaternion	8.522×10^{-13}	3.3052×10^{-12}	1.1773×10^{-3}	5.392
pdblmpe	Classic	2.617×10^{-11}		2.5466×10^{-3}	
1352	Quaternion	2.624×10^{-11}	7.1261×10^{-13}	2.3051×10^{-2}	9.051
pdblnd9	Classic	3.026×10^{-13}		6.8458×10^{-4}	
296	Quaternion	3.845×10^{-13}	4.7137×10^{-13}	4.3060×10^{-3}	6.290
pdblne5	Classic	1.214×10^{-12}		5.6792×10^{-4}	
254	Quaternion	1.384×10^{-12}	7.5582×10^{-13}	2.9916×10^{-3}	5.268
pdblnmj	Classic	1.237×10^{-14}		4.1876×10^{-4}	
170	Quaternion	1.424×10^{-14}	1.3921×10^{-14}	2.3147×10^{-3}	5.528
pdblo53	Classic	3.999×10^{-13}		2.3480×10^{-4}	
92	Quaternion	4.545×10^{-13}	6.5350×10^{-13}	1.2875×10^{-3}	5.483
pdbloqp	Classic	7.045×10^{-14}		3.2989×10^{-3}	
580	Quaternion	8.315×10^{-14}	9.0066×10^{-14}	3.5671×10^{-2}	10.813
pdblplw	Classic	2.830×10^{-14}		7.0863×10^{-5}	
32	Quaternion	3.122×10^{-14}	4.9118×10^{-14}	3.9928×10^{-4}	5.635
pdblplx	Classic	1.574×10^{-13}		6.6716×10^{-5}	
32	Quaternion	2.060×10^{-13}	1.7973×10^{-13}	3.7056×10^{-4}	5.554
pdblpv0	Classic	2.409×10^{-13}		6.7469×10^{-4}	
278	Quaternion	2.723×10^{-13}	1.0662×10^{-13}	4.3639×10^{-3}	6.468
pdblpzt	Classic	5.644×10^{-12}		2.9891×10^{-3}	
724	Quaternion	5.871×10^{-12}	9.9935×10^{-12}	3.0842×10^{-2}	10.318
pdblqlk	Classic	2.634×10^{-13}		1.3334×10^{-2}	
1108	Quaternion	2.869×10^{-13}	1.8593×10^{-12}	1.2665×10^{-1}	9.499
pdblr57	Classic	1.847×10^{-13}		1.0831×10^{-3}	
614	Quaternion	2.054×10^{-13}	1.4866×10^{-13}	8.9198×10^{-3}	8.235
pdblry3	Classic	4.938×10^{-13}		7.1541×10^{-4}	
386	Quaternion	5.910×10^{-13}	4.7678×10^{-13}	6.1067×10^{-3}	8.536
pdbls4h	Classic	4.696×10^{-13}		1.7331×10^{-4}	
80	Quaternion	6.349×10^{-13}	1.1092×10^{-12}	9.5034×10^{-4}	5.483
pdbls4j	Classic	1.520×10^{-13}		1.9858×10^{-4}	
80	Quaternion	2.230×10^{-13}	1.6407×10^{-13}	1.0975×10^{-3}	5.527
pdbls6j	Classic	6.073×10^{-13}		8.7923×10^{-4}	
524	Quaternion	7.660×10^{-13}	5.9201×10^{-13}	7.3704×10^{-3}	8.383
pdblsa8	Classic	9.340×10^{-13}		1.1026×10^{-3}	
638	Quaternion	1.034×10^{-12}	1.0370×10^{-12}	9.0630×10^{-3}	8.219
pdblt2y	Classic	1.887×10^{-13}		3.5853×10^{-4}	
152	Quaternion	2.396×10^{-13}	2.3861×10^{-13}	1.9460×10^{-3}	5.428
pdblt5q	Classic	3.877×10^{-14}		3.8604×10^{-4}	
180	Quaternion	5.093×10^{-14}	5.3231×10^{-14}	2.1305×10^{-3}	5.519
pdbltot	Classic	6.148×10^{-14}		5.7820×10^{-4}	
314	Quaternion	6.853×10^{-14}	2.8392×10^{-14}	4.9084×10^{-3}	8.489
pdblv6r	Classic	6.835×10^{-13}		3.0523×10^{-4}	
128	Quaternion	6.970×10^{-13}	3.1917×10^{-13}	1.6773×10^{-3}	5.495
pdblv92	Classic	1.463×10^{-13}		4.7916×10^{-4}	
278	Quaternion	1.630×10^{-13}	5.6062×10^{-14}	3.6904×10^{-3}	7.702
pdblvd7	Classic	6.342×10^{-13}		3.2095×10^{-4}	
140	Quaternion	7.439×10^{-13}	5.8715×10^{-13}	1.7731×10^{-3}	5.525
pdblvd9	Classic	1.290×10^{-12}		3.2839×10^{-4}	
140	Quaternion	1.554×10^{-12}	9.0327×10^{-13}	1.8061×10^{-3}	5.500
pdblvdb	Classic	9.108×10^{-13}		3.0734×10^{-4}	
140	Quaternion	1.083×10^{-12}	3.8641×10^{-13}	1.6814×10^{-3}	5.471
pdblvpc	Classic	8.500×10^{-15}		4.7188×10^{-4}	
272	Quaternion	1.002×10^{-14}	8.5436×10^{-15}	4.0128×10^{-3}	8.504

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1wnk 140	Classic	4.112×10^{-12}		3.1891×10^{-4}	
	Quaternion	4.632×10^{-12}	2.2335×10^{-11}	1.7490×10^{-3}	5.484
pdb1wo4 152	Classic	9.957×10^{-13}		3.5562×10^{-4}	
	Quaternion	9.639×10^{-13}	2.3523×10^{-12}	1.9547×10^{-3}	5.497
pdb1wo5 152	Classic	2.372×10^{-12}		3.5122×10^{-4}	
	Quaternion	2.514×10^{-12}	4.9059×10^{-12}	1.9265×10^{-3}	5.485
pdb1x60 476	Classic	1.076×10^{-12}		8.7221×10^{-4}	
	Quaternion	1.179×10^{-12}	3.9684×10^{-13}	7.4783×10^{-3}	8.574
pdb1x9v 544	Classic	8.975×10^{-13}		1.3927×10^{-2}	
	Quaternion	9.632×10^{-13}	1.3900×10^{-13}	1.3013×10^{-1}	9.344
pdb1y5c 68	Classic	7.693×10^{-14}		1.6100×10^{-4}	
	Quaternion	9.383×10^{-14}	2.8771×10^{-13}	8.8013×10^{-4}	5.467
pdb1yx7 500	Classic	3.509×10^{-12}		8.8745×10^{-4}	
	Quaternion	4.348×10^{-12}	7.3422×10^{-12}	7.5193×10^{-3}	8.473
pdb1yx8 500	Classic	7.276×10^{-12}		1.0601×10^{-3}	
	Quaternion	8.217×10^{-12}	1.0819×10^{-11}	9.0643×10^{-3}	8.550
pdb1yxr 464	Classic	6.979×10^{-13}		7.5384×10^{-4}	
	Quaternion	7.989×10^{-13}	2.5340×10^{-13}	6.4018×10^{-3}	8.492
pdb2a2y 1072	Classic	1.150×10^{-12}		3.8606×10^{-2}	
	Quaternion	1.151×10^{-12}	3.7416×10^{-13}	3.4496×10^{-1}	8.935
pdb2a4j 580	Classic	2.085×10^{-14}		1.1814×10^{-3}	
	Quaternion	2.727×10^{-14}	1.4394×10^{-14}	1.0107×10^{-2}	8.555
pdb2adl 868	Classic	1.752×10^{-11}		3.8700×10^{-3}	
	Quaternion	1.787×10^{-11}	3.0093×10^{-12}	4.0291×10^{-2}	10.411
pdb2adn 868	Classic	6.693×10^{-12}		2.1309×10^{-3}	
	Quaternion	6.465×10^{-12}	2.4957×10^{-12}	1.9026×10^{-2}	8.929
pdb2ajj 170	Classic	5.641×10^{-14}		4.0031×10^{-4}	
	Quaternion	6.584×10^{-14}	1.2744×10^{-13}	2.1926×10^{-3}	5.477
pdb2ajm 170	Classic	1.183×10^{-13}		3.1596×10^{-4}	
	Quaternion	1.555×10^{-13}	8.9439×10^{-13}	2.3738×10^{-3}	7.513
pdb2ajn 170	Classic	1.076×10^{-13}		3.1827×10^{-4}	
	Quaternion	1.217×10^{-13}	1.5981×10^{-13}	2.4036×10^{-3}	7.552
pdb2ajo 170	Classic	1.183×10^{-13}		3.1669×10^{-4}	
	Quaternion	1.555×10^{-13}	8.9439×10^{-13}	2.3821×10^{-3}	7.522
pdb2akk 446	Classic	1.288×10^{-13}		7.7303×10^{-4}	
	Quaternion	1.270×10^{-13}	1.1725×10^{-13}	6.4769×10^{-3}	8.379
pdb2bzb 748	Classic	9.365×10^{-14}		1.7262×10^{-2}	
	Quaternion	1.224×10^{-13}	1.5097×10^{-13}	1.6652×10^{-1}	9.647
pdb2c0s 386	Classic	3.028×10^{-13}		7.2067×10^{-4}	
	Quaternion	3.379×10^{-13}	7.2067×10^{-13}	6.3009×10^{-3}	8.743
pdb2dci 120	Classic	2.366×10^{-14}		2.5934×10^{-4}	
	Quaternion	2.950×10^{-14}	1.3479×10^{-13}	1.3928×10^{-3}	5.371
pdb2eem 206	Classic	5.190×10^{-13}		3.6267×10^{-4}	
	Quaternion	5.461×10^{-13}	4.0208×10^{-13}	2.7213×10^{-3}	7.504
pdb2fva 494	Classic	1.047×10^{-12}		8.0635×10^{-4}	
	Quaternion	1.194×10^{-12}	1.5803×10^{-12}	6.9312×10^{-3}	8.596
pdb2fvf 494	Classic	3.106×10^{-13}		8.2833×10^{-4}	
	Quaternion	3.445×10^{-13}	2.8750×10^{-13}	7.0460×10^{-3}	8.506
pdb2fxz 80	Classic	1.489×10^{-12}		1.8394×10^{-4}	
	Quaternion	1.749×10^{-12}	2.0430×10^{-12}	9.9607×10^{-4}	5.415
pdb2g9j 848	Classic	3.282×10^{-12}		6.5163×10^{-2}	
	Quaternion	3.535×10^{-12}	2.1668×10^{-12}	5.7866×10^{-1}	8.880
pdb2g9l 224	Classic	6.366×10^{-14}		3.9514×10^{-4}	
	Quaternion	8.672×10^{-14}	2.8081×10^{-13}	2.9315×10^{-3}	7.419

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2h5m 614	Classic	9.692×10^{-13}		1.0981×10^{-3}	
	Quaternion	1.032×10^{-12}	4.1376×10^{-12}	9.2457×10^{-3}	8.420
pdb2hep 252	Classic	1.191×10^{-12}		4.4362×10^{-4}	
	Quaternion	1.268×10^{-12}	5.5848×10^{-13}	3.3963×10^{-3}	7.656
pdb2j0z 752	Classic	4.393×10^{-12}		5.4362×10^{-2}	
	Quaternion	4.954×10^{-12}	4.5315×10^{-12}	4.9499×10^{-1}	9.105
pdb2j10 752	Classic	9.189×10^{-12}		1.4295×10^{-3}	
	Quaternion	9.523×10^{-12}	9.3908×10^{-13}	1.2125×10^{-2}	8.482
pdb2j11 752	Classic	5.254×10^{-12}		1.3649×10^{-3}	
	Quaternion	5.629×10^{-12}	1.6758×10^{-12}	1.1581×10^{-2}	8.485
pdb2jmy 92	Classic	9.834×10^{-13}		2.2496×10^{-4}	
	Quaternion	9.967×10^{-13}	5.0812×10^{-13}	1.2334×10^{-3}	5.483
pdb2jn5 74	Classic	1.104×10^{-11}		1.6183×10^{-4}	
	Quaternion	2.456×10^{-11}	1.4609×10^{-11}	8.8254×10^{-4}	5.454
pdb2jnk 842	Classic	2.246×10^{-12}		1.4978×10^{-3}	
	Quaternion	2.319×10^{-12}	3.7362×10^{-13}	1.2360×10^{-2}	8.252
pdb2jpn 476	Classic	6.730×10^{-14}		1.3273×10^{-3}	
	Quaternion	6.983×10^{-14}	1.9605×10^{-13}	1.1888×10^{-2}	8.956
pdb2jua 614	Classic	1.740×10^{-11}		1.1250×10^{-3}	
	Quaternion	1.882×10^{-11}	1.4391×10^{-11}	9.5424×10^{-3}	8.482
pdb2jvd 288	Classic	3.339×10^{-14}		5.2724×10^{-4}	
	Quaternion	3.898×10^{-14}	2.1712×10^{-14}	4.8594×10^{-3}	9.217
pdb2jwe 984	Classic	2.695×10^{-11}		1.7478×10^{-3}	
	Quaternion	2.734×10^{-11}	1.0970×10^{-12}	1.5161×10^{-2}	8.675
pdb2jws 338	Classic	1.251×10^{-13}		6.4471×10^{-4}	
	Quaternion	1.543×10^{-13}	2.8647×10^{-13}	5.6997×10^{-3}	8.841
pdb2jwu 338	Classic	4.421×10^{-12}		5.9821×10^{-4}	
	Quaternion	4.373×10^{-12}	6.2322×10^{-13}	5.3566×10^{-3}	8.954
pdb2jxf 182	Classic	1.399×10^{-13}		3.2332×10^{-4}	
	Quaternion	1.734×10^{-13}	5.8450×10^{-13}	2.4081×10^{-3}	7.448
pdb2jz5 548	Classic	2.860×10^{-13}		9.8866×10^{-4}	
	Quaternion	2.854×10^{-13}	1.7635×10^{-13}	8.6016×10^{-3}	8.700
pdb2k2a 422	Classic	3.798×10^{-14}		8.2055×10^{-4}	
	Quaternion	5.134×10^{-14}	1.3435×10^{-13}	7.2327×10^{-3}	8.814
pdb2k2f 1268	Classic	2.639×10^{-13}		5.2749	
	Quaternion	2.818×10^{-13}	7.2949×10^{-14}	4.8904×10^1	9.271
pdb2k36 896	Classic	1.922×10^{-13}		1.5582×10^{-3}	
	Quaternion	2.045×10^{-13}	1.2563×10^{-13}	1.3869×10^{-2}	8.901
pdb2k37 356	Classic	1.921×10^{-13}		6.4501×10^{-4}	
	Quaternion	2.525×10^{-13}	4.0204×10^{-13}	5.7069×10^{-3}	8.848
pdb2k3i 656	Classic	3.810×10^{-13}		1.6044×10^{-3}	
	Quaternion	4.009×10^{-13}	2.4790×10^{-13}	1.4810×10^{-2}	9.231
pdb2k6s 494	Classic	2.100×10^{-13}		1.3981×10^{-3}	
	Quaternion	2.651×10^{-13}	4.8726×10^{-13}	1.3110×10^{-2}	9.377
pdb2k7o 1096	Classic	1.279×10^{-13}		5.3201×10^{-3}	
	Quaternion	1.416×10^{-13}	4.6393×10^{-13}	5.6473×10^{-2}	10.615
pdb2kbm 1268	Classic	2.165×10^{-13}		2.1558	
	Quaternion	2.230×10^{-13}	2.6963×10^{-13}	1.9794×10^1	9.182
pdb2kdh 434	Classic	1.947×10^{-11}		7.9362×10^{-4}	
	Quaternion	2.228×10^{-11}	7.6317×10^{-11}	6.8440×10^{-3}	8.624
pdb2kdl 338	Classic	2.301×10^{-13}		6.1508×10^{-4}	
	Quaternion	2.927×10^{-13}	3.1526×10^{-13}	5.5095×10^{-3}	8.957
pdb2kdm 338	Classic	3.191×10^{-12}		5.9819×10^{-4}	
	Quaternion	3.284×10^{-12}	9.9439×10^{-13}	5.3256×10^{-3}	8.903

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2kdp 428	Classic	2.621×10^{-13}		7.5376×10^{-4}	
	Quaternion	2.865×10^{-13}	1.0772×10^{-13}	6.6821×10^{-3}	8.865
pdb2kdr 170	Classic	6.617×10^{-14}		3.1015×10^{-4}	
	Quaternion	8.490×10^{-14}	6.1679×10^{-14}	2.3268×10^{-3}	7.502
pdb2kes 290	Classic	4.468×10^{-14}		5.5711×10^{-4}	
	Quaternion	5.425×10^{-14}	2.3286×10^{-14}	5.2754×10^{-3}	9.469
pdb2kib 352	Classic	2.533×10^{-12}		6.8845×10^{-3}	
	Quaternion	2.539×10^{-12}	1.3388×10^{-12}	6.8890×10^{-2}	10.007
pdb2kjin 158	Classic	9.828×10^{-14}		3.7977×10^{-4}	
	Quaternion	1.174×10^{-13}	1.3673×10^{-13}	2.1179×10^{-3}	5.577
pdb2kjo 158	Classic	2.284×10^{-13}		3.5624×10^{-4}	
	Quaternion	2.421×10^{-13}	6.7185×10^{-14}	1.9704×10^{-3}	5.531
pdb2kjr 572	Classic	3.247×10^{-12}		9.8775×10^{-4}	
	Quaternion	3.251×10^{-12}	4.0637×10^{-13}	8.4528×10^{-3}	8.558
pdb2kko 1300	Classic	1.191×10^{-13}		1.0923×10^{-2}	
	Quaternion	1.285×10^{-13}	2.9766×10^{-14}	1.0362×10^{-1}	9.487
pdb2kl5 662	Classic	1.820×10^{-13}		1.1297×10^{-3}	
	Quaternion	2.020×10^{-13}	1.3796×10^{-13}	9.5223×10^{-3}	8.429
pdb2klz 276	Classic	3.439×10^{-14}		5.2279×10^{-4}	
	Quaternion	4.443×10^{-14}	6.4874×10^{-14}	4.9302×10^{-3}	9.431
pdb2ko1 1060	Classic	1.150×10^{-12}		1.5245×10^{-2}	
	Quaternion	1.151×10^{-12}	7.8450×10^{-13}	1.4649×10^{-1}	9.609
pdb2koz 200	Classic	1.067×10^{-12}		3.6294×10^{-4}	
	Quaternion	1.151×10^{-12}	8.8025×10^{-13}	2.5957×10^{-3}	7.152
pdb2kp0 200	Classic	4.893×10^{-12}		3.4310×10^{-4}	
	Quaternion	5.588×10^{-12}	4.2756×10^{-12}	2.5502×10^{-3}	7.433
pdb2ksg 290	Classic	3.215×10^{-14}		4.8832×10^{-4}	
	Quaternion	3.967×10^{-14}	2.4678×10^{-14}	3.6435×10^{-3}	7.461
pdb2kt8 458	Classic	3.314×10^{-12}		7.8976×10^{-4}	
	Quaternion	3.535×10^{-12}	7.1394×10^{-13}	6.9016×10^{-3}	8.739
pdb2kuh 404	Classic	2.016×10^{-14}		7.6927×10^{-4}	
	Quaternion	2.492×10^{-14}	4.0485×10^{-14}	6.7733×10^{-3}	8.805
pdb2kwh 338	Classic	1.408×10^{-13}		5.8873×10^{-4}	
	Quaternion	1.825×10^{-13}	2.9549×10^{-13}	5.3246×10^{-3}	9.044
pdb2kxa 144	Classic	1.325×10^{-12}		3.2428×10^{-4}	
	Quaternion	1.351×10^{-12}	3.5240×10^{-13}	1.7089×10^{-3}	5.270
pdb2kyb 362	Classic	1.321×10^{-11}		6.8054×10^{-4}	
	Quaternion	1.373×10^{-11}	2.6755×10^{-12}	6.2349×10^{-3}	9.162
pdb2l3m 428	Classic	1.028×10^{-12}		7.3573×10^{-4}	
	Quaternion	9.340×10^{-13}	6.9725×10^{-13}	6.4676×10^{-3}	8.791
pdb2l3n 626	Classic	3.025×10^{-14}		4.4048×10^{-3}	
	Quaternion	3.634×10^{-14}	4.4517×10^{-14}	4.9188×10^{-2}	11.167
pdb2l45 116	Classic	2.236×10^{-14}		2.7623×10^{-4}	
	Quaternion	3.033×10^{-14}	8.5325×10^{-14}	1.5065×10^{-3}	5.454
pdb2l5r 138	Classic	3.529×10^{-14}		3.7195×10^{-4}	
	Quaternion	4.432×10^{-14}	1.4398×10^{-14}	2.1477×10^{-3}	5.774
pdb2l6q 374	Classic	4.435×10^{-11}		6.3764×10^{-4}	
	Quaternion	5.413×10^{-11}	1.5380×10^{-10}	5.7749×10^{-3}	9.057
pdb2l6r 374	Classic	2.060×10^{-12}		6.6930×10^{-4}	
	Quaternion	2.174×10^{-12}	2.4219×10^{-11}	6.0824×10^{-3}	9.088
pdb2l98 434	Classic	3.273×10^{-13}		7.4646×10^{-4}	
	Quaternion	3.638×10^{-13}	8.9102×10^{-13}	6.6275×10^{-3}	8.879
pdb2lci 806	Classic	2.579×10^{-13}		1.4672×10^{-3}	
	Quaternion	2.404×10^{-13}	8.2767×10^{-14}	1.2327×10^{-2}	8.402

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2lde 152	Classic	3.153×10^{-14}		3.4310×10^{-4}	
	Quaternion	3.762×10^{-14}	4.1691×10^{-14}	1.8834×10^{-3}	5.489
pdb2le2 676	Classic	2.064×10^{-13}		1.5145×10^{-2}	
	Quaternion	2.042×10^{-13}	7.7661×10^{-14}	1.4040×10^{-1}	9.271
pdb2le7 122	Classic	2.112×10^{-14}		2.7783×10^{-4}	
	Quaternion	2.749×10^{-14}	3.9789×10^{-14}	1.5384×10^{-3}	5.537
pdb2ler 68	Classic	1.315×10^{-14}		1.5112×10^{-4}	
	Quaternion	1.532×10^{-14}	2.1465×10^{-14}	8.1315×10^{-4}	5.381
pdb2lgi 338	Classic	1.068×10^{-12}		5.9247×10^{-4}	
	Quaternion	1.052×10^{-12}	1.8917×10^{-13}	5.3870×10^{-3}	9.093
pdb2lhc 338	Classic	2.902×10^{-12}		6.3825×10^{-4}	
	Quaternion	2.997×10^{-12}	2.1365×10^{-12}	5.8566×10^{-3}	9.176
pdb2lhd 338	Classic	1.930×10^{-12}		5.8251×10^{-4}	
	Quaternion	2.033×10^{-12}	2.3902×10^{-12}	5.2959×10^{-3}	9.092
pdb2lhe 338	Classic	4.963×10^{-11}		6.1309×10^{-4}	
	Quaternion	4.967×10^{-11}	4.8488×10^{-13}	5.5012×10^{-3}	8.973
pdb2lhg 338	Classic	6.459×10^{-14}		6.0755×10^{-4}	
	Quaternion	7.322×10^{-14}	5.9754×10^{-14}	5.5854×10^{-3}	9.193
pdb2lix 162	Classic	4.842×10^{-14}		3.8437×10^{-4}	
	Quaternion	5.614×10^{-14}	7.8975×10^{-14}	2.1208×10^{-3}	5.517
pdb2lld 242	Classic	1.937×10^{-13}		4.3596×10^{-4}	
	Quaternion	2.214×10^{-13}	2.2642×10^{-13}	3.2601×10^{-3}	7.478
pdb2lm9 578	Classic	6.254×10^{-14}		1.0173×10^{-3}	
	Quaternion	7.713×10^{-14}	1.5079×10^{-13}	8.8827×10^{-3}	8.732
pdb2lmf 140	Classic	1.282×10^{-13}		3.1202×10^{-4}	
	Quaternion	1.462×10^{-13}	7.9808×10^{-14}	1.7012×10^{-3}	5.452
pdb2ln3 500	Classic	1.292×10^{-13}		8.9152×10^{-4}	
	Quaternion	1.359×10^{-13}	8.4114×10^{-14}	7.8811×10^{-3}	8.840
pdb2lo2 230	Classic	2.068×10^{-14}		3.9248×10^{-4}	
	Quaternion	2.571×10^{-14}	3.6944×10^{-14}	2.9206×10^{-3}	7.441
pdb2lqp 428	Classic	2.950×10^{-13}		7.4146×10^{-4}	
	Quaternion	3.085×10^{-13}	4.7561×10^{-13}	6.6591×10^{-3}	8.981
pdb2lr0 806	Classic	3.549×10^{-12}		1.4742×10^{-3}	
	Quaternion	3.440×10^{-12}	6.0485×10^{-13}	1.2818×10^{-2}	8.695
pdb2lrh 806	Classic	5.631×10^{-13}		1.4348×10^{-3}	
	Quaternion	6.564×10^{-13}	3.2048×10^{-13}	1.2417×10^{-2}	8.654
pdb2ls9 152	Classic	1.122×10^{-13}		3.1654×10^{-4}	
	Quaternion	1.471×10^{-13}	3.7128×10^{-13}	1.7085×10^{-3}	5.397
pdb2lsa 140	Classic	5.235×10^{-14}		3.1971×10^{-4}	
	Quaternion	7.034×10^{-14}	1.5385×10^{-13}	1.7255×10^{-3}	5.397
pdb2lss 422	Classic	1.230×10^{-13}		7.4616×10^{-4}	
	Quaternion	1.455×10^{-13}	1.6926×10^{-13}	6.3806×10^{-3}	8.551
pdb2lt3 680	Classic	7.245×10^{-14}		1.2264×10^{-3}	
	Quaternion	7.760×10^{-14}	5.2634×10^{-14}	1.0584×10^{-2}	8.630
pdb2lu6 86	Classic	5.356×10^{-15}		2.0177×10^{-4}	
	Quaternion	6.922×10^{-15}	4.1890×10^{-15}	1.1132×10^{-3}	5.517
pdb2lwa 432	Classic	3.615×10^{-13}		7.4943×10^{-4}	
	Quaternion	4.427×10^{-13}	9.3395×10^{-13}	6.5479×10^{-3}	8.737
pdb2lx0 194	Classic	3.569×10^{-13}		3.6060×10^{-4}	
	Quaternion	4.035×10^{-13}	2.0605×10^{-13}	2.6519×10^{-3}	7.354
pdb2lxb 892	Classic	1.542×10^{-13}		2.0064×10^{-3}	
	Quaternion	1.585×10^{-13}	1.6837×10^{-13}	1.8449×10^{-2}	9.195
pdb2lxy 404	Classic	9.313×10^{-13}		6.7654×10^{-4}	
	Quaternion	1.025×10^{-12}	1.6618×10^{-12}	5.9711×10^{-3}	8.826

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2lxx 194	Classic	2.371×10^{-12}	1.9895×10^{-12}	3.5827×10^{-4}	7.493
	Quaternion	2.792×10^{-12}		2.6845×10^{-3}	
pdb2lzf 820	Classic	3.217×10^{-14}	1.2991×10^{-13}	4.8256×10^{-2}	8.733
	Quaternion	3.957×10^{-14}		4.2144×10^{-1}	
pdb2m1a 158	Classic	6.346×10^{-15}	6.5801×10^{-15}	3.2920×10^{-4}	7.572
	Quaternion	7.612×10^{-15}		2.4928×10^{-3}	
pdb2m1j 182	Classic	1.865×10^{-14}	6.6915×10^{-14}	3.2907×10^{-4}	7.567
	Quaternion	2.212×10^{-14}		2.4901×10^{-3}	
pdb2m2y 110	Classic	2.699×10^{-13}	1.4386×10^{-13}	2.5549×10^{-4}	5.449
	Quaternion	2.808×10^{-13}		1.3921×10^{-3}	
pdb2m3f 134	Classic	3.629×10^{-14}	5.8107×10^{-14}	2.9775×10^{-4}	5.369
	Quaternion	4.641×10^{-14}		1.5987×10^{-3}	
pdb2m4j 2178	Classic	1.463×10^{-11}	1.8385×10^{-13}	1.1153×10^{-2}	9.615
	Quaternion	1.455×10^{-11}		1.0724×10^{-1}	
pdb2m8m 170	Classic	2.407×10^{-14}	1.1738×10^{-13}	3.7674×10^{-4}	5.561
	Quaternion	3.023×10^{-14}		2.0951×10^{-3}	
pdb2m8o 170	Classic	1.672×10^{-14}	2.4755×10^{-14}	3.6826×10^{-4}	5.548
	Quaternion	2.039×10^{-14}		2.0431×10^{-3}	
pdb2m97 416	Classic	4.646×10^{-14}	2.0639×10^{-13}	7.2849×10^{-4}	9.093
	Quaternion	5.841×10^{-14}		6.6240×10^{-3}	
pdb2m9g 1108	Classic	2.939×10^{-13}	5.8913×10^{-13}	2.2008×10^{-3}	8.307
	Quaternion	3.170×10^{-13}		1.8282×10^{-2}	
pdb2m9r 242	Classic	3.537×10^{-14}	1.6694×10^{-13}	4.3306×10^{-4}	7.964
	Quaternion	4.406×10^{-14}		3.4489×10^{-3}	
pdb2mdv 460	Classic	3.178×10^{-12}	3.0402×10^{-13}	8.5701×10^{-4}	8.770
	Quaternion	3.178×10^{-12}		7.5156×10^{-3}	
pdb2me1 164	Classic	1.886×10^{-13}	1.6579×10^{-13}	3.6691×10^{-4}	5.447
	Quaternion	2.208×10^{-13}		1.9986×10^{-3}	
pdb2me2 164	Classic	3.667×10^{-13}	1.1486×10^{-12}	3.8722×10^{-4}	5.539
	Quaternion	5.098×10^{-13}		2.1450×10^{-3}	
pdb2me3 164	Classic	1.425×10^{-13}	8.1775×10^{-14}	3.6492×10^{-4}	5.399
	Quaternion	1.590×10^{-13}		1.9702×10^{-3}	
pdb2me4 164	Classic	5.547×10^{-13}	9.4808×10^{-13}	3.2644×10^{-4}	7.427
	Quaternion	6.222×10^{-13}		2.4246×10^{-3}	
pdb2mg1 164	Classic	4.398×10^{-14}	1.5805×10^{-13}	3.6561×10^{-4}	5.585
	Quaternion	5.374×10^{-14}		2.0417×10^{-3}	
pdb2mg2 170	Classic	1.829×10^{-14}	2.5921×10^{-14}	3.7115×10^{-4}	5.644
	Quaternion	2.480×10^{-14}		2.0947×10^{-3}	
pdb2mg3 170	Classic	3.541×10^{-14}	2.4798×10^{-13}	3.8779×10^{-4}	5.603
	Quaternion	4.461×10^{-14}		2.1727×10^{-3}	
pdb2mh8 338	Classic	1.547×10^{-13}	2.9903×10^{-13}	6.2780×10^{-4}	9.445
	Quaternion	1.883×10^{-13}		5.9295×10^{-3}	
pdb2mhw 164	Classic	6.229×10^{-14}	4.9718×10^{-13}	3.7713×10^{-4}	5.426
	Quaternion	7.129×10^{-14}		2.0463×10^{-3}	
pdb2mi1 84	Classic	1.827×10^{-12}	1.5687×10^{-12}	2.0672×10^{-4}	5.470
	Quaternion	2.052×10^{-12}		1.1308×10^{-3}	
pdb2mi7 404	Classic	6.022×10^{-13}	1.3690×10^{-12}	6.3648×10^{-4}	9.234
	Quaternion	6.817×10^{-13}		5.8775×10^{-3}	
pdb2mij 224	Classic	1.244×10^{-13}	2.8681×10^{-13}	3.7489×10^{-4}	7.467
	Quaternion	1.522×10^{-13}		2.7993×10^{-3}	
pdb2mix 128	Classic	4.816×10^{-14}	3.7348×10^{-14}	2.8861×10^{-4}	5.419
	Quaternion	4.684×10^{-14}		1.5641×10^{-3}	
pdb2mj1 110	Classic	1.309×10^{-13}	2.3819×10^{-13}	2.6878×10^{-4}	5.519
	Quaternion	1.646×10^{-13}		1.4834×10^{-3}	

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2mj2 218	Classic	9.775×10^{-14}		3.7693×10^{-4}	
	Quaternion	1.196×10^{-13}	8.8713×10^{-14}	2.8954×10^{-3}	7.682
pdb2mjg 556	Classic	5.503×10^{-14}		2.3802×10^{-3}	
	Quaternion	6.580×10^{-14}	7.0670×10^{-14}	2.4684×10^{-2}	10.370
pdb2mji 788	Classic	3.207×10^{-12}		1.3558×10^{-3}	
	Quaternion	3.247×10^{-12}	2.7336×10^{-13}	1.1493×10^{-2}	8.477
pdb2mle 434	Classic	1.491×10^{-13}		7.8084×10^{-4}	
	Quaternion	1.535×10^{-13}	3.1271×10^{-13}	7.0985×10^{-3}	9.091
pdb2mlf 434	Classic	9.918×10^{-14}		7.7299×10^{-4}	
	Quaternion	1.128×10^{-13}	9.2903×10^{-14}	7.0224×10^{-3}	9.085
pdb2mo5 854	Classic	1.394×10^{-12}		1.5199×10^{-3}	
	Quaternion	1.403×10^{-12}	1.0682×10^{-12}	1.4037×10^{-2}	9.236
pdb2mpu 554	Classic	9.785×10^{-14}		9.9845×10^{-4}	
	Quaternion	1.016×10^{-13}	1.0352×10^{-13}	8.7204×10^{-3}	8.734
pdb2mra 704	Classic	2.632×10^{-13}		1.5523×10^{-3}	
	Quaternion	2.768×10^{-13}	1.2867×10^{-13}	1.4576×10^{-2}	9.390
pdb2msu 122	Classic	7.813×10^{-14}		3.0520×10^{-4}	
	Quaternion	8.765×10^{-14}	3.7025×10^{-14}	1.6975×10^{-3}	5.562
pdb2mtj 120	Classic	1.849×10^{-14}		3.2555×10^{-4}	
	Quaternion	2.364×10^{-14}	9.1457×10^{-14}	1.8731×10^{-3}	5.753
pdb2muh 98	Classic	2.008×10^{-13}		2.2327×10^{-4}	
	Quaternion	2.251×10^{-13}	1.4292×10^{-13}	1.2280×10^{-3}	5.500
pdb2mvj 156	Classic	1.534×10^{-13}		3.6646×10^{-4}	
	Quaternion	1.647×10^{-13}	5.5998×10^{-14}	2.0346×10^{-3}	5.552
pdb2mvt 284	Classic	6.053×10^{-12}		4.8908×10^{-4}	
	Quaternion	6.226×10^{-12}	3.1969×10^{-12}	3.6891×10^{-3}	7.543
pdb2mvx 2360	Classic	1.968×10^{-10}		9.4341×10^{-3}	
	Quaternion	1.971×10^{-10}	3.7182×10^{-11}	8.6154×10^{-2}	9.132
pdb2mz6 220	Classic	2.141×10^{-11}		9.1104×10^{-3}	
	Quaternion	2.153×10^{-11}	4.4199×10^{-13}	8.4254×10^{-2}	9.248
pdb2n00 572	Classic	2.703×10^{-13}		8.6970×10^{-4}	
	Quaternion	3.467×10^{-13}	7.3499×10^{-13}	7.5525×10^{-3}	8.684
pdb2n0b 60	Classic	7.104×10^{-13}		1.4046×10^{-4}	
	Quaternion	9.458×10^{-13}	8.9441×10^{-13}	7.8945×10^{-4}	5.620
pdb2n0c 60	Classic	1.293×10^{-13}		1.3741×10^{-4}	
	Quaternion	1.682×10^{-13}	2.8483×10^{-13}	7.6406×10^{-4}	5.560
pdb2n0d 60	Classic	3.639×10^{-12}		1.4277×10^{-4}	
	Quaternion	4.540×10^{-12}	1.6154×10^{-11}	8.0334×10^{-4}	5.627
pdb2n0e 60	Classic	3.314×10^{-12}		1.3854×10^{-4}	
	Quaternion	4.286×10^{-12}	8.3573×10^{-12}	7.6609×10^{-4}	5.530
pdb2n0f 60	Classic	3.185×10^{-13}		1.3812×10^{-4}	
	Quaternion	4.023×10^{-13}	5.8027×10^{-13}	7.6479×10^{-4}	5.537
pdb2n0g 60	Classic	8.315×10^{-13}		1.5118×10^{-4}	
	Quaternion	9.618×10^{-13}	1.3124×10^{-13}	8.4727×10^{-4}	5.605
pdb2n0h 60	Classic	7.690×10^{-13}		1.4014×10^{-4}	
	Quaternion	8.730×10^{-13}	1.8191×10^{-13}	7.8968×10^{-4}	5.635
pdb2n35 314	Classic	3.541×10^{-14}		5.5901×10^{-4}	
	Quaternion	4.466×10^{-14}	1.0752×10^{-13}	5.3970×10^{-3}	9.655
pdb2n3a 574	Classic	8.761×10^{-14}		2.0149×10^{-2}	
	Quaternion	1.049×10^{-13}	1.0149×10^{-13}	1.9906×10^{-1}	9.880
pdb2n41 638	Classic	1.812×10^{-13}		1.1790×10^{-3}	
	Quaternion	1.836×10^{-13}	8.2539×10^{-14}	1.0433×10^{-2}	8.849
pdb2n4e 638	Classic	1.494×10^{-13}		1.1599×10^{-3}	
	Quaternion	1.687×10^{-13}	1.8433×10^{-13}	1.0212×10^{-2}	8.804

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2n5q 164	Classic	1.732×10^{-12}	1.7589×10^{-12}	3.8385×10^{-4}	5.479
	Quaternion	1.745×10^{-12}		2.1031×10^{-3}	
pdb2n67 566	Classic	4.443×10^{-13}	6.3487×10^{-14}	1.0028×10^{-3}	8.751
	Quaternion	4.465×10^{-13}		8.7756×10^{-3}	
pdb2n6n 192	Classic	6.552×10^{-13}	4.4318×10^{-13}	4.2248×10^{-4}	7.902
	Quaternion	7.487×10^{-13}		3.3386×10^{-3}	
pdb2n7i 224	Classic	9.212×10^{-13}	3.0537×10^{-12}	3.8863×10^{-4}	7.588
	Quaternion	1.126×10^{-12}		2.9489×10^{-3}	
pdb2n7j 336	Classic	5.969×10^{-13}	1.5144×10^{-13}	6.1369×10^{-4}	9.486
	Quaternion	6.094×10^{-13}		5.8212×10^{-3}	
pdb2n9b 832	Classic	1.196×10^{-12}	1.1231×10^{-12}	5.0808×10^{-3}	11.372
	Quaternion	1.238×10^{-12}		5.7780×10^{-2}	
pdb2na9 266	Classic	5.440×10^{-14}	5.4544×10^{-14}	4.5025×10^{-4}	7.495
	Quaternion	6.690×10^{-14}		3.3747×10^{-3}	
pdb2ndc 110	Classic	3.365×10^{-14}	5.1916×10^{-14}	2.6782×10^{-4}	5.492
	Quaternion	4.479×10^{-14}		1.4709×10^{-3}	
pdb2nde 110	Classic	7.022×10^{-14}	2.5156×10^{-13}	2.3683×10^{-4}	5.408
	Quaternion	8.868×10^{-14}		1.2807×10^{-3}	
pdb2ndk 290	Classic	5.022×10^{-13}	2.0516×10^{-12}	4.9185×10^{-4}	7.508
	Quaternion	6.279×10^{-13}		3.6926×10^{-3}	
pdb2nvj 152	Classic	2.082×10^{-14}	1.4035×10^{-14}	3.1655×10^{-4}	5.304
	Quaternion	2.293×10^{-14}		1.6791×10^{-3}	
pdb2p6j 314	Classic	4.795×10^{-14}	1.1404×10^{-13}	5.4868×10^{-4}	9.605
	Quaternion	6.389×10^{-14}		5.2703×10^{-3}	
pdb2p81 266	Classic	7.881×10^{-13}	4.3715×10^{-13}	4.5051×10^{-4}	7.563
	Quaternion	8.250×10^{-13}		3.4071×10^{-3}	
pdb2pqe 896	Classic	1.127×10^{-11}	8.5719×10^{-12}	1.5984×10^{-3}	9.217
	Quaternion	1.248×10^{-11}		1.4733×10^{-2}	
pdb2rlg 108	Classic	5.501×10^{-14}	6.8873×10^{-14}	2.6156×10^{-4}	5.509
	Quaternion	6.973×10^{-14}		1.4408×10^{-3}	
pdb2rlh 108	Classic	4.772×10^{-14}	3.9131×10^{-14}	2.8127×10^{-4}	5.529
	Quaternion	5.801×10^{-14}		1.5553×10^{-3}	
pdb2rmy 206	Classic	1.872×10^{-13}	3.6453×10^{-13}	3.6099×10^{-4}	7.554
	Quaternion	2.498×10^{-13}		2.7271×10^{-3}	
pdb2rnd 206	Classic	2.626×10^{-13}	4.9979×10^{-13}	3.5179×10^{-4}	7.484
	Quaternion	3.581×10^{-13}		2.6327×10^{-3}	
pdb2roo 260	Classic	2.933×10^{-12}	3.5927×10^{-12}	1.0489×10^{-3}	9.753
	Quaternion	3.525×10^{-12}		1.0230×10^{-2}	
pdb2rql 572	Classic	2.345×10^{-12}	8.7086×10^{-13}	1.0462×10^{-3}	8.934
	Quaternion	2.496×10^{-12}		9.3466×10^{-3}	
pdb2rut 218	Classic	4.389×10^{-14}	3.5338×10^{-13}	3.7468×10^{-4}	7.577
	Quaternion	5.014×10^{-14}		2.8389×10^{-3}	
pdb2ruv 224	Classic	5.776×10^{-14}	1.2473×10^{-13}	3.8811×10^{-4}	7.634
	Quaternion	7.408×10^{-14}		2.9630×10^{-3}	
pdb2rux 218	Classic	2.671×10^{-14}	6.2140×10^{-14}	3.8815×10^{-4}	7.715
	Quaternion	3.016×10^{-14}		2.9944×10^{-3}	
pdb2ruy 224	Classic	1.968×10^{-14}	6.4254×10^{-14}	3.8895×10^{-4}	7.723
	Quaternion	2.387×10^{-14}		3.0040×10^{-3}	
pdb2rv3 218	Classic	3.656×10^{-14}	6.3794×10^{-14}	3.9622×10^{-4}	7.748
	Quaternion	4.118×10^{-14}		3.0699×10^{-3}	
pdb2rv5 212	Classic	1.145×10^{-14}	1.6010×10^{-14}	3.7049×10^{-4}	7.623
	Quaternion	1.338×10^{-14}		2.8242×10^{-3}	
pdb2y4q 476	Classic	1.410×10^{-12}	2.0648×10^{-13}	7.8652×10^{-4}	9.217
	Quaternion	1.451×10^{-12}		7.2496×10^{-3}	