

Table 1: Results

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1a57 698	Classic	2.096×10^{-11}		2.1619×10^{-3}	
	Quaternion	2.092×10^{-11}	1.8861×10^{-12}	1.3254×10^{-3}	63.107
pdb1b4c 1108	Classic	5.070×10^{-13}		6.9565×10^{-3}	
	Quaternion	5.498×10^{-13}	1.0757×10^{-12}	3.8304×10^{-3}	81.614
pdb1ba5 320	Classic	9.359×10^{-13}		6.6214×10^{-4}	
	Quaternion	1.070×10^{-12}	4.1376×10^{-12}	4.1305×10^{-4}	60.303
pdb1d1n 594	Classic	1.005×10^{-11}		1.0323×10^{-3}	
	Quaternion	9.672×10^{-12}	1.2689×10^{-12}	6.5782×10^{-4}	56.930
pdb1dp3 332	Classic	7.704×10^{-13}		5.3929×10^{-4}	
	Quaternion	8.939×10^{-13}	1.4697×10^{-12}	3.2486×10^{-4}	66.009
pdb1du1 122	Classic	8.225×10^{-13}		1.8230×10^{-4}	
	Quaternion	1.258×10^{-12}	1.2376×10^{-12}	1.1041×10^{-4}	65.107
pdb1eii 806	Classic	1.393×10^{-11}		1.4159×10^{-3}	
	Quaternion	1.365×10^{-11}	1.1331×10^{-11}	8.9087×10^{-4}	58.937
pdb1fcl 338	Classic	4.542×10^{-12}		6.0637×10^{-4}	
	Quaternion	4.515×10^{-12}	8.0786×10^{-13}	3.6910×10^{-4}	64.286
pdb1fd6 344	Classic	3.182×10^{-12}		6.0940×10^{-4}	
	Quaternion	3.193×10^{-12}	3.3846×10^{-13}	3.7272×10^{-4}	63.503
pdb1hf9 496	Classic	1.157×10^{-11}		1.1282×10^{-2}	
	Quaternion	1.180×10^{-11}	3.9332×10^{-12}	5.5652×10^{-3}	102.725
pdb1i2u 266	Classic	5.562×10^{-13}		4.4666×10^{-4}	
	Quaternion	5.607×10^{-13}	1.5136×10^{-13}	2.7242×10^{-4}	63.960
pdb1i2v 266	Classic	2.418×10^{-13}		4.9335×10^{-4}	
	Quaternion	2.519×10^{-13}	6.9127×10^{-14}	2.9752×10^{-4}	65.820
pdb1ijc 380	Classic	1.408×10^{-11}		6.3050×10^{-4}	
	Quaternion	1.426×10^{-11}	2.4877×10^{-12}	3.8765×10^{-4}	62.646
pdb1jlz 140	Classic	5.594×10^{-13}		2.1947×10^{-4}	
	Quaternion	5.965×10^{-13}	1.3105×10^{-12}	1.3368×10^{-4}	64.178
pdb1jw3 842	Classic	5.936×10^{-13}		1.4560×10^{-3}	
	Quaternion	5.897×10^{-13}	3.9013×10^{-13}	9.1058×10^{-4}	59.901
pdb1k0v 440	Classic	1.893×10^{-13}		8.0136×10^{-4}	
	Quaternion	1.894×10^{-13}	1.3433×10^{-13}	4.9410×10^{-4}	62.185
pdb1k2h 1120	Classic	5.491×10^{-13}		5.2146×10^{-3}	
	Quaternion	5.199×10^{-13}	2.2039×10^{-13}	2.9533×10^{-3}	76.570
pdb1k36 278	Classic	8.820×10^{-12}		4.5323×10^{-4}	
	Quaternion	1.081×10^{-11}	2.8981×10^{-11}	2.7208×10^{-4}	66.582
pdb1k37 278	Classic	4.711×10^{-13}		4.7322×10^{-4}	
	Quaternion	4.988×10^{-13}	1.5479×10^{-13}	2.8383×10^{-4}	66.727
pdb1kuw 62	Classic	9.229×10^{-14}		1.0282×10^{-4}	
	Quaternion	1.130×10^{-13}	7.3457×10^{-14}	6.2571×10^{-5}	64.324
pdb1kz0 98	Classic	4.404×10^{-14}		1.5888×10^{-4}	
	Quaternion	5.880×10^{-14}	2.4335×10^{-13}	9.5929×10^{-5}	65.628
pdb1kz2 98	Classic	2.119×10^{-14}		1.7042×10^{-4}	
	Quaternion	2.886×10^{-14}	2.6112×10^{-14}	1.0326×10^{-4}	65.035
pdb1kz5 74	Classic	4.081×10^{-14}		1.2408×10^{-4}	
	Quaternion	4.738×10^{-14}	4.8348×10^{-14}	7.4503×10^{-5}	66.546
pdb1lvz 68	Classic	6.336×10^{-14}		1.0871×10^{-4}	
	Quaternion	7.315×10^{-14}	7.3919×10^{-14}	6.6696×10^{-5}	62.999
pdb1m4e 122	Classic	5.949×10^{-13}		1.9611×10^{-4}	
	Quaternion	5.972×10^{-13}	1.1702×10^{-13}	1.1843×10^{-4}	65.585
pdb1ma2 104	Classic	8.695×10^{-12}		1.7843×10^{-4}	
	Quaternion	8.758×10^{-12}	4.7062×10^{-13}	1.0648×10^{-4}	67.568
pdb1ma4 104	Classic	7.247×10^{-14}		4.5032×10^{-4}	
	Quaternion	7.981×10^{-14}	1.8851×10^{-13}	2.4980×10^{-4}	80.272
pdb1ma5	Classic	8.169×10^{-13}		1.6704×10^{-4}	

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
104	Quaternion	9.044×10^{-13}	5.0234×10^{-13}	1.0056×10^{-4}	66.109
pdblma6	Classic	6.283×10^{-13}		1.5608×10^{-4}	
104	Quaternion	8.522×10^{-13}	3.3052×10^{-12}	9.5105×10^{-5}	64.115
pdblmpe	Classic	2.617×10^{-11}		2.5529×10^{-3}	
1352	Quaternion	2.624×10^{-11}	7.1261×10^{-13}	1.5790×10^{-3}	61.674
pdblnd9	Classic	3.026×10^{-13}		4.9485×10^{-4}	
296	Quaternion	3.845×10^{-13}	4.7137×10^{-13}	3.0197×10^{-4}	63.872
pdblne5	Classic	1.214×10^{-12}		4.0405×10^{-4}	
254	Quaternion	1.384×10^{-12}	7.5582×10^{-13}	2.4747×10^{-4}	63.268
pdblnmj	Classic	1.237×10^{-14}		3.0065×10^{-4}	
170	Quaternion	1.424×10^{-14}	1.3921×10^{-14}	1.8155×10^{-4}	65.603
pdblo53	Classic	3.999×10^{-13}		1.6454×10^{-4}	
92	Quaternion	4.545×10^{-13}	6.5350×10^{-13}	9.8595×10^{-5}	66.888
pdbloqp	Classic	7.045×10^{-14}		3.3130×10^{-3}	
580	Quaternion	8.315×10^{-14}	9.0066×10^{-14}	1.8492×10^{-3}	79.160
pdblplw	Classic	2.830×10^{-14}		5.0674×10^{-5}	
32	Quaternion	3.122×10^{-14}	4.9118×10^{-14}	3.1955×10^{-5}	58.582
pdblplx	Classic	1.574×10^{-13}		4.8005×10^{-5}	
32	Quaternion	2.060×10^{-13}	1.7973×10^{-13}	3.0342×10^{-5}	58.215
pdblpv0	Classic	2.409×10^{-13}		4.8761×10^{-4}	
278	Quaternion	2.723×10^{-13}	1.0662×10^{-13}	2.8928×10^{-4}	68.559
pdblpzt	Classic	5.644×10^{-12}		2.9728×10^{-3}	
724	Quaternion	5.871×10^{-12}	9.9935×10^{-12}	1.7050×10^{-3}	74.354
pdblqlk	Classic	2.634×10^{-13}		1.3266×10^{-2}	
1108	Quaternion	2.869×10^{-13}	1.8593×10^{-12}	6.5484×10^{-3}	102.587
pdblr57	Classic	1.847×10^{-13}		1.0884×10^{-3}	
614	Quaternion	2.054×10^{-13}	1.4866×10^{-13}	6.8177×10^{-4}	59.648
pdblry3	Classic	4.938×10^{-13}		7.0515×10^{-4}	
386	Quaternion	5.910×10^{-13}	4.7678×10^{-13}	4.1930×10^{-4}	68.175
pdbls4h	Classic	4.696×10^{-13}		1.2407×10^{-4}	
80	Quaternion	6.349×10^{-13}	1.1092×10^{-12}	7.4789×10^{-5}	65.892
pdbls4j	Classic	1.520×10^{-13}		1.4115×10^{-4}	
80	Quaternion	2.230×10^{-13}	1.6407×10^{-13}	8.5197×10^{-5}	65.676
pdbls6j	Classic	6.073×10^{-13}		8.8354×10^{-4}	
524	Quaternion	7.660×10^{-13}	5.9201×10^{-13}	5.4301×10^{-4}	62.712
pdblsa8	Classic	9.340×10^{-13}		1.1007×10^{-3}	
638	Quaternion	1.034×10^{-12}	1.0370×10^{-12}	6.8727×10^{-4}	60.157
pdblt2y	Classic	1.887×10^{-13}		2.5640×10^{-4}	
152	Quaternion	2.396×10^{-13}	2.3861×10^{-13}	1.5422×10^{-4}	66.257
pdblt5q	Classic	3.877×10^{-14}		2.7677×10^{-4}	
180	Quaternion	5.093×10^{-14}	5.3231×10^{-14}	1.6789×10^{-4}	64.849
pdbltot	Classic	6.148×10^{-14}		5.7252×10^{-4}	
314	Quaternion	6.853×10^{-14}	2.8392×10^{-14}	3.4454×10^{-4}	66.169
pdblv6r	Classic	6.835×10^{-13}		2.1523×10^{-4}	
128	Quaternion	6.970×10^{-13}	3.1917×10^{-13}	1.2801×10^{-4}	68.132
pdblv92	Classic	1.463×10^{-13}		4.7785×10^{-4}	
278	Quaternion	1.630×10^{-13}	5.6062×10^{-14}	2.8679×10^{-4}	66.620
pdblvd7	Classic	6.342×10^{-13}		2.2836×10^{-4}	
140	Quaternion	7.439×10^{-13}	5.8715×10^{-13}	1.3648×10^{-4}	67.316
pdblvd9	Classic	1.290×10^{-12}		2.3449×10^{-4}	
140	Quaternion	1.554×10^{-12}	9.0327×10^{-13}	1.4005×10^{-4}	67.433
pdblvdb	Classic	9.108×10^{-13}		2.1767×10^{-4}	
140	Quaternion	1.083×10^{-12}	3.8641×10^{-13}	1.3187×10^{-4}	65.060
pdblvpc	Classic	8.500×10^{-15}		4.6591×10^{-4}	
272	Quaternion	1.002×10^{-14}	8.5436×10^{-15}	2.8235×10^{-4}	65.014

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1wnk 140	Classic	4.112×10^{-12}		2.2627×10^{-4}	
	Quaternion	4.632×10^{-12}	2.2335×10^{-11}	1.3555×10^{-4}	66.930
pdb1wo4 152	Classic	9.957×10^{-13}		2.5233×10^{-4}	
	Quaternion	9.639×10^{-13}	2.3523×10^{-12}	1.4997×10^{-4}	68.255
pdb1wo5 152	Classic	2.372×10^{-12}		2.5089×10^{-4}	
	Quaternion	2.514×10^{-12}	4.9059×10^{-12}	1.4895×10^{-4}	68.437
pdb1x60 476	Classic	1.076×10^{-12}		8.6089×10^{-4}	
	Quaternion	1.179×10^{-12}	3.9684×10^{-13}	5.3054×10^{-4}	62.266
pdb1x9v 544	Classic	8.975×10^{-13}		1.3813×10^{-2}	
	Quaternion	9.632×10^{-13}	1.3900×10^{-13}	6.9153×10^{-3}	99.754
pdb1y5c 68	Classic	7.693×10^{-14}		1.1383×10^{-4}	
	Quaternion	9.383×10^{-14}	2.8771×10^{-13}	6.7701×10^{-5}	68.136
pdb1yx7 500	Classic	3.509×10^{-12}		8.8610×10^{-4}	
	Quaternion	4.348×10^{-12}	7.3422×10^{-12}	5.5150×10^{-4}	60.671
pdb1yx8 500	Classic	7.276×10^{-12}		1.0474×10^{-3}	
	Quaternion	8.217×10^{-12}	1.0819×10^{-11}	6.3793×10^{-4}	64.183
pdb1yxr 464	Classic	6.979×10^{-13}		7.4688×10^{-4}	
	Quaternion	7.989×10^{-13}	2.5340×10^{-13}	4.5861×10^{-4}	62.858
pdb2a2y 1072	Classic	1.150×10^{-12}		3.9989×10^{-2}	
	Quaternion	1.151×10^{-12}	3.7416×10^{-13}	1.8616×10^{-2}	114.807
pdb2a4j 580	Classic	2.085×10^{-14}		1.1753×10^{-3}	
	Quaternion	2.727×10^{-14}	1.4394×10^{-14}	7.1665×10^{-4}	64.006
pdb2adl 868	Classic	1.752×10^{-11}		3.8536×10^{-3}	
	Quaternion	1.787×10^{-11}	3.0093×10^{-12}	2.1600×10^{-3}	78.407
pdb2adn 868	Classic	6.693×10^{-12}		2.0933×10^{-3}	
	Quaternion	6.465×10^{-12}	2.4957×10^{-12}	1.2610×10^{-3}	66.002
pdb2ajj 170	Classic	5.641×10^{-14}		2.8310×10^{-4}	
	Quaternion	6.584×10^{-14}	1.2744×10^{-13}	1.6805×10^{-4}	68.463
pdb2ajm 170	Classic	1.183×10^{-13}		3.0295×10^{-4}	
	Quaternion	1.555×10^{-13}	8.9439×10^{-13}	1.7968×10^{-4}	68.608
pdb2ajn 170	Classic	1.076×10^{-13}		3.0590×10^{-4}	
	Quaternion	1.217×10^{-13}	1.5981×10^{-13}	1.8059×10^{-4}	69.391
pdb2ajo 170	Classic	1.183×10^{-13}		3.0390×10^{-4}	
	Quaternion	1.555×10^{-13}	8.9439×10^{-13}	1.8012×10^{-4}	68.720
pdb2akk 446	Classic	1.288×10^{-13}		7.7110×10^{-4}	
	Quaternion	1.270×10^{-13}	1.1725×10^{-13}	4.7578×10^{-4}	62.070
pdb2bzb 748	Classic	9.365×10^{-14}		1.7243×10^{-2}	
	Quaternion	1.224×10^{-13}	1.5097×10^{-13}	8.6729×10^{-3}	98.817
pdb2c0s 386	Classic	3.028×10^{-13}		7.1518×10^{-4}	
	Quaternion	3.379×10^{-13}	7.2067×10^{-13}	4.3276×10^{-4}	65.259
pdb2dci 120	Classic	2.366×10^{-14}		1.8630×10^{-4}	
	Quaternion	2.950×10^{-14}	1.3479×10^{-13}	1.1371×10^{-4}	63.829
pdb2eem 206	Classic	5.190×10^{-13}		3.5223×10^{-4}	
	Quaternion	5.461×10^{-13}	4.0208×10^{-13}	2.1117×10^{-4}	66.799
pdb2fva 494	Classic	1.047×10^{-12}		8.0405×10^{-4}	
	Quaternion	1.194×10^{-12}	1.5803×10^{-12}	4.9731×10^{-4}	61.679
pdb2fvf 494	Classic	3.106×10^{-13}		8.2008×10^{-4}	
	Quaternion	3.445×10^{-13}	2.8750×10^{-13}	5.0441×10^{-4}	62.582
pdb2fxz 80	Classic	1.489×10^{-12}		1.3102×10^{-4}	
	Quaternion	1.749×10^{-12}	2.0430×10^{-12}	7.9610×10^{-5}	64.583
pdb2g9j 848	Classic	3.282×10^{-12}		6.5541×10^{-2}	
	Quaternion	3.535×10^{-12}	2.1668×10^{-12}	3.1800×10^{-2}	106.103
pdb2g9l 224	Classic	6.366×10^{-14}		3.8688×10^{-4}	
	Quaternion	8.672×10^{-14}	2.8081×10^{-13}	2.3149×10^{-4}	67.127

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2h5m 614	Classic	9.692×10^{-13}		1.0929×10^{-3}	
	Quaternion	1.032×10^{-12}	4.1376×10^{-12}	6.7289×10^{-4}	62.423
pdb2hep 252	Classic	1.191×10^{-12}		4.4227×10^{-4}	
	Quaternion	1.268×10^{-12}	5.5848×10^{-13}	2.6411×10^{-4}	67.454
pdb2j0z 752	Classic	4.393×10^{-12}		5.6343×10^{-2}	
	Quaternion	4.954×10^{-12}	4.5315×10^{-12}	2.7130×10^{-2}	107.676
pdb2ji0 752	Classic	9.189×10^{-12}		1.4215×10^{-3}	
	Quaternion	9.523×10^{-12}	9.3908×10^{-13}	8.7680×10^{-4}	62.127
pdb2ji1 752	Classic	5.254×10^{-12}		1.3621×10^{-3}	
	Quaternion	5.629×10^{-12}	1.6758×10^{-12}	8.5047×10^{-4}	60.152
pdb2jmy 92	Classic	9.834×10^{-13}		1.5788×10^{-4}	
	Quaternion	9.967×10^{-13}	5.0812×10^{-13}	9.5439×10^{-5}	65.419
pdb2jn5 74	Classic	1.104×10^{-11}		1.1395×10^{-4}	
	Quaternion	2.456×10^{-11}	1.4609×10^{-11}	6.9605×10^{-5}	63.706
pdb2jnk 842	Classic	2.246×10^{-12}		1.5027×10^{-3}	
	Quaternion	2.319×10^{-12}	3.7362×10^{-13}	9.4317×10^{-4}	59.327
pdb2jpn 476	Classic	6.730×10^{-14}		1.3235×10^{-3}	
	Quaternion	6.983×10^{-14}	1.9605×10^{-13}	7.7517×10^{-4}	70.732
pdb2jua 614	Classic	1.740×10^{-11}		1.1134×10^{-3}	
	Quaternion	1.882×10^{-11}	1.4391×10^{-11}	6.8681×10^{-4}	62.114
pdb2jvd 288	Classic	3.339×10^{-14}		5.2067×10^{-4}	
	Quaternion	3.898×10^{-14}	2.1712×10^{-14}	3.0653×10^{-4}	69.857
pdb2jwe 984	Classic	2.695×10^{-11}		1.7278×10^{-3}	
	Quaternion	2.734×10^{-11}	1.0970×10^{-12}	1.0887×10^{-3}	58.701
pdb2jws 338	Classic	1.251×10^{-13}		6.3809×10^{-4}	
	Quaternion	1.543×10^{-13}	2.8647×10^{-13}	3.7831×10^{-4}	68.669
pdb2jwu 338	Classic	4.421×10^{-12}		5.9490×10^{-4}	
	Quaternion	4.373×10^{-12}	6.2322×10^{-13}	3.5804×10^{-4}	66.154
pdb2jxf 182	Classic	1.399×10^{-13}		3.0726×10^{-4}	
	Quaternion	1.734×10^{-13}	5.8450×10^{-13}	1.8324×10^{-4}	67.680
pdb2jz5 548	Classic	2.860×10^{-13}		9.9269×10^{-4}	
	Quaternion	2.854×10^{-13}	1.7635×10^{-13}	6.0794×10^{-4}	63.288
pdb2k2a 422	Classic	3.798×10^{-14}		8.1719×10^{-4}	
	Quaternion	5.134×10^{-14}	1.3435×10^{-13}	4.9110×10^{-4}	66.400
pdb2k36 896	Classic	1.922×10^{-13}		1.5558×10^{-3}	
	Quaternion	2.045×10^{-13}	1.2563×10^{-13}	9.7288×10^{-4}	59.921
pdb2k37 356	Classic	1.921×10^{-13}		6.4400×10^{-4}	
	Quaternion	2.525×10^{-13}	4.0204×10^{-13}	3.8544×10^{-4}	67.082
pdb2k3i 656	Classic	3.810×10^{-13}		1.6028×10^{-3}	
	Quaternion	4.009×10^{-13}	2.4790×10^{-13}	9.6227×10^{-4}	66.568
pdb2k6s 494	Classic	2.100×10^{-13}		1.3849×10^{-3}	
	Quaternion	2.651×10^{-13}	4.8726×10^{-13}	8.0662×10^{-4}	71.697
pdb2k7o 1096	Classic	1.279×10^{-13}		5.3965×10^{-3}	
	Quaternion	1.416×10^{-13}	4.6393×10^{-13}	3.0592×10^{-3}	76.406
pdb2kbn 1268	Classic	2.165×10^{-13}		2.1578	
	Quaternion	2.230×10^{-13}	2.6963×10^{-13}	1.0724	101.200
pdb2kdh 434	Classic	1.947×10^{-11}		7.8709×10^{-4}	
	Quaternion	2.228×10^{-11}	7.6317×10^{-11}	4.7395×10^{-4}	66.072
pdb2kdl 338	Classic	2.301×10^{-13}		6.1126×10^{-4}	
	Quaternion	2.927×10^{-13}	3.1526×10^{-13}	3.5936×10^{-4}	70.096
pdb2kdm 338	Classic	3.191×10^{-12}		5.9174×10^{-4}	
	Quaternion	3.284×10^{-12}	9.9439×10^{-13}	3.5576×10^{-4}	66.328
pdb2kdp 428	Classic	2.621×10^{-13}		7.5424×10^{-4}	
	Quaternion	2.865×10^{-13}	1.0772×10^{-13}	4.5467×10^{-4}	65.887

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2kdr 170	Classic	6.617×10^{-14}		2.9517×10^{-4}	
	Quaternion	8.490×10^{-14}	6.1679×10^{-14}	1.7460×10^{-4}	69.060
pdb2kes 290	Classic	4.468×10^{-14}		5.5826×10^{-4}	
	Quaternion	5.425×10^{-14}	2.3286×10^{-14}	3.2372×10^{-4}	72.453
pdb2kib 352	Classic	2.533×10^{-12}		6.7458×10^{-3}	
	Quaternion	2.539×10^{-12}	1.3388×10^{-12}	3.6820×10^{-3}	83.210
pdb2kjn 158	Classic	9.828×10^{-14}		2.7034×10^{-4}	
	Quaternion	1.174×10^{-13}	1.3673×10^{-13}	1.6096×10^{-4}	67.957
pdb2kjo 158	Classic	2.284×10^{-13}		2.5606×10^{-4}	
	Quaternion	2.421×10^{-13}	6.7185×10^{-14}	1.5318×10^{-4}	67.157
pdb2kjr 572	Classic	3.247×10^{-12}		9.7857×10^{-4}	
	Quaternion	3.251×10^{-12}	4.0637×10^{-13}	6.0084×10^{-4}	62.869
pdb2kko 1300	Classic	1.191×10^{-13}		1.0894×10^{-2}	
	Quaternion	1.285×10^{-13}	2.9766×10^{-14}	5.1976×10^{-3}	109.607
pdb2kl5 662	Classic	1.820×10^{-13}		1.1284×10^{-3}	
	Quaternion	2.020×10^{-13}	1.3796×10^{-13}	7.0070×10^{-4}	61.045
pdb2klz 276	Classic	3.439×10^{-14}		5.1593×10^{-4}	
	Quaternion	4.443×10^{-14}	6.4874×10^{-14}	3.0425×10^{-4}	69.576
pdb2ko1 1060	Classic	1.150×10^{-12}		1.5121×10^{-2}	
	Quaternion	1.151×10^{-12}	7.8450×10^{-13}	7.4594×10^{-3}	102.717
pdb2koz 200	Classic	1.067×10^{-12}		3.4210×10^{-4}	
	Quaternion	1.151×10^{-12}	8.8025×10^{-13}	2.0578×10^{-4}	66.247
pdb2kp0 200	Classic	4.893×10^{-12}		3.3280×10^{-4}	
	Quaternion	5.588×10^{-12}	4.2756×10^{-12}	2.0227×10^{-4}	64.532
pdb2ksg 290	Classic	3.215×10^{-14}		4.7445×10^{-4}	
	Quaternion	3.967×10^{-14}	2.4678×10^{-14}	2.8353×10^{-4}	67.337
pdb2kt8 458	Classic	3.314×10^{-12}		7.7722×10^{-4}	
	Quaternion	3.535×10^{-12}	7.1394×10^{-13}	4.7657×10^{-4}	63.084
pdb2kuh 404	Classic	2.016×10^{-14}		7.6927×10^{-4}	
	Quaternion	2.492×10^{-14}	4.0485×10^{-14}	4.6884×10^{-4}	64.081
pdb2kwh 338	Classic	1.408×10^{-13}		5.7805×10^{-4}	
	Quaternion	1.825×10^{-13}	2.9549×10^{-13}	3.4477×10^{-4}	67.661
pdb2kxa 144	Classic	1.325×10^{-12}		2.2927×10^{-4}	
	Quaternion	1.351×10^{-12}	3.5240×10^{-13}	1.3963×10^{-4}	64.204
pdb2kyb 362	Classic	1.321×10^{-11}		6.7701×10^{-4}	
	Quaternion	1.373×10^{-11}	2.6755×10^{-12}	4.0288×10^{-4}	68.042
pdb2l3m 428	Classic	1.028×10^{-12}		7.2951×10^{-4}	
	Quaternion	9.340×10^{-13}	6.9725×10^{-13}	4.4822×10^{-4}	62.757
pdb2l3n 626	Classic	3.025×10^{-14}		4.3912×10^{-3}	
	Quaternion	3.634×10^{-14}	4.4517×10^{-14}	2.4198×10^{-3}	81.473
pdb2l45 116	Classic	2.236×10^{-14}		1.9634×10^{-4}	
	Quaternion	3.033×10^{-14}	8.5325×10^{-14}	1.1664×10^{-4}	68.337
pdb2l5r 138	Classic	3.529×10^{-14}		2.6741×10^{-4}	
	Quaternion	4.432×10^{-14}	1.4398×10^{-14}	1.5955×10^{-4}	67.605
pdb2l6q 374	Classic	4.435×10^{-11}		6.3371×10^{-4}	
	Quaternion	5.413×10^{-11}	1.5380×10^{-10}	3.7980×10^{-4}	66.855
pdb2l6r 374	Classic	2.060×10^{-12}		6.6401×10^{-4}	
	Quaternion	2.174×10^{-12}	2.4219×10^{-11}	3.9751×10^{-4}	67.042
pdb2l98 434	Classic	3.273×10^{-13}		7.3698×10^{-4}	
	Quaternion	3.638×10^{-13}	8.9102×10^{-13}	4.4819×10^{-4}	64.434
pdb2lci 806	Classic	2.579×10^{-13}		1.4217×10^{-3}	
	Quaternion	2.404×10^{-13}	8.2767×10^{-14}	8.7718×10^{-4}	62.075
pdb2lde 152	Classic	3.153×10^{-14}		2.4148×10^{-4}	
	Quaternion	3.762×10^{-14}	4.1691×10^{-14}	1.4451×10^{-4}	67.102

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2le2 676	Classic	2.064×10^{-13}		1.4968×10^{-2}	
	Quaternion	2.042×10^{-13}	7.7661×10^{-14}	7.3422×10^{-3}	103.869
pdb2le7 122	Classic	2.112×10^{-14}		1.9726×10^{-4}	
	Quaternion	2.749×10^{-14}	3.9789×10^{-14}	1.1812×10^{-4}	67.006
pdb2ler 68	Classic	1.315×10^{-14}		1.0632×10^{-4}	
	Quaternion	1.532×10^{-14}	2.1465×10^{-14}	6.4784×10^{-5}	64.122
pdb2lgi 338	Classic	1.068×10^{-12}		5.9022×10^{-4}	
	Quaternion	1.052×10^{-12}	1.8917×10^{-13}	3.5764×10^{-4}	65.031
pdb2lhc 338	Classic	2.902×10^{-12}		6.3594×10^{-4}	
	Quaternion	2.997×10^{-12}	2.1365×10^{-12}	3.7530×10^{-4}	69.448
pdb2lhd 338	Classic	1.930×10^{-12}		5.8262×10^{-4}	
	Quaternion	2.033×10^{-12}	2.3902×10^{-12}	3.5552×10^{-4}	63.877
pdb2lhe 338	Classic	4.963×10^{-11}		5.9396×10^{-4}	
	Quaternion	4.967×10^{-11}	4.8488×10^{-13}	3.5959×10^{-4}	65.179
pdb2lhg 338	Classic	6.459×10^{-14}		6.0512×10^{-4}	
	Quaternion	7.322×10^{-14}	5.9754×10^{-14}	3.6865×10^{-4}	64.144
pdb2lix 162	Classic	4.842×10^{-14}		2.7593×10^{-4}	
	Quaternion	5.614×10^{-14}	7.8975×10^{-14}	1.6448×10^{-4}	67.758
pdb2lld 242	Classic	1.937×10^{-13}		4.3357×10^{-4}	
	Quaternion	2.214×10^{-13}	2.2642×10^{-13}	2.6101×10^{-4}	66.114
pdb2lm9 578	Classic	6.254×10^{-14}		1.0192×10^{-3}	
	Quaternion	7.713×10^{-14}	1.5079×10^{-13}	6.1820×10^{-4}	64.860
pdb2lmf 140	Classic	1.282×10^{-13}		2.2010×10^{-4}	
	Quaternion	1.462×10^{-13}	7.9808×10^{-14}	1.3198×10^{-4}	66.763
pdb2ln3 500	Classic	1.292×10^{-13}		8.9196×10^{-4}	
	Quaternion	1.359×10^{-13}	8.4114×10^{-14}	5.4196×10^{-4}	64.580
pdb2lo2 230	Classic	2.068×10^{-14}		3.8135×10^{-4}	
	Quaternion	2.571×10^{-14}	3.6944×10^{-14}	2.2808×10^{-4}	67.200
pdb2lqp 428	Classic	2.950×10^{-13}		7.3419×10^{-4}	
	Quaternion	3.085×10^{-13}	4.7561×10^{-13}	4.4596×10^{-4}	64.631
pdb2lro 806	Classic	3.549×10^{-12}		1.4619×10^{-3}	
	Quaternion	3.440×10^{-12}	6.0485×10^{-13}	8.9982×10^{-4}	62.472
pdb2lrh 806	Classic	5.631×10^{-13}		1.4397×10^{-3}	
	Quaternion	6.564×10^{-13}	3.2048×10^{-13}	8.8823×10^{-4}	62.081
pdb2ls9 152	Classic	1.122×10^{-13}		2.2601×10^{-4}	
	Quaternion	1.471×10^{-13}	3.7128×10^{-13}	1.3696×10^{-4}	65.017
pdb2lsa 140	Classic	5.235×10^{-14}		2.2727×10^{-4}	
	Quaternion	7.034×10^{-14}	1.5385×10^{-13}	1.3725×10^{-4}	65.596
pdb2lss 422	Classic	1.230×10^{-13}		7.2862×10^{-4}	
	Quaternion	1.455×10^{-13}	1.6926×10^{-13}	4.4965×10^{-4}	62.041
pdb2lt3 680	Classic	7.245×10^{-14}		1.2013×10^{-3}	
	Quaternion	7.760×10^{-14}	5.2634×10^{-14}	7.4460×10^{-4}	61.329
pdb2lu6 86	Classic	5.356×10^{-15}		1.4267×10^{-4}	
	Quaternion	6.922×10^{-15}	4.1890×10^{-15}	8.5192×10^{-5}	67.473
pdb2lwa 432	Classic	3.615×10^{-13}		7.3860×10^{-4}	
	Quaternion	4.427×10^{-13}	9.3395×10^{-13}	4.4618×10^{-4}	65.539
pdb2lx0 194	Classic	3.569×10^{-13}		3.4382×10^{-4}	
	Quaternion	4.035×10^{-13}	2.0605×10^{-13}	2.0353×10^{-4}	68.932
pdb2lxb 892	Classic	1.542×10^{-13}		2.0045×10^{-3}	
	Quaternion	1.585×10^{-13}	1.6837×10^{-13}	1.2005×10^{-3}	66.973
pdb2lxy 404	Classic	9.313×10^{-13}		6.5472×10^{-4}	
	Quaternion	1.025×10^{-12}	1.6618×10^{-12}	3.9539×10^{-4}	65.588
pdb2lxz 194	Classic	2.371×10^{-12}		3.4743×10^{-4}	
	Quaternion	2.792×10^{-12}	1.9895×10^{-12}	2.0835×10^{-4}	66.756

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2lzf 820	Classic	3.217×10^{-14}	1.2991×10^{-13}	4.8244×10^{-2}	108.404
	Quaternion	3.957×10^{-14}		2.3149×10^{-2}	
pdb2m1a 158	Classic	6.346×10^{-15}	6.5801×10^{-15}	3.1258×10^{-4}	70.976
	Quaternion	7.612×10^{-15}		1.8282×10^{-4}	
pdb2m1j 182	Classic	1.865×10^{-14}	6.6915×10^{-14}	3.1849×10^{-4}	68.051
	Quaternion	2.212×10^{-14}		1.8952×10^{-4}	
pdb2m2y 110	Classic	2.699×10^{-13}	1.4386×10^{-13}	1.8363×10^{-4}	64.646
	Quaternion	2.808×10^{-13}		1.1153×10^{-4}	
pdb2m3f 134	Classic	3.629×10^{-14}	5.8107×10^{-14}	2.0867×10^{-4}	64.240
	Quaternion	4.641×10^{-14}		1.2705×10^{-4}	
pdb2m4j 2178	Classic	1.463×10^{-11}	1.8385×10^{-13}	1.1116×10^{-2}	109.607
	Quaternion	1.455×10^{-11}		5.3032×10^{-3}	
pdb2m8m 170	Classic	2.407×10^{-14}	1.1738×10^{-13}	2.7228×10^{-4}	64.688
	Quaternion	3.023×10^{-14}		1.6533×10^{-4}	
pdb2m8o 170	Classic	1.672×10^{-14}	2.4755×10^{-14}	2.6698×10^{-4}	63.837
	Quaternion	2.039×10^{-14}		1.6295×10^{-4}	
pdb2m97 416	Classic	4.646×10^{-14}	2.0639×10^{-13}	7.2599×10^{-4}	62.590
	Quaternion	5.841×10^{-14}		4.4652×10^{-4}	
pdb2m9g 1108	Classic	2.939×10^{-13}	5.8913×10^{-13}	2.0183×10^{-3}	62.361
	Quaternion	3.170×10^{-13}		1.2431×10^{-3}	
pdb2m9r 242	Classic	3.537×10^{-14}	1.6694×10^{-13}	4.2289×10^{-4}	72.024
	Quaternion	4.406×10^{-14}		2.4583×10^{-4}	
pdb2mdv 460	Classic	3.178×10^{-12}	3.0402×10^{-13}	8.6933×10^{-4}	63.721
	Quaternion	3.178×10^{-12}		5.3098×10^{-4}	
pdb2me1 164	Classic	1.886×10^{-13}	1.6579×10^{-13}	2.6009×10^{-4}	66.886
	Quaternion	2.208×10^{-13}		1.5585×10^{-4}	
pdb2me2 164	Classic	3.667×10^{-13}	1.1486×10^{-12}	2.7457×10^{-4}	67.829
	Quaternion	5.098×10^{-13}		1.6360×10^{-4}	
pdb2me3 164	Classic	1.425×10^{-13}	8.1775×10^{-14}	2.5660×10^{-4}	64.864
	Quaternion	1.590×10^{-13}		1.5564×10^{-4}	
pdb2me4 164	Classic	5.547×10^{-13}	9.4808×10^{-13}	3.0612×10^{-4}	69.568
	Quaternion	6.222×10^{-13}		1.8053×10^{-4}	
pdb2mg1 164	Classic	4.398×10^{-14}	1.5805×10^{-13}	2.6419×10^{-4}	65.451
	Quaternion	5.374×10^{-14}		1.5968×10^{-4}	
pdb2mg2 170	Classic	1.829×10^{-14}	2.5921×10^{-14}	2.7172×10^{-4}	63.777
	Quaternion	2.480×10^{-14}		1.6591×10^{-4}	
pdb2mg3 170	Classic	3.541×10^{-14}	2.4798×10^{-13}	2.8251×10^{-4}	64.779
	Quaternion	4.461×10^{-14}		1.7145×10^{-4}	
pdb2mh8 338	Classic	1.547×10^{-13}	2.9903×10^{-13}	6.2157×10^{-4}	66.243
	Quaternion	1.883×10^{-13}		3.7389×10^{-4}	
pdb2mhw 164	Classic	6.229×10^{-14}	4.9718×10^{-13}	2.7004×10^{-4}	66.199
	Quaternion	7.129×10^{-14}		1.6248×10^{-4}	
pdb2mi1 84	Classic	1.827×10^{-12}	1.5687×10^{-12}	1.4489×10^{-4}	64.484
	Quaternion	2.052×10^{-12}		8.8088×10^{-5}	
pdb2mi7 404	Classic	6.022×10^{-13}	1.3690×10^{-12}	6.3422×10^{-4}	62.929
	Quaternion	6.817×10^{-13}		3.8926×10^{-4}	
pdb2mij 224	Classic	1.244×10^{-13}	2.8681×10^{-13}	3.6544×10^{-4}	67.393
	Quaternion	1.522×10^{-13}		2.1831×10^{-4}	
pdb2mix 128	Classic	4.816×10^{-14}	3.7348×10^{-14}	2.0512×10^{-4}	65.238
	Quaternion	4.684×10^{-14}		1.2414×10^{-4}	
pdb2mj1 110	Classic	1.309×10^{-13}	2.3819×10^{-13}	1.9077×10^{-4}	67.699
	Quaternion	1.646×10^{-13}		1.1376×10^{-4}	
pdb2mj2 218	Classic	9.775×10^{-14}	8.8713×10^{-14}	3.6833×10^{-4}	68.550
	Quaternion	1.196×10^{-13}		2.1853×10^{-4}	

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2mjg 556	Classic	5.503×10^{-14}		2.3586×10^{-3}	
	Quaternion	6.580×10^{-14}	7.0670×10^{-14}	1.3334×10^{-3}	76.885
pdb2mji 788	Classic	3.207×10^{-12}		1.3478×10^{-3}	
	Quaternion	3.247×10^{-12}	2.7336×10^{-13}	8.4516×10^{-4}	59.470
pdb2mle 434	Classic	1.491×10^{-13}		7.7147×10^{-4}	
	Quaternion	1.535×10^{-13}	3.1271×10^{-13}	4.6715×10^{-4}	65.145
pdb2mlf 434	Classic	9.918×10^{-14}		7.7926×10^{-4}	
	Quaternion	1.128×10^{-13}	9.2903×10^{-14}	4.7311×10^{-4}	64.708
pdb2mo5 854	Classic	1.394×10^{-12}		1.5113×10^{-3}	
	Quaternion	1.403×10^{-12}	1.0682×10^{-12}	9.3683×10^{-4}	61.324
pdb2mpu 554	Classic	9.785×10^{-14}		9.8422×10^{-4}	
	Quaternion	1.016×10^{-13}	1.0352×10^{-13}	6.0610×10^{-4}	62.385
pdb2mra 704	Classic	2.632×10^{-13}		1.5331×10^{-3}	
	Quaternion	2.768×10^{-13}	1.2867×10^{-13}	9.2748×10^{-4}	65.297
pdb2msu 122	Classic	7.813×10^{-14}		2.1724×10^{-4}	
	Quaternion	8.765×10^{-14}	3.7025×10^{-14}	1.2845×10^{-4}	69.132
pdb2mty 120	Classic	1.849×10^{-14}		2.3281×10^{-4}	
	Quaternion	2.364×10^{-14}	9.1457×10^{-14}	1.3611×10^{-4}	71.038
pdb2muh 98	Classic	2.008×10^{-13}		1.5666×10^{-4}	
	Quaternion	2.251×10^{-13}	1.4292×10^{-13}	9.3760×10^{-5}	67.090
pdb2mvj 156	Classic	1.534×10^{-13}		2.5822×10^{-4}	
	Quaternion	1.647×10^{-13}	5.5998×10^{-14}	1.5455×10^{-4}	67.078
pdb2mvt 284	Classic	6.053×10^{-12}		4.7813×10^{-4}	
	Quaternion	6.226×10^{-12}	3.1969×10^{-12}	2.8778×10^{-4}	66.143
pdb2mvx 2360	Classic	1.968×10^{-10}		9.3286×10^{-3}	
	Quaternion	1.971×10^{-10}	3.7182×10^{-11}	4.5635×10^{-3}	104.420
pdb2mz6 220	Classic	2.141×10^{-11}		9.1228×10^{-3}	
	Quaternion	2.153×10^{-11}	4.4199×10^{-13}	4.3015×10^{-3}	112.086
pdb2n00 572	Classic	2.703×10^{-13}		8.6087×10^{-4}	
	Quaternion	3.467×10^{-13}	7.3499×10^{-13}	5.4366×10^{-4}	58.347
pdb2n0b 60	Classic	7.104×10^{-13}		1.0044×10^{-4}	
	Quaternion	9.458×10^{-13}	8.9441×10^{-13}	6.0160×10^{-5}	66.948
pdb2n0c 60	Classic	1.293×10^{-13}		9.6705×10^{-5}	
	Quaternion	1.682×10^{-13}	2.8483×10^{-13}	5.7845×10^{-5}	67.181
pdb2n0d 60	Classic	3.639×10^{-12}		1.0152×10^{-4}	
	Quaternion	4.540×10^{-12}	1.6154×10^{-11}	6.1330×10^{-5}	65.527
pdb2n0e 60	Classic	3.314×10^{-12}		9.9076×10^{-5}	
	Quaternion	4.286×10^{-12}	8.3573×10^{-12}	6.1166×10^{-5}	61.978
pdb2n0f 60	Classic	3.185×10^{-13}		9.7870×10^{-5}	
	Quaternion	4.023×10^{-13}	5.8027×10^{-13}	5.9154×10^{-5}	65.450
pdb2n0g 60	Classic	8.315×10^{-13}		1.0761×10^{-4}	
	Quaternion	9.618×10^{-13}	1.3124×10^{-13}	6.4664×10^{-5}	66.422
pdb2n0h 60	Classic	7.690×10^{-13}		1.0129×10^{-4}	
	Quaternion	8.730×10^{-13}	1.8191×10^{-13}	6.1692×10^{-5}	64.191
pdb2n35 314	Classic	3.541×10^{-14}		5.6372×10^{-4}	
	Quaternion	4.466×10^{-14}	1.0752×10^{-13}	3.3432×10^{-4}	68.619
pdb2n3a 574	Classic	8.761×10^{-14}		2.0232×10^{-2}	
	Quaternion	1.049×10^{-13}	1.0149×10^{-13}	1.0131×10^{-2}	99.711
pdb2n41 638	Classic	1.812×10^{-13}		1.1970×10^{-3}	
	Quaternion	1.836×10^{-13}	8.2539×10^{-14}	7.3829×10^{-4}	62.127
pdb2n4e 638	Classic	1.494×10^{-13}		1.1638×10^{-3}	
	Quaternion	1.687×10^{-13}	1.8433×10^{-13}	7.1419×10^{-4}	62.953
pdb2n5q 164	Classic	1.732×10^{-12}		2.7483×10^{-4}	
	Quaternion	1.745×10^{-12}	1.7589×10^{-12}	1.6518×10^{-4}	66.388

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2n67 566	Classic	4.443×10^{-13}		1.0115×10^{-3}	
	Quaternion	4.465×10^{-13}	6.3487×10^{-14}	6.2203×10^{-4}	62.607
pdb2n6n 192	Classic	6.552×10^{-13}		4.1554×10^{-4}	
	Quaternion	7.487×10^{-13}	4.4318×10^{-13}	2.4351×10^{-4}	70.645
pdb2n7i 224	Classic	9.212×10^{-13}		3.8205×10^{-4}	
	Quaternion	1.126×10^{-12}	3.0537×10^{-12}	2.2771×10^{-4}	67.780
pdb2n7j 336	Classic	5.969×10^{-13}		6.0209×10^{-4}	
	Quaternion	6.094×10^{-13}	1.5144×10^{-13}	3.6259×10^{-4}	66.050
pdb2n9b 832	Classic	1.196×10^{-12}		5.0501×10^{-3}	
	Quaternion	1.238×10^{-12}	1.1231×10^{-12}	2.8315×10^{-3}	78.351
pdb2na9 266	Classic	5.440×10^{-14}		4.3914×10^{-4}	
	Quaternion	6.690×10^{-14}	5.4544×10^{-14}	2.6053×10^{-4}	68.558
pdb2ndc 110	Classic	3.365×10^{-14}		1.8760×10^{-4}	
	Quaternion	4.479×10^{-14}	5.1916×10^{-14}	1.1198×10^{-4}	67.529
pdb2nde 110	Classic	7.022×10^{-14}		1.6800×10^{-4}	
	Quaternion	8.868×10^{-14}	2.5156×10^{-13}	1.0168×10^{-4}	65.225
pdb2ndk 290	Classic	5.022×10^{-13}		4.8302×10^{-4}	
	Quaternion	6.279×10^{-13}	2.0516×10^{-12}	2.9078×10^{-4}	66.113
pdb2nvj 152	Classic	2.082×10^{-14}		2.2727×10^{-4}	
	Quaternion	2.293×10^{-14}	1.4035×10^{-14}	1.3850×10^{-4}	64.094
pdb2p6j 314	Classic	4.795×10^{-14}		5.4258×10^{-4}	
	Quaternion	6.389×10^{-14}	1.1404×10^{-13}	3.2504×10^{-4}	66.927
pdb2p81 266	Classic	7.881×10^{-13}		4.3972×10^{-4}	
	Quaternion	8.250×10^{-13}	4.3715×10^{-13}	2.6305×10^{-4}	67.161
pdb2pqe 896	Classic	1.127×10^{-11}		1.6020×10^{-3}	
	Quaternion	1.248×10^{-11}	8.5719×10^{-12}	9.9426×10^{-4}	61.127
pdb2rlg 108	Classic	5.501×10^{-14}		1.8400×10^{-4}	
	Quaternion	6.973×10^{-14}	6.8873×10^{-14}	1.1072×10^{-4}	66.180
pdb2rlh 108	Classic	4.772×10^{-14}		1.9792×10^{-4}	
	Quaternion	5.801×10^{-14}	3.9131×10^{-14}	1.1765×10^{-4}	68.229
pdb2rmy 206	Classic	1.872×10^{-13}		3.4852×10^{-4}	
	Quaternion	2.498×10^{-13}	3.6453×10^{-13}	2.0608×10^{-4}	69.118
pdb2rnd 206	Classic	2.626×10^{-13}		3.3769×10^{-4}	
	Quaternion	3.581×10^{-13}	4.9979×10^{-13}	2.0308×10^{-4}	66.283
pdb2roo 260	Classic	2.933×10^{-12}		1.0398×10^{-3}	
	Quaternion	3.525×10^{-12}	3.5927×10^{-12}	5.8810×10^{-4}	76.807
pdb2rql 572	Classic	2.345×10^{-12}		1.0289×10^{-3}	
	Quaternion	2.496×10^{-12}	8.7086×10^{-13}	6.2930×10^{-4}	63.503
pdb2rut 218	Classic	4.389×10^{-14}		3.6475×10^{-4}	
	Quaternion	5.014×10^{-14}	3.5338×10^{-13}	2.1663×10^{-4}	68.373
pdb2ruv 224	Classic	5.776×10^{-14}		3.7912×10^{-4}	
	Quaternion	7.408×10^{-14}	1.2473×10^{-13}	2.2742×10^{-4}	66.701
pdb2rux 218	Classic	2.671×10^{-14}		3.8199×10^{-4}	
	Quaternion	3.016×10^{-14}	6.2140×10^{-14}	2.2683×10^{-4}	68.401
pdb2ruy 224	Classic	1.968×10^{-14}		3.8254×10^{-4}	
	Quaternion	2.387×10^{-14}	6.4254×10^{-14}	2.2796×10^{-4}	67.812
pdb2rv3 218	Classic	3.656×10^{-14}		3.8996×10^{-4}	
	Quaternion	4.118×10^{-14}	6.3794×10^{-14}	2.2916×10^{-4}	70.169
pdb2rv5 212	Classic	1.145×10^{-14}		3.6007×10^{-4}	
	Quaternion	1.338×10^{-14}	1.6010×10^{-14}	2.1632×10^{-4}	66.456
pdb2y4q 476	Classic	1.410×10^{-12}		7.8371×10^{-4}	
	Quaternion	1.451×10^{-12}	2.0648×10^{-13}	4.7685×10^{-4}	64.350