

Table 1: Results

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1a57 698	Classic	2.096×10^{-11}		3.0976×10^{-3}	
	Quaternion	2.092×10^{-11}	1.8861×10^{-12}	1.7823×10^{-3}	73.793
pdb1b4c 1108	Classic	1.203×10^{-9}		7.4621×10^{-3}	
	Quaternion	1.203×10^{-9}	1.0756×10^{-12}	4.1287×10^{-3}	80.736
pdb1ba5 320	Classic	9.359×10^{-13}		6.8990×10^{-4}	
	Quaternion	1.070×10^{-12}	4.1376×10^{-12}	4.0837×10^{-4}	68.940
pdb1d1n 594	Classic	1.005×10^{-11}		1.0929×10^{-3}	
	Quaternion	9.672×10^{-12}	1.2689×10^{-12}	6.7787×10^{-4}	61.219
pdb1dp3 332	Classic	7.704×10^{-13}		5.6310×10^{-4}	
	Quaternion	8.939×10^{-13}	1.4697×10^{-12}	3.3737×10^{-4}	66.908
pdb1du1 122	Classic	8.225×10^{-13}		1.9252×10^{-4}	
	Quaternion	1.258×10^{-12}	1.2376×10^{-12}	1.1494×10^{-4}	67.491
pdb1eii 806	Classic	1.393×10^{-11}		1.5097×10^{-3}	
	Quaternion	1.365×10^{-11}	1.1331×10^{-11}	9.4273×10^{-4}	60.141
pdb1fcl 338	Classic	4.542×10^{-12}		1.0476×10^{-3}	
	Quaternion	4.515×10^{-12}	8.0786×10^{-13}	6.0299×10^{-4}	73.727
pdb1fd6 344	Classic	3.182×10^{-12}		6.4084×10^{-4}	
	Quaternion	3.193×10^{-12}	3.3846×10^{-13}	3.8581×10^{-4}	66.100
pdb1hf9 496	Classic	1.157×10^{-11}		1.8820×10^{-2}	
	Quaternion	1.180×10^{-11}	3.9332×10^{-12}	9.6796×10^{-3}	94.428
pdb1i2u 266	Classic	5.562×10^{-13}		4.7375×10^{-4}	
	Quaternion	5.607×10^{-13}	1.5136×10^{-13}	2.9057×10^{-4}	63.039
pdb1i2v 266	Classic	2.418×10^{-13}		5.2014×10^{-4}	
	Quaternion	2.519×10^{-13}	6.9127×10^{-14}	3.1558×10^{-4}	64.818
pdb1ijc 380	Classic	1.408×10^{-11}		1.2715×10^{-3}	
	Quaternion	1.426×10^{-11}	2.4877×10^{-12}	7.2579×10^{-4}	75.194
pdb1jlz 140	Classic	5.594×10^{-13}		2.3380×10^{-4}	
	Quaternion	5.965×10^{-13}	1.3105×10^{-12}	1.4010×10^{-4}	66.879
pdb1jw3 842	Classic	5.936×10^{-13}		1.6047×10^{-3}	
	Quaternion	5.897×10^{-13}	3.9013×10^{-13}	9.8738×10^{-4}	62.524
pdb1k0v 440	Classic	1.893×10^{-13}		8.5383×10^{-4}	
	Quaternion	1.894×10^{-13}	1.3433×10^{-13}	5.2827×10^{-4}	61.626
pdb1k2h 1120	Classic	5.491×10^{-13}		5.5528×10^{-3}	
	Quaternion	5.199×10^{-13}	2.2039×10^{-13}	3.0967×10^{-3}	79.316
pdb1k36 278	Classic	8.820×10^{-12}		4.9160×10^{-4}	
	Quaternion	1.081×10^{-11}	2.8981×10^{-11}	2.9538×10^{-4}	66.432
pdb1k37 278	Classic	4.711×10^{-13}		7.0791×10^{-4}	
	Quaternion	4.988×10^{-13}	1.5479×10^{-13}	4.0780×10^{-4}	73.594
pdb1kuw 62	Classic	9.229×10^{-14}		1.1029×10^{-4}	
	Quaternion	1.130×10^{-13}	7.3457×10^{-14}	6.9041×10^{-5}	59.738
pdb1kz0 98	Classic	4.404×10^{-14}		1.6827×10^{-4}	
	Quaternion	5.880×10^{-14}	2.4335×10^{-13}	1.0204×10^{-4}	64.899
pdb1kz2 98	Classic	2.119×10^{-14}		1.7994×10^{-4}	
	Quaternion	2.886×10^{-14}	2.6112×10^{-14}	1.0816×10^{-4}	66.368
pdb1kz5 74	Classic	4.081×10^{-14}		1.3192×10^{-4}	
	Quaternion	4.738×10^{-14}	4.8348×10^{-14}	7.9587×10^{-5}	65.755
pdb1lvz 68	Classic	6.336×10^{-14}		1.1593×10^{-4}	
	Quaternion	7.315×10^{-14}	7.3919×10^{-14}	7.1658×10^{-5}	61.775
pdb1m4e 122	Classic	5.949×10^{-13}		2.0824×10^{-4}	
	Quaternion	5.972×10^{-13}	1.1702×10^{-13}	1.2763×10^{-4}	63.160
pdb1ma2 104	Classic	8.695×10^{-12}		3.3335×10^{-4}	
	Quaternion	8.758×10^{-12}	4.7062×10^{-13}	1.8821×10^{-4}	77.116
pdb1ma4 104	Classic	7.247×10^{-14}		4.7621×10^{-4}	
	Quaternion	7.981×10^{-14}	1.8851×10^{-13}	2.6268×10^{-4}	81.292
pdb1ma5	Classic	8.169×10^{-13}		1.7736×10^{-4}	

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
104	Quaternion	9.044×10^{-13}	5.0234×10^{-13}	1.0790×10^{-4}	64.377
pdb1ma6 104	Classic	6.283×10^{-13}		1.6624×10^{-4}	
	Quaternion	8.522×10^{-13}	3.3052×10^{-12}	1.0178×10^{-4}	63.331
pdb1mpe 1352	Classic	2.617×10^{-11}		1.1122×10^{-2}	
	Quaternion	2.624×10^{-11}	7.1261×10^{-13}	5.2959×10^{-3}	110.009
pdb1nd9 296	Classic	3.026×10^{-13}		5.2690×10^{-4}	
	Quaternion	3.845×10^{-13}	4.7137×10^{-13}	3.2032×10^{-4}	64.492
pdb1ne5 254	Classic	1.214×10^{-12}		4.2922×10^{-4}	
	Quaternion	1.384×10^{-12}	7.5582×10^{-13}	2.6058×10^{-4}	64.720
pdb1nmj 170	Classic	1.237×10^{-14}		3.1806×10^{-4}	
	Quaternion	1.424×10^{-14}	1.3921×10^{-14}	1.8918×10^{-4}	68.123
pdb1o53 92	Classic	3.999×10^{-13}		1.7284×10^{-4}	
	Quaternion	4.545×10^{-13}	6.5350×10^{-13}	1.0322×10^{-4}	67.441
pdb1oqp 580	Classic	7.045×10^{-14}		3.5369×10^{-3}	
	Quaternion	8.315×10^{-14}	9.0066×10^{-14}	1.9445×10^{-3}	81.894
pdb1plw 32	Classic	2.830×10^{-14}		5.2910×10^{-5}	
	Quaternion	3.122×10^{-14}	4.9118×10^{-14}	3.2956×10^{-5}	60.547
pdb1plx 32	Classic	1.574×10^{-13}		5.0472×10^{-5}	
	Quaternion	2.060×10^{-13}	1.7973×10^{-13}	3.1212×10^{-5}	61.703
pdb1pv0 278	Classic	2.409×10^{-13}		5.0669×10^{-4}	
	Quaternion	2.723×10^{-13}	1.0662×10^{-13}	3.0314×10^{-4}	67.148
pdb1pzt 724	Classic	5.644×10^{-12}		7.6149×10^{-3}	
	Quaternion	5.871×10^{-12}	9.9935×10^{-12}	4.0347×10^{-3}	88.735
pdb1qlk 1108	Classic	9.019×10^{-10}		1.4342×10^{-2}	
	Quaternion	9.019×10^{-10}	1.3287×10^{-12}	6.7851×10^{-3}	111.378
pdb1r57 614	Classic	1.847×10^{-13}		1.1411×10^{-3}	
	Quaternion	2.054×10^{-13}	1.4866×10^{-13}	7.0420×10^{-4}	62.037
pdb1ry3 386	Classic	2.023×10^{-9}		7.4381×10^{-4}	
	Quaternion	2.023×10^{-9}	6.0848×10^{-13}	4.4093×10^{-4}	68.692
pdb1s4h 80	Classic	4.300×10^{-9}		1.2325×10^{-4}	
	Quaternion	4.300×10^{-9}	1.1103×10^{-12}	7.4755×10^{-5}	64.875
pdb1s4j 80	Classic	1.520×10^{-13}		1.4820×10^{-4}	
	Quaternion	2.230×10^{-13}	1.6407×10^{-13}	8.7809×10^{-5}	68.774
pdb1s6j 524	Classic	6.073×10^{-13}		9.8509×10^{-4}	
	Quaternion	7.660×10^{-13}	5.9201×10^{-13}	6.0143×10^{-4}	63.793
pdb1sa8 638	Classic	9.340×10^{-13}		1.1572×10^{-3}	
	Quaternion	1.034×10^{-12}	1.0370×10^{-12}	7.1893×10^{-4}	60.961
pdb1t2y 152	Classic	1.887×10^{-13}		2.7047×10^{-4}	
	Quaternion	2.396×10^{-13}	2.3861×10^{-13}	1.6200×10^{-4}	66.956
pdb1t5q 180	Classic	3.877×10^{-14}		2.9179×10^{-4}	
	Quaternion	5.093×10^{-14}	5.3231×10^{-14}	1.7432×10^{-4}	67.387
pdb1tot 314	Classic	6.148×10^{-14}		5.9893×10^{-4}	
	Quaternion	6.853×10^{-14}	2.8392×10^{-14}	3.6195×10^{-4}	65.476
pdb1v6r 128	Classic	6.835×10^{-13}		2.2214×10^{-4}	
	Quaternion	6.970×10^{-13}	3.1917×10^{-13}	1.3132×10^{-4}	69.158
pdb1v92 278	Classic	1.463×10^{-13}		5.0297×10^{-4}	
	Quaternion	1.630×10^{-13}	5.6062×10^{-14}	3.0211×10^{-4}	66.488
pdb1vd7 140	Classic	3.741×10^{-9}		2.3736×10^{-4}	
	Quaternion	3.741×10^{-9}	5.8433×10^{-13}	1.4185×10^{-4}	67.336
pdb1vd9 140	Classic	1.290×10^{-12}		2.8409×10^{-4}	
	Quaternion	1.554×10^{-12}	9.0327×10^{-13}	1.6418×10^{-4}	73.031
pdb1vdb 140	Classic	9.108×10^{-13}		2.3160×10^{-4}	
	Quaternion	1.083×10^{-12}	3.8641×10^{-13}	1.3750×10^{-4}	68.435
pdb1vpc 272	Classic	8.500×10^{-15}		4.9897×10^{-4}	
	Quaternion	1.002×10^{-14}	8.5436×10^{-15}	2.9585×10^{-4}	68.654

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1wnk 140	Classic	4.112×10^{-12}	2.2335×10^{-11}	2.3846×10^{-4}	69.012
	Quaternion	4.632×10^{-12}		1.4109×10^{-4}	
pdb1wo4 152	Classic	9.957×10^{-13}	2.3523×10^{-12}	2.6937×10^{-4}	69.559
	Quaternion	9.639×10^{-13}		1.5887×10^{-4}	
pdb1wo5 152	Classic	5.257×10^{-9}	4.9063×10^{-12}	2.7336×10^{-4}	69.331
	Quaternion	5.258×10^{-9}		1.6144×10^{-4}	
pdb1x60 476	Classic	1.076×10^{-12}	3.9684×10^{-13}	9.1535×10^{-4}	63.443
	Quaternion	1.179×10^{-12}		5.6004×10^{-4}	
pdb1x9v 544	Classic	8.975×10^{-13}	1.3900×10^{-13}	3.5175×10^{-2}	106.060
	Quaternion	9.632×10^{-13}		1.7070×10^{-2}	
pdb1y5c 68	Classic	8.980×10^{-9}	2.9085×10^{-13}	1.1371×10^{-4}	68.065
	Quaternion	8.980×10^{-9}		6.7656×10^{-5}	
pdb1yx7 500	Classic	8.116×10^{-10}	7.6614×10^{-12}	1.3509×10^{-3}	67.843
	Quaternion	8.125×10^{-10}		8.0485×10^{-4}	
pdb1yx8 500	Classic	7.276×10^{-12}	1.0819×10^{-11}	1.1170×10^{-3}	65.465
	Quaternion	8.217×10^{-12}		6.7507×10^{-4}	
pdb1yxr 464	Classic	5.838×10^{-10}	2.5240×10^{-13}	7.9996×10^{-4}	64.549
	Quaternion	5.839×10^{-10}		4.8615×10^{-4}	
pdb2a2y 1072	Classic	1.150×10^{-12}	3.7416×10^{-13}	4.2045×10^{-2}	113.837
	Quaternion	1.151×10^{-12}		1.9662×10^{-2}	
pdb2a4j 580	Classic	2.085×10^{-14}	1.4394×10^{-14}	1.2252×10^{-3}	67.345
	Quaternion	2.727×10^{-14}		7.3214×10^{-4}	
pdb2adl 868	Classic	1.752×10^{-11}	3.0093×10^{-12}	8.2112×10^{-2}	110.163
	Quaternion	1.787×10^{-11}		3.9071×10^{-2}	
pdb2adn 868	Classic	6.693×10^{-12}	2.4957×10^{-12}	2.2276×10^{-3}	69.029
	Quaternion	6.465×10^{-12}		1.3179×10^{-3}	
pdb2ajj 170	Classic	5.641×10^{-14}	1.2744×10^{-13}	2.9880×10^{-4}	68.222
	Quaternion	6.584×10^{-14}		1.7762×10^{-4}	
pdb2ajm 170	Classic	1.183×10^{-13}	8.9439×10^{-13}	3.2395×10^{-4}	68.683
	Quaternion	1.555×10^{-13}		1.9204×10^{-4}	
pdb2ajn 170	Classic	1.076×10^{-13}	1.5981×10^{-13}	3.2165×10^{-4}	69.622
	Quaternion	1.217×10^{-13}		1.8963×10^{-4}	
pdb2ajo 170	Classic	1.183×10^{-13}	8.9439×10^{-13}	3.2775×10^{-4}	69.485
	Quaternion	1.555×10^{-13}		1.9338×10^{-4}	
pdb2akk 446	Classic	1.288×10^{-13}	1.1725×10^{-13}	1.6710×10^{-3}	73.493
	Quaternion	1.270×10^{-13}		9.6313×10^{-4}	
pdb2bzb 748	Classic	9.365×10^{-14}	1.5097×10^{-13}	1.7992×10^{-2}	101.835
	Quaternion	1.224×10^{-13}		8.9140×10^{-3}	
pdb2c0s 386	Classic	3.028×10^{-13}	7.2067×10^{-13}	7.6036×10^{-4}	68.726
	Quaternion	3.379×10^{-13}		4.5065×10^{-4}	
pdb2dci 120	Classic	2.366×10^{-14}	1.3479×10^{-13}	1.9867×10^{-4}	65.057
	Quaternion	2.950×10^{-14}		1.2036×10^{-4}	
pdb2eem 206	Classic	5.190×10^{-13}	4.0208×10^{-13}	4.2055×10^{-4}	70.346
	Quaternion	5.461×10^{-13}		2.4688×10^{-4}	
pdb2fva 494	Classic	1.047×10^{-12}	1.5803×10^{-12}	1.1894×10^{-3}	69.778
	Quaternion	1.194×10^{-12}		7.0053×10^{-4}	
pdb2fvf 494	Classic	3.106×10^{-13}	2.8750×10^{-13}	8.6869×10^{-4}	63.761
	Quaternion	3.445×10^{-13}		5.3047×10^{-4}	
pdb2fxz 80	Classic	1.489×10^{-12}	2.0430×10^{-12}	1.4156×10^{-4}	66.192
	Quaternion	1.749×10^{-12}		8.5176×10^{-5}	
pdb2g9j 848	Classic	3.282×10^{-12}	2.1668×10^{-12}	6.9865×10^{-2}	106.550
	Quaternion	3.535×10^{-12}		3.3825×10^{-2}	
pdb2g9l 224	Classic	6.366×10^{-14}	2.8081×10^{-13}	4.0967×10^{-4}	68.114
	Quaternion	8.672×10^{-14}		2.4369×10^{-4}	

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2h5m 614	Classic	9.692×10^{-13}		1.1547×10^{-3}	
	Quaternion	1.032×10^{-12}	4.1376×10^{-12}	7.0883×10^{-4}	62.906
pdb2hep 252	Classic	1.191×10^{-12}		4.5969×10^{-4}	
	Quaternion	1.268×10^{-12}	5.5848×10^{-13}	2.7321×10^{-4}	68.253
pdb2j0z 752	Classic	3.192×10^{-10}		9.1996×10^{-1}	
	Quaternion	3.197×10^{-10}	4.5324×10^{-12}	4.6878×10^{-1}	96.246
pdb2j10 752	Classic	5.870×10^{-10}		1.0201×10^{-2}	
	Quaternion	5.873×10^{-10}	9.5552×10^{-13}	4.7414×10^{-3}	115.140
pdb2j11 752	Classic	7.191×10^{-10}		5.6798×10^{-3}	
	Quaternion	7.194×10^{-10}	1.6970×10^{-12}	3.0700×10^{-3}	85.010
pdb2jmy 92	Classic	9.834×10^{-13}		1.6610×10^{-4}	
	Quaternion	9.967×10^{-13}	5.0812×10^{-13}	1.0081×10^{-4}	64.760
pdb2jn5 74	Classic	3.147×10^{-9}		1.1912×10^{-4}	
	Quaternion	3.160×10^{-9}	1.4394×10^{-11}	7.1769×10^{-5}	65.978
pdb2jnk 842	Classic	4.387×10^{-10}		1.5827×10^{-3}	
	Quaternion	4.388×10^{-10}	3.9471×10^{-13}	9.7676×10^{-4}	62.035
pdb2jpn 476	Classic	6.730×10^{-14}		1.4019×10^{-3}	
	Quaternion	6.983×10^{-14}	1.9605×10^{-13}	8.1153×10^{-4}	72.749
pdb2jua 614	Classic	1.740×10^{-11}		1.1801×10^{-3}	
	Quaternion	1.882×10^{-11}	1.4391×10^{-11}	7.1352×10^{-4}	65.395
pdb2jvd 288	Classic	3.339×10^{-14}		5.4928×10^{-4}	
	Quaternion	3.898×10^{-14}	2.1712×10^{-14}	3.2538×10^{-4}	68.811
pdb2jwe 984	Classic	2.695×10^{-11}		1.9337×10^{-3}	
	Quaternion	2.734×10^{-11}	1.0970×10^{-12}	1.1859×10^{-3}	63.063
pdb2jws 338	Classic	1.251×10^{-13}		6.7258×10^{-4}	
	Quaternion	1.543×10^{-13}	2.8647×10^{-13}	4.0128×10^{-4}	67.609
pdb2jwu 338	Classic	4.421×10^{-12}		9.6054×10^{-4}	
	Quaternion	4.373×10^{-12}	6.2322×10^{-13}	5.5692×10^{-4}	72.473
pdb2jxf 182	Classic	1.399×10^{-13}		3.2684×10^{-4}	
	Quaternion	1.734×10^{-13}	5.8450×10^{-13}	1.9441×10^{-4}	68.117
pdb2jz5 548	Classic	2.860×10^{-13}		1.1526×10^{-3}	
	Quaternion	2.854×10^{-13}	1.7635×10^{-13}	6.8667×10^{-4}	67.853
pdb2k2a 422	Classic	3.798×10^{-14}		8.5215×10^{-4}	
	Quaternion	5.134×10^{-14}	1.3435×10^{-13}	5.1852×10^{-4}	64.344
pdb2k2f 1268	Classic	2.639×10^{-13}		5.5618	
	Quaternion	2.818×10^{-13}	7.2949×10^{-14}	2.7437	102.709
pdb2k36 896	Classic	1.922×10^{-13}		1.6390×10^{-3}	
	Quaternion	2.045×10^{-13}	1.2563×10^{-13}	1.0102×10^{-3}	62.234
pdb2k37 356	Classic	1.921×10^{-13}		6.7804×10^{-4}	
	Quaternion	2.525×10^{-13}	4.0204×10^{-13}	4.0601×10^{-4}	67.001
pdb2k3i 656	Classic	3.810×10^{-13}		1.7156×10^{-3}	
	Quaternion	4.009×10^{-13}	2.4790×10^{-13}	1.0131×10^{-3}	69.337
pdb2k6s 494	Classic	2.100×10^{-13}		1.4756×10^{-3}	
	Quaternion	2.651×10^{-13}	4.8726×10^{-13}	8.5355×10^{-4}	72.881
pdb2k7o 1096	Classic	1.279×10^{-13}		5.8539×10^{-3}	
	Quaternion	1.416×10^{-13}	4.6393×10^{-13}	3.2148×10^{-3}	82.091
pdb2kbm 1268	Classic	2.165×10^{-13}		2.2705	
	Quaternion	2.230×10^{-13}	2.6963×10^{-13}	1.1026	105.931
pdb2kdh 434	Classic	1.947×10^{-11}		1.0571×10^{-3}	
	Quaternion	2.228×10^{-11}	7.6317×10^{-11}	6.1648×10^{-4}	71.476
pdb2kdl 338	Classic	2.301×10^{-13}		6.5074×10^{-4}	
	Quaternion	2.927×10^{-13}	3.1526×10^{-13}	3.8122×10^{-4}	70.700
pdb2kdm 338	Classic	3.191×10^{-12}		6.2356×10^{-4}	
	Quaternion	3.284×10^{-12}	9.9439×10^{-13}	3.7254×10^{-4}	67.380

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2kdp 428	Classic	2.621×10^{-13}		7.8929×10^{-4}	
	Quaternion	2.865×10^{-13}	1.0772×10^{-13}	4.7470×10^{-4}	66.271
pdb2kdr 170	Classic	6.617×10^{-14}		3.0911×10^{-4}	
	Quaternion	8.490×10^{-14}	6.1679×10^{-14}	1.8284×10^{-4}	69.062
pdb2kes 290	Classic	4.468×10^{-14}		5.8171×10^{-4}	
	Quaternion	5.425×10^{-14}	2.3286×10^{-14}	3.3944×10^{-4}	71.374
pdb2kib 352	Classic	2.533×10^{-12}		7.2366×10^{-3}	
	Quaternion	2.539×10^{-12}	1.3388×10^{-12}	3.8448×10^{-3}	88.216
pdb2kjn 158	Classic	1.125×10^{-9}		2.8140×10^{-4}	
	Quaternion	1.125×10^{-9}	1.3817×10^{-13}	1.6715×10^{-4}	68.354
pdb2kjo 158	Classic	2.284×10^{-13}		2.6832×10^{-4}	
	Quaternion	2.421×10^{-13}	6.7185×10^{-14}	1.5813×10^{-4}	69.683
pdb2kjr 572	Classic	3.247×10^{-12}		1.6800×10^{-3}	
	Quaternion	3.251×10^{-12}	4.0637×10^{-13}	9.6766×10^{-4}	73.615
pdb2kko 1300	Classic	1.191×10^{-13}		1.1699×10^{-2}	
	Quaternion	1.285×10^{-13}	2.9766×10^{-14}	5.5240×10^{-3}	111.775
pdb2kl5 662	Classic	1.820×10^{-13}		1.1961×10^{-3}	
	Quaternion	2.020×10^{-13}	1.3796×10^{-13}	7.3436×10^{-4}	62.875
pdb2klz 276	Classic	3.439×10^{-14}		5.4274×10^{-4}	
	Quaternion	4.443×10^{-14}	6.4874×10^{-14}	3.1961×10^{-4}	69.812
pdb2ko1 1060	Classic	1.150×10^{-12}		1.6266×10^{-2}	
	Quaternion	1.151×10^{-12}	7.8450×10^{-13}	7.9917×10^{-3}	103.542
pdb2koz 200	Classic	1.075×10^{-9}		3.5634×10^{-4}	
	Quaternion	1.075×10^{-9}	8.8024×10^{-13}	2.1746×10^{-4}	63.868
pdb2kp0 200	Classic	4.893×10^{-12}		3.8609×10^{-4}	
	Quaternion	5.588×10^{-12}	4.2756×10^{-12}	2.2883×10^{-4}	68.725
pdb2ksg 290	Classic	3.215×10^{-14}		5.0165×10^{-4}	
	Quaternion	3.967×10^{-14}	2.4678×10^{-14}	3.0087×10^{-4}	66.735
pdb2kt8 458	Classic	3.314×10^{-12}		8.1917×10^{-4}	
	Quaternion	3.535×10^{-12}	7.1394×10^{-13}	4.9979×10^{-4}	63.902
pdb2kuh 404	Classic	2.016×10^{-14}		8.1677×10^{-4}	
	Quaternion	2.492×10^{-14}	4.0485×10^{-14}	4.8875×10^{-4}	67.112
pdb2kwh 338	Classic	1.408×10^{-13}		6.1089×10^{-4}	
	Quaternion	1.825×10^{-13}	2.9549×10^{-13}	3.6200×10^{-4}	68.755
pdb2kxa 144	Classic	1.325×10^{-12}		2.4662×10^{-4}	
	Quaternion	1.351×10^{-12}	3.5240×10^{-13}	1.4976×10^{-4}	64.678
pdb2kyb 362	Classic	1.999×10^{-8}		1.8716×10^{-3}	
	Quaternion	1.999×10^{-8}	2.6711×10^{-12}	1.0255×10^{-3}	82.494
pdb2l3m 428	Classic	1.028×10^{-12}		7.6908×10^{-4}	
	Quaternion	9.340×10^{-13}	6.9725×10^{-13}	4.7017×10^{-4}	63.576
pdb2l3n 626	Classic	3.025×10^{-14}		4.6848×10^{-3}	
	Quaternion	3.634×10^{-14}	4.4517×10^{-14}	2.5642×10^{-3}	82.701
pdb2l45 116	Classic	2.236×10^{-14}		2.0701×10^{-4}	
	Quaternion	3.033×10^{-14}	8.5325×10^{-14}	1.2400×10^{-4}	66.941
pdb2l5r 138	Classic	3.529×10^{-14}		2.7825×10^{-4}	
	Quaternion	4.432×10^{-14}	1.4398×10^{-14}	1.6525×10^{-4}	68.384
pdb2l6q 374	Classic	9.260×10^{-9}		6.4635×10^{-4}	
	Quaternion	1.043×10^{-8}	1.7792×10^{-8}	3.9001×10^{-4}	65.724
pdb2l6r 374	Classic	7.323×10^{-10}		7.0087×10^{-4}	
	Quaternion	7.325×10^{-10}	2.4265×10^{-11}	4.1723×10^{-4}	67.984
pdb2l98 434	Classic	3.273×10^{-13}		8.3874×10^{-4}	
	Quaternion	3.638×10^{-13}	8.9102×10^{-13}	5.0306×10^{-4}	66.729
pdb2lci 806	Classic	2.579×10^{-13}		1.4929×10^{-3}	
	Quaternion	2.404×10^{-13}	8.2767×10^{-14}	9.1240×10^{-4}	63.628

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2lde 152	Classic	3.153×10^{-14}		2.5673×10^{-4}	
	Quaternion	3.762×10^{-14}	4.1691×10^{-14}	1.5228×10^{-4}	68.588
pdb2le2 676	Classic	2.064×10^{-13}		1.5739×10^{-2}	
	Quaternion	2.042×10^{-13}	7.7661×10^{-14}	7.7061×10^{-3}	104.236
pdb2le7 122	Classic	2.112×10^{-14}		2.0940×10^{-4}	
	Quaternion	2.749×10^{-14}	3.9789×10^{-14}	1.2460×10^{-4}	68.050
pdb2ler 68	Classic	1.315×10^{-14}		1.1173×10^{-4}	
	Quaternion	1.532×10^{-14}	2.1465×10^{-14}	6.7438×10^{-5}	65.686
pdb2lgi 338	Classic	1.068×10^{-12}		6.1992×10^{-4}	
	Quaternion	1.052×10^{-12}	1.8917×10^{-13}	3.7533×10^{-4}	65.166
pdb2lhc 338	Classic	5.829×10^{-10}		6.6583×10^{-4}	
	Quaternion	5.830×10^{-10}	2.1362×10^{-12}	3.9156×10^{-4}	70.047
pdb2lhd 338	Classic	1.930×10^{-12}		8.3015×10^{-4}	
	Quaternion	2.033×10^{-12}	2.3902×10^{-12}	4.8651×10^{-4}	70.634
pdb2lhe 338	Classic	4.963×10^{-11}		8.0811×10^{-4}	
	Quaternion	4.967×10^{-11}	4.8488×10^{-13}	4.7411×10^{-4}	70.446
pdb2lhg 338	Classic	6.459×10^{-14}		6.3823×10^{-4}	
	Quaternion	7.322×10^{-14}	5.9754×10^{-14}	3.8844×10^{-4}	64.307
pdb2lix 162	Classic	4.842×10^{-14}		2.9096×10^{-4}	
	Quaternion	5.614×10^{-14}	7.8975×10^{-14}	1.7375×10^{-4}	67.456
pdb2lld 242	Classic	1.937×10^{-13}		4.5370×10^{-4}	
	Quaternion	2.214×10^{-13}	2.2642×10^{-13}	2.7515×10^{-4}	64.891
pdb2lm9 578	Classic	6.254×10^{-14}		1.0492×10^{-3}	
	Quaternion	7.713×10^{-14}	1.5079×10^{-13}	6.3970×10^{-4}	64.015
pdb2lmf 140	Classic	1.282×10^{-13}		2.3083×10^{-4}	
	Quaternion	1.462×10^{-13}	7.9808×10^{-14}	1.3926×10^{-4}	65.752
pdb2ln3 500	Classic	1.292×10^{-13}		9.3536×10^{-4}	
	Quaternion	1.359×10^{-13}	8.4114×10^{-14}	5.6557×10^{-4}	65.384
pdb2lo2 230	Classic	2.068×10^{-14}		4.0432×10^{-4}	
	Quaternion	2.571×10^{-14}	3.6944×10^{-14}	2.4260×10^{-4}	66.662
pdb2lqp 428	Classic	2.950×10^{-13}		7.7901×10^{-4}	
	Quaternion	3.085×10^{-13}	4.7561×10^{-13}	4.7042×10^{-4}	65.597
pdb2lr0 806	Classic	3.549×10^{-12}		1.5532×10^{-3}	
	Quaternion	3.440×10^{-12}	6.0485×10^{-13}	9.4880×10^{-4}	63.703
pdb2lrh 806	Classic	5.631×10^{-13}		1.5159×10^{-3}	
	Quaternion	6.564×10^{-13}	3.2048×10^{-13}	9.2155×10^{-4}	64.495
pdb2ls9 152	Classic	1.122×10^{-13}		2.4594×10^{-4}	
	Quaternion	1.471×10^{-13}	3.7128×10^{-13}	1.4448×10^{-4}	70.218
pdb2lsa 140	Classic	5.235×10^{-14}		2.3979×10^{-4}	
	Quaternion	7.034×10^{-14}	1.5385×10^{-13}	1.4364×10^{-4}	66.931
pdb2lss 422	Classic	1.230×10^{-13}		7.6231×10^{-4}	
	Quaternion	1.455×10^{-13}	1.6926×10^{-13}	4.7314×10^{-4}	61.118
pdb2lt3 680	Classic	7.245×10^{-14}		1.2685×10^{-3}	
	Quaternion	7.760×10^{-14}	5.2634×10^{-14}	7.8110×10^{-4}	62.394
pdb2lu6 86	Classic	5.356×10^{-15}		1.4900×10^{-4}	
	Quaternion	6.922×10^{-15}	4.1890×10^{-15}	8.8744×10^{-5}	67.894
pdb2lwa 432	Classic	3.615×10^{-13}		7.7691×10^{-4}	
	Quaternion	4.427×10^{-13}	9.3395×10^{-13}	4.6823×10^{-4}	65.925
pdb2lx0 194	Classic	1.940×10^{-9}		3.5896×10^{-4}	
	Quaternion	1.940×10^{-9}	2.0923×10^{-13}	2.1216×10^{-4}	69.189
pdb2lxb 892	Classic	1.542×10^{-13}		2.1294×10^{-3}	
	Quaternion	1.585×10^{-13}	1.6837×10^{-13}	1.2487×10^{-3}	70.520
pdb2lxy 404	Classic	9.313×10^{-13}		9.5943×10^{-4}	
	Quaternion	1.025×10^{-12}	1.6618×10^{-12}	5.6012×10^{-4}	71.291

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2lxx 194	Classic	2.371×10^{-12}	1.9895×10^{-12}	3.6134×10^{-4}	63.560
	Quaternion	2.792×10^{-12}		2.2092×10^{-4}	
pdb2lzf 820	Classic	3.217×10^{-14}	1.2991×10^{-13}	5.1288×10^{-2}	112.060
	Quaternion	3.957×10^{-14}		2.4186×10^{-2}	
pdb2m1a 158	Classic	6.346×10^{-15}	6.5801×10^{-15}	3.3309×10^{-4}	73.250
	Quaternion	7.612×10^{-15}		1.9226×10^{-4}	
pdb2m1j 182	Classic	1.865×10^{-14}	6.6915×10^{-14}	3.3657×10^{-4}	69.656
	Quaternion	2.212×10^{-14}		1.9839×10^{-4}	
pdb2m2y 110	Classic	2.699×10^{-13}	1.4386×10^{-13}	1.9285×10^{-4}	65.155
	Quaternion	2.808×10^{-13}		1.1677×10^{-4}	
pdb2m3f 134	Classic	3.629×10^{-14}	5.8107×10^{-14}	2.2175×10^{-4}	67.078
	Quaternion	4.641×10^{-14}		1.3272×10^{-4}	
pdb2m4j 2178	Classic	1.463×10^{-11}	1.8385×10^{-13}	4.0490×10^{-2}	101.660
	Quaternion	1.455×10^{-11}		2.0078×10^{-2}	
pdb2m8m 170	Classic	2.407×10^{-14}	1.1738×10^{-13}	2.8771×10^{-4}	66.112
	Quaternion	3.023×10^{-14}		1.7320×10^{-4}	
pdb2m8o 170	Classic	1.672×10^{-14}	2.4755×10^{-14}	2.8012×10^{-4}	65.082
	Quaternion	2.039×10^{-14}		1.6968×10^{-4}	
pdb2m97 416	Classic	4.646×10^{-14}	2.0639×10^{-13}	7.6185×10^{-4}	64.541
	Quaternion	5.841×10^{-14}		4.6302×10^{-4}	
pdb2m9g 1108	Classic	2.939×10^{-13}	5.8913×10^{-13}	2.1131×10^{-3}	64.236
	Quaternion	3.170×10^{-13}		1.2866×10^{-3}	
pdb2m9r 242	Classic	3.537×10^{-14}	1.6694×10^{-13}	4.4036×10^{-4}	73.750
	Quaternion	4.406×10^{-14}		2.5345×10^{-4}	
pdb2mdv 460	Classic	3.178×10^{-12}	3.0402×10^{-13}	2.1606×10^{-3}	77.977
	Quaternion	3.178×10^{-12}		1.2140×10^{-3}	
pdb2me1 164	Classic	1.886×10^{-13}	1.6579×10^{-13}	2.7545×10^{-4}	67.365
	Quaternion	2.208×10^{-13}		1.6458×10^{-4}	
pdb2me2 164	Classic	3.667×10^{-13}	1.1486×10^{-12}	2.9364×10^{-4}	68.033
	Quaternion	5.098×10^{-13}		1.7475×10^{-4}	
pdb2me3 164	Classic	2.593×10^{-9}	9.2137×10^{-14}	2.6866×10^{-4}	65.552
	Quaternion	2.593×10^{-9}		1.6228×10^{-4}	
pdb2me4 164	Classic	2.854×10^{-9}	9.9945×10^{-13}	3.1834×10^{-4}	70.898
	Quaternion	2.854×10^{-9}		1.8627×10^{-4}	
pdb2mg1 164	Classic	4.398×10^{-14}	1.5805×10^{-13}	2.7731×10^{-4}	65.344
	Quaternion	5.374×10^{-14}		1.6771×10^{-4}	
pdb2mg2 170	Classic	1.829×10^{-14}	2.5921×10^{-14}	2.8400×10^{-4}	64.911
	Quaternion	2.480×10^{-14}		1.7221×10^{-4}	
pdb2mg3 170	Classic	3.541×10^{-14}	2.4798×10^{-13}	2.9721×10^{-4}	65.546
	Quaternion	4.461×10^{-14}		1.7953×10^{-4}	
pdb2mh8 338	Classic	1.547×10^{-13}	2.9903×10^{-13}	6.5303×10^{-4}	67.369
	Quaternion	1.883×10^{-13}		3.9018×10^{-4}	
pdb2mhw 164	Classic	6.229×10^{-14}	4.9718×10^{-13}	2.8854×10^{-4}	65.551
	Quaternion	7.129×10^{-14}		1.7429×10^{-4}	
pdb2mi1 84	Classic	1.827×10^{-12}	1.5687×10^{-12}	1.5367×10^{-4}	64.394
	Quaternion	2.052×10^{-12}		9.3477×10^{-5}	
pdb2mi7 404	Classic	6.022×10^{-13}	1.3690×10^{-12}	6.6453×10^{-4}	65.336
	Quaternion	6.817×10^{-13}		4.0193×10^{-4}	
pdb2mij 224	Classic	1.244×10^{-13}	2.8681×10^{-13}	3.8460×10^{-4}	67.374
	Quaternion	1.522×10^{-13}		2.2978×10^{-4}	
pdb2mix 128	Classic	4.816×10^{-14}	3.7348×10^{-14}	2.1401×10^{-4}	63.229
	Quaternion	4.684×10^{-14}		1.3111×10^{-4}	
pdb2mj1 110	Classic	1.309×10^{-13}	2.3819×10^{-13}	1.9921×10^{-4}	67.083
	Quaternion	1.646×10^{-13}		1.1923×10^{-4}	

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2mj2 218	Classic	9.775×10^{-14}		3.8883×10^{-4}	
	Quaternion	1.196×10^{-13}	8.8713×10^{-14}	2.2862×10^{-4}	70.078
pdb2mjg 556	Classic	5.503×10^{-14}		2.4581×10^{-3}	
	Quaternion	6.580×10^{-14}	7.0670×10^{-14}	1.3846×10^{-3}	77.528
pdb2mji 788	Classic	3.207×10^{-12}		1.4269×10^{-3}	
	Quaternion	3.247×10^{-12}	2.7336×10^{-13}	8.8351×10^{-4}	61.505
pdb2mle 434	Classic	1.491×10^{-13}		8.1574×10^{-4}	
	Quaternion	1.535×10^{-13}	3.1271×10^{-13}	4.8696×10^{-4}	67.517
pdb2mlf 434	Classic	9.918×10^{-14}		8.1616×10^{-4}	
	Quaternion	1.128×10^{-13}	9.2903×10^{-14}	4.8863×10^{-4}	67.031
pdb2mo5 854	Classic	2.527×10^{-10}		1.6060×10^{-3}	
	Quaternion	2.527×10^{-10}	1.0204×10^{-12}	9.8152×10^{-4}	63.620
pdb2mpu 554	Classic	9.785×10^{-14}		1.0429×10^{-3}	
	Quaternion	1.016×10^{-13}	1.0352×10^{-13}	6.3907×10^{-4}	63.198
pdb2mra 704	Classic	2.632×10^{-13}		1.6160×10^{-3}	
	Quaternion	2.768×10^{-13}	1.2867×10^{-13}	9.6089×10^{-4}	68.176
pdb2msu 122	Classic	7.813×10^{-14}		2.2737×10^{-4}	
	Quaternion	8.765×10^{-14}	3.7025×10^{-14}	1.3399×10^{-4}	69.685
pdb2mty 120	Classic	1.849×10^{-14}		2.4839×10^{-4}	
	Quaternion	2.364×10^{-14}	9.1457×10^{-14}	1.4472×10^{-4}	71.636
pdb2muh 98	Classic	2.008×10^{-13}		1.6404×10^{-4}	
	Quaternion	2.251×10^{-13}	1.4292×10^{-13}	9.8978×10^{-5}	65.737
pdb2mvj 156	Classic	1.534×10^{-13}		2.7486×10^{-4}	
	Quaternion	1.647×10^{-13}	5.5998×10^{-14}	1.6300×10^{-4}	68.625
pdb2mvt 284	Classic	6.053×10^{-12}		6.5595×10^{-4}	
	Quaternion	6.226×10^{-12}	3.1969×10^{-12}	3.8272×10^{-4}	71.392
pdb2mvx 2360	Classic	4.728×10^{-9}		3.6926×10^{-2}	
	Quaternion	4.729×10^{-9}	3.7181×10^{-11}	1.8364×10^{-2}	101.080
pdb2mz6 220	Classic	4.129×10^{-8}		9.7106×10^{-2}	
	Quaternion	4.129×10^{-8}	4.4231×10^{-13}	4.6765×10^{-2}	107.647
pdb2n00 572	Classic	2.703×10^{-13}		9.0193×10^{-4}	
	Quaternion	3.467×10^{-13}	7.3499×10^{-13}	5.6160×10^{-4}	60.599
pdb2n0b 60	Classic	7.104×10^{-13}		1.0505×10^{-4}	
	Quaternion	9.458×10^{-13}	8.9441×10^{-13}	6.2945×10^{-5}	66.899
pdb2n0c 60	Classic	1.293×10^{-13}		1.0017×10^{-4}	
	Quaternion	1.682×10^{-13}	2.8483×10^{-13}	6.0318×10^{-5}	66.076
pdb2n0d 60	Classic	1.925×10^{-9}		1.0091×10^{-4}	
	Quaternion	1.926×10^{-9}	1.6149×10^{-11}	6.1599×10^{-5}	63.820
pdb2n0e 60	Classic	3.314×10^{-12}		1.0495×10^{-4}	
	Quaternion	4.286×10^{-12}	8.3573×10^{-12}	6.3857×10^{-5}	64.356
pdb2n0f 60	Classic	8.103×10^{-9}		9.6344×10^{-5}	
	Quaternion	8.103×10^{-9}	5.8011×10^{-13}	5.9130×10^{-5}	62.936
pdb2n0g 60	Classic	8.315×10^{-13}		1.1529×10^{-4}	
	Quaternion	9.618×10^{-13}	1.3124×10^{-13}	6.8230×10^{-5}	68.973
pdb2n0h 60	Classic	7.690×10^{-13}		1.0711×10^{-4}	
	Quaternion	8.730×10^{-13}	1.8191×10^{-13}	6.5045×10^{-5}	64.669
pdb2n35 314	Classic	3.541×10^{-14}		5.9116×10^{-4}	
	Quaternion	4.466×10^{-14}	1.0752×10^{-13}	3.5242×10^{-4}	67.745
pdb2n3a 574	Classic	8.761×10^{-14}		2.1481×10^{-2}	
	Quaternion	1.049×10^{-13}	1.0149×10^{-13}	1.0667×10^{-2}	101.389
pdb2n41 638	Classic	1.812×10^{-13}		1.2289×10^{-3}	
	Quaternion	1.836×10^{-13}	8.2539×10^{-14}	7.4603×10^{-4}	64.727
pdb2n4e 638	Classic	1.494×10^{-13}		1.2242×10^{-3}	
	Quaternion	1.687×10^{-13}	1.8433×10^{-13}	7.4537×10^{-4}	64.236

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2n5q 164	Classic	1.732×10^{-12}	1.7589×10^{-12}	2.9292×10^{-4}	66.347
	Quaternion	1.745×10^{-12}		1.7609×10^{-4}	
pdb2n67 566	Classic	4.443×10^{-13}	6.3487×10^{-14}	1.0532×10^{-3}	64.711
	Quaternion	4.465×10^{-13}		6.3944×10^{-4}	
pdb2n6n 192	Classic	4.139×10^{-8}	5.0670×10^{-13}	3.5655×10^{-4}	65.993
	Quaternion	4.139×10^{-8}		2.1480×10^{-4}	
pdb2n7i 224	Classic	9.212×10^{-13}	3.0537×10^{-12}	3.9687×10^{-4}	66.659
	Quaternion	1.126×10^{-12}		2.3813×10^{-4}	
pdb2n7j 336	Classic	5.969×10^{-13}	1.5144×10^{-13}	6.4266×10^{-4}	66.850
	Quaternion	6.094×10^{-13}		3.8517×10^{-4}	
pdb2n9b 832	Classic	1.196×10^{-12}	1.1231×10^{-12}	1.0148×10^{-2}	116.516
	Quaternion	1.238×10^{-12}		4.6870×10^{-3}	
pdb2na9 266	Classic	5.440×10^{-14}	5.4544×10^{-14}	4.5576×10^{-4}	67.013
	Quaternion	6.690×10^{-14}		2.7289×10^{-4}	
pdb2ndc 110	Classic	3.365×10^{-14}	5.1916×10^{-14}	1.9448×10^{-4}	65.979
	Quaternion	4.479×10^{-14}		1.1717×10^{-4}	
pdb2nde 110	Classic	7.022×10^{-14}	2.5156×10^{-13}	1.7506×10^{-4}	66.462
	Quaternion	8.868×10^{-14}		1.0517×10^{-4}	
pdb2ndk 290	Classic	5.022×10^{-13}	2.0516×10^{-12}	5.0744×10^{-4}	66.972
	Quaternion	6.279×10^{-13}		3.0391×10^{-4}	
pdb2nvj 152	Classic	2.082×10^{-14}	1.4035×10^{-14}	2.4046×10^{-4}	65.649
	Quaternion	2.293×10^{-14}		1.4516×10^{-4}	
pdb2p6j 314	Classic	4.795×10^{-14}	1.1404×10^{-13}	5.6852×10^{-4}	67.410
	Quaternion	6.389×10^{-14}		3.3960×10^{-4}	
pdb2p81 266	Classic	7.881×10^{-13}	4.3715×10^{-13}	4.6013×10^{-4}	67.810
	Quaternion	8.250×10^{-13}		2.7420×10^{-4}	
pdb2pqe 896	Classic	6.484×10^{-10}	8.5673×10^{-12}	2.0226×10^{-3}	66.379
	Quaternion	6.496×10^{-10}		1.2157×10^{-3}	
pdb2rlg 108	Classic	5.501×10^{-14}	6.8873×10^{-14}	1.9394×10^{-4}	66.728
	Quaternion	6.973×10^{-14}		1.1632×10^{-4}	
pdb2rlh 108	Classic	4.772×10^{-14}	3.9131×10^{-14}	2.1222×10^{-4}	66.986
	Quaternion	5.801×10^{-14}		1.2709×10^{-4}	
pdb2rmy 206	Classic	1.872×10^{-13}	3.6453×10^{-13}	3.6903×10^{-4}	67.331
	Quaternion	2.498×10^{-13}		2.2054×10^{-4}	
pdb2rnd 206	Classic	2.626×10^{-13}	4.9979×10^{-13}	3.5529×10^{-4}	66.803
	Quaternion	3.581×10^{-13}		2.1300×10^{-4}	
pdb2roo 260	Classic	2.933×10^{-12}	3.5927×10^{-12}	1.0981×10^{-3}	75.634
	Quaternion	3.525×10^{-12}		6.2520×10^{-4}	
pdb2rql 572	Classic	2.345×10^{-12}	8.7086×10^{-13}	1.4835×10^{-3}	69.649
	Quaternion	2.496×10^{-12}		8.7444×10^{-4}	
pdb2rut 218	Classic	4.389×10^{-14}	3.5338×10^{-13}	3.8246×10^{-4}	69.276
	Quaternion	5.014×10^{-14}		2.2594×10^{-4}	
pdb2ruv 224	Classic	5.776×10^{-14}	1.2473×10^{-13}	3.9747×10^{-4}	68.075
	Quaternion	7.408×10^{-14}		2.3649×10^{-4}	
pdb2rux 218	Classic	2.671×10^{-14}	6.2140×10^{-14}	3.9917×10^{-4}	68.145
	Quaternion	3.016×10^{-14}		2.3739×10^{-4}	
pdb2ruy 224	Classic	1.968×10^{-14}	6.4254×10^{-14}	3.9857×10^{-4}	68.031
	Quaternion	2.387×10^{-14}		2.3720×10^{-4}	
pdb2rv3 218	Classic	3.656×10^{-14}	6.3794×10^{-14}	4.1040×10^{-4}	70.635
	Quaternion	4.118×10^{-14}		2.4052×10^{-4}	
pdb2rv5 212	Classic	1.145×10^{-14}	1.6010×10^{-14}	3.7833×10^{-4}	67.603
	Quaternion	1.338×10^{-14}		2.2573×10^{-4}	
pdb2y4q 476	Classic	1.410×10^{-12}	2.0648×10^{-13}	8.2746×10^{-4}	63.525
	Quaternion	1.451×10^{-12}		5.0601×10^{-4}	