

MSMS

	MSMS					
1CRN	79	93	94	94	78	87,6
1KX2	188	199	190	187	175	187,8
3EAM	1749	1737	1739	1735	1756	1743,2
1GRU	x	x	x	x	x	x
4V59	x	x	x	x	x	x

EDTSurf								
	EDTSurf					Mean	Box size	Scale factor
1CRN	755	752	749	733	742	746,2	141x119x141	4
1KX2	1440	1393	1391	1403	1391	1403,6	149x163x171	4
3EAM	4591	4594	4575	4577	4591	4585,6	248x200x299	2,229
1GRU	5923	5943	5967	5939	5922	5938,8	221x221x300	1,449
4V59	6859	6979	6880	6840	6849	6881,4	251x299x278	0,999

CUDASES (0.5 reso)								
	CUDASES (0.5 reso)					Mean	Box size	
1CRN	331	332	342	337	324	333,2	76x76x76	
1KX2	329	345	343	340	346	340,6	92x92x92	
3EAM	608	636	624	636	632	627,2	265x265x265	
1GRU	1886	1889	1872	1886	1909	1888,4	416x416x416	
4V59	4423	4361	4380	4379	4392	4387	601x601x601	

CUDASES (matching EDSurf)								
	CUDASES (matching EDSurf)					Mean	Box size	Resolution
1CRN	372	369	377	375	384	375,4	141x141x141	0,267
1KX2	377	383	394	408	399	392,2	161x161x161	0,284
3EAM	598	595	582	582	590	589,4	246x246x246	0,54
1GRU	834	816	816	793	847	821,2	241x241x241	0,865
4V59	934	986	952	928	952	950,4	276x276x276	0,982

QuickSES slice size tests					
QuickSES 3eam	200	300	450		Box Size
0.5	707,4	627	635,6		265^3
0.3	1678	1458	1298,333333333333		442^3
0.15	11230	9414,333333333333	8739,333333333333		883^3

QuickSES solvent size

	0,5	1,4	2,0	5,0	
QuickSES 3eam (reso 0,5A)					
Time	580	660	640	725	
Box Size	258x258x258	265x265x265	270x270x270	294x294x294	
Memory peak	476	440	450	549	