Table 1: Results

	Problem Size	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1a57 698		Classic	2.096×10^{-11}		2.9518×10^{-3}	
		Quaternion	2.092×10^{-11}	1.8861×10^{-12}	1.7007×10^{-3}	73.561 01
pdb1b4c 1108		Classic	1.203×10^{-9}		7.0285×10^{-3}	
		Quaternion	1.203×10^{-9}	1.0756×10^{-12}	3.9253×10^{-3}	79.054 40
pdb1ba5 320		Classic	9.359×10^{-13}		6.6698×10^{-4}	
		Quaternion	1.070×10^{-12}	4.1376×10^{-12}	3.9719×10^{-4}	67.924 75
pdb1d1n 594		Classic	1.005×10^{-11}		1.0563×10^{-3}	
		Quaternion	9.672×10^{-12}	1.2689×10^{-12}	6.6521×10^{-4}	58.795 90
pdb1dp3 332		Classic	7.704×10^{-13}		5.4273×10^{-4}	
		Quaternion	8.939×10^{-13}	1.4697×10^{-12}	3.3159×10^{-4}	63.673 62
pdb1du1 122		Classic	8.225×10^{-13}		1.8437×10^{-4}	
		Quaternion	1.258×10^{-12}	1.2376×10^{-12}	1.1232×10^{-4}	64.147 52
pdb1eii 806		Classic	1.393×10^{-11}		1.4632×10^{-3}	
		Quaternion	1.365×10^{-11}	1.1331×10^{-11}	9.2362×10^{-4}	58.419 53
pdb1fcl 338		Classic	4.542×10^{-12}		1.0112×10^{-3}	
		Quaternion	4.515×10^{-12}	8.0786×10^{-13}	5.8997×10^{-4}	71.391 96
pdb1fd6 344		Classic	3.182×10^{-12}		6.1200×10^{-4}	
		Quaternion	3.193×10^{-12}	3.3846×10^{-13}	3.7254×10^{-4}	64.279 67
pdb1hf9 496		Classic	1.157×10^{-11}		1.9207×10^{-2}	
		Quaternion	1.180×10^{-11}	3.9332×10^{-12}	9.3737×10^{-3}	104.907 36
pdb1i2u 266		Classic	5.562×10^{-13}		4.5520×10^{-4}	
		Quaternion	5.607×10^{-13}	1.5136×10^{-13}	2.8053×10^{-4}	62.262 28
pdb1i2v 266		Classic	2.418×10^{-13}		5.0893×10^{-4}	
		Quaternion	2.519×10^{-13}	6.9127×10^{-14}	3.1292×10^{-4}	62.640 03
pdb1ijc 380		Classic	1.408×10^{-11}		1.2551×10^{-3}	
		Quaternion	1.426×10^{-11}	2.4877×10^{-12}	7.2816×10^{-4}	72.363 75
pdb1jlz 140		Classic	5.594×10^{-13}		2.3048×10^{-4}	
		Quaternion	5.965×10^{-13}	1.3105×10^{-12}	1.3962×10^{-4}	65.073 90
pdb1jw3 842		Classic	5.936×10^{-13}		1.5873×10^{-3}	
		Quaternion	5.897×10^{-13}	3.9013×10^{-13}	9.8822×10^{-4}	60.617 59
pdb1k0v 440		Classic	1.893×10^{-13}		8.4919×10^{-4}	
		Quaternion	1.894×10^{-13}	1.3433×10^{-13}	5.2530×10^{-4}	61.659 07
pdb1k2h 1120		Classic	5.491×10^{-13}		5.4764×10^{-3}	
		Quaternion	5.199×10^{-13}	2.2039×10^{-13}	3.0636×10^{-3}	78.758 02
pdb1k36 278		Classic	8.820×10^{-12}		4.8178×10^{-4}	
		Quaternion	1.081×10^{-11}	2.8981×10^{-11}	2.8607×10^{-4}	68.414 11
pdb1k37 278		Classic	4.711×10^{-13}		6.9144×10^{-4}	
		Quaternion	4.988×10^{-13}	1.5479×10^{-13}	4.0552×10^{-4}	70.505 95
pdb1kuw 62		Classic	9.229×10^{-14}		1.0631×10^{-4}	
		Quaternion	1.130×10^{-13}	7.3457×10^{-14}	6.4713×10^{-5}	64.281 52
pdb1kz0 98		Classic	4.404×10^{-14}		1.6470×10^{-4}	
		Quaternion	5.880×10^{-14}	2.4335×10^{-13}	9.9061×10^{-5}	66.258 50
pdb1kz2 98		Classic	2.119×10^{-14}		1.7613×10^{-4}	
		Quaternion	2.886×10^{-14}	2.6112×10^{-14}	1.0593×10^{-4}	66.265 62
pdb1kz5		Classic	4.081×10^{-14}		1.2806×10^{-4}	

Table 2: Results - continued

	Problem Size	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
74		Quaternion	4.738×10^{-14}	4.8348×10^{-14}	7.6891×10^{-5}	66.544 85
pdb1lvz		Classic	6.336×10^{-14}		1.1210×10^{-4}	
68		Quaternion	7.315×10^{-14}	7.3919×10^{-14}	6.8546×10^{-5}	63.541 27
pdb1m4e		Classic	5.949×10^{-13}		2.0349×10^{-4}	
122		Quaternion	5.972×10^{-13}	1.1702×10^{-13}	1.2380×10^{-4}	64.363 66
pdb1ma2		Classic	8.695×10^{-12}		3.2666×10^{-4}	
104		Quaternion	8.758×10^{-12}	4.7062×10^{-13}	1.8671×10^{-4}	74.955 75
pdb1ma4		Classic	7.247×10^{-14}		4.6898×10^{-4}	
104		Quaternion	7.981×10^{-14}	1.8851×10^{-13}	2.5826×10^{-4}	81.594 34
pdb1ma5		Classic	8.169×10^{-13}		1.7470×10^{-4}	
104		Quaternion	9.044×10^{-13}	5.0234×10^{-13}	1.0519×10^{-4}	66.074 42
pdb1ma6		Classic	6.283×10^{-13}		1.6156×10^{-4}	
104		Quaternion	8.522×10^{-13}	3.3052×10^{-12}	9.8305×10^{-5}	64.350 24
pdb1mpe		Classic	2.617×10^{-11}		1.1304×10^{-2}	
1352		Quaternion	2.624×10^{-11}	7.1261×10^{-13}	5.2556×10^{-3}	115.088 39
pdb1nd9		Classic	3.026×10^{-13}		5.1913×10^{-4}	
296		Quaternion	3.845×10^{-13}	4.7137×10^{-13}	3.2185×10^{-4}	61.293 57
pdb1ne5		Classic	1.214×10^{-12}		4.2127×10^{-4}	
254		Quaternion	1.384×10^{-12}	7.5582×10^{-13}	2.5516×10^{-4}	65.104 68
pdb1nmj		Classic	1.237×10^{-14}		3.0985×10^{-4}	
170		Quaternion	1.424×10^{-14}	1.3921×10^{-14}	1.8648×10^{-4}	66.153 75
pdb1o53		Classic	3.999×10^{-13}		1.7000×10^{-4}	
92		Quaternion	4.545×10^{-13}	6.5350×10^{-13}	1.0024×10^{-4}	69.583 22
pdb1oqp		Classic	7.045×10^{-14}		3.4433×10^{-3}	
580		Quaternion	8.315×10^{-14}	9.0066×10^{-14}	1.9316×10^{-3}	78.264 56
pdb1plw		Classic	2.830×10^{-14}		5.2547×10^{-5}	
32		Quaternion	3.122×10^{-14}	4.9118×10^{-14}	3.2633×10^{-5}	61.024 12
pdb1plx		Classic	1.574×10^{-13}		4.9863×10^{-5}	
32		Quaternion	2.060×10^{-13}	1.7973×10^{-13}	3.0994×10^{-5}	60.882 12
pdb1pv0		Classic	2.409×10^{-13}		5.0536×10^{-4}	
278		Quaternion	2.723×10^{-13}	1.0662×10^{-13}	3.0395×10^{-4}	66.264 41
pdb1pzr		Classic	5.644×10^{-12}		7.4886×10^{-3}	
724		Quaternion	5.871×10^{-12}	9.9935×10^{-12}	4.0800×10^{-3}	83.544 21
pdb1qlk		Classic	9.019×10^{-10}		1.4160×10^{-2}	
1108		Quaternion	9.019×10^{-10}	1.3287×10^{-12}	6.7812×10^{-3}	108.811 76
pdb1r57		Classic	1.847×10^{-13}		1.1509×10^{-3}	
614		Quaternion	2.054×10^{-13}	1.4866×10^{-13}	7.1845×10^{-4}	60.192 13
pdb1ry3		Classic	2.023×10^{-9}		7.3868×10^{-4}	
386		Quaternion	2.023×10^{-9}	6.0848×10^{-13}	4.3764×10^{-4}	68.787 37
pdb1s4h		Classic	4.300×10^{-9}		1.2121×10^{-4}	
80		Quaternion	4.300×10^{-9}	1.1103×10^{-12}	7.3903×10^{-5}	64.017 46
pdb1s4j		Classic	1.520×10^{-13}		1.4646×10^{-4}	
80		Quaternion	2.230×10^{-13}	1.6407×10^{-13}	8.7409×10^{-5}	67.557 12
pdb1s6j		Classic	6.073×10^{-13}		9.8595×10^{-4}	
524		Quaternion	7.660×10^{-13}	5.9201×10^{-13}	6.0244×10^{-4}	63.658 82

Table 2: Results - continued

	Problem Size	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1sa8 638		Classic	9.340×10^{-13}		1.1605×10^{-3}	
		Quaternion	1.034×10^{-12}	1.0370×10^{-12}	7.2310×10^{-4}	60.486 89
pdb1t2y 152		Classic	1.887×10^{-13}		2.6701×10^{-4}	
		Quaternion	2.396×10^{-13}	2.3861×10^{-13}	1.6115×10^{-4}	65.686 96
pdb1t5q 180		Classic	3.877×10^{-14}		2.8653×10^{-4}	
		Quaternion	5.093×10^{-14}	5.3231×10^{-14}	1.7355×10^{-4}	65.102 42
pdb1tot 314		Classic	6.148×10^{-14}		6.0050×10^{-4}	
		Quaternion	6.853×10^{-14}	2.8392×10^{-14}	3.6430×10^{-4}	64.834 08
pdb1v6r 128		Classic	6.835×10^{-13}		2.2342×10^{-4}	
		Quaternion	6.970×10^{-13}	3.1917×10^{-13}	1.3291×10^{-4}	68.095 19
pdb1v92 278		Classic	1.463×10^{-13}		4.9476×10^{-4}	
		Quaternion	1.630×10^{-13}	5.6062×10^{-14}	2.9902×10^{-4}	65.461 84
pdb1vd7 140		Classic	3.741×10^{-9}		2.3344×10^{-4}	
		Quaternion	3.741×10^{-9}	5.8433×10^{-13}	1.3950×10^{-4}	67.343 01
pdb1vd9 140		Classic	1.290×10^{-12}		2.7679×10^{-4}	
		Quaternion	1.554×10^{-12}	9.0327×10^{-13}	1.6215×10^{-4}	70.700 02
pdb1vdb 140		Classic	9.108×10^{-13}		2.2516×10^{-4}	
		Quaternion	1.083×10^{-12}	3.8641×10^{-13}	1.3532×10^{-4}	66.395 08
pdb1vpc 272		Classic	8.500×10^{-15}		4.8303×10^{-4}	
		Quaternion	1.002×10^{-14}	8.5436×10^{-15}	2.9228×10^{-4}	65.262 64
pdb1wnk 140		Classic	4.112×10^{-12}		2.3185×10^{-4}	
		Quaternion	4.632×10^{-12}	2.2335×10^{-11}	1.3971×10^{-4}	65.949 72
pdb1wo4 152		Classic	9.957×10^{-13}		2.6168×10^{-4}	
		Quaternion	9.639×10^{-13}	2.3523×10^{-12}	1.5466×10^{-4}	69.195 81
pdb1wo5 152		Classic	5.257×10^{-9}		2.6978×10^{-4}	
		Quaternion	5.258×10^{-9}	4.9063×10^{-12}	1.6139×10^{-4}	67.161 64
pdb1x60 476		Classic	1.076×10^{-12}		9.0043×10^{-4}	
		Quaternion	1.179×10^{-12}	3.9684×10^{-13}	5.6004×10^{-4}	60.779 66
pdb1x9v 544		Classic	8.975×10^{-13}		3.4714×10^{-2}	
		Quaternion	9.632×10^{-13}	1.3900×10^{-13}	1.7086×10^{-2}	103.177 02
pdb1y5c 68		Classic	8.980×10^{-9}		1.0994×10^{-4}	
		Quaternion	8.980×10^{-9}	2.9085×10^{-13}	6.6392×10^{-5}	65.587 46
pdb1yx7 500		Classic	8.116×10^{-10}		1.3420×10^{-3}	
		Quaternion	8.125×10^{-10}	7.6614×10^{-12}	8.1759×10^{-4}	64.134 90
pdb1yx8 500		Classic	7.276×10^{-12}		1.0980×10^{-3}	
		Quaternion	8.217×10^{-12}	1.0819×10^{-11}	6.6669×10^{-4}	64.696 41
pdb1yxr 464		Classic	5.838×10^{-10}		8.0441×10^{-4}	
		Quaternion	5.839×10^{-10}	2.5240×10^{-13}	4.8760×10^{-4}	64.973 95
pdb2a2y 1072		Classic	1.150×10^{-12}		4.1882×10^{-2}	
		Quaternion	1.151×10^{-12}	3.7416×10^{-13}	1.9425×10^{-2}	115.608 11
pdb2a4j 580		Classic	2.085×10^{-14}		1.2066×10^{-3}	
		Quaternion	2.727×10^{-14}	1.4394×10^{-14}	7.2504×10^{-4}	66.419 02
pdb2adl 868		Classic	1.752×10^{-11}		8.2764×10^{-2}	
		Quaternion	1.787×10^{-11}	3.0093×10^{-12}	3.9669×10^{-2}	108.636 60

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2adn 868	Classic	6.693×10^{-12}		2.2075×10^{-3}	
	Quaternion	6.465×10^{-12}	2.4957×10^{-12}	1.3132×10^{-3}	68.108 17
pdb2ajj 170	Classic	5.641×10^{-14}		2.9320×10^{-4}	
	Quaternion	6.584×10^{-14}	1.2744×10^{-13}	1.7442×10^{-4}	68.103 05
pdb2ajm 170	Classic	1.183×10^{-13}		3.1577×10^{-4}	
	Quaternion	1.555×10^{-13}	8.9439×10^{-13}	1.8912×10^{-4}	66.970 44
pdb2ajn 170	Classic	1.076×10^{-13}		3.1551×10^{-4}	
	Quaternion	1.217×10^{-13}	1.5981×10^{-13}	1.8677×10^{-4}	68.936 10
pdb2ajo 170	Classic	1.183×10^{-13}		3.1799×10^{-4}	
	Quaternion	1.555×10^{-13}	8.9439×10^{-13}	1.8869×10^{-4}	68.531 94
pdb2akk 446	Classic	1.288×10^{-13}		1.6540×10^{-3}	
	Quaternion	1.270×10^{-13}	1.1725×10^{-13}	9.6115×10^{-4}	72.084 62
pdb2bzb 748	Classic	9.365×10^{-14}		1.8091×10^{-2}	
	Quaternion	1.224×10^{-13}	1.5097×10^{-13}	9.0010×10^{-3}	100.986 10
pdb2c0s 386	Classic	3.028×10^{-13}		7.4994×10^{-4}	
	Quaternion	3.379×10^{-13}	7.2067×10^{-13}	4.5348×10^{-4}	65.375 60
pdb2dci 120	Classic	2.366×10^{-14}		1.9331×10^{-4}	
	Quaternion	2.950×10^{-14}	1.3479×10^{-13}	1.1863×10^{-4}	62.946 92
pdb2eem 206	Classic	5.190×10^{-13}		4.1190×10^{-4}	
	Quaternion	5.461×10^{-13}	4.0208×10^{-13}	2.4512×10^{-4}	68.042 06
pdb2fva 494	Classic	1.047×10^{-12}		1.1865×10^{-3}	
	Quaternion	1.194×10^{-12}	1.5803×10^{-12}	7.0200×10^{-4}	69.024 18
pdb2fvf 494	Classic	3.106×10^{-13}		8.6354×10^{-4}	
	Quaternion	3.445×10^{-13}	2.8750×10^{-13}	5.3257×10^{-4}	62.146 01
pdb2fxz 80	Classic	1.489×10^{-12}		1.3940×10^{-4}	
	Quaternion	1.749×10^{-12}	2.0430×10^{-12}	8.4085×10^{-5}	65.782 45
pdb2g9j 848	Classic	3.282×10^{-12}		6.9504×10^{-2}	
	Quaternion	3.535×10^{-12}	2.1668×10^{-12}	3.3882×10^{-2}	105.132 10
pdb2g9l 224	Classic	6.366×10^{-14}		4.0461×10^{-4}	
	Quaternion	8.672×10^{-14}	2.8081×10^{-13}	2.4340×10^{-4}	66.232 13
pdb2h5m 614	Classic	9.692×10^{-13}		1.1504×10^{-3}	
	Quaternion	1.032×10^{-12}	4.1376×10^{-12}	7.0370×10^{-4}	63.477 56
pdb2hep 252	Classic	1.191×10^{-12}		4.5123×10^{-4}	
	Quaternion	1.268×10^{-12}	5.5848×10^{-13}	2.7064×10^{-4}	66.727 57
pdb2j0z 752	Classic	3.192×10^{-10}		9.1775×10^{-1}	
	Quaternion	3.197×10^{-10}	4.5324×10^{-12}	4.6311×10^{-1}	98.169 96
pdb2j10 752	Classic	5.870×10^{-10}		1.0137×10^{-2}	
	Quaternion	5.873×10^{-10}	9.5552×10^{-13}	4.6567×10^{-3}	117.675 35
pdb2j11 752	Classic	7.191×10^{-10}		5.4620×10^{-3}	
	Quaternion	7.194×10^{-10}	1.6970×10^{-12}	3.0397×10^{-3}	79.685 43
pdb2jmy 92	Classic	9.834×10^{-13}		1.6556×10^{-4}	
	Quaternion	9.967×10^{-13}	5.0812×10^{-13}	1.0091×10^{-4}	64.065 33
pdb2jn5 74	Classic	3.147×10^{-9}		1.1669×10^{-4}	
	Quaternion	3.160×10^{-9}	1.4394×10^{-11}	7.1694×10^{-5}	62.761 18

4

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2jnk 842	Classic	4.387×10^{-10}		1.5665×10^{-3}	
	Quaternion	4.388×10^{-10}	3.9471×10^{-13}	9.7952×10^{-4}	59.922 66
pdb2jpn 476	Classic	6.730×10^{-14}		1.3840×10^{-3}	
	Quaternion	6.983×10^{-14}	1.9605×10^{-13}	8.1097×10^{-4}	70.660 64
pdb2jua 614	Classic	1.740×10^{-11}		1.1647×10^{-3}	
	Quaternion	1.882×10^{-11}	1.4391×10^{-11}	7.1516×10^{-4}	62.854 34
pdb2jvd 288	Classic	3.339×10^{-14}		5.3906×10^{-4}	
	Quaternion	3.898×10^{-14}	2.1712×10^{-14}	3.1791×10^{-4}	69.563 29
pdb2jwe 984	Classic	2.695×10^{-11}		1.9257×10^{-3}	
	Quaternion	2.734×10^{-11}	1.0970×10^{-12}	1.2000×10^{-3}	60.481 48
pdb2jws 338	Classic	1.251×10^{-13}		6.7057×10^{-4}	
	Quaternion	1.543×10^{-13}	2.8647×10^{-13}	3.9551×10^{-4}	69.545 36
pdb2jwu 338	Classic	4.421×10^{-12}		9.5804×10^{-4}	
	Quaternion	4.373×10^{-12}	6.2322×10^{-13}	5.5398×10^{-4}	72.936 62
pdb2jxf 182	Classic	1.399×10^{-13}		3.2221×10^{-4}	
	Quaternion	1.734×10^{-13}	5.8450×10^{-13}	1.9337×10^{-4}	66.627 71
pdb2jz5 548	Classic	2.860×10^{-13}		1.1449×10^{-3}	
	Quaternion	2.854×10^{-13}	1.7635×10^{-13}	6.8794×10^{-4}	66.426 72
pdb2k2a 422	Classic	3.798×10^{-14}		8.5947×10^{-4}	
	Quaternion	5.134×10^{-14}	1.3435×10^{-13}	5.1708×10^{-4}	66.217 80
pdb2k2f 1268	Classic	2.639×10^{-13}		5.4893	
	Quaternion	2.818×10^{-13}	7.2949×10^{-14}	2.7229	101.601 27
pdb2k36 896	Classic	1.922×10^{-13}		1.6274×10^{-3}	
	Quaternion	2.045×10^{-13}	1.2563×10^{-13}	1.0185×10^{-3}	59.783 18
pdb2k37 356	Classic	1.921×10^{-13}		6.7390×10^{-4}	
	Quaternion	2.525×10^{-13}	4.0204×10^{-13}	4.0386×10^{-4}	66.866 20
pdb2k3i 656	Classic	3.810×10^{-13}		1.6771×10^{-3}	
	Quaternion	4.009×10^{-13}	2.4790×10^{-13}	9.9328×10^{-4}	68.842 45
pdb2k6s 494	Classic	2.100×10^{-13}		1.4712×10^{-3}	
	Quaternion	2.651×10^{-13}	4.8726×10^{-13}	8.5722×10^{-4}	71.619 38
pdb2k7o 1096	Classic	1.279×10^{-13}		5.6416×10^{-3}	
	Quaternion	1.416×10^{-13}	4.6393×10^{-13}	3.1674×10^{-3}	78.113 70
pdb2kbm 1268	Classic	2.165×10^{-13}		2.2556	
	Quaternion	2.230×10^{-13}	2.6963×10^{-13}	1.1098	103.239 00
pdb2kdh 434	Classic	1.947×10^{-11}		1.0340×10^{-3}	
	Quaternion	2.228×10^{-11}	7.6317×10^{-11}	6.0895×10^{-4}	69.803 38
pdb2kdl 338	Classic	2.301×10^{-13}		6.4298×10^{-4}	
	Quaternion	2.927×10^{-13}	3.1526×10^{-13}	3.8115×10^{-4}	68.693 38
pdb2kdm 338	Classic	3.191×10^{-12}		6.1470×10^{-4}	
	Quaternion	3.284×10^{-12}	9.9439×10^{-13}	3.6995×10^{-4}	66.155 79
pdb2kdp 428	Classic	2.621×10^{-13}		7.9344×10^{-4}	
	Quaternion	2.865×10^{-13}	1.0772×10^{-13}	4.7257×10^{-4}	67.899 87
pdb2kdr 170	Classic	6.617×10^{-14}		3.0345×10^{-4}	
	Quaternion	8.490×10^{-14}	6.1679×10^{-14}	1.8116×10^{-4}	67.504 05

	Problem Size	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2kes		Classic	4.468×10^{-14}		5.8000×10^{-4}	
	290	Quaternion	5.425×10^{-14}	2.3286×10^{-14}	3.3743×10^{-4}	71.887 93
pdb2kib		Classic	2.533×10^{-12}		7.0185×10^{-3}	
	352	Quaternion	2.539×10^{-12}	1.3388×10^{-12}	3.8145×10^{-3}	83.993 98
pdb2kjn		Classic	1.125×10^{-9}		2.7560×10^{-4}	
	158	Quaternion	1.125×10^{-9}	1.3817×10^{-13}	1.6547×10^{-4}	66.548 92
pdb2kjo		Classic	2.284×10^{-13}		2.6341×10^{-4}	
	158	Quaternion	2.421×10^{-13}	6.7185×10^{-14}	1.5811×10^{-4}	66.600 04
pdb2kjr		Classic	3.247×10^{-12}		1.6612×10^{-3}	
	572	Quaternion	3.251×10^{-12}	4.0637×10^{-13}	9.6695×10^{-4}	71.792 48
pdb2kko		Classic	1.191×10^{-13}		1.1580×10^{-2}	
	1300	Quaternion	1.285×10^{-13}	2.9766×10^{-14}	5.3994×10^{-3}	114.476 59
pdb2kl5		Classic	1.820×10^{-13}		1.1682×10^{-3}	
	662	Quaternion	2.020×10^{-13}	1.3796×10^{-13}	7.2738×10^{-4}	60.609 02
pdb2klz		Classic	3.439×10^{-14}		5.3462×10^{-4}	
	276	Quaternion	4.443×10^{-14}	6.4874×10^{-14}	3.1399×10^{-4}	70.268 47
pdb2ko1		Classic	1.150×10^{-12}		1.6068×10^{-2}	
	1060	Quaternion	1.151×10^{-12}	7.8450×10^{-13}	7.8097×10^{-3}	105.744 97
pdb2koz		Classic	1.075×10^{-9}		3.4678×10^{-4}	
	200	Quaternion	1.075×10^{-9}	8.8024×10^{-13}	2.1238×10^{-4}	63.283 12
pdb2kp0		Classic	4.893×10^{-12}		3.7779×10^{-4}	
	200	Quaternion	5.588×10^{-12}	4.2756×10^{-12}	2.2317×10^{-4}	69.283 40
pdb2ksg		Classic	3.215×10^{-14}		4.9497×10^{-4}	
	290	Quaternion	3.967×10^{-14}	2.4678×10^{-14}	2.9655×10^{-4}	66.908 11
pdb2kt8		Classic	3.314×10^{-12}		8.1415×10^{-4}	
	458	Quaternion	3.535×10^{-12}	7.1394×10^{-13}	4.9532×10^{-4}	64.366 76
pdb2kuh		Classic	2.016×10^{-14}		8.0609×10^{-4}	
	404	Quaternion	2.492×10^{-14}	4.0485×10^{-14}	4.8916×10^{-4}	64.791 37
pdb2kwh		Classic	1.408×10^{-13}		5.9954×10^{-4}	
	338	Quaternion	1.825×10^{-13}	2.9549×10^{-13}	3.5826×10^{-4}	67.347 03
pdb2kxa		Classic	1.325×10^{-12}		2.4131×10^{-4}	
	144	Quaternion	1.351×10^{-12}	3.5240×10^{-13}	1.4810×10^{-4}	62.934 24
pdb2kyb		Classic	1.999×10^{-8}		1.8346×10^{-3}	
	362	Quaternion	1.999×10^{-8}	2.6711×10^{-12}	1.0283×10^{-3}	78.415 08
pdb2l3m		Classic	1.028×10^{-12}		7.6538×10^{-4}	
	428	Quaternion	9.340×10^{-13}	6.9725×10^{-13}	4.6736×10^{-4}	63.765 18
pdb2l3n		Classic	3.025×10^{-14}		4.6289×10^{-3}	
	626	Quaternion	3.634×10^{-14}	4.4517×10^{-14}	2.5401×10^{-3}	82.234 77
pdb2l45		Classic	2.236×10^{-14}		2.0473×10^{-4}	
	116	Quaternion	3.033×10^{-14}	8.5325×10^{-14}	1.2174×10^{-4}	68.172 05
pdb2l5r		Classic	3.529×10^{-14}		2.7732×10^{-4}	
	138	Quaternion	4.432×10^{-14}	1.4398×10^{-14}	1.6351×10^{-4}	69.602 32
pdb2l6q		Classic	9.260×10^{-9}		6.5059×10^{-4}	
	374	Quaternion	1.043×10^{-8}	1.7792×10^{-8}	3.9752×10^{-4}	63.663 93

Problem Size	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2l6r	Classic	7.323×10^{-10}		6.9369×10^{-4}	
374	Quaternion	7.325×10^{-10}	2.4265×10^{-11}	4.2321×10^{-4}	63.910 45
pdb2l98	Classic	3.273×10^{-13}		8.3189×10^{-4}	
434	Quaternion	3.638×10^{-13}	8.9102×10^{-13}	4.9565×10^{-4}	67.838 43
pdb2lci	Classic	2.579×10^{-13}		1.4953×10^{-3}	
806	Quaternion	2.404×10^{-13}	8.2767×10^{-14}	9.1594×10^{-4}	63.258 27
pdb2lde	Classic	3.153×10^{-14}		2.4935×10^{-4}	
152	Quaternion	3.762×10^{-14}	4.1691×10^{-14}	1.5007×10^{-4}	66.157 56
pdb2le2	Classic	2.064×10^{-13}		1.5828×10^{-2}	
676	Quaternion	2.042×10^{-13}	7.7661×10^{-14}	7.6362×10^{-3}	107.271 58
pdb2le7	Classic	2.112×10^{-14}		2.0560×10^{-4}	
122	Quaternion	2.749×10^{-14}	3.9789×10^{-14}	1.2262×10^{-4}	67.664 30
pdb2ler	Classic	1.315×10^{-14}		1.1181×10^{-4}	
68	Quaternion	1.532×10^{-14}	2.1465×10^{-14}	6.7622×10^{-5}	65.346 08
pdb2lgi	Classic	1.068×10^{-12}		6.1011×10^{-4}	
338	Quaternion	1.052×10^{-12}	1.8917×10^{-13}	3.7216×10^{-4}	63.938 76
pdb2lhc	Classic	5.829×10^{-10}		6.6728×10^{-4}	
338	Quaternion	5.830×10^{-10}	2.1362×10^{-12}	3.9795×10^{-4}	67.680 37
pdb2lhd	Classic	1.930×10^{-12}		8.2372×10^{-4}	
338	Quaternion	2.033×10^{-12}	2.3902×10^{-12}	4.8768×10^{-4}	68.907 46
pdb2lhe	Classic	4.963×10^{-11}		7.9542×10^{-4}	
338	Quaternion	4.967×10^{-11}	4.8488×10^{-13}	4.7306×10^{-4}	68.142 76
pdb2lhg	Classic	6.459×10^{-14}		6.2955×10^{-4}	
338	Quaternion	7.322×10^{-14}	5.9754×10^{-14}	3.8394×10^{-4}	63.972 53
pdb2lix	Classic	4.842×10^{-14}		2.8652×10^{-4}	
162	Quaternion	5.614×10^{-14}	7.8975×10^{-14}	1.7148×10^{-4}	67.087 90
pdb2lld	Classic	1.937×10^{-13}		4.4840×10^{-4}	
242	Quaternion	2.214×10^{-13}	2.2642×10^{-13}	2.7615×10^{-4}	62.376 81
pdb2lm9	Classic	6.254×10^{-14}		1.0445×10^{-3}	
578	Quaternion	7.713×10^{-14}	1.5079×10^{-13}	6.3262×10^{-4}	65.100 99
pdb2lmf	Classic	1.282×10^{-13}		2.2760×10^{-4}	
140	Quaternion	1.462×10^{-13}	7.9808×10^{-14}	1.3654×10^{-4}	66.692 67
pdb2ln3	Classic	1.292×10^{-13}		9.2559×10^{-4}	
500	Quaternion	1.359×10^{-13}	8.4114×10^{-14}	5.6168×10^{-4}	64.787 76
pdb2lo2	Classic	2.068×10^{-14}		3.9914×10^{-4}	
230	Quaternion	2.571×10^{-14}	3.6944×10^{-14}	2.4200×10^{-4}	64.931 22
pdb2lqp	Classic	2.950×10^{-13}		7.7204×10^{-4}	
428	Quaternion	3.085×10^{-13}	4.7561×10^{-13}	4.6975×10^{-4}	64.350 52
pdb2lr0	Classic	3.549×10^{-12}		1.5240×10^{-3}	
806	Quaternion	3.440×10^{-12}	6.0485×10^{-13}	9.3151×10^{-4}	63.610 15
pdb2lrh	Classic	5.631×10^{-13}		1.4892×10^{-3}	
806	Quaternion	6.564×10^{-13}	3.2048×10^{-13}	9.1309×10^{-4}	63.097 09
pdb2ls9	Classic	1.122×10^{-13}		2.3982×10^{-4}	
152	Quaternion	1.471×10^{-13}	3.7128×10^{-13}	1.4535×10^{-4}	64.988 70

Table 2: Results - continued

	Problem Size	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2lsa		Classic	5.235×10^{-14}		2.3711×10^{-4}	
	140	Quaternion	7.034×10^{-14}	1.5385×10^{-13}	1.4364×10^{-4}	65.065 25
pdb2lss		Classic	1.230×10^{-13}		7.6212×10^{-4}	
	422	Quaternion	1.455×10^{-13}	1.6926×10^{-13}	4.7620×10^{-4}	60.039 98
pdb2lt3		Classic	7.245×10^{-14}		1.2642×10^{-3}	
	680	Quaternion	7.760×10^{-14}	5.2634×10^{-14}	7.8956×10^{-4}	60.114 23
pdb2lu6		Classic	5.356×10^{-15}		1.4840×10^{-4}	
	86	Quaternion	6.922×10^{-15}	4.1890×10^{-15}	8.7935×10^{-5}	68.759 88
pdb2lwa		Classic	3.615×10^{-13}		7.6963×10^{-4}	
	432	Quaternion	4.427×10^{-13}	9.3395×10^{-13}	4.6916×10^{-4}	64.044 62
pdb2lx0		Classic	1.940×10^{-9}		3.5120×10^{-4}	
	194	Quaternion	1.940×10^{-9}	2.0923×10^{-13}	2.1099×10^{-4}	66.456 86
pdb2lxb		Classic	1.542×10^{-13}		2.0736×10^{-3}	
	892	Quaternion	1.585×10^{-13}	1.6837×10^{-13}	1.2389×10^{-3}	67.368 73
pdb2lxy		Classic	9.313×10^{-13}		9.4891×10^{-4}	
	404	Quaternion	1.025×10^{-12}	1.6618×10^{-12}	5.5823×10^{-4}	69.986 27
pdb2lxz		Classic	2.371×10^{-12}		3.6233×10^{-4}	
	194	Quaternion	2.792×10^{-12}	1.9895×10^{-12}	2.1837×10^{-4}	65.928 01
pdb2lzf		Classic	3.217×10^{-14}		5.1196×10^{-2}	
	820	Quaternion	3.957×10^{-14}	1.2991×10^{-13}	2.4720×10^{-2}	107.105 68
pdb2m1a		Classic	6.346×10^{-15}		3.2338×10^{-4}	
	158	Quaternion	7.612×10^{-15}	6.5801×10^{-15}	1.9137×10^{-4}	68.978 54
pdb2m1j		Classic	1.865×10^{-14}		3.3130×10^{-4}	
	182	Quaternion	2.212×10^{-14}	6.6915×10^{-14}	1.9828×10^{-4}	67.084 84
pdb2m2y		Classic	2.699×10^{-13}		1.8685×10^{-4}	
	110	Quaternion	2.808×10^{-13}	1.4386×10^{-13}	1.1245×10^{-4}	66.166 88
pdb2m3f		Classic	3.629×10^{-14}		2.1466×10^{-4}	
	134	Quaternion	4.641×10^{-14}	5.8107×10^{-14}	1.3036×10^{-4}	64.669 22
pdb2m4j		Classic	1.463×10^{-11}		4.0158×10^{-2}	
	2178	Quaternion	1.455×10^{-11}	1.8385×10^{-13}	1.9961×10^{-2}	101.181 51
pdb2m8m		Classic	2.407×10^{-14}		2.8258×10^{-4}	
	170	Quaternion	3.023×10^{-14}	1.1738×10^{-13}	1.7129×10^{-4}	64.973 13
pdb2m8o		Classic	1.672×10^{-14}		2.7663×10^{-4}	
	170	Quaternion	2.039×10^{-14}	2.4755×10^{-14}	1.6880×10^{-4}	63.880 76
pdb2m97		Classic	4.646×10^{-14}		7.6201×10^{-4}	
	416	Quaternion	5.841×10^{-14}	2.0639×10^{-13}	4.7284×10^{-4}	61.153 89
pdb2m9g		Classic	2.939×10^{-13}		2.0976×10^{-3}	
	1108	Quaternion	3.170×10^{-13}	5.8913×10^{-13}	1.2856×10^{-3}	63.161 89
pdb2m9r		Classic	3.537×10^{-14}		4.3800×10^{-4}	
	242	Quaternion	4.406×10^{-14}	1.6694×10^{-13}	2.5305×10^{-4}	73.088 18
pdb2mdv		Classic	3.178×10^{-12}		2.1264×10^{-3}	
	460	Quaternion	3.178×10^{-12}	3.0402×10^{-13}	1.2079×10^{-3}	76.046 40
pdb2me1		Classic	1.886×10^{-13}		2.7337×10^{-4}	
	164	Quaternion	2.208×10^{-13}	1.6579×10^{-13}	1.6513×10^{-4}	65.548 94

	Problem Size	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time	
pdb2me2 164		Classic	3.667×10^{-13}			2.9177×10^{-4}	
		Quaternion	5.098×10^{-13}	1.1486×10^{-12}		1.7359×10^{-4}	68.082 58
pdb2me3 164		Classic	2.593×10^{-9}			2.6801×10^{-4}	
		Quaternion	2.593×10^{-9}	9.2137×10^{-14}		1.6247×10^{-4}	64.963 76
pdb2me4 164		Classic	2.854×10^{-9}			3.1285×10^{-4}	
		Quaternion	2.854×10^{-9}	9.9945×10^{-13}		1.8609×10^{-4}	68.122 27
pdb2mg1 164		Classic	4.398×10^{-14}			2.7477×10^{-4}	
		Quaternion	5.374×10^{-14}	1.5805×10^{-13}		1.6842×10^{-4}	63.153 22
pdb2mg2 170		Classic	1.829×10^{-14}			2.8189×10^{-4}	
		Quaternion	2.480×10^{-14}	2.5921×10^{-14}		1.7237×10^{-4}	63.538 77
pdb2mg3 170		Classic	3.541×10^{-14}			2.9087×10^{-4}	
		Quaternion	4.461×10^{-14}	2.4798×10^{-13}		1.7847×10^{-4}	62.978 89
pdb2mh8 338		Classic	1.547×10^{-13}			6.4620×10^{-4}	
		Quaternion	1.883×10^{-13}	2.9903×10^{-13}		3.8846×10^{-4}	66.350 20
pdb2mhw 164		Classic	6.229×10^{-14}			2.8046×10^{-4}	
		Quaternion	7.129×10^{-14}	4.9718×10^{-13}		1.7330×10^{-4}	61.834 57
pdb2mi1 84		Classic	1.827×10^{-12}			1.5245×10^{-4}	
		Quaternion	2.052×10^{-12}	1.5687×10^{-12}		9.2051×10^{-5}	65.617 43
pdb2mi7 404		Classic	6.022×10^{-13}			6.6253×10^{-4}	
		Quaternion	6.817×10^{-13}	1.3690×10^{-12}		4.0685×10^{-4}	62.844 71
pdb2mij 224		Classic	1.244×10^{-13}			3.8008×10^{-4}	
		Quaternion	1.522×10^{-13}	2.8681×10^{-13}		2.2922×10^{-4}	65.810 37
pdb2mix 128		Classic	4.816×10^{-14}			2.1355×10^{-4}	
		Quaternion	4.684×10^{-14}	3.7348×10^{-14}		1.3050×10^{-4}	63.633 44
pdb2mj1 110		Classic	1.309×10^{-13}			1.9866×10^{-4}	
		Quaternion	1.646×10^{-13}	2.3819×10^{-13}		1.1766×10^{-4}	68.842 96
pdb2mj2 218		Classic	9.775×10^{-14}			3.8096×10^{-4}	
		Quaternion	1.196×10^{-13}	8.8713×10^{-14}		2.2764×10^{-4}	67.354 97
pdb2mjg 556		Classic	5.503×10^{-14}			2.4548×10^{-3}	
		Quaternion	6.580×10^{-14}	7.0670×10^{-14}		1.3970×10^{-3}	75.719 10
pdb2mji 788		Classic	3.207×10^{-12}			1.4144×10^{-3}	
		Quaternion	3.247×10^{-12}	2.7336×10^{-13}		8.8363×10^{-4}	60.067 35
pdb2mle 434		Classic	1.491×10^{-13}			8.0971×10^{-4}	
		Quaternion	1.535×10^{-13}	3.1271×10^{-13}		4.8857×10^{-4}	65.728 87
pdb2mlf 434		Classic	9.918×10^{-14}			8.0349×10^{-4}	
		Quaternion	1.128×10^{-13}	9.2903×10^{-14}		4.8419×10^{-4}	65.946 59
pdb2mo5 854		Classic	2.527×10^{-10}			1.5646×10^{-3}	
		Quaternion	2.527×10^{-10}	1.0204×10^{-12}		9.7189×10^{-4}	60.981 08
pdb2mpu 554		Classic	9.785×10^{-14}			1.0274×10^{-3}	
		Quaternion	1.016×10^{-13}	1.0352×10^{-13}		6.3650×10^{-4}	61.421 28
pdb2mra 704		Classic	2.632×10^{-13}			1.6134×10^{-3}	
		Quaternion	2.768×10^{-13}	1.2867×10^{-13}		9.6953×10^{-4}	66.413 81
pdb2msu 122		Classic	7.813×10^{-14}			2.2473×10^{-4}	
		Quaternion	8.765×10^{-14}	3.7025×10^{-14}		1.3344×10^{-4}	68.419 32

	Problem Size	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2mty 120		Classic	1.849×10^{-14}		2.4184×10^{-4}	
		Quaternion	2.364×10^{-14}	9.1457×10^{-14}	1.4186×10^{-4}	$70.478\,04$
pdb2muh 98		Classic	2.008×10^{-13}		1.6587×10^{-4}	
		Quaternion	2.251×10^{-13}	1.4292×10^{-13}	9.9743×10^{-5}	$66.299\,72$
pdb2mvj 156		Classic	1.534×10^{-13}		2.6945×10^{-4}	
		Quaternion	1.647×10^{-13}	5.5998×10^{-14}	1.6377×10^{-4}	$64.528\,74$
pdb2mvt 284		Classic	6.053×10^{-12}		6.4266×10^{-4}	
		Quaternion	6.226×10^{-12}	3.1969×10^{-12}	3.7860×10^{-4}	$69.749\,34$
pdb2mvx 2360		Classic	4.728×10^{-9}		3.7186×10^{-2}	
		Quaternion	4.729×10^{-9}	3.7181×10^{-11}	1.8636×10^{-2}	$99.533\,19$
pdb2mz6 220		Classic	4.129×10^{-8}		9.7662×10^{-2}	
		Quaternion	4.129×10^{-8}	4.4231×10^{-13}	4.7517×10^{-2}	$105.533\,00$
pdb2n00 572		Classic	2.703×10^{-13}		8.9193×10^{-4}	
		Quaternion	3.467×10^{-13}	7.3499×10^{-13}	5.6154×10^{-4}	$58.837\,33$
pdb2n0b 60		Classic	7.104×10^{-13}		1.0532×10^{-4}	
		Quaternion	9.458×10^{-13}	8.9441×10^{-13}	6.4478×10^{-5}	$63.339\,43$
pdb2n0c 60		Classic	1.293×10^{-13}		9.9088×10^{-5}	
		Quaternion	1.682×10^{-13}	2.8483×10^{-13}	5.9963×10^{-5}	$65.249\,95$
pdb2n0d 60		Classic	1.925×10^{-9}		9.9021×10^{-5}	
		Quaternion	1.926×10^{-9}	1.6149×10^{-11}	6.0649×10^{-5}	$63.269\,50$
pdb2n0e 60		Classic	3.314×10^{-12}		1.0405×10^{-4}	
		Quaternion	4.286×10^{-12}	8.3573×10^{-12}	6.3836×10^{-5}	$63.000\,01$
pdb2n0f 60		Classic	8.103×10^{-9}		9.4798×10^{-5}	
		Quaternion	8.103×10^{-9}	5.8011×10^{-13}	5.8399×10^{-5}	$62.328\,66$
pdb2n0g 60		Classic	8.315×10^{-13}		1.1269×10^{-4}	
		Quaternion	9.618×10^{-13}	1.3124×10^{-13}	6.7681×10^{-5}	$66.504\,63$
pdb2n0h 60		Classic	7.690×10^{-13}		1.0649×10^{-4}	
		Quaternion	8.730×10^{-13}	1.8191×10^{-13}	6.5592×10^{-5}	$62.357\,74$
pdb2n35 314		Classic	3.541×10^{-14}		5.7583×10^{-4}	
		Quaternion	4.466×10^{-14}	1.0752×10^{-13}	3.4850×10^{-4}	$65.229\,90$
pdb2n3a 574		Classic	8.761×10^{-14}		2.1136×10^{-2}	
		Quaternion	1.049×10^{-13}	1.0149×10^{-13}	1.0581×10^{-2}	$99.754\,47$
pdb2n41 638		Classic	1.812×10^{-13}		1.2214×10^{-3}	
		Quaternion	1.836×10^{-13}	8.2539×10^{-14}	7.5387×10^{-4}	$62.020\,24$
pdb2n4e 638		Classic	1.494×10^{-13}		1.2005×10^{-3}	
		Quaternion	1.687×10^{-13}	1.8433×10^{-13}	7.4403×10^{-4}	$61.355\,93$
pdb2n5q 164		Classic	1.732×10^{-12}		2.8586×10^{-4}	
		Quaternion	1.745×10^{-12}	1.7589×10^{-12}	1.7326×10^{-4}	$64.988\,36$
pdb2n67 566		Classic	4.443×10^{-13}		1.0705×10^{-3}	
		Quaternion	4.465×10^{-13}	6.3487×10^{-14}	6.5889×10^{-4}	$62.466\,17$
pdb2n6n 192		Classic	4.139×10^{-8}		3.5018×10^{-4}	
		Quaternion	4.139×10^{-8}	5.0670×10^{-13}	2.1213×10^{-4}	$65.076\,79$
pdb2n7i 224		Classic	9.212×10^{-13}		3.9039×10^{-4}	
		Quaternion	1.126×10^{-12}	3.0537×10^{-12}	2.3389×10^{-4}	$66.911\,44$

	Problem Size	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time	
pdb2n7j 336		Classic	5.969×10^{-13}			6.2452×10^{-4}	
		Quaternion	6.094×10^{-13}	1.5144×10^{-13}		3.7466×10^{-4}	66.692 33
pdb2n9b 832		Classic	1.196×10^{-12}			1.0415×10^{-2}	
		Quaternion	1.238×10^{-12}	1.1231×10^{-12}		4.6876×10^{-3}	122.174 14
pdb2na9 266		Classic	5.440×10^{-14}			4.5118×10^{-4}	
		Quaternion	6.690×10^{-14}	5.4544×10^{-14}		2.6866×10^{-4}	67.933 62
pdb2ndc 110		Classic	3.365×10^{-14}			1.9645×10^{-4}	
		Quaternion	4.479×10^{-14}	5.1916×10^{-14}		1.1711×10^{-4}	67.751 29
pdb2nde 110		Classic	7.022×10^{-14}			1.7381×10^{-4}	
		Quaternion	8.868×10^{-14}	2.5156×10^{-13}		1.0512×10^{-4}	65.346 87
pdb2ndk 290		Classic	5.022×10^{-13}			4.9350×10^{-4}	
		Quaternion	6.279×10^{-13}	2.0516×10^{-12}		3.0069×10^{-4}	64.120 92
pdb2nvj 152		Classic	2.082×10^{-14}			2.3645×10^{-4}	
		Quaternion	2.293×10^{-14}	1.4035×10^{-14}		1.4631×10^{-4}	61.612 23
pdb2p6j 314		Classic	4.795×10^{-14}			5.6452×10^{-4}	
		Quaternion	6.389×10^{-14}	1.1404×10^{-13}		3.4004×10^{-4}	66.016 40
pdb2p81 266		Classic	7.881×10^{-13}			4.5289×10^{-4}	
		Quaternion	8.250×10^{-13}	4.3715×10^{-13}		2.7048×10^{-4}	67.435 54
pdb2pqe 896		Classic	6.484×10^{-10}			2.0028×10^{-3}	
		Quaternion	6.496×10^{-10}	8.5673×10^{-12}		1.2182×10^{-3}	64.404 25
pdb2rlg 108		Classic	5.501×10^{-14}			1.9145×10^{-4}	
		Quaternion	6.973×10^{-14}	6.8873×10^{-14}		1.1444×10^{-4}	67.286 63
pdb2rlh 108		Classic	4.772×10^{-14}			2.0634×10^{-4}	
		Quaternion	5.801×10^{-14}	3.9131×10^{-14}		1.2294×10^{-4}	67.845 06
pdb2rmy 206		Classic	1.872×10^{-13}			3.6036×10^{-4}	
		Quaternion	2.498×10^{-13}	3.6453×10^{-13}		2.1423×10^{-4}	68.214 64
pdb2rnd 206		Classic	2.626×10^{-13}			3.4764×10^{-4}	
		Quaternion	3.581×10^{-13}	4.9979×10^{-13}		2.0993×10^{-4}	65.595 44
pdb2roo 260		Classic	2.933×10^{-12}			1.0899×10^{-3}	
		Quaternion	3.525×10^{-12}	3.5927×10^{-12}		6.1599×10^{-4}	76.938 92
pdb2rql 572		Classic	2.345×10^{-12}			1.4716×10^{-3}	
		Quaternion	2.496×10^{-12}	8.7086×10^{-13}		8.7885×10^{-4}	67.442 57
pdb2rut 218		Classic	4.389×10^{-14}			3.7874×10^{-4}	
		Quaternion	5.014×10^{-14}	3.5338×10^{-13}		2.2736×10^{-4}	66.579 51
pdb2ruv 224		Classic	5.776×10^{-14}			3.9526×10^{-4}	
		Quaternion	7.408×10^{-14}	1.2473×10^{-13}		2.3560×10^{-4}	67.767 96
pdb2rux 218		Classic	2.671×10^{-14}			3.9808×10^{-4}	
		Quaternion	3.016×10^{-14}	6.2140×10^{-14}		2.3731×10^{-4}	67.745 85
pdb2ruy 224		Classic	1.968×10^{-14}			3.9089×10^{-4}	
		Quaternion	2.387×10^{-14}	6.4254×10^{-14}		2.3568×10^{-4}	65.854 13
pdb2rv3 218		Classic	3.656×10^{-14}			4.0489×10^{-4}	
		Quaternion	4.118×10^{-14}	6.3794×10^{-14}		2.4209×10^{-4}	67.248 33
pdb2rv5 212		Classic	1.145×10^{-14}			3.7540×10^{-4}	
		Quaternion	1.338×10^{-14}	1.6010×10^{-14}		2.2636×10^{-4}	65.841 45

Table 2: Results - continued

	Problem Size	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time	
pdb2y4q 476		Classic	1.410×10^{-12}			8.2759×10^{-4}	
		Quaternion	1.451×10^{-12}	2.0648×10^{-13}		5.0510×10^{-4}	$63.847\,03$