

Table 1: Results

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1a57	Classic	2.813×10^{-18}		1.0482×10^{-2}	
	Quaternion	2.786×10^{-18}	1.8861×10^{-12}	5.9658×10^{-3}	75.706 95
pdb1b4c	Classic	1.432×10^{-11}		9.7867×10^{-3}	
	Quaternion	1.432×10^{-11}	1.0913×10^{-12}	5.5507×10^{-3}	76.313 67
pdb1ba5	Classic	3.546×10^{-21}		6.9987×10^{-4}	
	Quaternion	3.767×10^{-21}	4.1376×10^{-12}	4.6989×10^{-4}	48.944 54
pdb1d1n	Classic	3.794×10^{-11}		1.1736×10^{-3}	
	Quaternion	3.794×10^{-11}	1.3063×10^{-12}	8.1805×10^{-4}	43.466 13
pdb1dp3	Classic	1.810×10^{-10}		1.3754×10^{-3}	
	Quaternion	1.810×10^{-10}	1.4158×10^{-12}	8.7240×10^{-4}	57.651 92
pdb1du1	Classic	8.393×10^{-22}		2.2848×10^{-4}	
	Quaternion	2.570×10^{-21}	1.2376×10^{-12}	1.5005×10^{-4}	52.267 18
pdb1eii	Classic	1.054×10^{-18}		2.3000×10^{-3}	
	Quaternion	9.664×10^{-19}	1.1331×10^{-11}	1.5436×10^{-3}	49.006 33
pdb1fcl	Classic	1.465×10^{-10}		3.3759×10^{-3}	
	Quaternion	1.465×10^{-10}	8.2109×10^{-13}	2.0751×10^{-3}	62.688 89
pdb1fd6	Classic	2.932×10^{-20}		1.4788×10^{-3}	
	Quaternion	2.882×10^{-20}	3.3846×10^{-13}	9.5069×10^{-4}	55.546 72
pdb1hf9	Classic	1.631×10^{-10}		6.6706×10^{-1}	
	Quaternion	1.631×10^{-10}	3.9588×10^{-12}	3.8669×10^{-1}	72.502 65
pdb1i2u	Classic	4.584×10^{-22}		5.3651×10^{-4}	
	Quaternion	4.245×10^{-22}	1.5136×10^{-13}	3.6289×10^{-4}	47.844 63
pdb1i2v	Classic	2.720×10^{-22}		5.8955×10^{-4}	
	Quaternion	2.818×10^{-22}	6.9127×10^{-14}	3.9327×10^{-4}	49.911 13
pdb1ijc	Classic	2.599×10^{-10}		7.5517×10^{-2}	
	Quaternion	2.599×10^{-10}	4.2252×10^{-12}	4.3294×10^{-2}	74.427 44
pdb1jlz	Classic	3.674×10^{-22}		2.6829×10^{-4}	
	Quaternion	3.399×10^{-22}	1.3105×10^{-12}	1.7943×10^{-4}	49.524 32
pdb1jw3	Classic	6.754×10^{-22}		2.7456×10^{-3}	
	Quaternion	6.597×10^{-22}	3.9013×10^{-13}	1.7546×10^{-3}	56.478 00
pdb1k0v	Classic	7.977×10^{-23}		8.3616×10^{-4}	
	Quaternion	7.593×10^{-23}	1.3433×10^{-13}	5.6413×10^{-4}	48.220 79
pdb1k2h	Classic	4.294×10^{-12}		1.9075×10^{-2}	
	Quaternion	4.294×10^{-12}	2.2036×10^{-13}	1.1129×10^{-2}	71.395 18
pdb1k36	Classic	5.937×10^{-19}		3.8935×10^{-2}	
	Quaternion	8.594×10^{-19}	2.8981×10^{-11}	2.2830×10^{-2}	70.540 36
pdb1k37	Classic	5.384×10^{-22}		1.9058×10^{-3}	
	Quaternion	5.917×10^{-22}	1.5479×10^{-13}	1.1556×10^{-3}	64.916 91
pdb1kuw	Classic	5.108×10^{-24}		1.1179×10^{-4}	
	Quaternion	7.241×10^{-24}	7.3457×10^{-14}	7.4821×10^{-5}	49.407 25
pdb1kz0	Classic	1.262×10^{-24}		1.7039×10^{-4}	
	Quaternion	2.406×10^{-24}	2.4335×10^{-13}	1.1422×10^{-4}	49.180 52
pdb1kz2	Classic	2.013×10^{-25}		1.8350×10^{-4}	
	Quaternion	4.170×10^{-25}	2.6112×10^{-14}	1.2351×10^{-4}	48.568 35
pdb1kz5	Classic	1.468×10^{-24}		1.3355×10^{-4}	
	Quaternion	2.012×10^{-24}	4.8348×10^{-14}	8.9626×10^{-5}	49.005 31

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1lvz	Classic	1.771×10^{-10}		1.1582×10^{-4}	
	Quaternion	1.771×10^{-10}	7.9621×10^{-14}	7.8221×10^{-5}	48.063 49
pdb1m4e	Classic	1.150×10^{-10}		2.0809×10^{-4}	
	Quaternion	1.150×10^{-10}	1.0477×10^{-13}	1.3841×10^{-4}	50.347 17
pdb1ma2	Classic	7.245×10^{-10}		1.6239×10^{-3}	
	Quaternion	7.245×10^{-10}	4.3233×10^{-13}	1.0033×10^{-3}	61.859 82
pdb1ma4	Classic	1.435×10^{-10}		4.7529×10^{-4}	
	Quaternion	1.435×10^{-10}	2.4225×10^{-13}	3.0458×10^{-4}	56.048 93
pdb1ma5	Classic	5.542×10^{-22}		1.8221×10^{-4}	
	Quaternion	6.385×10^{-22}	5.0234×10^{-13}	1.2224×10^{-4}	49.056 18
pdb1ma6	Classic	3.155×10^{-11}		1.7334×10^{-4}	
	Quaternion	3.155×10^{-11}	3.3030×10^{-12}	1.1766×10^{-4}	47.324 52
pdb1mpe	Classic	1.591×10^{-11}		4.6366×10^{-1}	
	Quaternion	1.591×10^{-11}	7.1211×10^{-13}	2.6541×10^{-1}	74.696 30
pdb1nd9	Classic	1.316×10^{-22}		1.7189×10^{-3}	
	Quaternion	2.085×10^{-22}	4.7137×10^{-13}	1.0529×10^{-3}	63.246 59
pdb1ne5	Classic	2.810×10^{-21}		8.7959×10^{-4}	
	Quaternion	3.265×10^{-21}	7.5582×10^{-13}	5.6402×10^{-4}	55.949 73
pdb1nmj	Classic	1.047×10^{-25}		3.1943×10^{-4}	
	Quaternion	1.220×10^{-25}	1.3921×10^{-14}	2.1528×10^{-4}	48.379 30
pdb1o53	Classic	9.038×10^{-11}		1.7907×10^{-4}	
	Quaternion	9.038×10^{-11}	6.4225×10^{-13}	1.2025×10^{-4}	48.920 12
pdb1oqp	Classic	1.876×10^{-23}		3.7526×10^{-3}	
	Quaternion	2.226×10^{-23}	9.0066×10^{-14}	2.3190×10^{-3}	61.822 31
pdb1plw	Classic	4.274×10^{-25}		5.5555×10^{-5}	
	Quaternion	4.615×10^{-25}	4.9118×10^{-14}	3.7554×10^{-5}	47.933 64
pdb1plx	Classic	3.214×10^{-24}		5.3057×10^{-5}	
	Quaternion	4.865×10^{-24}	1.7973×10^{-13}	3.6156×10^{-5}	46.746 69
pdb1pv0	Classic	1.092×10^{-10}		5.9205×10^{-4}	
	Quaternion	1.092×10^{-10}	1.0039×10^{-13}	3.8753×10^{-4}	52.774 80
pdb1qlk	Classic	5.745×10^{-11}		4.9762×10^{-2}	
	Quaternion	5.745×10^{-11}	1.2720×10^{-12}	2.8805×10^{-2}	72.752 03
pdb1r57	Classic	1.569×10^{-12}		1.6613×10^{-3}	
	Quaternion	1.569×10^{-12}	1.6053×10^{-13}	1.0768×10^{-3}	54.279 76
pdb1ry3	Classic	2.183×10^{-10}		8.2148×10^{-4}	
	Quaternion	2.183×10^{-10}	5.4489×10^{-13}	5.4473×10^{-4}	50.806 09
pdb1s4h	Classic	7.638×10^{-13}		1.2965×10^{-4}	
	Quaternion	7.638×10^{-13}	1.1103×10^{-12}	8.7392×10^{-5}	48.359 69
pdb1s4j	Classic	3.063×10^{-10}		1.4618×10^{-4}	
	Quaternion	3.063×10^{-10}	1.6581×10^{-13}	9.7300×10^{-5}	50.240 49
pdb1s6j	Classic	9.709×10^{-11}		3.7478×10^{-3}	
	Quaternion	9.709×10^{-11}	1.3676×10^{-12}	2.2720×10^{-3}	64.955 30
pdb1sa8	Classic	5.626×10^{-21}		1.3251×10^{-3}	
	Quaternion	6.708×10^{-21}	1.0370×10^{-12}	8.6376×10^{-4}	53.415 28
pdb1t2y	Classic	3.418×10^{-23}		3.0920×10^{-4}	

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1t5q	Quaternion	6.168×10^{-23}	2.3861×10^{-13}	2.0189×10^{-4}	53.155 26
	Classic	8.677×10^{-25}		3.1394×10^{-4}	
pdb1tot	Quaternion	1.218×10^{-24}	5.3231×10^{-14}	2.0166×10^{-4}	55.674 40
	Classic	6.421×10^{-24}		6.2836×10^{-4}	
pdb1v6r	Quaternion	8.295×10^{-24}	2.8392×10^{-14}	4.1719×10^{-4}	50.615 00
	Classic	1.358×10^{-21}		2.3704×10^{-4}	
pdb1v92	Quaternion	1.214×10^{-21}	3.1917×10^{-13}	1.5787×10^{-4}	50.151 87
	Classic	2.234×10^{-23}		5.3131×10^{-4}	
pdb1vd7	Quaternion	2.533×10^{-23}	5.6062×10^{-14}	3.5608×10^{-4}	49.213 16
	Classic	2.384×10^{-10}		2.5831×10^{-4}	
pdb1vd9	Quaternion	2.384×10^{-10}	5.6018×10^{-13}	1.7336×10^{-4}	49.003 37
	Classic	1.054×10^{-9}		3.3104×10^{-4}	
pdb1vdb	Quaternion	1.054×10^{-9}	1.3255×10^{-12}	2.1835×10^{-4}	51.611 43
	Classic	4.381×10^{-10}		2.4648×10^{-4}	
pdb1vpc	Quaternion	4.381×10^{-10}	3.8541×10^{-13}	1.6660×10^{-4}	47.944 79
	Classic	8.186×10^{-26}		5.0069×10^{-4}	
pdb1wnk	Quaternion	9.792×10^{-26}	8.5436×10^{-15}	3.3532×10^{-4}	49.317 59
	Classic	4.998×10^{-20}		2.5557×10^{-4}	
pdb1wo4	Quaternion	5.984×10^{-20}	2.2335×10^{-11}	1.6958×10^{-4}	50.706 16
	Classic	3.925×10^{-21}		1.6181×10^{-3}	
pdb1wo5	Quaternion	2.918×10^{-21}	2.3523×10^{-12}	9.9292×10^{-4}	62.960 52
	Classic	4.057×10^{-11}		5.5664×10^{-4}	
pdb1x60	Quaternion	4.057×10^{-11}	4.9000×10^{-12}	3.5920×10^{-4}	54.969 57
	Classic	3.853×10^{-11}		1.2396×10^{-2}	
pdb1x9v	Quaternion	3.853×10^{-11}	9.7171×10^{-13}	7.2476×10^{-3}	71.035 45
	Classic	1.060×10^{-12}		2.5467	
pdb1y5c	Quaternion	1.060×10^{-12}	1.3466×10^{-13}	1.4682	73.459 54
	Classic	3.720×10^{-11}		1.1192×10^{-4}	
pdb1yx7	Quaternion	3.720×10^{-11}	2.9129×10^{-13}	7.4809×10^{-5}	49.613 01
	Classic	1.457×10^{-10}		8.3681×10^{-3}	
pdb1yx8	Quaternion	1.457×10^{-10}	7.3116×10^{-12}	4.6442×10^{-3}	80.185 29
	Classic	5.204×10^{-11}		3.8456×10^{-3}	
pdb1yxr	Quaternion	5.204×10^{-11}	1.0853×10^{-11}	2.4222×10^{-3}	58.764 39
	Classic	1.975×10^{-11}		1.7957×10^{-3}	
pdb2a2y	Quaternion	1.975×10^{-11}	3.2120×10^{-13}	1.1391×10^{-3}	57.645 05
	Classic	3.781×10^{-21}		1.8372×10^{-1}	
pdb2a4j	Quaternion	3.629×10^{-21}	3.7416×10^{-13}	1.0545×10^{-1}	74.225 95
	Classic	3.676×10^{-24}		1.2743×10^{-3}	
pdb2adn	Quaternion	3.858×10^{-24}	1.4394×10^{-14}	8.1970×10^{-4}	55.463 69
	Classic	1.093×10^{-11}		4.3582×10^{-1}	
pdb2ajj	Quaternion	1.093×10^{-11}	2.4948×10^{-12}	2.5224×10^{-1}	72.779 60
	Classic	3.048×10^{-10}		2.9937×10^{-4}	
pdb2ajm	Quaternion	3.048×10^{-10}	1.2387×10^{-13}	2.0150×10^{-4}	48.571 08
	Classic	2.564×10^{-10}		3.1686×10^{-4}	
	Quaternion	2.564×10^{-10}	8.8381×10^{-13}	2.1142×10^{-4}	49.868 86

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2ajn	Classic	1.597×10^{-10}		3.1861×10^{-4}	
	Quaternion	1.597×10^{-10}	2.0883×10^{-13}	2.0984×10^{-4}	51.837 85
pdb2ajo	Classic	2.564×10^{-10}		3.2247×10^{-4}	
	Quaternion	2.564×10^{-10}	8.8381×10^{-13}	2.1534×10^{-4}	49.754 10
pdb2akk	Classic	2.396×10^{-23}		2.2345×10^{-3}	
	Quaternion	2.209×10^{-23}	1.1725×10^{-13}	1.4017×10^{-3}	59.415 87
pdb2bzb	Classic	5.648×10^{-23}		1.9305×10^{-2}	
	Quaternion	8.249×10^{-23}	1.5097×10^{-13}	1.1181×10^{-2}	72.666 07
pdb2c0s	Classic	6.258×10^{-22}		7.5463×10^{-4}	
	Quaternion	5.562×10^{-22}	7.2067×10^{-13}	5.1005×10^{-4}	47.950 99
pdb2dci	Classic	3.476×10^{-25}		2.0235×10^{-4}	
	Quaternion	4.611×10^{-25}	1.3479×10^{-13}	1.3688×10^{-4}	47.832 01
pdb2eem	Classic	1.331×10^{-21}		7.6570×10^{-4}	
	Quaternion	1.376×10^{-21}	4.0208×10^{-13}	4.8730×10^{-4}	57.132 32
pdb2fva	Classic	6.795×10^{-21}		2.1769×10^{-2}	
	Quaternion	7.377×10^{-21}	1.5803×10^{-12}	1.2243×10^{-2}	77.815 23
pdb2fvf	Classic	4.700×10^{-22}		1.0457×10^{-2}	
	Quaternion	4.791×10^{-22}	2.8750×10^{-13}	5.8515×10^{-3}	78.705 77
pdb2fxz	Classic	7.197×10^{-10}		1.5033×10^{-4}	
	Quaternion	7.197×10^{-10}	1.7350×10^{-12}	1.0051×10^{-4}	49.565 98
pdb2g9j	Classic	4.109×10^{-19}		1.2174×10^{-1}	
	Quaternion	4.425×10^{-19}	2.1668×10^{-12}	6.8370×10^{-2}	78.056 36
pdb2g9l	Classic	3.353×10^{-24}		4.0998×10^{-4}	
	Quaternion	5.316×10^{-24}	2.8081×10^{-13}	2.7348×10^{-4}	49.914 34
pdb2h5m	Classic	3.296×10^{-12}		1.2757×10^{-3}	
	Quaternion	3.296×10^{-12}	4.0081×10^{-12}	8.4083×10^{-4}	51.722 52
pdb2hep	Classic	1.540×10^{-20}		1.1385×10^{-3}	
	Quaternion	1.589×10^{-20}	5.5848×10^{-13}	7.0874×10^{-4}	60.632 22
pdb2jmy	Classic	2.970×10^{-21}		1.7130×10^{-4}	
	Quaternion	2.975×10^{-21}	5.0812×10^{-13}	1.1477×10^{-4}	49.261 33
pdb2jn5	Classic	2.618×10^{-13}		1.5793×10^{-4}	
	Quaternion	2.618×10^{-13}	1.4394×10^{-11}	1.0423×10^{-4}	51.517 97
pdb2jnk	Classic	7.596×10^{-12}		3.1906×10^{-3}	
	Quaternion	7.596×10^{-12}	3.7973×10^{-13}	1.9743×10^{-3}	61.603 73
pdb2jpn	Classic	1.441×10^{-22}		1.4250×10^{-3}	
	Quaternion	1.468×10^{-22}	1.9605×10^{-13}	9.4705×10^{-4}	50.471 36
pdb2jua	Classic	5.614×10^{-18}		1.5013×10^{-3}	
	Quaternion	6.136×10^{-18}	1.4391×10^{-11}	9.6109×10^{-4}	56.204 98
pdb2jvd	Classic	3.772×10^{-24}		5.5534×10^{-4}	
	Quaternion	3.831×10^{-24}	2.1712×10^{-14}	3.7595×10^{-4}	47.715 61
pdb2jwe	Classic	8.005×10^{-11}		1.1928	
	Quaternion	8.005×10^{-11}	1.1093×10^{-12}	6.8263×10^{-1}	74.735 40
pdb2jws	Classic	7.594×10^{-11}		7.0082×10^{-4}	
	Quaternion	7.594×10^{-11}	2.9470×10^{-13}	4.5578×10^{-4}	53.761 62
pdb2jwu	Classic	5.598×10^{-11}		2.6288×10^{-3}	

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2jxf	Quaternion	5.598×10^{-11}	6.2848×10^{-13}	1.6420×10^{-3}	60.098 94
	Classic	2.087×10^{-11}		3.4091×10^{-4}	
pdb2jz5	Quaternion	2.087×10^{-11}	6.1180×10^{-13}	2.2742×10^{-4}	49.906 78
	Classic	3.724×10^{-22}		2.1965×10^{-3}	
pdb2k2a	Quaternion	3.469×10^{-22}	1.7635×10^{-13}	1.2821×10^{-3}	71.330 25
	Classic	1.403×10^{-24}		9.0095×10^{-4}	
pdb2k36	Quaternion	2.466×10^{-24}	1.3435×10^{-13}	5.9181×10^{-4}	52.238 19
	Classic	1.163×10^{-11}		1.7676×10^{-3}	
pdb2k37	Quaternion	1.163×10^{-11}	9.1745×10^{-14}	1.2040×10^{-3}	46.813 91
	Classic	4.035×10^{-23}		8.1092×10^{-4}	
pdb2k3i	Quaternion	5.985×10^{-23}	4.0204×10^{-13}	5.0474×10^{-4}	60.660 78
	Classic	6.004×10^{-22}		1.8112×10^{-3}	
pdb2k6s	Quaternion	6.345×10^{-22}	2.4790×10^{-13}	1.1536×10^{-3}	57.005 43
	Classic	7.112×10^{-23}		7.2039×10^{-3}	
pdb2k7o	Quaternion	9.897×10^{-23}	4.8726×10^{-13}	4.1393×10^{-3}	74.036 40
	Classic	1.164×10^{-22}		6.7940×10^{-3}	
pdb2kbm	Quaternion	1.121×10^{-22}	4.6393×10^{-13}	3.9738×10^{-3}	70.972 70
	Classic	7.942×10^{-22}		2.5007	
pdb2kdh	Quaternion	7.754×10^{-22}	2.6963×10^{-13}	1.4992	66.801 88
	Classic	1.695×10^{-10}		1.6772×10^{-3}	
pdb2kdl	Quaternion	1.695×10^{-10}	7.7869×10^{-11}	1.0930×10^{-3}	53.450 42
	Classic	4.907×10^{-11}		1.6585×10^{-3}	
pdb2kdm	Quaternion	4.907×10^{-11}	3.2157×10^{-13}	1.0473×10^{-3}	58.357 44
	Classic	5.397×10^{-11}		1.0383×10^{-3}	
pdb2kdp	Quaternion	5.397×10^{-11}	9.7911×10^{-13}	6.7358×10^{-4}	54.151 82
	Classic	2.228×10^{-22}		7.9966×10^{-4}	
pdb2kdr	Quaternion	2.410×10^{-22}	1.0772×10^{-13}	5.3284×10^{-4}	50.076 10
	Classic	2.762×10^{-11}		3.2099×10^{-4}	
pdb2kes	Quaternion	2.762×10^{-11}	6.3191×10^{-14}	2.1383×10^{-4}	50.114 70
	Classic	3.442×10^{-24}		5.8206×10^{-4}	
pdb2kib	Quaternion	3.742×10^{-24}	2.3286×10^{-14}	3.8529×10^{-4}	51.072 18
	Classic	7.789×10^{-21}		8.4915×10^{-1}	
pdb2kjin	Quaternion	7.661×10^{-21}	1.3388×10^{-12}	5.1378×10^{-1}	65.276 48
	Classic	6.977×10^{-14}		2.8717×10^{-4}	
pdb2kjo	Quaternion	6.977×10^{-14}	1.3817×10^{-13}	1.9261×10^{-4}	49.092 49
	Classic	1.095×10^{-10}		2.6420×10^{-4}	
pdb2kjr	Quaternion	1.095×10^{-10}	6.4697×10^{-14}	1.7871×10^{-4}	47.836 17
	Classic	5.549×10^{-10}		1.1772×10^{-2}	
pdb2kko	Quaternion	5.549×10^{-10}	4.1183×10^{-13}	6.6174×10^{-3}	77.892 28
	Classic	6.417×10^{-23}		1.1848×10^{-2}	
pdb2kl5	Quaternion	6.445×10^{-23}	2.9766×10^{-14}	6.6481×10^{-3}	78.208 94
	Classic	9.555×10^{-23}		1.3908×10^{-3}	
pdb2klz	Quaternion	1.109×10^{-22}	1.3796×10^{-13}	9.0357×10^{-4}	53.922 65
	Classic	6.371×10^{-25}		5.4489×10^{-4}	
	Quaternion	8.338×10^{-25}	6.4874×10^{-14}	3.6172×10^{-4}	50.637 78
	Classic				

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2ko1	Classic	1.529×10^{-12}		1.6441×10^{-2}	
	Quaternion	1.529×10^{-12}	8.2369×10^{-13}	9.3631×10^{-3}	75.593 36
pdb2koz	Classic	2.708×10^{-10}		4.8005×10^{-4}	
	Quaternion	2.708×10^{-10}	8.4351×10^{-13}	3.2088×10^{-4}	49.603 83
pdb2kp0	Classic	1.278×10^{-11}		1.1434×10^{-3}	
	Quaternion	1.278×10^{-11}	5.5654×10^{-12}	7.2810×10^{-4}	57.040 28
pdb2ksg	Classic	6.462×10^{-25}		4.9734×10^{-4}	
	Quaternion	8.842×10^{-25}	2.4678×10^{-14}	3.3668×10^{-4}	47.715 96
pdb2kt8	Classic	3.464×10^{-20}		3.3935×10^{-3}	
	Quaternion	3.826×10^{-20}	7.1394×10^{-13}	2.1056×10^{-3}	61.163 30
pdb2kuh	Classic	9.257×10^{-25}		7.9167×10^{-4}	
	Quaternion	1.163×10^{-24}	4.0485×10^{-14}	5.3487×10^{-4}	48.012 58
pdb2kwh	Classic	8.244×10^{-23}		6.7003×10^{-4}	
	Quaternion	1.133×10^{-22}	2.9549×10^{-13}	4.5013×10^{-4}	48.854 60
pdb2kxa	Classic	8.576×10^{-11}		2.3885×10^{-4}	
	Quaternion	8.576×10^{-11}	3.8041×10^{-13}	1.6333×10^{-4}	46.236 81
pdb2kyb	Classic	4.276×10^{-12}		4.3480×10^{-2}	
	Quaternion	4.276×10^{-12}	2.6711×10^{-12}	2.5996×10^{-2}	67.256 99
pdb2l3m	Classic	3.116×10^{-21}		7.6442×10^{-4}	
	Quaternion	2.523×10^{-21}	6.9725×10^{-13}	5.1670×10^{-4}	47.943 38
pdb2l3n	Classic	8.484×10^{-24}		4.8274×10^{-3}	
	Quaternion	8.131×10^{-24}	4.4517×10^{-14}	3.0002×10^{-3}	60.903 02
pdb2l45	Classic	2.812×10^{-25}		2.9029×10^{-4}	
	Quaternion	4.631×10^{-25}	8.5325×10^{-14}	1.8961×10^{-4}	53.096 55
pdb2l5r	Classic	6.534×10^{-25}		2.8608×10^{-4}	
	Quaternion	9.282×10^{-25}	1.4398×10^{-14}	1.9322×10^{-4}	48.062 55
pdb2l6q	Classic	1.665×10^{-10}		1.6372×10^{-3}	
	Quaternion	1.665×10^{-10}	1.5379×10^{-10}	1.0400×10^{-3}	57.414 07
pdb2l6r	Classic	3.639×10^{-11}		7.1779×10^{-4}	
	Quaternion	3.639×10^{-11}	2.4193×10^{-11}	4.8160×10^{-4}	49.043 66
pdb2l98	Classic	4.508×10^{-22}		2.3060×10^{-3}	
	Quaternion	4.664×10^{-22}	8.9102×10^{-13}	1.4614×10^{-3}	57.800 78
pdb2lci	Classic	3.159×10^{-22}		1.8062×10^{-3}	
	Quaternion	2.617×10^{-22}	8.2767×10^{-14}	1.1861×10^{-3}	52.285 58
pdb2lde	Classic	6.300×10^{-25}		2.6467×10^{-4}	
	Quaternion	8.122×10^{-25}	4.1691×10^{-14}	1.7742×10^{-4}	49.178 21
pdb2le2	Classic	1.089×10^{-22}		1.6426×10^{-2}	
	Quaternion	1.028×10^{-22}	7.7661×10^{-14}	9.3941×10^{-3}	74.855 87
pdb2le7	Classic	2.062×10^{-25}		2.3475×10^{-4}	
	Quaternion	3.381×10^{-25}	3.9789×10^{-14}	1.5464×10^{-4}	51.808 91
pdb2ler	Classic	5.612×10^{-26}		1.1683×10^{-4}	
	Quaternion	6.601×10^{-26}	2.1465×10^{-14}	8.4018×10^{-5}	39.054 73
pdb2lgi	Classic	3.579×10^{-21}		1.3904×10^{-3}	
	Quaternion	3.437×10^{-21}	1.8917×10^{-13}	8.7108×10^{-4}	59.612 32
pdb2lhc	Classic	1.256×10^{-10}		1.1772×10^{-3}	

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2lhd	Quaternion	1.256×10^{-10}	2.0329×10^{-12}	7.3728×10^{-4}	59.663 19
	Classic	7.034×10^{-21}		6.0906×10^{-3}	
pdb2lhe	Quaternion	6.544×10^{-21}	2.3902×10^{-12}	3.6206×10^{-3}	68.219 82
	Classic	9.704×10^{-18}		2.0754×10^{-3}	
pdb2lhg	Quaternion	9.708×10^{-18}	4.8488×10^{-13}	1.2941×10^{-3}	60.369 41
	Classic	1.568×10^{-23}		6.3293×10^{-4}	
pdb2lix	Quaternion	1.696×10^{-23}	5.9754×10^{-14}	4.2806×10^{-4}	47.861 97
	Classic	4.261×10^{-24}		2.9372×10^{-4}	
pdb2ljd	Quaternion	5.093×10^{-24}	7.8975×10^{-14}	1.9630×10^{-4}	49.627 86
	Classic	1.086×10^{-22}		4.5052×10^{-4}	
pdb2lmd	Quaternion	1.061×10^{-22}	2.2642×10^{-13}	3.0477×10^{-4}	47.823 76
	Classic	2.032×10^{-23}		1.0566×10^{-3}	
pdb2lme	Quaternion	2.297×10^{-23}	1.5079×10^{-13}	7.0055×10^{-4}	50.830 38
	Classic	2.032×10^{-23}		1.0566×10^{-3}	
pdb2lmf	Quaternion	3.934×10^{-11}	6.4067×10^{-14}	1.5850×10^{-4}	47.893 06
	Classic	3.934×10^{-11}		2.3441×10^{-4}	
pdb2ln3	Quaternion	6.400×10^{-23}	8.4114×10^{-14}	6.2219×10^{-4}	50.777 57
	Classic	6.609×10^{-23}		9.3813×10^{-4}	
pdb2lo2	Quaternion	3.105×10^{-25}	3.6944×10^{-14}	2.7201×10^{-4}	48.403 91
	Classic	4.558×10^{-25}		4.0367×10^{-4}	
pdb2lqp	Quaternion	1.441×10^{-10}	4.7992×10^{-13}	5.0852×10^{-4}	49.802 07
	Classic	1.441×10^{-10}		7.6178×10^{-4}	
pdb2lr0	Quaternion	8.958×10^{-20}	6.0485×10^{-13}	1.6262×10^{-3}	56.788 65
	Classic	8.036×10^{-20}		2.5497×10^{-3}	
pdb2lrh	Quaternion	2.070×10^{-11}	3.1935×10^{-13}	1.9653×10^{-3}	62.686 68
	Classic	2.070×10^{-11}		3.1972×10^{-3}	
pdb2ls9	Quaternion	1.279×10^{-23}	3.7128×10^{-13}	1.6335×10^{-4}	48.132 10
	Classic	2.226×10^{-23}		2.4198×10^{-4}	
pdb2lsa	Quaternion	2.870×10^{-24}	1.5385×10^{-13}	1.6492×10^{-4}	51.386 25
	Classic	4.764×10^{-24}		2.4967×10^{-4}	
pdb2lss	Quaternion	2.190×10^{-23}	1.6926×10^{-13}	5.1622×10^{-4}	44.764 02
	Classic	3.006×10^{-23}		7.4730×10^{-4}	
pdb2lt3	Quaternion	6.850×10^{-23}	5.2634×10^{-14}	8.4785×10^{-4}	49.654 92
	Classic	6.975×10^{-23}		1.2689×10^{-3}	
pdb2lu6	Quaternion	4.905×10^{-26}	4.1890×10^{-15}	1.0060×10^{-4}	50.397 35
	Classic	5.585×10^{-26}		1.5131×10^{-4}	
pdb2lwa	Quaternion	1.578×10^{-10}	8.1907×10^{-13}	5.0604×10^{-4}	48.690 53
	Classic	1.578×10^{-10}		7.5244×10^{-4}	
pdb2lx0	Quaternion	6.031×10^{-11}	2.2251×10^{-13}	2.4170×10^{-4}	48.722 05
	Classic	6.031×10^{-11}		3.5946×10^{-4}	
pdb2lxb	Quaternion	2.298×10^{-22}	1.6837×10^{-13}	1.7063×10^{-3}	56.421 54
	Classic	1.990×10^{-22}		2.6690×10^{-3}	
pdb2lxy	Quaternion	1.602×10^{-10}	1.5972×10^{-12}	3.6068×10^{-3}	53.874 14
	Classic	1.602×10^{-10}		5.5499×10^{-3}	
pdb2lxz	Quaternion	1.239×10^{-20}	1.9895×10^{-12}	2.3142×10^{-3}	62.103 77
	Classic	1.591×10^{-20}		3.7514×10^{-3}	

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2lzf	Classic	1.185×10^{-23}		4.9261×10^{-2}	
	Quaternion	1.232×10^{-23}	1.2991×10^{-13}	2.8483×10^{-2}	72.946 62
pdb2m1a	Classic	1.280×10^{-26}		3.2426×10^{-4}	
	Quaternion	1.526×10^{-26}	6.5801×10^{-15}	2.1676×10^{-4}	49.593 33
pdb2m1j	Classic	2.536×10^{-25}		3.3196×10^{-4}	
	Quaternion	2.900×10^{-25}	6.6915×10^{-14}	2.2383×10^{-4}	48.308 98
pdb2m2y	Classic	1.129×10^{-22}		1.8870×10^{-4}	
	Quaternion	1.161×10^{-22}	1.4386×10^{-13}	1.2853×10^{-4}	46.809 74
pdb2m3f	Classic	9.684×10^{-25}		2.1571×10^{-4}	
	Quaternion	1.447×10^{-24}	5.8107×10^{-14}	1.4718×10^{-4}	46.565 38
pdb2m8m	Classic	6.232×10^{-25}		2.7942×10^{-4}	
	Quaternion	8.684×10^{-25}	1.1738×10^{-13}	1.9232×10^{-4}	45.289 05
pdb2m8o	Classic	1.061×10^{-25}		2.7439×10^{-4}	
	Quaternion	1.792×10^{-25}	2.4755×10^{-14}	1.8752×10^{-4}	46.324 43
pdb2m97	Classic	1.278×10^{-23}		7.2189×10^{-4}	
	Quaternion	1.357×10^{-23}	2.0639×10^{-13}	4.9017×10^{-4}	47.274 50
pdb2m9g	Classic	7.081×10^{-22}		3.9308×10^{-3}	
	Quaternion	6.955×10^{-22}	5.8913×10^{-13}	2.5479×10^{-3}	54.274 03
pdb2m9r	Classic	2.225×10^{-24}		4.4323×10^{-4}	
	Quaternion	2.776×10^{-24}	1.6694×10^{-13}	2.9003×10^{-4}	52.824 14
pdb2mdv	Classic	3.465×10^{-20}		6.2219×10^{-3}	
	Quaternion	3.462×10^{-20}	3.0402×10^{-13}	3.8527×10^{-3}	61.494 78
pdb2me1	Classic	3.641×10^{-23}		2.9541×10^{-4}	
	Quaternion	4.117×10^{-23}	1.6579×10^{-13}	2.0005×10^{-4}	47.672 15
pdb2me2	Classic	2.046×10^{-10}		2.8463×10^{-4}	
	Quaternion	2.046×10^{-10}	1.1547×10^{-12}	1.9767×10^{-4}	43.991 87
pdb2me3	Classic	1.545×10^{-10}		2.5364×10^{-4}	
	Quaternion	1.545×10^{-10}	1.2879×10^{-13}	1.7432×10^{-4}	45.500 26
pdb2me4	Classic	1.290×10^{-10}		3.0309×10^{-4}	
	Quaternion	1.290×10^{-10}	1.0094×10^{-12}	2.0334×10^{-4}	49.053 19
pdb2mg1	Classic	1.404×10^{-24}		2.7344×10^{-4}	
	Quaternion	1.939×10^{-24}	1.5805×10^{-13}	1.8650×10^{-4}	46.619 48
pdb2mg2	Classic	1.731×10^{-25}		2.8118×10^{-4}	
	Quaternion	3.131×10^{-25}	2.5921×10^{-14}	1.8955×10^{-4}	48.340 57
pdb2mg3	Classic	1.819×10^{-24}		2.9302×10^{-4}	
	Quaternion	2.948×10^{-24}	2.4798×10^{-13}	2.0096×10^{-4}	45.810 04
pdb2mh8	Classic	4.294×10^{-23}		6.2286×10^{-4}	
	Quaternion	4.630×10^{-23}	2.9903×10^{-13}	4.2107×10^{-4}	47.924 32
pdb2mhw	Classic	8.747×10^{-24}		2.7655×10^{-4}	
	Quaternion	9.581×10^{-24}	4.9718×10^{-13}	1.8793×10^{-4}	47.155 09
pdb2mi1	Classic	1.105×10^{-10}		1.6166×10^{-3}	
	Quaternion	1.105×10^{-10}	1.8681×10^{-12}	1.0235×10^{-3}	57.939 48
pdb2mi7	Classic	6.468×10^{-11}		6.6272×10^{-4}	
	Quaternion	6.468×10^{-11}	1.5019×10^{-12}	4.4866×10^{-4}	47.711 63
pdb2mij	Classic	1.951×10^{-23}		3.7235×10^{-4}	

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2mix	Quaternion	2.395×10^{-23}	2.8681×10^{-13}	2.5280×10^{-4}	47.288 90
	Classic	4.178×10^{-24}		2.1017×10^{-4}	
pdb2mj1	Quaternion	3.575×10^{-24}	3.7348×10^{-14}	1.4325×10^{-4}	46.710 53
	Classic	1.396×10^{-23}		2.0075×10^{-4}	
pdb2mj2	Quaternion	2.596×10^{-23}	2.3819×10^{-13}	1.3534×10^{-4}	48.322 79
	Classic	1.094×10^{-23}		3.7654×10^{-4}	
pdb2mjg	Quaternion	1.108×10^{-23}	8.8713×10^{-14}	2.5107×10^{-4}	49.975 11
	Classic	7.804×10^{-24}		2.4895×10^{-3}	
pdb2mji	Quaternion	9.552×10^{-24}	7.0670×10^{-14}	1.6031×10^{-3}	55.297 86
	Classic	1.678×10^{-11}		1.5423×10^{-3}	
pdb2mle	Quaternion	1.678×10^{-11}	2.6848×10^{-13}	1.0457×10^{-3}	47.493 04
	Classic	2.557×10^{-22}		7.6666×10^{-4}	
pdb2mlf	Quaternion	2.484×10^{-22}	3.1271×10^{-13}	5.1731×10^{-4}	48.200 22
	Classic	4.519×10^{-23}		7.8846×10^{-4}	
pdb2mo5	Quaternion	5.232×10^{-23}	9.2903×10^{-14}	5.2956×10^{-4}	48.888 85
	Classic	3.667×10^{-14}		2.4296×10^{-3}	
pdb2mpu	Quaternion	3.667×10^{-14}	1.0204×10^{-12}	1.5847×10^{-3}	53.311 07
	Classic	4.222×10^{-23}		9.8894×10^{-4}	
pdb2mra	Quaternion	4.294×10^{-23}	1.0352×10^{-13}	6.6709×10^{-4}	48.246 67
	Classic	3.623×10^{-22}		2.1497×10^{-3}	
pdb2msu	Quaternion	3.611×10^{-22}	1.2867×10^{-13}	1.3920×10^{-3}	54.434 29
	Classic	9.787×10^{-24}		2.2890×10^{-4}	
pdb2mtu	Quaternion	9.927×10^{-24}	3.7025×10^{-14}	1.5321×10^{-4}	49.404 40
	Classic	3.199×10^{-24}		2.4169×10^{-4}	
pdb2mtv	Quaternion	3.231×10^{-24}	9.1457×10^{-14}	1.6246×10^{-4}	48.772 31
	Classic	8.261×10^{-11}		2.5837×10^{-4}	
pdb2muh	Quaternion	8.261×10^{-11}	1.2902×10^{-13}	1.6954×10^{-4}	52.393 82
	Classic	5.040×10^{-23}		2.6618×10^{-4}	
pdb2mvj	Quaternion	5.367×10^{-23}	5.5998×10^{-14}	1.8027×10^{-4}	47.657 28
	Classic	6.070×10^{-11}		7.3972×10^{-4}	
pdb2mvt	Quaternion	6.070×10^{-11}	7.9957×10^{-12}	4.8984×10^{-4}	51.011 55
	Classic	4.389×10^{-11}		1.6886×10^{-3}	
pdb2n00	Quaternion	4.389×10^{-11}	7.6285×10^{-13}	1.1123×10^{-3}	51.804 54
	Classic	8.069×10^{-10}		1.0729×10^{-4}	
pdb2n0b	Quaternion	8.069×10^{-10}	4.9548×10^{-13}	7.2517×10^{-5}	47.955 29
	Classic	7.716×10^{-10}		9.1751×10^{-5}	
pdb2n0c	Quaternion	7.716×10^{-10}	2.8732×10^{-13}	6.2140×10^{-5}	47.652 08
	Classic	1.036×10^{-9}		9.7581×10^{-5}	
pdb2n0d	Quaternion	1.036×10^{-9}	1.6367×10^{-11}	6.6570×10^{-5}	46.584 05
	Classic	1.311×10^{-20}		1.0535×10^{-4}	
pdb2n0e	Quaternion	2.206×10^{-20}	8.3573×10^{-12}	7.2663×10^{-5}	44.979 87
	Classic	2.458×10^{-12}		1.0670×10^{-4}	
pdb2n0f	Quaternion	2.458×10^{-12}	5.8011×10^{-13}	7.2337×10^{-5}	47.504 73
	Classic	4.155×10^{-11}		1.0939×10^{-4}	
pdb2n0g	Quaternion	4.155×10^{-11}	1.1957×10^{-13}	7.3762×10^{-5}	48.298 58
	Classic				

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2n0h	Classic	4.270×10^{-11}		1.0756×10^{-4}	
	Quaternion	4.270×10^{-11}	1.8250×10^{-13}	7.1637×10^{-5}	50.141 34
pdb2n35	Classic	8.043×10^{-25}		5.6190×10^{-4}	
	Quaternion	1.232×10^{-24}	1.0752×10^{-13}	3.8191×10^{-4}	47.127 09
pdb2n3a	Classic	2.832×10^{-23}		2.1007×10^{-2}	
	Quaternion	3.061×10^{-23}	1.0149×10^{-13}	1.2421×10^{-2}	69.124 96
pdb2n41	Classic	1.224×10^{-22}		1.5574×10^{-3}	
	Quaternion	1.164×10^{-22}	8.2539×10^{-14}	1.0110×10^{-3}	54.052 99
pdb2n4e	Classic	5.807×10^{-23}		1.1506×10^{-3}	
	Quaternion	6.977×10^{-23}	1.8433×10^{-13}	7.7566×10^{-4}	48.341 23
pdb2n5q	Classic	1.185×10^{-10}		6.5162×10^{-4}	
	Quaternion	1.185×10^{-10}	1.3595×10^{-12}	4.1991×10^{-4}	55.181 77
pdb2n67	Classic	9.891×10^{-22}		9.8900×10^{-4}	
	Quaternion	9.843×10^{-22}	6.3487×10^{-14}	6.6965×10^{-4}	47.688 28
pdb2n6n	Classic	5.565×10^{-12}		7.5344×10^{-4}	
	Quaternion	5.565×10^{-12}	5.0670×10^{-13}	4.8421×10^{-4}	55.602 85
pdb2n7i	Classic	1.104×10^{-11}		4.0391×10^{-4}	
	Quaternion	1.104×10^{-11}	7.8924×10^{-13}	2.7511×10^{-4}	46.814 48
pdb2n7j	Classic	7.762×10^{-22}		9.4451×10^{-4}	
	Quaternion	8.069×10^{-22}	1.5144×10^{-13}	6.1968×10^{-4}	52.420 22
pdb2n9b	Classic	1.370×10^{-11}		1.1058×10^{-1}	
	Quaternion	1.370×10^{-11}	1.1216×10^{-12}	6.3286×10^{-2}	74.730 54
pdb2na9	Classic	7.057×10^{-24}		4.4144×10^{-4}	
	Quaternion	7.644×10^{-24}	5.4544×10^{-14}	2.9958×10^{-4}	47.350 98
pdb2ndc	Classic	3.774×10^{-25}		1.9368×10^{-4}	
	Quaternion	6.918×10^{-25}	5.1916×10^{-14}	1.3049×10^{-4}	48.432 21
pdb2nde	Classic	5.377×10^{-24}		1.7424×10^{-4}	
	Quaternion	7.565×10^{-24}	2.5156×10^{-13}	1.1837×10^{-4}	47.200 85
pdb2ndk	Classic	2.765×10^{-10}		5.0137×10^{-4}	
	Quaternion	2.765×10^{-10}	2.0544×10^{-12}	3.3991×10^{-4}	47.503 43
pdb2nvj	Classic	4.747×10^{-25}		2.3316×10^{-4}	
	Quaternion	4.939×10^{-25}	1.4035×10^{-14}	1.5984×10^{-4}	45.868 97
pdb2p6j	Classic	4.722×10^{-24}		5.4718×10^{-4}	
	Quaternion	7.445×10^{-24}	1.1404×10^{-13}	3.6827×10^{-4}	48.581 46
pdb2p81	Classic	1.879×10^{-10}		4.4254×10^{-4}	
	Quaternion	1.879×10^{-10}	4.5339×10^{-13}	3.0120×10^{-4}	46.928 91
pdb2pqe	Classic	3.153×10^{-10}		1.0609×10^{-2}	
	Quaternion	3.153×10^{-10}	9.8682×10^{-12}	5.9324×10^{-3}	78.825 61
pdb2rlg	Classic	8.929×10^{-25}		1.8986×10^{-4}	
	Quaternion	1.295×10^{-24}	6.8873×10^{-14}	1.2780×10^{-4}	48.565 67
pdb2rlh	Classic	2.916×10^{-24}		2.0583×10^{-4}	
	Quaternion	3.096×10^{-24}	3.9131×10^{-14}	1.3824×10^{-4}	48.888 91
pdb2rmy	Classic	4.282×10^{-11}		3.6432×10^{-4}	
	Quaternion	4.282×10^{-11}	3.7231×10^{-13}	2.4479×10^{-4}	48.831 23
pdb2rnd	Classic	3.984×10^{-23}		3.4991×10^{-4}	

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2roo	Quaternion	6.946×10^{-23}	4.9979×10^{-13}	2.3648×10^{-4}	47.965 98
	Classic	3.028×10^{-20}		3.8559×10^{-3}	
pdb2rql	Quaternion	3.997×10^{-20}	3.5927×10^{-12}	2.4581×10^{-3}	56.867 08
	Classic	6.597×10^{-12}		8.7922×10^{-3}	
pdb2rut	Quaternion	6.597×10^{-12}	8.7082×10^{-13}	4.8222×10^{-3}	82.327 39
	Classic	2.630×10^{-24}		3.6915×10^{-4}	
pdb2ruv	Quaternion	2.842×10^{-24}	3.5338×10^{-13}	2.4859×10^{-4}	48.496 12
	Classic	8.503×10^{-24}		3.8585×10^{-4}	
pdb2rux	Quaternion	1.524×10^{-23}	1.2473×10^{-13}	2.6129×10^{-4}	47.668 88
	Classic	9.101×10^{-25}		3.9361×10^{-4}	
pdb2ruy	Quaternion	1.065×10^{-24}	6.2140×10^{-14}	2.6406×10^{-4}	49.062 70
	Classic	2.386×10^{-25}		3.8879×10^{-4}	
pdb2rv3	Quaternion	3.545×10^{-25}	6.4254×10^{-14}	2.6114×10^{-4}	48.885 45
	Classic	2.522×10^{-24}		4.0029×10^{-4}	
pdb2rv5	Quaternion	2.720×10^{-24}	6.3794×10^{-14}	2.6667×10^{-4}	50.105 19
	Classic	7.467×10^{-26}		3.6862×10^{-4}	
pdb2y4q	Quaternion	9.134×10^{-26}	1.6010×10^{-14}	2.4846×10^{-4}	48.365 30
	Classic	2.386×10^{-11}		2.6610×10^{-3}	
pdb2y4q	Quaternion	2.386×10^{-11}	2.6305×10^{-13}	1.6431×10^{-3}	61.944 38
	Classic				