Consolidated Performance Tests

Felipe Fidalgo[*1], Emerson Castelani[†2], and Guilherme Philippi[‡1]

[1]Department of Mathematics, Universidade Federal de Santa Catarina, 2514 João Pessoa street, Velha, Blumenau, Santa Catarina, Brazil, 89036-004
[2]Department of Mathematics, Universidade Estadual de Maringá, 5790 Colombo Avenue, , Jardim Universitário, Maringá, Paraná, Brazil, 87020-900

September 7, 2022

Contents

---

[*]felipe.fidalgo@ufsc.br
[†]evcastelani@uem.br
[‡]g.philippi@grad.ufsc.br

1 Benchmark's tables

1.1 Using BP-One versions

Table 1: Results

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

Problem Size	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1ma2 104	Classic	8.695×10^{-12}		3.2666×10^{-4}	
	Quaternion	8.758×10^{-12}	4.7062×10^{-13}	1.8671×10^{-4}	74.95575
pdb1ma4 104	Classic	7.247×10^{-14}		4.6898×10^{-4}	
	Quaternion	7.981×10^{-14}	1.8851×10^{-13}	2.5826×10^{-4}	81.59434
pdb1ma5 104	Classic	8.169×10^{-13}		1.7470×10^{-4}	
	Quaternion	9.044×10^{-13}	5.0234×10^{-13}	1.0519×10^{-4}	66.07442
pdb1ma6 104	Classic	6.283×10^{-13}		1.6156×10^{-4}	
	Quaternion	8.522×10^{-13}	3.3052×10^{-12}	9.8305×10^{-5}	64.35024
pdb1mpe 1352	Classic	2.617×10^{-11}		1.1304×10^{-2}	
	Quaternion	2.624×10^{-11}	7.1261×10^{-13}	5.2556×10^{-3}	115.08839
pdb1nd9 296	Classic	3.026×10^{-13}		5.1913×10^{-4}	
	Quaternion	3.845×10^{-13}	4.7137×10^{-13}	3.2185×10^{-4}	61.29357
pdb1ne5 254	Classic	1.214×10^{-12}		4.2127×10^{-4}	
	Quaternion	1.384×10^{-12}	7.5582×10^{-13}	2.5516×10^{-4}	65.10468
pdb1nmj 170	Classic	1.237×10^{-14}		3.0985×10^{-4}	
	Quaternion	1.424×10^{-14}	1.3921×10^{-14}	1.8648×10^{-4}	66.15375
pdb1o53 92	Classic	3.999×10^{-13}		1.7000×10^{-4}	
	Quaternion	4.545×10^{-13}	6.5350×10^{-13}	1.0024×10^{-4}	69.58322
pdb1oqp 580	Classic	7.045×10^{-14}		3.4433×10^{-3}	
	Quaternion	8.315×10^{-14}	9.0066×10^{-14}	1.9316×10^{-3}	78.26456
pdb1plw 32	Classic	2.830×10^{-14}		5.2547×10^{-5}	
	Quaternion	3.122×10^{-14}	4.9118×10^{-14}	3.2633×10^{-5}	61.02412
pdb1plx 32	Classic	1.574×10^{-13}		4.9863×10^{-5}	
	Quaternion	2.060×10^{-13}	1.7973×10^{-13}	3.0994×10^{-5}	60.88212
pdb1pv0 278	Classic	2.409×10^{-13}		5.0536×10^{-4}	
	Quaternion	2.723×10^{-13}	1.0662×10^{-13}	3.0395×10^{-4}	66.26441
pdb1pzr 724	Classic	5.644×10^{-12}		7.4886×10^{-3}	
	Quaternion	5.871×10^{-12}	9.9935×10^{-12}	4.0800×10^{-3}	83.54421
pdb1qlk 1108	Classic	9.019×10^{-10}		1.4160×10^{-2}	
	Quaternion	9.019×10^{-10}	1.3287×10^{-12}	6.7812×10^{-3}	108.81176
pdb1r57 614	Classic	1.847×10^{-13}		1.1509×10^{-3}	
	Quaternion	2.054×10^{-13}	1.4866×10^{-13}	7.1845×10^{-4}	60.19213
pdb1ry3 386	Classic	2.023×10^{-9}		7.3868×10^{-4}	
	Quaternion	2.023×10^{-9}	6.0848×10^{-13}	4.3764×10^{-4}	68.78737
pdb1s4h 80	Classic	4.300×10^{-9}		1.2121×10^{-4}	
	Quaternion	4.300×10^{-9}	1.1103×10^{-12}	7.3903×10^{-5}	64.01746
pdb1s4j 80	Classic	1.520×10^{-13}		1.4646×10^{-4}	
	Quaternion	2.230×10^{-13}	1.6407×10^{-13}	8.7409×10^{-5}	67.55712
pdb1s6j 524	Classic	6.073×10^{-13}		9.8595×10^{-4}	
	Quaternion	7.660×10^{-13}	5.9201×10^{-13}	6.0244×10^{-4}	63.65882
pdb1sa8 638	Classic	9.340×10^{-13}		1.1605×10^{-3}	
	Quaternion	1.034×10^{-12}	1.0370×10^{-12}	7.2310×10^{-4}	60.48689
pdb1t2y 152	Classic	1.887×10^{-13}		2.6701×10^{-4}	
	Quaternion	2.396×10^{-13}	2.3861×10^{-13}	1.6115×10^{-4}	65.68696
pdb1t5q 180	Classic	3.877×10^{-14}		2.8653×10^{-4}	
	Quaternion	5.093×10^{-14}	5.3231×10^{-14}	1.7355×10^{-4}	65.10242
pdb1tot 314	Classic	6.148×10^{-14}		6.0050×10^{-4}	
	Quaternion	6.853×10^{-14}	2.8392×10^{-14}	3.6430×10^{-4}	64.83408
pdb1v6r 128	Classic	6.835×10^{-13}		2.2342×10^{-4}	
	Quaternion	6.970×10^{-13}	3.1917×10^{-13}	1.3291×10^{-4}	68.09519
pdb1v92 278	Classic	1.463×10^{-13}		4.9476×10^{-4}	
	Quaternion	1.630×10^{-13}	5.6062×10^{-14}	2.9902×10^{-4}	65.46184
pdb1vd7 140	Classic	3.741×10^{-9}		2.3344×10^{-4}	
	Quaternion	3.741×10^{-9}	5.8433×10^{-13}	1.3950×10^{-4}	67.34301

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1vd9 140	Classic Quaternion	1.290×10^{-12} 1.554×10^{-12}	9.0327×10^{-13}	2.7679×10^{-4} 1.6215×10^{-4}	70.700 02
pdb1vdb 140	Classic Quaternion	9.108×10^{-13} 1.083×10^{-12}	3.8641×10^{-13}	2.2516×10^{-4} 1.3532×10^{-4}	66.395 08
pdb1vpc 272	Classic Quaternion	8.500×10^{-15} 1.002×10^{-14}	8.5436×10^{-15}	4.8303×10^{-4} 2.9228×10^{-4}	65.262 64
pdb1wnk 140	Classic Quaternion	4.112×10^{-12} 4.632×10^{-12}	2.2335×10^{-11}	2.3185×10^{-4} 1.3971×10^{-4}	65.949 72
pdb1wo4 152	Classic Quaternion	9.957×10^{-13} 9.639×10^{-13}	2.3523×10^{-12}	2.6168×10^{-4} 1.5466×10^{-4}	69.195 81
pdb1wo5 152	Classic Quaternion	5.257×10^{-9} 5.258×10^{-9}	4.9063×10^{-12}	2.6978×10^{-4} 1.6139×10^{-4}	67.161 64
pdb1x60 476	Classic Quaternion	1.076×10^{-12} 1.179×10^{-12}	3.9684×10^{-13}	9.0043×10^{-4} 5.6004×10^{-4}	60.779 66
pdb1x9v 544	Classic Quaternion	8.975×10^{-13} 9.632×10^{-13}	1.3900×10^{-13}	3.4714×10^{-2} 1.7086×10^{-2}	103.177 02
pdb1y5c 68	Classic Quaternion	8.980×10^{-9} 8.980×10^{-9}	2.9085×10^{-13}	1.0994×10^{-4} 6.6392×10^{-5}	65.587 46
pdb1yx7 500	Classic Quaternion	8.116×10^{-10} 8.125×10^{-10}	7.6614×10^{-12}	1.3420×10^{-3} 8.1759×10^{-4}	64.134 90
pdb1yx8 500	Classic Quaternion	7.276×10^{-12} 8.217×10^{-12}	1.0819×10^{-11}	1.0980×10^{-3} 6.6669×10^{-4}	64.696 41
pdb1yxr 464	Classic Quaternion	5.838×10^{-10} 5.839×10^{-10}	2.5240×10^{-13}	8.0441×10^{-4} 4.8760×10^{-4}	64.973 95
pdb2a2y 1072	Classic Quaternion	1.150×10^{-12} 1.151×10^{-12}	3.7416×10^{-13}	4.1882×10^{-2} 1.9425×10^{-2}	115.608 11
pdb2a4j 580	Classic Quaternion	2.085×10^{-14} 2.727×10^{-14}	1.4394×10^{-14}	1.2066×10^{-3} 7.2504×10^{-4}	66.419 02
pdb2adl 868	Classic Quaternion	1.752×10^{-11} 1.787×10^{-11}	3.0093×10^{-12}	8.2764×10^{-2} 3.9669×10^{-2}	108.636 60
pdb2adn 868	Classic Quaternion	6.693×10^{-12} 6.465×10^{-12}	2.4957×10^{-12}	2.2075×10^{-3} 1.3132×10^{-3}	68.108 17
pdb2ajj 170	Classic Quaternion	5.641×10^{-14} 6.584×10^{-14}	1.2744×10^{-13}	2.9320×10^{-4} 1.7442×10^{-4}	68.103 05
pdb2ajm 170	Classic Quaternion	1.183×10^{-13} 1.555×10^{-13}	8.9439×10^{-13}	3.1577×10^{-4} 1.8912×10^{-4}	66.970 44
pdb2ajn 170	Classic Quaternion	1.076×10^{-13} 1.217×10^{-13}	1.5981×10^{-13}	3.1551×10^{-4} 1.8677×10^{-4}	68.936 10
pdb2ajo 170	Classic Quaternion	1.183×10^{-13} 1.555×10^{-13}	8.9439×10^{-13}	3.1799×10^{-4} 1.8869×10^{-4}	68.531 94
pdb2akk 446	Classic Quaternion	1.288×10^{-13} 1.270×10^{-13}	1.1725×10^{-13}	1.6540×10^{-3} 9.6115×10^{-4}	72.084 62
pdb2bzb 748	Classic Quaternion	9.365×10^{-14} 1.224×10^{-13}	1.5097×10^{-13}	1.8091×10^{-2} 9.0010×10^{-3}	100.986 10
pdb2c0s 386	Classic Quaternion	3.028×10^{-13} 3.379×10^{-13}	7.2067×10^{-13}	7.4994×10^{-4} 4.5348×10^{-4}	65.375 60
pdb2dci 120	Classic Quaternion	2.366×10^{-14} 2.950×10^{-14}	1.3479×10^{-13}	1.9331×10^{-4} 1.1863×10^{-4}	62.946 92
pdb2eem 206	Classic Quaternion	5.190×10^{-13} 5.461×10^{-13}	4.0208×10^{-13}	4.1190×10^{-4} 2.4512×10^{-4}	68.042 06
pdb2fva 494	Classic Quaternion	1.047×10^{-12} 1.194×10^{-12}	1.5803×10^{-12}	1.1865×10^{-3} 7.0200×10^{-4}	69.024 18
pdb2fvf 494	Classic Quaternion	3.106×10^{-13} 3.445×10^{-13}	2.8750×10^{-13}	8.6354×10^{-4} 5.3257×10^{-4}	62.146 01

Problem Size	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
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
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

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2kdh	Classic	1.947×10^{-11}		1.0340×10^{-3}	
434	Quaternion	2.228×10^{-11}	7.6317×10^{-11}	6.0895×10^{-4}	69.803 38
pdb2kdl	Classic	2.301×10^{-13}		6.4298×10^{-4}	
338	Quaternion	2.927×10^{-13}	3.1526×10^{-13}	3.8115×10^{-4}	68.693 38
pdb2kdm	Classic	3.191×10^{-12}		6.1470×10^{-4}	
338	Quaternion	3.284×10^{-12}	9.9439×10^{-13}	3.6995×10^{-4}	66.155 79
pdb2kdp	Classic	2.621×10^{-13}		7.9344×10^{-4}	
428	Quaternion	2.865×10^{-13}	1.0772×10^{-13}	4.7257×10^{-4}	67.899 87
pdb2kdr	Classic	6.617×10^{-14}		3.0345×10^{-4}	
170	Quaternion	8.490×10^{-14}	6.1679×10^{-14}	1.8116×10^{-4}	67.504 05
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

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2l6r 374	Classic	7.323×10^{-10}		6.9369×10^{-4}	
	Quaternion	7.325×10^{-10}	2.4265×10^{-11}	4.2321×10^{-4}	63.910 45
pdb2l98 434	Classic	3.273×10^{-13}		8.3189×10^{-4}	
	Quaternion	3.638×10^{-13}	8.9102×10^{-13}	4.9565×10^{-4}	67.838 43
pdb2lci 806	Classic	2.579×10^{-13}		1.4953×10^{-3}	
	Quaternion	2.404×10^{-13}	8.2767×10^{-14}	9.1594×10^{-4}	63.258 27
pdb2lde 152	Classic	3.153×10^{-14}		2.4935×10^{-4}	
	Quaternion	3.762×10^{-14}	4.1691×10^{-14}	1.5007×10^{-4}	66.157 56
pdb2le2 676	Classic	2.064×10^{-13}		1.5828×10^{-2}	
	Quaternion	2.042×10^{-13}	7.7661×10^{-14}	7.6362×10^{-3}	107.271 58
pdb2le7 122	Classic	2.112×10^{-14}		2.0560×10^{-4}	
	Quaternion	2.749×10^{-14}	3.9789×10^{-14}	1.2262×10^{-4}	67.664 30
pdb2ler 68	Classic	1.315×10^{-14}		1.1181×10^{-4}	
	Quaternion	1.532×10^{-14}	2.1465×10^{-14}	6.7622×10^{-5}	65.346 08
pdb2lgi 338	Classic	1.068×10^{-12}		6.1011×10^{-4}	
	Quaternion	1.052×10^{-12}	1.8917×10^{-13}	3.7216×10^{-4}	63.938 76
pdb2lhc 338	Classic	5.829×10^{-10}		6.6728×10^{-4}	
	Quaternion	5.830×10^{-10}	2.1362×10^{-12}	3.9795×10^{-4}	67.680 37
pdb2lhd 338	Classic	1.930×10^{-12}		8.2372×10^{-4}	
	Quaternion	2.033×10^{-12}	2.3902×10^{-12}	4.8768×10^{-4}	68.907 46
pdb2lhe 338	Classic	4.963×10^{-11}		7.9542×10^{-4}	
	Quaternion	4.967×10^{-11}	4.8488×10^{-13}	4.7306×10^{-4}	68.142 76
pdb2lhg 338	Classic	6.459×10^{-14}		6.2955×10^{-4}	
	Quaternion	7.322×10^{-14}	5.9754×10^{-14}	3.8394×10^{-4}	63.972 53
pdb2lix 162	Classic	4.842×10^{-14}		2.8652×10^{-4}	
	Quaternion	5.614×10^{-14}	7.8975×10^{-14}	1.7148×10^{-4}	67.087 90
pdb2lld 242	Classic	1.937×10^{-13}		4.4840×10^{-4}	
	Quaternion	2.214×10^{-13}	2.2642×10^{-13}	2.7615×10^{-4}	62.376 81
pdb2lm9 578	Classic	6.254×10^{-14}		1.0445×10^{-3}	
	Quaternion	7.713×10^{-14}	1.5079×10^{-13}	6.3262×10^{-4}	65.100 99
pdb2lmf 140	Classic	1.282×10^{-13}		2.2760×10^{-4}	
	Quaternion	1.462×10^{-13}	7.9808×10^{-14}	1.3654×10^{-4}	66.692 67
pdb2ln3 500	Classic	1.292×10^{-13}		9.2559×10^{-4}	
	Quaternion	1.359×10^{-13}	8.4114×10^{-14}	5.6168×10^{-4}	64.787 76
pdb2lo2 230	Classic	2.068×10^{-14}		3.9914×10^{-4}	
	Quaternion	2.571×10^{-14}	3.6944×10^{-14}	2.4200×10^{-4}	64.931 22
pdb2lqp 428	Classic	2.950×10^{-13}		7.7204×10^{-4}	
	Quaternion	3.085×10^{-13}	4.7561×10^{-13}	4.6975×10^{-4}	64.350 52
pdb2lr0 806	Classic	3.549×10^{-12}		1.5240×10^{-3}	
	Quaternion	3.440×10^{-12}	6.0485×10^{-13}	9.3151×10^{-4}	63.610 15
pdb2lrh 806	Classic	5.631×10^{-13}		1.4892×10^{-3}	
	Quaternion	6.564×10^{-13}	3.2048×10^{-13}	9.1309×10^{-4}	63.097 09
pdb2ls9 152	Classic	1.122×10^{-13}		2.3982×10^{-4}	
	Quaternion	1.471×10^{-13}	3.7128×10^{-13}	1.4535×10^{-4}	64.988 70
pdb2lsa 140	Classic	5.235×10^{-14}		2.3711×10^{-4}	
	Quaternion	7.034×10^{-14}	1.5385×10^{-13}	1.4364×10^{-4}	65.065 25
pdb2lss 422	Classic	1.230×10^{-13}		7.6212×10^{-4}	
	Quaternion	1.455×10^{-13}	1.6926×10^{-13}	4.7620×10^{-4}	60.039 98
pdb2lt3 680	Classic	7.245×10^{-14}		1.2642×10^{-3}	
	Quaternion	7.760×10^{-14}	5.2634×10^{-14}	7.8956×10^{-4}	60.114 23
pdb2lu6 86	Classic	5.356×10^{-15}		1.4840×10^{-4}	
	Quaternion	6.922×10^{-15}	4.1890×10^{-15}	8.7935×10^{-5}	68.759 88
pdb2lwa 432	Classic	3.615×10^{-13}		7.6963×10^{-4}	
	Quaternion	4.427×10^{-13}	9.3395×10^{-13}	4.6916×10^{-4}	64.044 62

7

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
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}	67.366 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
pdb2me2	Classic	3.667×10^{-13}		2.9177×10^{-4}	
164	Quaternion	5.098×10^{-13}	1.1486×10^{-12}	1.7359×10^{-4}	68.082 58
pdb2me3	Classic	2.593×10^{-9}		2.6801×10^{-4}	
164	Quaternion	2.593×10^{-9}	9.2137×10^{-14}	1.6247×10^{-4}	64.963 76
pdb2me4	Classic	2.854×10^{-9}		3.1285×10^{-4}	
164	Quaternion	2.854×10^{-9}	9.9945×10^{-13}	1.8609×10^{-4}	68.122 27
pdb2mg1	Classic	4.398×10^{-14}		2.7477×10^{-4}	
164	Quaternion	5.374×10^{-14}	1.5805×10^{-13}	1.6842×10^{-4}	63.153 22
pdb2mg2	Classic	1.829×10^{-14}		2.8189×10^{-4}	
170	Quaternion	2.480×10^{-14}	2.5921×10^{-14}	1.7237×10^{-4}	63.538 77
pdb2mg3	Classic	3.541×10^{-14}		2.9087×10^{-4}	
170	Quaternion	4.461×10^{-14}	2.4798×10^{-13}	1.7847×10^{-4}	62.978 89
pdb2mh8	Classic	1.547×10^{-13}		6.4620×10^{-4}	
338	Quaternion	1.883×10^{-13}	2.9903×10^{-13}	3.8846×10^{-4}	66.350 20
pdb2mhw	Classic	6.229×10^{-14}		2.8046×10^{-4}	
164	Quaternion	7.129×10^{-14}	4.9718×10^{-13}	1.7330×10^{-4}	61.834 57
pdb2mi1	Classic	1.827×10^{-12}		1.5245×10^{-4}	
84	Quaternion	2.052×10^{-12}	1.5687×10^{-12}	9.2051×10^{-5}	65.617 43
pdb2mi7	Classic	6.022×10^{-13}		6.6253×10^{-4}	
404	Quaternion	6.817×10^{-13}	1.3690×10^{-12}	4.0685×10^{-4}	62.844 71

Problem Size	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
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
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

Problem Size	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2n3a	Classic	8.761×10^{-14}		2.1136×10^{-2}	
574	Quaternion	1.049×10^{-13}	1.0149×10^{-13}	1.0581×10^{-2}	99.754 47
pdb2n41	Classic	1.812×10^{-13}		1.2214×10^{-3}	
638	Quaternion	1.836×10^{-13}	8.2539×10^{-14}	7.5387×10^{-4}	62.020 24
pdb2n4e	Classic	1.494×10^{-13}		1.2005×10^{-3}	
638	Quaternion	1.687×10^{-13}	1.8433×10^{-13}	7.4403×10^{-4}	61.355 93
pdb2n5q	Classic	1.732×10^{-12}		2.8586×10^{-4}	
164	Quaternion	1.745×10^{-12}	1.7589×10^{-12}	1.7326×10^{-4}	64.988 36
pdb2n67	Classic	4.443×10^{-13}		1.0705×10^{-3}	
566	Quaternion	4.465×10^{-13}	6.3487×10^{-14}	6.5889×10^{-4}	62.466 17
pdb2n6n	Classic	4.139×10^{-8}		3.5018×10^{-4}	
192	Quaternion	4.139×10^{-8}	5.0670×10^{-13}	2.1213×10^{-4}	65.076 79
pdb2n7i	Classic	9.212×10^{-13}		3.9039×10^{-4}	
224	Quaternion	1.126×10^{-12}	3.0537×10^{-12}	2.3389×10^{-4}	66.911 44
pdb2n7j	Classic	5.969×10^{-13}		6.2452×10^{-4}	
336	Quaternion	6.094×10^{-13}	1.5144×10^{-13}	3.7466×10^{-4}	66.692 33
pdb2n9b	Classic	1.196×10^{-12}		1.0415×10^{-2}	
832	Quaternion	1.238×10^{-12}	1.1231×10^{-12}	4.6876×10^{-3}	122.174 14
pdb2na9	Classic	5.440×10^{-14}		4.5118×10^{-4}	
266	Quaternion	6.690×10^{-14}	5.4544×10^{-14}	2.6866×10^{-4}	67.933 62
pdb2ndc	Classic	3.365×10^{-14}		1.9645×10^{-4}	
110	Quaternion	4.479×10^{-14}	5.1916×10^{-14}	1.1711×10^{-4}	67.751 29
pdb2nde	Classic	7.022×10^{-14}		1.7381×10^{-4}	
110	Quaternion	8.868×10^{-14}	2.5156×10^{-13}	1.0512×10^{-4}	65.346 87
pdb2ndk	Classic	5.022×10^{-13}		4.9350×10^{-4}	
290	Quaternion	6.279×10^{-13}	2.0516×10^{-12}	3.0069×10^{-4}	64.120 92
pdb2nvj	Classic	2.082×10^{-14}		2.3645×10^{-4}	
152	Quaternion	2.293×10^{-14}	1.4035×10^{-14}	1.4631×10^{-4}	61.612 23
pdb2p6j	Classic	4.795×10^{-14}		5.6452×10^{-4}	
314	Quaternion	6.389×10^{-14}	1.1404×10^{-13}	3.4004×10^{-4}	66.016 40
pdb2p81	Classic	7.881×10^{-13}		4.5289×10^{-4}	
266	Quaternion	8.250×10^{-13}	4.3715×10^{-13}	2.7048×10^{-4}	67.435 54
pdb2pqe	Classic	6.484×10^{-10}		2.0028×10^{-3}	
896	Quaternion	6.496×10^{-10}	8.5673×10^{-12}	1.2182×10^{-3}	64.404 25
pdb2rlg	Classic	5.501×10^{-14}		1.9145×10^{-4}	
108	Quaternion	6.973×10^{-14}	6.8873×10^{-14}	1.1444×10^{-4}	67.286 63
pdb2rlh	Classic	4.772×10^{-14}		2.0634×10^{-4}	
108	Quaternion	5.801×10^{-14}	3.9131×10^{-14}	1.2294×10^{-4}	67.845 06
pdb2rmy	Classic	1.872×10^{-13}		3.6036×10^{-4}	
206	Quaternion	2.498×10^{-13}	3.6453×10^{-13}	2.1423×10^{-4}	68.214 64
pdb2rnd	Classic	2.626×10^{-13}		3.4764×10^{-4}	
206	Quaternion	3.581×10^{-13}	4.9979×10^{-13}	2.0993×10^{-4}	65.595 44
pdb2roo	Classic	2.933×10^{-12}		1.0899×10^{-3}	
260	Quaternion	3.525×10^{-12}	3.5927×10^{-12}	6.1599×10^{-4}	76.938 92
pdb2rql	Classic	2.345×10^{-12}		1.4716×10^{-3}	
572	Quaternion	2.496×10^{-12}	8.7086×10^{-13}	8.7885×10^{-4}	67.442 57
pdb2rut	Classic	4.389×10^{-14}		3.7874×10^{-4}	
218	Quaternion	5.014×10^{-14}	3.5338×10^{-13}	2.2736×10^{-4}	66.579 51
pdb2ruv	Classic	5.776×10^{-14}		3.9526×10^{-4}	
224	Quaternion	7.408×10^{-14}	1.2473×10^{-13}	2.3560×10^{-4}	67.767 96
pdb2rux	Classic	2.671×10^{-14}		3.9808×10^{-4}	
218	Quaternion	3.016×10^{-14}	6.2140×10^{-14}	2.3731×10^{-4}	67.745 85
pdb2ruy	Classic	1.968×10^{-14}		3.9089×10^{-4}	
224	Quaternion	2.387×10^{-14}	6.4254×10^{-14}	2.3568×10^{-4}	65.854 13

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
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}	$65.841\,45$
pdb2y4q 476	Classic	1.410×10^{-12}		8.2759×10^{-4}	
	Quaternion	1.451×10^{-12}	2.0648×10^{-13}	5.0510×10^{-4}	$63.847\,03$

1.2 Using BP-All versions

Table 3: Results

Problem Size	Method	$\lvert\mathcal{X}\rvert$	$\min_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}} \mathrm{RMSD}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_o)$	$i : \mathbf{x_i} \sim \mathbf{x}_o$	$\mathrm{MDE}(\mathbf{x}_i)$	Time	Improv time
pdb1a57	ClassicAll	8	3.1806×10^{-11}	5	2.096×10^{-11}	7.2168×10^{-3}	
698	QuaternionAll	8	3.3550×10^{-11}	5	2.092×10^{-11}	4.4005×10^{-3}	63.999
pdb1b4c	ClassicAll	8	2.6824×10^{-12}	5	5.067×10^{-13}	2.1307×10^{-2}	
1108	QuaternionAll	8	3.4662×10^{-12}	5	5.493×10^{-13}	1.1153×10^{-2}	91.045
pdb1ba5	ClassicAll	8	3.5621×10^{-2}	6	9.363×10^{-13}	2.2181×10^{-3}	
320	QuaternionAll	8	3.5621×10^{-2}	6	1.069×10^{-12}	1.4090×10^{-3}	57.428
pdb1d1n	ClassicAll	2	2.9766×10^{-11}	1	1.005×10^{-11}	3.4262×10^{-3}	
594	QuaternionAll	2	2.9311×10^{-11}	1	9.672×10^{-12}	1.9654×10^{-3}	74.331
pdb1dp3	ClassicAll	8	4.9981×10^{-5}	2	7.704×10^{-13}	2.2527×10^{-3}	
332	QuaternionAll	8	4.9981×10^{-5}	2	8.940×10^{-13}	1.4370×10^{-3}	56.765
pdb1du1	ClassicAll	8	6.6600×10^{-13}	1	8.225×10^{-13}	7.7204×10^{-4}	
122	QuaternionAll	8	1.6577×10^{-12}	1	1.258×10^{-12}	5.0114×10^{-4}	54.055
pdb1eii	ClassicAll	8	1.9451×10^{-10}	1	1.393×10^{-11}	5.7653×10^{-3}	
806	QuaternionAll	8	1.8740×10^{-10}	1	1.365×10^{-11}	3.7502×10^{-3}	53.735
pdb1fcl	ClassicAll	8	1.5447×10^{-11}	2	4.542×10^{-12}	2.3463×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	1.5223×10^{-11}	2	4.515×10^{-12}	1.5115×10^{-3}	55.228
pdb1fd6	ClassicAll	8	2.0242×10^{-5}	2	3.182×10^{-12}	2.4067×10^{-3}	
344	QuaternionAll	8	2.0242×10^{-5}	2	3.193×10^{-12}	1.5457×10^{-3}	55.707
pdb1hf9	ClassicAll	8	9.0139×10^{-10}	6	1.156×10^{-11}	4.1394×10^{-2}	
496	QuaternionAll	8	9.0282×10^{-10}	6	1.180×10^{-11}	2.1486×10^{-2}	92.651
pdb1i2u	ClassicAll	8	1.3842×10^{-3}	2	5.562×10^{-13}	1.8649×10^{-3}	
266	QuaternionAll	8	1.3842×10^{-3}	2	5.609×10^{-13}	1.2106×10^{-3}	54.043
pdb1i2v	ClassicAll	8	8.9125×10^{-13}	5	2.422×10^{-13}	1.8297×10^{-3}	
266	QuaternionAll	8	8.8206×10^{-13}	5	2.525×10^{-13}	1.1844×10^{-3}	54.479
pdb1ijc	ClassicAll	8	9.1858×10^{-11}	2	1.408×10^{-11}	2.9060×10^{-3}	
380	QuaternionAll	8	9.4110×10^{-11}	2	1.426×10^{-11}	1.8500×10^{-3}	57.083
pdb1jlz	ClassicAll	8	1.2304×10^{-4}	1	5.594×10^{-13}	9.1346×10^{-4}	
140	QuaternionAll	8	1.2304×10^{-4}	1	5.965×10^{-13}	5.9424×10^{-4}	53.718
pdb1jw3	ClassicAll	8	1.9618×10^{-12}	2	5.936×10^{-13}	5.9916×10^{-3}	
842	QuaternionAll	8	1.8088×10^{-12}	2	5.897×10^{-13}	3.8800×10^{-3}	54.421
pdb1k0v	ClassicAll	8	8.3940×10^{-5}	2	1.893×10^{-13}	3.2384×10^{-3}	
440	QuaternionAll	8	8.3940×10^{-5}	2	1.894×10^{-13}	2.0929×10^{-3}	54.728
pdb1k2h	ClassicAll	8	1.9788×10^{-4}	2	5.490×10^{-13}	2.6758×10^{-2}	
1120	QuaternionAll	8	1.9788×10^{-4}	2	5.198×10^{-13}	1.3144×10^{-2}	103.577
pdb1k36	ClassicAll	8	1.6100×10^{-10}	1	8.820×10^{-12}	1.8692×10^{-3}	
278	QuaternionAll	8	1.8077×10^{-10}	1	1.081×10^{-11}	1.1901×10^{-3}	57.060
pdb1k37	ClassicAll	8	2.1407×10^{-12}	2	4.711×10^{-13}	1.8674×10^{-3}	
278	QuaternionAll	8	2.0318×10^{-12}	2	4.988×10^{-13}	1.1885×10^{-3}	57.126
pdb1kuw	ClassicAll	8	1.8706×10^{-4}	1	9.229×10^{-14}	3.9029×10^{-4}	
62	QuaternionAll	8	1.8706×10^{-4}	1	1.130×10^{-13}	2.5891×10^{-4}	50.741
pdb1kz0	ClassicAll	8	6.7512×10^{-13}	1	4.404×10^{-14}	6.3022×10^{-4}	
98	QuaternionAll	8	6.2568×10^{-13}	1	5.880×10^{-14}	4.0976×10^{-4}	53.803
pdb1kz2	ClassicAll	8	3.1076×10^{-6}	1	2.119×10^{-14}	6.4018×10^{-4}	
98	QuaternionAll	8	3.1076×10^{-6}	1	2.886×10^{-14}	4.1913×10^{-4}	52.740
pdb1kz5	ClassicAll	8	4.8094×10^{-13}	1	4.081×10^{-14}	4.7184×10^{-4}	
74	QuaternionAll	8	5.2716×10^{-13}	1	4.738×10^{-14}	3.0708×10^{-4}	53.651
pdb1lvz	ClassicAll	8	1.4708×10^{-3}	1	6.336×10^{-14}	4.2873×10^{-4}	
68	QuaternionAll	8	1.4708×10^{-3}	1	7.315×10^{-14}	2.8144×10^{-4}	52.337
pdb1m4e	ClassicAll	8	5.4966×10^{-12}	1	5.949×10^{-13}	7.9497×10^{-4}	
122	QuaternionAll	8	5.5048×10^{-12}	1	5.972×10^{-13}	5.2298×10^{-4}	52.008
pdb1ma2	ClassicAll	8	1.7458×10^{-10}	2	8.695×10^{-12}	6.6260×10^{-4}	
104	QuaternionAll	8	1.7467×10^{-10}	2	8.757×10^{-12}	4.2948×10^{-4}	54.281

Problem Size	Method	$|\mathcal{X}|$	$\min\limits_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}} \mathrm{RMSD}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_o)$	$i : \mathbf{x_i} \sim \mathbf{x}_o$	$\mathrm{MDE}(\mathbf{x}_i)$	Time	Improv time
pdb1ma4	ClassicAll	8	5.4569×10^{-4}	2	7.247×10^{-14}	1.6390×10^{-3}	
104	QuaternionAll	8	5.4569×10^{-4}	2	7.977×10^{-14}	9.2800×10^{-4}	76.615
pdb1ma5	ClassicAll	8	9.6358×10^{-5}	1	8.169×10^{-13}	6.7216×10^{-4}	
104	QuaternionAll	8	9.6358×10^{-5}	1	9.044×10^{-13}	4.3986×10^{-4}	52.813
pdb1ma6	ClassicAll	8	1.2440×10^{-11}	2	6.283×10^{-13}	6.7314×10^{-4}	
104	QuaternionAll	8	1.4288×10^{-11}	2	8.487×10^{-13}	4.4000×10^{-4}	52.988
pdb1mpe	ClassicAll	8	5.1722×10^{-10}	2	2.617×10^{-11}	1.2925×10^{-2}	
1352	QuaternionAll	8	5.1751×10^{-10}	2	2.624×10^{-11}	7.1170×10^{-3}	81.604
pdb1nd9	ClassicAll	8	1.0508×10^{-12}	2	3.026×10^{-13}	2.0602×10^{-3}	
296	QuaternionAll	8	8.9082×10^{-13}	2	3.845×10^{-13}	1.3414×10^{-3}	53.589
pdb1ne5	ClassicAll	128	1.4845×10^{-11}	33	1.214×10^{-12}	3.1537×10^{-2}	
254	QuaternionAll	128	1.5105×10^{-11}	33	1.384×10^{-12}	1.9559×10^{-2}	61.239
pdb1nmj	ClassicAll	8	2.3883×10^{-13}	7	1.236×10^{-14}	1.1175×10^{-3}	
170	QuaternionAll	8	2.3832×10^{-13}	7	1.422×10^{-14}	7.2169×10^{-4}	54.843
pdb1o53	ClassicAll	8	1.0887×10^{-11}	2	3.999×10^{-13}	5.8817×10^{-4}	
92	QuaternionAll	8	1.1252×10^{-11}	2	4.527×10^{-13}	3.8500×10^{-4}	52.771
pdb1oqp	ClassicAll	8	2.9348×10^{-3}	2	7.045×10^{-14}	2.6452×10^{-2}	
580	QuaternionAll	8	2.9348×10^{-3}	2	8.314×10^{-14}	1.2882×10^{-2}	105.339
pdb1plw	ClassicAll	8	3.0310×10^{-13}	2	2.830×10^{-14}	1.8013×10^{-4}	
32	QuaternionAll	8	3.2973×10^{-13}	2	3.112×10^{-14}	1.2037×10^{-4}	49.647
pdb1plx	ClassicAll	8	2.8525×10^{-4}	1	1.574×10^{-13}	1.8123×10^{-4}	
32	QuaternionAll	8	2.8525×10^{-4}	1	2.060×10^{-13}	1.2033×10^{-4}	50.613
pdb1pv0	ClassicAll	16	1.3024×10^{-11}	1	2.409×10^{-13}	3.6764×10^{-3}	
278	QuaternionAll	16	1.3017×10^{-11}	1	2.723×10^{-13}	2.3561×10^{-3}	56.037
pdb1pzr	ClassicAll	8	3.9940×10^{-10}	1	5.644×10^{-12}	1.3472×10^{-1}	
724	QuaternionAll	8	3.9046×10^{-10}	1	5.871×10^{-12}	6.3919×10^{-2}	110.770
pdb1qlk	ClassicAll	8	3.1378×10^{-5}	5	2.634×10^{-13}	3.4224×10^{-2}	
1108	QuaternionAll	8	3.1378×10^{-5}	5	2.870×10^{-13}	1.8366×10^{-2}	86.341
pdb1r57	ClassicAll	8	4.3330×10^{-3}	2	1.847×10^{-13}	4.3587×10^{-3}	
614	QuaternionAll	8	4.3330×10^{-3}	2	2.054×10^{-13}	2.8209×10^{-3}	54.518
pdb1ry3	ClassicAll	8	9.1924×10^{-12}	2	4.938×10^{-13}	2.6880×10^{-3}	
386	QuaternionAll	8	9.4285×10^{-12}	2	5.913×10^{-13}	1.6985×10^{-3}	58.256
pdb1s4h	ClassicAll	8	1.4643×10^{-4}	2	4.696×10^{-13}	5.0040×10^{-4}	
80	QuaternionAll	8	1.4643×10^{-4}	2	6.351×10^{-13}	3.2503×10^{-4}	53.952
pdb1s4j	ClassicAll	8	5.8507×10^{-12}	2	1.520×10^{-13}	5.1183×10^{-4}	
80	QuaternionAll	8	5.8479×10^{-12}	2	2.083×10^{-13}	3.3630×10^{-4}	52.193
pdb1s6j	ClassicAll	8	6.0202×10^{-5}	1	6.073×10^{-13}	3.7005×10^{-3}	
524	QuaternionAll	8	6.0202×10^{-5}	1	7.660×10^{-13}	2.3304×10^{-3}	58.796
pdb1sa8	ClassicAll	8	1.7170×10^{-3}	1	9.340×10^{-13}	4.5346×10^{-3}	
638	QuaternionAll	8	1.7170×10^{-3}	1	1.034×10^{-12}	3.0039×10^{-3}	50.957
pdb1t2y	ClassicAll	8	2.5460×10^{-4}	1	1.887×10^{-13}	1.0142×10^{-3}	
152	QuaternionAll	8	2.5460×10^{-4}	1	2.396×10^{-13}	6.6476×10^{-4}	52.562
pdb1t5q	ClassicAll	2	1.0265×10^{-12}	1	3.877×10^{-14}	9.4120×10^{-4}	
180	QuaternionAll	2	1.0480×10^{-12}	1	5.093×10^{-14}	5.2552×10^{-4}	79.096
pdb1tot	ClassicAll	8	3.4218×10^{-3}	5	6.151×10^{-14}	2.2365×10^{-3}	
314	QuaternionAll	8	3.4218×10^{-3}	5	6.855×10^{-14}	1.4438×10^{-3}	54.902
pdb1v6r	ClassicAll	8	1.3650×10^{-4}	2	6.835×10^{-13}	8.2447×10^{-4}	
128	QuaternionAll	8	1.3650×10^{-4}	2	6.971×10^{-13}	5.3590×10^{-4}	53.848
pdb1v92	ClassicAll	8	3.1327×10^{-5}	1	1.463×10^{-13}	1.9226×10^{-3}	
278	QuaternionAll	8	3.1327×10^{-5}	1	1.630×10^{-13}	1.2375×10^{-3}	55.364
pdb1vd7	ClassicAll	8	7.8801×10^{-12}	1	6.342×10^{-13}	9.0575×10^{-4}	
140	QuaternionAll	8	7.9022×10^{-12}	1	7.439×10^{-13}	5.9296×10^{-4}	52.750
pdb1vd9	ClassicAll	8	1.5514×10^{-11}	1	1.290×10^{-12}	9.0526×10^{-4}	
140	QuaternionAll	8	1.5541×10^{-11}	1	1.554×10^{-12}	5.8499×10^{-4}	54.747

Problem Size	Method	$|\mathcal{X}|$	$\min_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}} \mathrm{RMSD}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_o)$	$i : \mathbf{x_i} \sim \mathbf{x}_o$	$\mathrm{MDE}(\mathbf{x}_i)$	Time	Improv time
pdb1vdb	ClassicAll	8	8.5740×10^{-12}	2	9.108×10^{-13}	9.0390×10^{-4}	
140	QuaternionAll	8	8.5291×10^{-12}	2	1.082×10^{-12}	5.8446×10^{-4}	54.655
pdb1vpc	ClassicAll	8	4.3482×10^{-4}	6	8.510×10^{-15}	1.8807×10^{-3}	
272	QuaternionAll	8	4.3482×10^{-4}	6	1.002×10^{-14}	1.1963×10^{-3}	57.209
pdb1wnk	ClassicAll	8	2.2292×10^{-10}	1	4.112×10^{-12}	9.0852×10^{-4}	
140	QuaternionAll	8	2.2177×10^{-10}	1	4.632×10^{-12}	5.8888×10^{-4}	54.279
pdb1wo4	ClassicAll	8	4.6193×10^{-5}	2	9.957×10^{-13}	9.9077×10^{-4}	
152	QuaternionAll	8	4.6193×10^{-5}	2	9.634×10^{-13}	6.3894×10^{-4}	55.065
pdb1wo5	ClassicAll	8	2.7147×10^{-10}	1	2.372×10^{-12}	9.9623×10^{-4}	
152	QuaternionAll	8	2.7625×10^{-10}	1	2.514×10^{-12}	6.4531×10^{-4}	54.380
pdb1x60	ClassicAll	8	6.7449×10^{-12}	1	1.076×10^{-12}	3.3136×10^{-3}	
476	QuaternionAll	8	6.9447×10^{-12}	1	1.179×10^{-12}	2.1603×10^{-3}	53.386
pdb1x9v	ClassicAll	8	1.1547×10^{-4}	6	8.968×10^{-13}	4.1615×10^{-2}	
544	QuaternionAll	8	1.1547×10^{-4}	6	9.611×10^{-13}	2.1452×10^{-2}	93.994
pdb1y5c	ClassicAll	8	8.7435×10^{-13}	1	7.693×10^{-14}	4.2161×10^{-4}	
68	QuaternionAll	8	8.2242×10^{-13}	1	9.383×10^{-14}	2.7276×10^{-4}	54.570
pdb1yx7	ClassicAll	8	1.3647×10^{-10}	5	3.509×10^{-12}	3.5138×10^{-3}	
500	QuaternionAll	8	1.4245×10^{-10}	5	4.348×10^{-12}	2.2682×10^{-3}	54.917
pdb1yx8	ClassicAll	8	2.5841×10^{-10}	6	7.284×10^{-12}	3.9642×10^{-3}	
500	QuaternionAll	8	2.6921×10^{-10}	6	8.217×10^{-12}	2.5052×10^{-3}	58.237
pdb1yxr	ClassicAll	8	9.3459×10^{-4}	1	6.979×10^{-13}	3.2919×10^{-3}	
464	QuaternionAll	8	9.3459×10^{-4}	1	7.989×10^{-13}	2.1481×10^{-3}	53.244
pdb2a2y	ClassicAll	8	8.1076×10^{-5}	2	1.150×10^{-12}	2.0710×10^{-1}	
1072	QuaternionAll	8	8.1076×10^{-5}	2	1.151×10^{-12}	9.7691×10^{-2}	111.993
pdb2a4j	ClassicAll	8	1.0516×10^{-4}	2	2.085×10^{-14}	4.8461×10^{-3}	
580	QuaternionAll	8	1.0516×10^{-4}	2	2.727×10^{-14}	3.0597×10^{-3}	58.387
pdb2adl	ClassicAll	8	3.1161×10^{-11}	1	1.752×10^{-11}	1.6403×10^{-2}	
868	QuaternionAll	8	3.3255×10^{-11}	1	1.787×10^{-11}	8.4920×10^{-3}	93.158
pdb2adn	ClassicAll	8	2.3364×10^{-10}	1	6.693×10^{-12}	1.2112×10^{-2}	
868	QuaternionAll	8	2.3188×10^{-10}	1	6.465×10^{-12}	6.3753×10^{-3}	89.982
pdb2ajj	ClassicAll	8	2.9810×10^{-4}	1	5.641×10^{-14}	1.1115×10^{-3}	
170	QuaternionAll	8	2.9810×10^{-4}	1	6.584×10^{-14}	7.1627×10^{-4}	55.172
pdb2ajm	ClassicAll	8	2.4063×10^{-12}	2	1.183×10^{-13}	1.1195×10^{-3}	
170	QuaternionAll	8	2.7001×10^{-12}	2	1.555×10^{-13}	7.2295×10^{-4}	54.857
pdb2ajn	ClassicAll	8	4.3268×10^{-4}	1	1.076×10^{-13}	1.1117×10^{-3}	
170	QuaternionAll	8	4.3268×10^{-4}	1	1.217×10^{-13}	7.1301×10^{-4}	55.920
pdb2ajo	ClassicAll	8	2.4063×10^{-12}	2	1.183×10^{-13}	1.1267×10^{-3}	
170	QuaternionAll	8	2.7001×10^{-12}	2	1.555×10^{-13}	7.3113×10^{-4}	54.105
pdb2akk	ClassicAll	8	3.0416×10^{-3}	2	1.289×10^{-13}	3.1293×10^{-3}	
446	QuaternionAll	8	3.0416×10^{-3}	2	1.279×10^{-13}	2.0386×10^{-3}	53.502
pdb2bzb	ClassicAll	8	4.6498×10^{-13}	5	9.361×10^{-14}	4.3490×10^{-2}	
748	QuaternionAll	8	6.0113×10^{-13}	5	1.224×10^{-13}	2.2541×10^{-2}	92.941
pdb2c0s	ClassicAll	8	1.0793×10^{-2}	6	3.028×10^{-13}	2.7425×10^{-3}	
386	QuaternionAll	8	1.0793×10^{-2}	6	3.380×10^{-13}	1.7394×10^{-3}	57.670
pdb2dci	ClassicAll	2	2.0907×10^{-13}	1	2.366×10^{-14}	6.3428×10^{-4}	
120	QuaternionAll	2	3.3732×10^{-13}	1	2.950×10^{-14}	3.6157×10^{-4}	75.424
pdb2eem	ClassicAll	8	9.5324×10^{-12}	1	5.190×10^{-13}	1.3738×10^{-3}	
206	QuaternionAll	8	9.5866×10^{-12}	1	5.461×10^{-13}	8.8063×10^{-4}	56.002
pdb2fva	ClassicAll	8	1.2680×10^{-11}	2	1.047×10^{-12}	3.4355×10^{-3}	
494	QuaternionAll	8	1.2689×10^{-11}	2	1.195×10^{-12}	2.1902×10^{-3}	56.856
pdb2fvf	ClassicAll	8	3.5796×10^{-12}	1	3.106×10^{-13}	3.4452×10^{-3}	
494	QuaternionAll	8	3.3286×10^{-12}	1	3.445×10^{-13}	2.2127×10^{-3}	55.699
pdb2fxz	ClassicAll	8	4.2293×10^{-12}	1	1.489×10^{-12}	5.1456×10^{-4}	
80	QuaternionAll	8	5.3169×10^{-12}	1	1.749×10^{-12}	3.3937×10^{-4}	51.622

Problem Size	Method	$|\mathcal{X}|$	$\min_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}} \mathrm{RMSD}(\mathbf{x},\mathbf{x}_o)$	$i : \mathbf{x_i} \sim \mathbf{x}_o$	$\mathrm{MDE}(\mathbf{x}_i)$	Time	Improv time
pdb2g9j	ClassicAll	8	5.8011×10^{-4}	2	3.282×10^{-12}	2.6196×10^{-1}	
848	QuaternionAll	8	5.8011×10^{-4}	2	3.535×10^{-12}	1.2965×10^{-1}	102.051
pdb2g9l	ClassicAll	8	1.0333×10^{-4}	2	6.365×10^{-14}	1.5112×10^{-3}	
224	QuaternionAll	8	1.0333×10^{-4}	2	8.666×10^{-14}	9.7433×10^{-4}	55.102
pdb2h5m	ClassicAll	8	1.2267×10^{-3}	1	9.692×10^{-13}	4.3038×10^{-3}	
614	QuaternionAll	8	1.2267×10^{-3}	1	1.032×10^{-12}	2.7747×10^{-3}	55.110
pdb2hep	ClassicAll	2	2.1758×10^{-11}	1	1.191×10^{-12}	1.3721×10^{-3}	
252	QuaternionAll	2	2.2038×10^{-11}	1	1.268×10^{-12}	7.5315×10^{-4}	82.177
pdb2j0z	ClassicAll	8	1.3100×10^{-10}	6	4.392×10^{-12}	1.6122×10^{-1}	
752	QuaternionAll	8	1.3116×10^{-10}	6	4.954×10^{-12}	7.7250×10^{-2}	108.703
pdb2j10	ClassicAll	1024	2.9952×10^{-5}	574	9.196×10^{-12}	6.8913×10^{-1}	
752	QuaternionAll	1024	2.9952×10^{-5}	574	9.529×10^{-12}	5.5720×10^{-1}	23.678
pdb2j11	ClassicAll	1024	2.7803×10^{-11}	549	5.256×10^{-12}	6.8328×10^{-1}	
752	QuaternionAll	1024	2.7661×10^{-11}	549	5.631×10^{-12}	5.5622×10^{-1}	22.844
pdb2jmy	ClassicAll	8	7.0432×10^{-5}	1	9.834×10^{-13}	5.9855×10^{-4}	
92	QuaternionAll	8	7.0432×10^{-5}	1	9.967×10^{-13}	3.9728×10^{-4}	50.662
pdb2jn5	ClassicAll	8	6.6339×10^{-12}	1	1.104×10^{-11}	4.6229×10^{-4}	
74	QuaternionAll	8	2.0459×10^{-11}	1	2.456×10^{-11}	3.0059×10^{-4}	53.793
pdb2jnk	ClassicAll	8	3.4995×10^{-11}	1	2.246×10^{-12}	6.1159×10^{-3}	
842	QuaternionAll	8	3.4653×10^{-11}	1	2.319×10^{-12}	3.9615×10^{-3}	54.384
pdb2jpn	ClassicAll	8	6.4192×10^{-12}	2	6.730×10^{-14}	4.5397×10^{-3}	
476	QuaternionAll	8	6.5904×10^{-12}	2	6.984×10^{-14}	2.7453×10^{-3}	65.366
pdb2jua	ClassicAll	8	1.8734×10^{-4}	2	1.740×10^{-11}	4.4263×10^{-3}	
614	QuaternionAll	8	1.8734×10^{-4}	2	1.882×10^{-11}	2.8110×10^{-3}	57.461
pdb2jvd	ClassicAll	2	9.4244×10^{-13}	1	3.339×10^{-14}	1.5850×10^{-3}	
288	QuaternionAll	2	9.4967×10^{-13}	1	3.898×10^{-14}	8.6960×10^{-4}	82.264
pdb2jwe	ClassicAll	2	9.2597×10^{-11}	1	2.695×10^{-11}	5.7134×10^{-3}	
984	QuaternionAll	2	9.2052×10^{-11}	1	2.734×10^{-11}	3.2419×10^{-3}	76.233
pdb2jws	ClassicAll	8	4.5612×10^{-4}	2	1.251×10^{-13}	2.4140×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	4.5612×10^{-4}	2	1.543×10^{-13}	1.5437×10^{-3}	56.376
pdb2jwu	ClassicAll	8	3.0876×10^{-4}	1	4.421×10^{-12}	2.3899×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	3.0876×10^{-4}	1	4.373×10^{-12}	1.5433×10^{-3}	54.854
pdb2jxf	ClassicAll	8	2.4000×10^{-4}	1	1.399×10^{-13}	1.2131×10^{-3}	
182	QuaternionAll	8	2.4000×10^{-4}	1	1.734×10^{-13}	7.7873×10^{-4}	55.782
pdb2jz5	ClassicAll	8	1.7460×10^{-3}	1	2.860×10^{-13}	3.7907×10^{-3}	
548	QuaternionAll	8	1.7460×10^{-3}	1	2.854×10^{-13}	2.4272×10^{-3}	56.177
pdb2k2a	ClassicAll	8	4.7195×10^{-3}	5	3.810×10^{-14}	2.9808×10^{-3}	
422	QuaternionAll	8	4.7195×10^{-3}	5	5.148×10^{-14}	1.9006×10^{-3}	56.839
pdb2k2f	ClassicAll	8	1.2926×10^{-11}	1	2.639×10^{-13}	2.9746×10^{1}	
1268	QuaternionAll	8	1.2956×10^{-11}	1	2.818×10^{-13}	1.3832×10^{1}	115.049
pdb2k36	ClassicAll	8	1.6972×10^{-12}	1	1.922×10^{-13}	6.4707×10^{-3}	
896	QuaternionAll	8	1.6007×10^{-12}	1	2.045×10^{-13}	4.1580×10^{-3}	55.621
pdb2k37	ClassicAll	8	3.7147×10^{-12}	1	1.921×10^{-13}	2.5637×10^{-3}	
356	QuaternionAll	8	3.6185×10^{-12}	1	2.525×10^{-13}	1.6373×10^{-3}	56.576
pdb2k3i	ClassicAll	8	4.6225×10^{-3}	2	3.810×10^{-13}	5.9071×10^{-3}	
656	QuaternionAll	8	4.6225×10^{-3}	2	4.009×10^{-13}	3.5884×10^{-3}	64.615
pdb2k6s	ClassicAll	8	8.2998×10^{-12}	2	2.100×10^{-13}	7.3740×10^{-3}	
494	QuaternionAll	8	8.4519×10^{-12}	2	2.651×10^{-13}	4.2070×10^{-3}	75.280
pdb2k7o	ClassicAll	8	1.8663×10^{-4}	1	1.279×10^{-13}	5.1186×10^{-2}	
1096	QuaternionAll	8	1.8663×10^{-4}	1	1.416×10^{-13}	2.6689×10^{-2}	91.784
pdb2kbm	ClassicAll	8	1.5487×10^{-12}	2	2.165×10^{-13}	2.5000×10^{1}	
1268	QuaternionAll	8	1.6865×10^{-12}	2	2.226×10^{-13}	1.1776×10^{1}	112.296
pdb2kdh	ClassicAll	8	7.2209×10^{-5}	2	1.947×10^{-11}	3.0999×10^{-3}	
434	QuaternionAll	8	7.2209×10^{-5}	2	2.228×10^{-11}	1.9917×10^{-3}	55.644

15

Problem Size	Method	$|\mathcal{X}|$	$\min_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \mathrm{RMSD}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_o)$	$i : \mathbf{x_i} \sim \mathbf{x}_o$	$\mathrm{MDE}(\mathbf{x}_i)$	Time	Improv time
pdb2kdl	ClassicAll	8	4.4591×10^{-12}	2	2.301×10^{-13}	2.3135×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	4.4513×10^{-12}	2	2.919×10^{-13}	1.4812×10^{-3}	56.185
pdb2kdm	ClassicAll	8	2.1896×10^{-11}	1	3.191×10^{-12}	2.3738×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	2.1643×10^{-11}	1	3.284×10^{-12}	1.5183×10^{-3}	56.347
pdb2kdp	ClassicAll	8	3.0283×10^{-12}	1	2.621×10^{-13}	3.0102×10^{-3}	
428	QuaternionAll	8	3.0741×10^{-12}	1	2.865×10^{-13}	1.9209×10^{-3}	56.709
pdb2kdr	ClassicAll	8	6.3024×10^{-5}	2	6.618×10^{-14}	1.1171×10^{-3}	
170	QuaternionAll	8	6.3024×10^{-5}	2	8.490×10^{-14}	7.1496×10^{-4}	56.243
pdb2kes	ClassicAll	8	1.8528×10^{-4}	7	4.467×10^{-14}	1.9606×10^{-3}	
290	QuaternionAll	8	1.8528×10^{-4}	7	5.425×10^{-14}	1.2466×10^{-3}	57.266
pdb2kib	ClassicAll	8	2.9706×10^{-5}	1	2.533×10^{-12}	3.5759×10^{-2}	
352	QuaternionAll	8	2.9706×10^{-5}	1	2.539×10^{-12}	1.7861×10^{-2}	100.203
pdb2kjn	ClassicAll	8	1.9764×10^{-12}	2	9.827×10^{-14}	1.0281×10^{-3}	
158	QuaternionAll	8	1.9265×10^{-12}	2	1.174×10^{-13}	6.6463×10^{-4}	54.686
pdb2kjo	ClassicAll	8	1.2876×10^{-11}	1	2.284×10^{-13}	1.0360×10^{-3}	
158	QuaternionAll	8	1.2921×10^{-11}	1	2.421×10^{-13}	6.6731×10^{-4}	55.247
pdb2kjr	ClassicAll	8	5.1341×10^{-11}	2	3.247×10^{-12}	3.9453×10^{-3}	
572	QuaternionAll	8	5.1082×10^{-11}	2	3.252×10^{-12}	2.5296×10^{-3}	55.966
pdb2kko	ClassicAll	8	6.9643×10^{-4}	2	1.191×10^{-13}	5.7810×10^{-2}	
1300	QuaternionAll	8	6.9643×10^{-4}	2	1.284×10^{-13}	2.9904×10^{-2}	93.315
pdb2kl5	ClassicAll	8	2.4505×10^{-12}	1	1.820×10^{-13}	4.6640×10^{-3}	
662	QuaternionAll	8	2.5206×10^{-12}	1	2.020×10^{-13}	2.9957×10^{-3}	55.690
pdb2klz	ClassicAll	2	3.9786×10^{-13}	1	3.439×10^{-14}	1.5068×10^{-3}	
276	QuaternionAll	2	3.7834×10^{-13}	1	4.443×10^{-14}	8.2650×10^{-4}	82.307
pdb2ko1	ClassicAll	8	9.3273×10^{-4}	2	1.150×10^{-12}	8.1329×10^{-2}	
1060	QuaternionAll	8	9.3273×10^{-4}	2	1.151×10^{-12}	3.8494×10^{-2}	111.278
pdb2koz	ClassicAll	8	4.7204×10^{-5}	2	1.067×10^{-12}	1.3638×10^{-3}	
200	QuaternionAll	8	4.7204×10^{-5}	2	1.151×10^{-12}	8.8530×10^{-4}	54.047
pdb2kp0	ClassicAll	8	7.8392×10^{-11}	2	4.894×10^{-12}	1.3497×10^{-3}	
200	QuaternionAll	8	8.2404×10^{-11}	2	5.595×10^{-12}	8.7224×10^{-4}	54.739
pdb2ksg	ClassicAll	8	9.2027×10^{-13}	1	3.215×10^{-14}	1.9883×10^{-3}	
290	QuaternionAll	8	9.2208×10^{-13}	1	3.967×10^{-14}	1.2800×10^{-3}	55.337
pdb2kt8	ClassicAll	8	4.1573×10^{-4}	1	3.314×10^{-12}	3.1420×10^{-3}	
458	QuaternionAll	8	4.1573×10^{-4}	1	3.535×10^{-12}	2.0305×10^{-3}	54.738
pdb2kuh	ClassicAll	8	1.1667×10^{-3}	6	2.015×10^{-14}	2.8482×10^{-3}	
404	QuaternionAll	8	1.1667×10^{-3}	6	2.491×10^{-14}	1.8381×10^{-3}	54.954
pdb2kwh	ClassicAll	8	2.0587×10^{-3}	2	1.408×10^{-13}	2.3177×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	2.0587×10^{-3}	2	1.825×10^{-13}	1.4781×10^{-3}	56.804
pdb2kxa	ClassicAll	2	3.9712×10^{-12}	1	1.325×10^{-12}	7.8119×10^{-4}	
144	QuaternionAll	2	3.7392×10^{-12}	1	1.351×10^{-12}	4.4945×10^{-4}	73.810
pdb2kyb	ClassicAll	8	3.1200×10^{-6}	2	1.321×10^{-11}	3.4027×10^{-3}	
362	QuaternionAll	8	3.1200×10^{-6}	2	1.373×10^{-11}	2.0755×10^{-3}	63.943
pdb2l3m	ClassicAll	8	1.5178×10^{-3}	1	1.028×10^{-12}	2.9766×10^{-3}	
428	QuaternionAll	8	1.5178×10^{-3}	1	9.340×10^{-13}	1.9217×10^{-3}	54.897
pdb2l3n	ClassicAll	8	3.9987×10^{-4}	5	3.024×10^{-14}	1.8277×10^{-2}	
626	QuaternionAll	8	3.9987×10^{-4}	5	3.632×10^{-14}	9.2061×10^{-3}	98.537
pdb2l45	ClassicAll	8	5.9466×10^{-13}	1	2.236×10^{-14}	7.6098×10^{-4}	
116	QuaternionAll	8	6.7808×10^{-13}	1	3.033×10^{-14}	4.9929×10^{-4}	52.412
pdb2l5r	ClassicAll	2	3.0491×10^{-13}	2	3.535×10^{-14}	7.1230×10^{-4}	
138	QuaternionAll	2	3.0031×10^{-13}	2	4.436×10^{-14}	4.0015×10^{-4}	78.007
pdb2l6q	ClassicAll	4	1.6115×10^{-9}	1	4.435×10^{-11}	1.9704×10^{-3}	
374	QuaternionAll	4	1.6752×10^{-9}	1	5.413×10^{-11}	1.1738×10^{-3}	67.872
pdb2l6r	ClassicAll	8	1.0970×10^{-10}	2	2.060×10^{-12}	2.6361×10^{-3}	
374	QuaternionAll	8	9.8250×10^{-11}	2	2.174×10^{-12}	1.6745×10^{-3}	57.422

Problem Size	Method	$|\mathcal{X}|$	$\min_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}}$ RMSD$(\mathbf{x}, \mathbf{x}_o)$	$i : \mathbf{x_i} \sim \mathbf{x}_o$	MDE$(\mathbf{x}_i)$	Time	Improv time
pdb2l98	ClassicAll	8	5.6413×10^{-12}	2	3.273×10^{-13}	3.0147×10^{-3}	
434	QuaternionAll	8	6.2089×10^{-12}	2	3.637×10^{-13}	1.9279×10^{-3}	56.372
pdb2lci	ClassicAll	8	1.2015×10^{-12}	1	2.579×10^{-13}	5.6616×10^{-3}	
806	QuaternionAll	8	1.1830×10^{-12}	1	2.404×10^{-13}	3.6360×10^{-3}	55.707
pdb2lde	ClassicAll	8	6.0406×10^{-3}	2	3.154×10^{-14}	9.8617×10^{-4}	
152	QuaternionAll	8	6.0406×10^{-3}	2	3.766×10^{-14}	6.3873×10^{-4}	54.396
pdb2le2	ClassicAll	8	1.5317×10^{-12}	2	2.064×10^{-13}	2.2512×10^{-1}	
676	QuaternionAll	8	1.4989×10^{-12}	2	2.042×10^{-13}	1.0961×10^{-1}	105.376
pdb2le7	ClassicAll	8	8.8940×10^{-14}	2	2.111×10^{-14}	7.8547×10^{-4}	
122	QuaternionAll	8	1.1008×10^{-13}	2	2.749×10^{-14}	5.1159×10^{-4}	53.534
pdb2ler	ClassicAll	8	5.1096×10^{-14}	2	1.314×10^{-14}	4.2376×10^{-4}	
68	QuaternionAll	8	6.2001×10^{-14}	2	1.532×10^{-14}	2.7519×10^{-4}	53.992
pdb2lgi	ClassicAll	8	9.7255×10^{-12}	2	1.068×10^{-12}	2.3776×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	9.6518×10^{-12}	2	1.052×10^{-12}	1.5301×10^{-3}	55.393
pdb2lhc	ClassicAll	8	3.8367×10^{-10}	1	2.902×10^{-12}	2.4365×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	3.8166×10^{-10}	1	2.997×10^{-12}	1.5379×10^{-3}	58.426
pdb2lhd	ClassicAll	8	1.3048×10^{-11}	2	1.930×10^{-12}	2.3559×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	1.4592×10^{-11}	2	2.033×10^{-12}	1.5150×10^{-3}	55.502
pdb2lhe	ClassicAll	8	9.7862×10^{-10}	2	4.963×10^{-11}	2.5781×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	9.7867×10^{-10}	2	4.967×10^{-11}	1.6370×10^{-3}	57.493
pdb2lhg	ClassicAll	8	5.0995×10^{-13}	6	6.485×10^{-14}	2.3862×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	5.4683×10^{-13}	6	7.343×10^{-14}	1.5279×10^{-3}	56.176
pdb2lix	ClassicAll	2	4.9988×10^{-13}	1	4.842×10^{-14}	8.5831×10^{-4}	
162	QuaternionAll	2	5.1517×10^{-13}	1	5.614×10^{-14}	4.8839×10^{-4}	75.743
pdb2lld	ClassicAll	8	3.3972×10^{-3}	5	1.938×10^{-13}	1.6492×10^{-3}	
242	QuaternionAll	8	3.3972×10^{-3}	5	2.216×10^{-13}	1.0697×10^{-3}	54.176
pdb2lm9	ClassicAll	8	2.2967×10^{-3}	2	6.254×10^{-14}	4.0365×10^{-3}	
578	QuaternionAll	8	2.2967×10^{-3}	2	7.713×10^{-14}	2.5617×10^{-3}	57.571
pdb2lmf	ClassicAll	8	1.0942×10^{-4}	1	1.282×10^{-13}	9.1035×10^{-4}	
140	QuaternionAll	8	1.0942×10^{-4}	1	1.462×10^{-13}	5.8702×10^{-4}	55.081
pdb2ln3	ClassicAll	8	2.5821×10^{-13}	1	1.292×10^{-13}	3.4688×10^{-3}	
500	QuaternionAll	8	2.9987×10^{-13}	1	1.359×10^{-13}	2.2326×10^{-3}	55.367
pdb2lo2	ClassicAll	8	1.4423×10^{-2}	2	2.068×10^{-14}	1.5525×10^{-3}	
230	QuaternionAll	8	1.4423×10^{-2}	2	2.571×10^{-14}	1.0000×10^{-3}	55.244
pdb2lqp	ClassicAll	8	5.7815×10^{-4}	2	2.950×10^{-13}	2.9691×10^{-3}	
428	QuaternionAll	8	5.7815×10^{-4}	2	3.085×10^{-13}	1.9058×10^{-3}	55.794
pdb2lr0	ClassicAll	8	1.2202×10^{-11}	1	3.549×10^{-12}	5.6876×10^{-3}	
806	QuaternionAll	8	1.1747×10^{-11}	1	3.440×10^{-12}	3.6523×10^{-3}	55.724
pdb2lrh	ClassicAll	8	2.9721×10^{-12}	1	5.631×10^{-13}	5.6939×10^{-3}	
806	QuaternionAll	8	2.9099×10^{-12}	1	6.564×10^{-13}	3.6372×10^{-3}	56.546
pdb2ls9	ClassicAll	8	2.7045×10^{-12}	1	1.122×10^{-13}	1.0102×10^{-3}	
152	QuaternionAll	8	3.0425×10^{-12}	1	1.471×10^{-13}	6.5577×10^{-4}	54.050
pdb2lsa	ClassicAll	8	2.5535×10^{-3}	2	5.235×10^{-14}	9.2737×10^{-4}	
140	QuaternionAll	8	2.5535×10^{-3}	2	6.998×10^{-14}	6.0696×10^{-4}	52.790
pdb2lss	ClassicAll	8	1.2372×10^{-3}	1	1.230×10^{-13}	3.0024×10^{-3}	
422	QuaternionAll	8	1.2372×10^{-3}	1	1.455×10^{-13}	1.9476×10^{-3}	54.157
pdb2lt3	ClassicAll	8	9.6961×10^{-13}	6	7.245×10^{-14}	4.7925×10^{-3}	
680	QuaternionAll	8	1.0253×10^{-12}	6	7.760×10^{-14}	3.0730×10^{-3}	55.954
pdb2lu6	ClassicAll	8	7.7550×10^{-3}	1	5.356×10^{-15}	5.3249×10^{-4}	
86	QuaternionAll	8	7.7550×10^{-3}	1	6.922×10^{-15}	3.4442×10^{-4}	54.604
pdb2lwa	ClassicAll	2048	4.9078×10^{-12}	449	3.616×10^{-13}	1.2911	
432	QuaternionAll	2048	4.0818×10^{-12}	449	4.436×10^{-13}	9.2788×10^{-1}	39.145
pdb2lx0	ClassicAll	8	7.4851×10^{-12}	1	3.569×10^{-13}	1.3161×10^{-3}	
194	QuaternionAll	8	7.5304×10^{-12}	1	4.035×10^{-13}	8.5217×10^{-4}	54.440

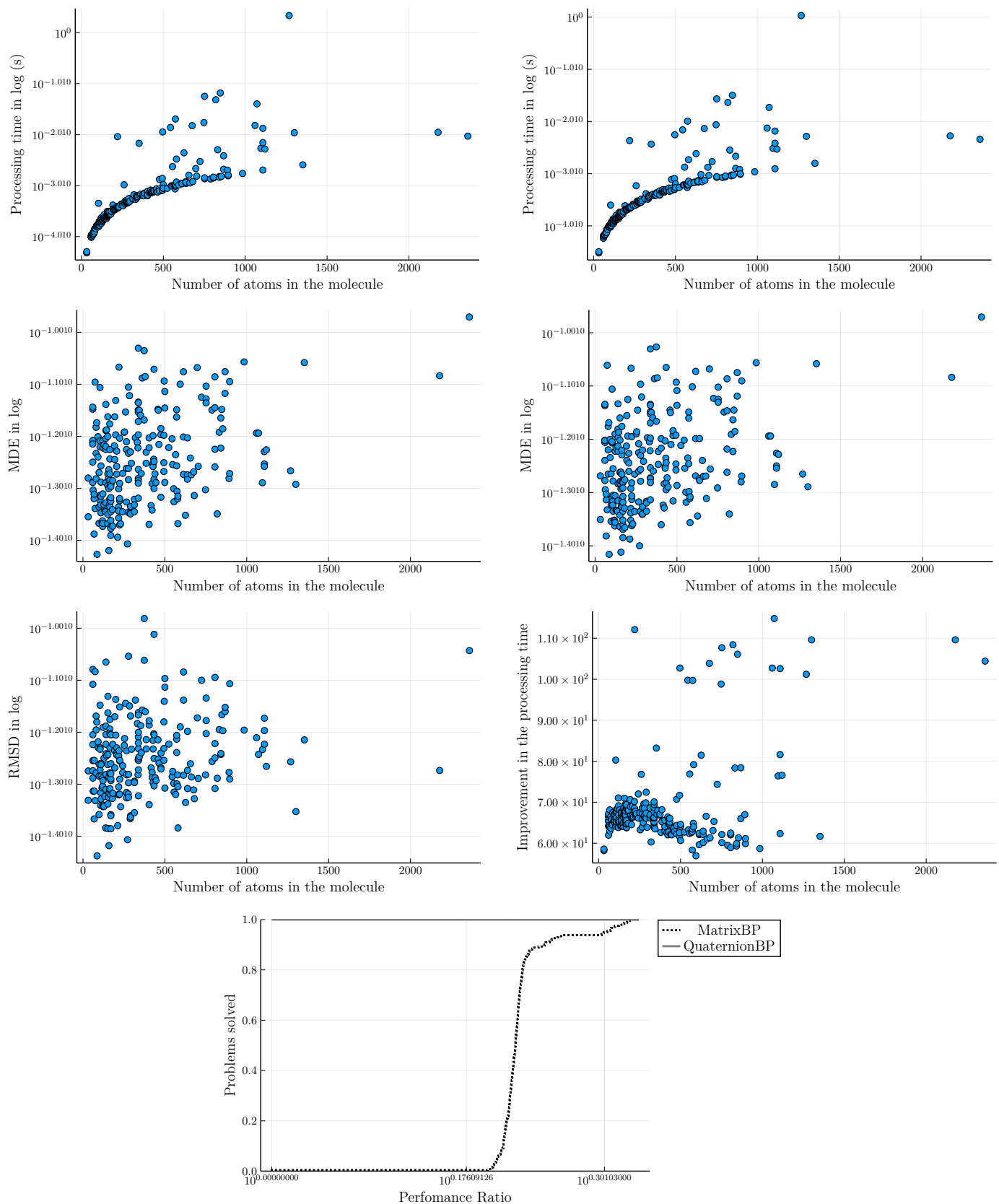| Problem Size	Method	$|\mathcal{X}|$	$\min_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}} \mathrm{RMSD}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_o)$	$i : \mathbf{x_i} \sim \mathbf{x}_o$	$\mathrm{MDE}(\mathbf{x}_i)$	Time	Improv time
pdb2lxb	ClassicAll	8	9.0172×10^{-13}	1	1.542×10^{-13}	1.6539×10^{-2}	
892	QuaternionAll	8	8.6577×10^{-13}	1	1.585×10^{-13}	8.5426×10^{-3}	93.606
pdb2lxy	ClassicAll	8	1.1155×10^{-10}	2	9.313×10^{-13}	2.8074×10^{-3}	
404	QuaternionAll	8	1.1215×10^{-10}	2	1.025×10^{-12}	1.7838×10^{-3}	57.383
pdb2lxz	ClassicAll	8	1.1003×10^{-4}	2	2.371×10^{-12}	1.3136×10^{-3}	
194	QuaternionAll	8	1.1003×10^{-4}	2	2.792×10^{-12}	8.4998×10^{-4}	54.545
pdb2lzf	ClassicAll	8	5.9653×10^{-4}	2	3.217×10^{-14}	2.6541×10^{-1}	
820	QuaternionAll	8	5.9653×10^{-4}	2	3.959×10^{-14}	1.2717×10^{-1}	108.709
pdb2m1a	ClassicAll	8	9.1771×10^{-14}	1	6.346×10^{-15}	1.0358×10^{-3}	
158	QuaternionAll	8	9.0451×10^{-14}	1	7.612×10^{-15}	6.6637×10^{-4}	55.437
pdb2m1j	ClassicAll	8	1.5890×10^{-13}	2	1.865×10^{-14}	1.2810×10^{-3}	
182	QuaternionAll	8	1.6894×10^{-13}	2	2.212×10^{-14}	8.1920×10^{-4}	56.375
pdb2m2y	ClassicAll	8	1.8177×10^{-3}	1	2.699×10^{-13}	7.1505×10^{-4}	
110	QuaternionAll	8	1.8177×10^{-3}	1	2.808×10^{-13}	4.6500×10^{-4}	53.774
pdb2m3f	ClassicAll	8	9.5240×10^{-14}	1	3.629×10^{-14}	8.6816×10^{-4}	
134	QuaternionAll	8	5.7597×10^{-14}	1	4.641×10^{-14}	5.6331×10^{-4}	54.117
pdb2m4j	ClassicAll	8	5.2912×10^{-4}	1	1.463×10^{-11}	7.0056×10^{-2}	
2178	QuaternionAll	8	5.2912×10^{-4}	1	1.455×10^{-11}	3.5973×10^{-2}	94.747
pdb2m8m	ClassicAll	8	6.9769×10^{-3}	5	2.424×10^{-14}	1.1181×10^{-3}	
170	QuaternionAll	8	6.9769×10^{-3}	5	3.058×10^{-14}	7.1566×10^{-4}	56.229
pdb2m8o	ClassicAll	8	4.7097×10^{-3}	5	1.798×10^{-14}	1.1217×10^{-3}	
170	QuaternionAll	8	4.7097×10^{-3}	5	2.301×10^{-14}	7.2157×10^{-4}	55.446
pdb2m97	ClassicAll	8	2.4560×10^{-12}	6	4.654×10^{-14}	2.9099×10^{-3}	
416	QuaternionAll	8	2.4592×10^{-12}	6	5.847×10^{-14}	1.8594×10^{-3}	56.502
pdb2m9g	ClassicAll	8	4.9692×10^{-12}	1	2.939×10^{-13}	1.0016×10^{-2}	
1108	QuaternionAll	8	4.9567×10^{-12}	1	3.170×10^{-13}	5.2963×10^{-3}	89.107
pdb2m9r	ClassicAll	8	3.7505×10^{-12}	1	3.537×10^{-14}	1.6064×10^{-3}	
242	QuaternionAll	8	3.6480×10^{-12}	1	4.406×10^{-14}	9.8646×10^{-4}	62.840
pdb2mdv	ClassicAll	8	4.7210×10^{-4}	2	3.178×10^{-12}	3.3404×10^{-3}	
460	QuaternionAll	8	4.7210×10^{-4}	2	3.178×10^{-12}	2.1592×10^{-3}	54.706
pdb2me1	ClassicAll	8	1.4934×10^{-4}	2	1.886×10^{-13}	1.0737×10^{-3}	
164	QuaternionAll	8	1.4934×10^{-4}	2	2.202×10^{-13}	6.8778×10^{-4}	56.114
pdb2me2	ClassicAll	8	1.3863×10^{-4}	1	3.667×10^{-13}	1.1361×10^{-3}	
164	QuaternionAll	8	1.3863×10^{-4}	1	5.098×10^{-13}	7.1731×10^{-4}	58.383
pdb2me3	ClassicAll	8	3.4823×10^{-5}	2	1.425×10^{-13}	1.0830×10^{-3}	
164	QuaternionAll	8	3.4823×10^{-5}	2	1.590×10^{-13}	6.9159×10^{-4}	56.590
pdb2me4	ClassicAll	8	2.9945×10^{-5}	2	5.547×10^{-13}	1.1386×10^{-3}	
164	QuaternionAll	8	2.9945×10^{-5}	2	6.221×10^{-13}	7.2300×10^{-4}	57.477
pdb2mg1	ClassicAll	8	4.4954×10^{-13}	6	4.400×10^{-14}	1.0749×10^{-3}	
164	QuaternionAll	8	5.4976×10^{-13}	6	5.374×10^{-14}	6.8859×10^{-4}	56.100
pdb2mg2	ClassicAll	8	1.0745×10^{-3}	6	1.831×10^{-14}	1.1148×10^{-3}	
170	QuaternionAll	8	1.0745×10^{-3}	6	2.481×10^{-14}	7.1821×10^{-4}	55.223
pdb2mg3	ClassicAll	8	6.2977×10^{-13}	6	3.542×10^{-14}	1.1292×10^{-3}	
170	QuaternionAll	8	6.7812×10^{-13}	6	4.459×10^{-14}	7.2254×10^{-4}	56.277
pdb2mh8	ClassicAll	8	4.2246×10^{-12}	6	1.547×10^{-13}	2.3125×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	4.0208×10^{-12}	6	1.883×10^{-13}	1.4856×10^{-3}	55.656
pdb2mhw	ClassicAll	8	3.6932×10^{-3}	2	6.229×10^{-14}	1.1199×10^{-3}	
164	QuaternionAll	8	3.6932×10^{-3}	2	7.130×10^{-14}	7.2828×10^{-4}	53.778
pdb2mi1	ClassicAll	4	2.1485×10^{-11}	4	1.828×10^{-12}	7.9150×10^{-4}	
84	QuaternionAll	4	2.2963×10^{-11}	4	2.053×10^{-12}	4.4975×10^{-4}	75.987
pdb2mi7	ClassicAll	8	8.0637×10^{-12}	2	6.022×10^{-13}	2.7539×10^{-3}	
404	QuaternionAll	8	8.8714×10^{-12}	2	6.815×10^{-13}	1.7510×10^{-3}	57.280
pdb2mij	ClassicAll	8	1.2077×10^{-12}	1	1.244×10^{-13}	1.5043×10^{-3}	
224	QuaternionAll	8	1.2294×10^{-12}	1	1.522×10^{-13}	9.6447×10^{-4}	55.973

Table 4: Results - continued

Problem Size	Method	$|\mathcal{X}|$	$\min_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}} \text{RMSD}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_o)$	$i : \mathbf{x_i} \sim \mathbf{x}_o$	$\text{MDE}(\mathbf{x}_i)$	Time	Improv time
pdb2mix	ClassicAll	8	3.7545×10^{-13}	1	4.816×10^{-14}	8.4472×10^{-4}	
128	QuaternionAll	8	3.4098×10^{-13}	1	4.684×10^{-14}	5.5285×10^{-4}	52.794
pdb2mj1	ClassicAll	8	2.0809×10^{-3}	1	1.309×10^{-13}	7.1806×10^{-4}	
110	QuaternionAll	8	2.0809×10^{-3}	1	1.646×10^{-13}	4.6531×10^{-4}	54.318
pdb2mj2	ClassicAll	8	3.9018×10^{-3}	2	9.775×10^{-14}	1.4385×10^{-3}	
218	QuaternionAll	8	3.9018×10^{-3}	2	1.192×10^{-13}	9.1651×10^{-4}	56.956
pdb2mjg	ClassicAll	8	1.4497×10^{-3}	2	5.503×10^{-14}	2.1163×10^{-2}	
556	QuaternionAll	8	1.4497×10^{-3}	2	6.579×10^{-14}	1.0643×10^{-2}	98.846
pdb2mji	ClassicAll	8	1.3090×10^{-11}	1	3.207×10^{-12}	5.6582×10^{-3}	
788	QuaternionAll	8	1.2949×10^{-11}	1	3.247×10^{-12}	3.6855×10^{-3}	53.528
pdb2mle	ClassicAll	8	1.6719×10^{-3}	2	1.491×10^{-13}	3.0881×10^{-3}	
434	QuaternionAll	8	1.6719×10^{-3}	2	1.535×10^{-13}	1.9706×10^{-3}	56.705
pdb2mlf	ClassicAll	8	8.3036×10^{-13}	2	9.918×10^{-14}	3.0447×10^{-3}	
434	QuaternionAll	8	8.8493×10^{-13}	2	1.127×10^{-13}	1.9552×10^{-3}	55.724
pdb2mo5	ClassicAll	8	1.9007×10^{-11}	1	1.394×10^{-12}	6.1861×10^{-3}	
854	QuaternionAll	8	1.8458×10^{-11}	1	1.403×10^{-12}	3.9989×10^{-3}	54.695
pdb2mpu	ClassicAll	8	2.5305×10^{-12}	1	9.785×10^{-14}	3.9406×10^{-3}	
554	QuaternionAll	8	2.5592×10^{-12}	1	1.016×10^{-13}	2.5394×10^{-3}	55.178
pdb2mra	ClassicAll	8	4.3616×10^{-12}	1	2.632×10^{-13}	5.9738×10^{-3}	
704	QuaternionAll	8	4.3117×10^{-12}	1	2.768×10^{-13}	3.7144×10^{-3}	60.829
pdb2msu	ClassicAll	8	3.6237×10^{-12}	1	7.813×10^{-14}	7.9014×10^{-4}	
122	QuaternionAll	8	3.6441×10^{-12}	1	8.765×10^{-14}	5.1566×10^{-4}	53.229
pdb2mty	ClassicAll	2	5.1232×10^{-12}	2	1.848×10^{-14}	6.7409×10^{-4}	
120	QuaternionAll	2	5.2129×10^{-12}	2	2.363×10^{-14}	3.7637×10^{-4}	79.103
pdb2muh	ClassicAll	8	8.0615×10^{-5}	2	2.008×10^{-13}	6.2151×10^{-4}	
98	QuaternionAll	8	8.0615×10^{-5}	2	2.279×10^{-13}	3.9926×10^{-4}	55.666
pdb2mvj	ClassicAll	2	6.1752×10^{-12}	1	1.534×10^{-13}	8.1384×10^{-4}	
156	QuaternionAll	2	6.1858×10^{-12}	1	1.647×10^{-13}	4.5906×10^{-4}	77.282
pdb2mvt	ClassicAll	8	1.5441×10^{-4}	2	6.053×10^{-12}	1.9649×10^{-3}	
284	QuaternionAll	8	1.5441×10^{-4}	2	6.225×10^{-12}	1.2743×10^{-3}	54.200
pdb2mvx	ClassicAll	8	5.8655×10^{-5}	6	1.968×10^{-10}	3.1667×10^{-2}	
2360	QuaternionAll	8	5.8655×10^{-5}	6	1.971×10^{-10}	1.7955×10^{-2}	76.369
pdb2mz6	ClassicAll	8	2.3371×10^{-10}	1	2.141×10^{-11}	4.7695×10^{-2}	
220	QuaternionAll	8	2.3374×10^{-10}	1	2.153×10^{-11}	2.4584×10^{-2}	94.004
pdb2n00	ClassicAll	8	1.2439×10^{-4}	2	2.703×10^{-13}	4.0558×10^{-3}	
572	QuaternionAll	8	1.2439×10^{-4}	2	3.466×10^{-13}	2.6001×10^{-3}	55.986
pdb2n0b	ClassicAll	2	1.0219×10^{-11}	2	7.123×10^{-13}	2.9131×10^{-4}	
60	QuaternionAll	2	1.0781×10^{-11}	2	9.477×10^{-13}	1.6266×10^{-4}	79.095
pdb2n0c	ClassicAll	2	1.0471×10^{-12}	1	1.293×10^{-13}	2.8892×10^{-4}	
60	QuaternionAll	2	9.1394×10^{-13}	1	1.682×10^{-13}	1.6213×10^{-4}	78.206
pdb2n0d	ClassicAll	2	5.2061×10^{-11}	2	3.639×10^{-12}	2.9353×10^{-4}	
60	QuaternionAll	2	5.7645×10^{-11}	2	4.540×10^{-12}	1.6380×10^{-4}	79.201
pdb2n0e	ClassicAll	2	1.1503×10^{-11}	2	3.314×10^{-12}	2.9862×10^{-4}	
60	QuaternionAll	2	1.8786×10^{-11}	2	4.286×10^{-12}	1.7032×10^{-4}	75.335
pdb2n0f	ClassicAll	2	2.2697×10^{-12}	1	3.185×10^{-13}	2.9557×10^{-4}	
60	QuaternionAll	2	2.7490×10^{-12}	1	4.023×10^{-13}	1.6613×10^{-4}	77.919
pdb2n0g	ClassicAll	2	1.4896×10^{-11}	1	8.315×10^{-13}	2.9465×10^{-4}	
60	QuaternionAll	2	1.4974×10^{-11}	1	9.618×10^{-13}	1.6859×10^{-4}	74.774
pdb2n0h	ClassicAll	2	4.1935×10^{-12}	2	7.716×10^{-13}	2.9523×10^{-4}	
60	QuaternionAll	2	4.1379×10^{-12}	2	8.755×10^{-13}	1.6501×10^{-4}	78.920
pdb2n35	ClassicAll	8	1.4478×10^{-4}	6	3.658×10^{-14}	2.1553×10^{-3}	
314	QuaternionAll	8	1.4478×10^{-4}	6	4.617×10^{-14}	1.3703×10^{-3}	57.290
pdb2n3a	ClassicAll	8	2.1457×10^{-3}	5	8.770×10^{-14}	7.4548×10^{-2}	
574	QuaternionAll	8	2.1457×10^{-3}	5	1.049×10^{-13}	3.7047×10^{-2}	101.227

19

Problem Size	Method	$\lvert\mathcal{X}\rvert$	$\min\limits_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}}\mathrm{RMSD}(\mathbf{x},\mathbf{x}_o)$	$i:\mathbf{x_i}\sim\mathbf{x}_o$	$\mathrm{MDE}(\mathbf{x}_i)$	Time	Improv time
pdb2n41	ClassicAll	8	5.9366×10^{-3}	2	1.812×10^{-13}	4.5500×10^{-3}	
638	QuaternionAll	8	5.9366×10^{-3}	2	1.836×10^{-13}	2.8766×10^{-3}	58.176
pdb2n4e	ClassicAll	8	5.1960×10^{-3}	2	1.494×10^{-13}	4.4792×10^{-3}	
638	QuaternionAll	8	5.1960×10^{-3}	2	1.687×10^{-13}	2.9218×10^{-3}	53.305
pdb2n5q	ClassicAll	8	1.1051×10^{-11}	1	1.732×10^{-12}	1.1036×10^{-3}	
164	QuaternionAll	8	9.3428×10^{-12}	1	1.745×10^{-12}	7.1961×10^{-4}	53.367
pdb2n67	ClassicAll	8	2.0736×10^{-12}	1	4.443×10^{-13}	4.0023×10^{-3}	
566	QuaternionAll	8	2.0936×10^{-12}	1	4.465×10^{-13}	2.5811×10^{-3}	55.062
pdb2n6n	ClassicAll	2	1.6681×10^{-12}	2	6.557×10^{-13}	1.1880×10^{-3}	
192	QuaternionAll	2	1.2630×10^{-12}	2	7.492×10^{-13}	6.6004×10^{-4}	79.991
pdb2n7i	ClassicAll	8	1.3998×10^{-4}	1	9.212×10^{-13}	1.5001×10^{-3}	
224	QuaternionAll	8	1.3998×10^{-4}	1	1.126×10^{-12}	9.5671×10^{-4}	56.801
pdb2n7j	ClassicAll	2	2.5110×10^{-12}	1	5.969×10^{-13}	1.8835×10^{-3}	
336	QuaternionAll	2	2.6436×10^{-12}	1	6.094×10^{-13}	1.0410×10^{-3}	80.945
pdb2n9b	ClassicAll	8	4.0200×10^{-10}	1	1.196×10^{-12}	1.1441×10^{-1}	
832	QuaternionAll	8	4.0126×10^{-10}	1	1.238×10^{-12}	5.3057×10^{-2}	115.633
pdb2na9	ClassicAll	8	2.3390×10^{-12}	1	5.440×10^{-14}	1.8226×10^{-3}	
266	QuaternionAll	8	2.3721×10^{-12}	1	6.690×10^{-14}	1.1543×10^{-3}	57.894
pdb2ndc	ClassicAll	8	3.1313×10^{-3}	2	3.365×10^{-14}	7.1114×10^{-4}	
110	QuaternionAll	8	3.1313×10^{-3}	2	4.481×10^{-14}	4.6542×10^{-4}	52.796
pdb2nde	ClassicAll	8	8.5286×10^{-5}	2	7.022×10^{-14}	7.0378×10^{-4}	
110	QuaternionAll	8	8.5286×10^{-5}	2	8.855×10^{-14}	4.5662×10^{-4}	54.126
pdb2ndk	ClassicAll	8	9.0150×10^{-5}	1	5.022×10^{-13}	1.9955×10^{-3}	
290	QuaternionAll	8	9.0150×10^{-5}	1	6.279×10^{-13}	1.2676×10^{-3}	57.420
pdb2nvj	ClassicAll	8	6.7520×10^{-3}	7	2.082×10^{-14}	1.0271×10^{-3}	
152	QuaternionAll	8	6.7520×10^{-3}	7	2.293×10^{-14}	6.7479×10^{-4}	52.215
pdb2p6j	ClassicAll	8	3.2640×10^{-13}	1	4.795×10^{-14}	2.1604×10^{-3}	
314	QuaternionAll	8	3.5480×10^{-13}	1	6.389×10^{-14}	1.3869×10^{-3}	55.769
pdb2p81	ClassicAll	8	6.8538×10^{-11}	2	7.881×10^{-13}	1.8154×10^{-3}	
266	QuaternionAll	8	6.8914×10^{-11}	2	8.226×10^{-13}	1.1458×10^{-3}	58.435
pdb2pqe	ClassicAll	8	4.1258×10^{-5}	2	1.127×10^{-11}	6.4705×10^{-3}	
896	QuaternionAll	8	4.1258×10^{-5}	2	1.248×10^{-11}	4.1703×10^{-3}	55.156
pdb2rlg	ClassicAll	2	4.8140×10^{-13}	1	5.501×10^{-14}	5.5687×10^{-4}	
108	QuaternionAll	2	5.3066×10^{-13}	1	6.973×10^{-14}	3.1140×10^{-4}	78.828
pdb2rlh	ClassicAll	2	1.0750×10^{-12}	1	4.772×10^{-14}	5.6031×10^{-4}	
108	QuaternionAll	2	1.0423×10^{-12}	1	5.801×10^{-14}	3.1601×10^{-4}	77.306
pdb2rmy	ClassicAll	8	1.2240×10^{-4}	1	1.872×10^{-13}	1.3607×10^{-3}	
206	QuaternionAll	8	1.2240×10^{-4}	1	2.498×10^{-13}	8.7649×10^{-4}	55.244
pdb2rnd	ClassicAll	128	3.4031×10^{-12}	33	2.626×10^{-13}	2.2644×10^{-2}	
206	QuaternionAll	128	3.8842×10^{-12}	33	3.569×10^{-13}	1.2864×10^{-2}	76.027
pdb2roo	ClassicAll	8	3.3639×10^{-4}	6	2.933×10^{-12}	3.1899×10^{-3}	
260	QuaternionAll	8	3.3639×10^{-4}	6	3.525×10^{-12}	1.8971×10^{-3}	68.144
pdb2rql	ClassicAll	8	9.9510×10^{-11}	1	2.345×10^{-12}	3.9594×10^{-3}	
572	QuaternionAll	8	1.0013×10^{-10}	1	2.496×10^{-12}	2.5420×10^{-3}	55.758
pdb2rut	ClassicAll	8	2.0579×10^{-13}	2	4.389×10^{-14}	1.4384×10^{-3}	
218	QuaternionAll	8	4.0527×10^{-13}	2	5.013×10^{-14}	9.2275×10^{-4}	55.878
pdb2ruv	ClassicAll	8	5.4278×10^{-13}	2	5.775×10^{-14}	1.5078×10^{-3}	
224	QuaternionAll	8	6.5510×10^{-13}	2	7.404×10^{-14}	9.5680×10^{-4}	57.593
pdb2rux	ClassicAll	8	3.6084×10^{-3}	1	2.671×10^{-14}	1.4544×10^{-3}	
218	QuaternionAll	8	3.6084×10^{-3}	1	3.016×10^{-14}	9.3587×10^{-4}	55.411
pdb2ruy	ClassicAll	8	4.1535×10^{-13}	1	1.968×10^{-14}	1.4661×10^{-3}	
224	QuaternionAll	8	3.5981×10^{-13}	1	2.387×10^{-14}	9.3448×10^{-4}	56.889
pdb2rv3	ClassicAll	8	3.0630×10^{-4}	1	3.656×10^{-14}	1.4407×10^{-3}	
218	QuaternionAll	8	3.0630×10^{-4}	1	4.118×10^{-14}	9.2552×10^{-4}	55.664

Table 4: Results - continued

Problem Size	Method	$|\mathcal{X}|$	$\min\limits_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}}\text{RMSD}(\mathbf{x},\mathbf{x}_o)$	$i:\mathbf{x_i}\sim\mathbf{x}_o$	$\text{MDE}(\mathbf{x}_i)$	Time	Improv time
pdb2rv5	ClassicAll	8	8.6519×10^{-4}	1	1.145×10^{-14}	1.4125×10^{-3}	
212	QuaternionAll	8	8.6519×10^{-4}	1	1.338×10^{-14}	9.0624×10^{-4}	55.864
pdb2y4q	ClassicAll	8	4.6451×10^{-11}	2	1.410×10^{-12}	3.3001×10^{-3}	
476	QuaternionAll	8	4.6324×10^{-11}	2	1.451×10^{-12}	2.1201×10^{-3}	55.657

2 Visual analysis

2.1 BP-One

2.2 BP-All