

Table 1: Results

	Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1a57	Classic	2.813×10^{-18}			1.1307×10^{-2}	
	Quaternion	2.786×10^{-18}	1.8861×10^{-12}		6.3393×10^{-3}	78.363 62
pdb1b4c	Classic	1.432×10^{-11}			1.0380×10^{-2}	
	Quaternion	1.432×10^{-11}	1.0913×10^{-12}		5.7853×10^{-3}	79.413 32
pdb1ba5	Classic	3.546×10^{-21}			7.6887×10^{-4}	
	Quaternion	3.767×10^{-21}	4.1376×10^{-12}		5.1396×10^{-4}	49.596 95
pdb1d1n	Classic	3.794×10^{-11}			1.2602×10^{-3}	
	Quaternion	3.794×10^{-11}	1.3063×10^{-12}		8.5907×10^{-4}	46.699 38
pdb1dp3	Classic	1.810×10^{-10}			1.4761×10^{-3}	
	Quaternion	1.810×10^{-10}	1.4158×10^{-12}		9.4509×10^{-4}	56.189 51
pdb1du1	Classic	8.393×10^{-22}			2.4629×10^{-4}	
	Quaternion	2.570×10^{-21}	1.2376×10^{-12}		1.6174×10^{-4}	52.274 64
pdb1eii	Classic	1.054×10^{-18}			2.4625×10^{-3}	
	Quaternion	9.664×10^{-19}	1.1331×10^{-11}		1.6236×10^{-3}	51.675 97
pdb1fcl	Classic	1.465×10^{-10}			3.4758×10^{-3}	
	Quaternion	1.465×10^{-10}	8.2109×10^{-13}		2.1915×10^{-3}	58.600 80
pdb1fd6	Classic	2.932×10^{-20}			1.5947×10^{-3}	
	Quaternion	2.882×10^{-20}	3.3846×10^{-13}		1.0197×10^{-3}	56.382 66
pdb1hf9	Classic	1.631×10^{-10}			7.0223×10^{-1}	
	Quaternion	1.631×10^{-10}	3.9588×10^{-12}		4.1865×10^{-1}	67.736 22
pdb1i2u	Classic	4.584×10^{-22}			6.0379×10^{-4}	
	Quaternion	4.245×10^{-22}	1.5136×10^{-13}		3.9849×10^{-4}	51.520 62
pdb1i2v	Classic	2.720×10^{-22}			6.6118×10^{-4}	
	Quaternion	2.818×10^{-22}	6.9127×10^{-14}		4.3543×10^{-4}	51.843 39
pdb1ijc	Classic	2.599×10^{-10}			8.1068×10^{-2}	
	Quaternion	2.599×10^{-10}	4.2252×10^{-12}		4.7364×10^{-2}	71.158 04
pdb1jlz	Classic	3.674×10^{-22}			2.9548×10^{-4}	
	Quaternion	3.399×10^{-22}	1.3105×10^{-12}		1.9356×10^{-4}	52.654 04
pdb1jw3	Classic	6.754×10^{-22}			2.9590×10^{-3}	
	Quaternion	6.597×10^{-22}	3.9013×10^{-13}		1.9363×10^{-3}	52.817 71
pdb1k0v	Classic	7.977×10^{-23}			9.5839×10^{-4}	
	Quaternion	7.593×10^{-23}	1.3433×10^{-13}		6.4509×10^{-4}	48.566 25
pdb1k2h	Classic	4.294×10^{-12}			2.0881×10^{-2}	
	Quaternion	4.294×10^{-12}	2.2036×10^{-13}		1.1979×10^{-2}	74.313 36
pdb1k36	Classic	5.937×10^{-19}			4.2150×10^{-2}	
	Quaternion	8.594×10^{-19}	2.8981×10^{-11}		2.4718×10^{-2}	70.523 85
pdb1k37	Classic	5.384×10^{-22}			2.0118×10^{-3}	
	Quaternion	5.917×10^{-22}	1.5479×10^{-13}		1.2776×10^{-3}	57.467 37
pdb1kuw	Classic	5.108×10^{-24}			1.2148×10^{-4}	
	Quaternion	7.241×10^{-24}	7.3457×10^{-14}		8.1357×10^{-5}	49.321 51
pdb1kz0	Classic	1.262×10^{-24}			1.8929×10^{-4}	
	Quaternion	2.406×10^{-24}	2.4335×10^{-13}		1.2479×10^{-4}	51.693 30
pdb1kz2	Classic	2.013×10^{-25}			1.9988×10^{-4}	
	Quaternion	4.170×10^{-25}	2.6112×10^{-14}		1.3181×10^{-4}	51.638 88
pdb1kz5	Classic	1.468×10^{-24}			1.4530×10^{-4}	
	Quaternion	2.012×10^{-24}	4.8348×10^{-14}		9.6127×10^{-5}	51.151 08

Table 2: Results - continued

	Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1lvz	Classic	1.771×10^{-10}			1.2531×10^{-4}	
	Quaternion	1.771×10^{-10}		7.9621×10^{-14}	8.4107×10^{-5}	48.988 79
pdb1m4e	Classic	1.150×10^{-10}			2.2728×10^{-4}	
	Quaternion	1.150×10^{-10}		1.0477×10^{-13}	1.5068×10^{-4}	50.834 20
pdb1ma2	Classic	7.245×10^{-10}			1.7719×10^{-3}	
	Quaternion	7.245×10^{-10}		4.3233×10^{-13}	1.1014×10^{-3}	60.875 02
pdb1ma4	Classic	1.435×10^{-10}			5.2937×10^{-4}	
	Quaternion	1.435×10^{-10}		2.4225×10^{-13}	3.3598×10^{-4}	57.557 14
pdb1ma5	Classic	5.542×10^{-22}			2.0042×10^{-4}	
	Quaternion	6.385×10^{-22}		5.0234×10^{-13}	1.3170×10^{-4}	52.178 07
pdb1ma6	Classic	3.155×10^{-11}			1.8963×10^{-4}	
	Quaternion	3.155×10^{-11}		3.3030×10^{-12}	1.2728×10^{-4}	48.983 74
pdb1mpe	Classic	1.591×10^{-11}			4.8677×10^{-1}	
	Quaternion	1.591×10^{-11}		7.1211×10^{-13}	2.8441×10^{-1}	71.154 37
pdb1nd9	Classic	1.316×10^{-22}			1.8387×10^{-3}	
	Quaternion	2.085×10^{-22}		4.7137×10^{-13}	1.1682×10^{-3}	57.397 02
pdb1ne5	Classic	2.810×10^{-21}			9.6073×10^{-4}	
	Quaternion	3.265×10^{-21}		7.5582×10^{-13}	6.2023×10^{-4}	54.899 92
pdb1nmj	Classic	1.047×10^{-25}			3.5098×10^{-4}	
	Quaternion	1.220×10^{-25}		1.3921×10^{-14}	2.3363×10^{-4}	50.226 85
pdb1o53	Classic	9.038×10^{-11}			1.9371×10^{-4}	
	Quaternion	9.038×10^{-11}		6.4225×10^{-13}	1.2824×10^{-4}	51.045 46
pdb1oqp	Classic	1.876×10^{-23}			3.9788×10^{-3}	
	Quaternion	2.226×10^{-23}		9.0066×10^{-14}	2.5275×10^{-3}	57.423 77
pdb1plw	Classic	4.274×10^{-25}			5.9413×10^{-5}	
	Quaternion	4.615×10^{-25}		4.9118×10^{-14}	3.9891×10^{-5}	48.940 22
pdb1plx	Classic	3.214×10^{-24}			5.6405×10^{-5}	
	Quaternion	4.865×10^{-24}		1.7973×10^{-13}	3.8035×10^{-5}	48.297 62
pdb1pv0	Classic	1.092×10^{-10}			6.6000×10^{-4}	
	Quaternion	1.092×10^{-10}		1.0039×10^{-13}	4.3189×10^{-4}	52.817 26
pdb1qlk	Classic	5.745×10^{-11}			5.1799×10^{-2}	
	Quaternion	5.745×10^{-11}		1.2720×10^{-12}	3.0357×10^{-2}	70.634 65
pdb1r57	Classic	1.569×10^{-12}			1.6876×10^{-3}	
	Quaternion	1.569×10^{-12}		1.6053×10^{-13}	1.1166×10^{-3}	51.140 06
pdb1ry3	Classic	2.183×10^{-10}			9.2252×10^{-4}	
	Quaternion	2.183×10^{-10}		5.4489×10^{-13}	6.0444×10^{-4}	52.624 80
pdb1s4h	Classic	7.638×10^{-13}			1.4137×10^{-4}	
	Quaternion	7.638×10^{-13}		1.1103×10^{-12}	9.3650×10^{-5}	50.953 55
pdb1s4j	Classic	3.063×10^{-10}			1.5947×10^{-4}	
	Quaternion	3.063×10^{-10}		1.6581×10^{-13}	1.0539×10^{-4}	51.314 91
pdb1s6j	Classic	9.709×10^{-11}			3.9079×10^{-3}	
	Quaternion	9.709×10^{-11}		1.3676×10^{-12}	2.4661×10^{-3}	58.466 94
pdb1sa8	Classic	5.626×10^{-21}			1.3532×10^{-3}	
	Quaternion	6.708×10^{-21}		1.0370×10^{-12}	9.1643×10^{-4}	47.655 95
pdb1t2y	Classic	3.418×10^{-23}			3.2326×10^{-4}	

Table 2: Results - continued

	Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
		Quaternion	6.168×10^{-23}	2.3861×10^{-13}	2.1196×10^{-4}	52.513 25
pdb1t5q	Classic	8.677×10^{-25}			3.2821×10^{-4}	
	Quaternion	1.218×10^{-24}	5.3231×10^{-14}		2.1790×10^{-4}	50.625 07
pdb1tot	Classic	6.421×10^{-24}			6.6164×10^{-4}	
	Quaternion	8.295×10^{-24}	2.8392×10^{-14}		4.4372×10^{-4}	49.112 05
pdb1v6r	Classic	1.358×10^{-21}			2.5952×10^{-4}	
	Quaternion	1.214×10^{-21}	3.1917×10^{-13}		1.7064×10^{-4}	52.087 33
pdb1v92	Classic	2.234×10^{-23}			5.8762×10^{-4}	
	Quaternion	2.533×10^{-23}	5.6062×10^{-14}		3.8809×10^{-4}	51.412 54
pdb1vd7	Classic	2.384×10^{-10}			2.8397×10^{-4}	
	Quaternion	2.384×10^{-10}	5.6018×10^{-13}		1.8742×10^{-4}	51.514 62
pdb1vd9	Classic	1.054×10^{-9}			3.6497×10^{-4}	
	Quaternion	1.054×10^{-9}	1.3255×10^{-12}		2.3543×10^{-4}	55.025 12
pdb1vdb	Classic	4.381×10^{-10}			2.6826×10^{-4}	
	Quaternion	4.381×10^{-10}	3.8541×10^{-13}		1.7664×10^{-4}	51.871 34
pdb1vpc	Classic	8.186×10^{-26}			5.5492×10^{-4}	
	Quaternion	9.792×10^{-26}	8.5436×10^{-15}		3.6938×10^{-4}	50.227 34
pdb1wnk	Classic	4.998×10^{-20}			2.7799×10^{-4}	
	Quaternion	5.984×10^{-20}	2.2335×10^{-11}		1.8375×10^{-4}	51.292 55
pdb1wo4	Classic	3.925×10^{-21}			1.7548×10^{-3}	
	Quaternion	2.918×10^{-21}	2.3523×10^{-12}		1.0849×10^{-3}	61.746 05
pdb1wo5	Classic	4.057×10^{-11}			6.1364×10^{-4}	
	Quaternion	4.057×10^{-11}	4.9000×10^{-12}		3.9099×10^{-4}	56.945 15
pdb1x60	Classic	3.853×10^{-11}			1.3587×10^{-2}	
	Quaternion	3.853×10^{-11}	9.7171×10^{-13}		7.5413×10^{-3}	80.162 59
pdb1x9v	Classic	1.060×10^{-12}			2.6964	
	Quaternion	1.060×10^{-12}	1.3466×10^{-13}		1.6019	68.329 87
pdb1y5c	Classic	3.720×10^{-11}			1.2337×10^{-4}	
	Quaternion	3.720×10^{-11}	2.9129×10^{-13}		8.1129×10^{-5}	52.062 15
pdb1yx7	Classic	1.457×10^{-10}			8.0395×10^{-3}	
	Quaternion	1.457×10^{-10}	7.3116×10^{-12}		5.0128×10^{-3}	60.378 70
pdb1yx8	Classic	5.204×10^{-11}			4.0991×10^{-3}	
	Quaternion	5.204×10^{-11}	1.0853×10^{-11}		2.5921×10^{-3}	58.138 11
pdb1yxr	Classic	1.975×10^{-11}			1.8790×10^{-3}	
	Quaternion	1.975×10^{-11}	3.2120×10^{-13}		1.2184×10^{-3}	54.214 09
pdb2a2y	Classic	3.781×10^{-21}			2.0035×10^{-1}	
	Quaternion	3.629×10^{-21}	3.7416×10^{-13}		1.1322×10^{-1}	76.960 82
pdb2a4j	Classic	3.676×10^{-24}			1.3902×10^{-3}	
	Quaternion	3.858×10^{-24}	1.4394×10^{-14}		9.3247×10^{-4}	49.082 49
pdb2adn	Classic	1.093×10^{-11}			4.5672×10^{-1}	
	Quaternion	1.093×10^{-11}	2.4948×10^{-12}		2.6584×10^{-1}	71.800 27
pdb2ajj	Classic	3.048×10^{-10}			3.3025×10^{-4}	
	Quaternion	3.048×10^{-10}	1.2387×10^{-13}		2.1780×10^{-4}	51.630 38
pdb2ajm	Classic	2.564×10^{-10}			3.5380×10^{-4}	
	Quaternion	2.564×10^{-10}	8.8381×10^{-13}		2.3000×10^{-4}	53.828 51

Table 2: Results - continued

	Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2ajn	Classic	1.597×10^{-10}			3.4931×10^{-4}	
	Quaternion	1.597×10^{-10}		2.0883×10^{-13}	2.2843×10^{-4}	52.919 28
pdb2ajo	Classic	2.564×10^{-10}			3.5190×10^{-4}	
	Quaternion	2.564×10^{-10}		8.8381×10^{-13}	2.3055×10^{-4}	52.634 20
pdb2akk	Classic	2.396×10^{-23}			2.3780×10^{-3}	
	Quaternion	2.209×10^{-23}		1.1725×10^{-13}	1.5174×10^{-3}	56.709 66
pdb2bzb	Classic	5.648×10^{-23}			2.0534×10^{-2}	
	Quaternion	8.249×10^{-23}		1.5097×10^{-13}	1.1920×10^{-2}	72.275 18
pdb2c0s	Classic	6.258×10^{-22}			8.3863×10^{-4}	
	Quaternion	5.562×10^{-22}		7.2067×10^{-13}	5.5903×10^{-4}	50.016 73
pdb2dci	Classic	3.476×10^{-25}			2.1926×10^{-4}	
	Quaternion	4.611×10^{-25}		1.3479×10^{-13}	1.4645×10^{-4}	49.718 17
pdb2eem	Classic	1.331×10^{-21}			8.3248×10^{-4}	
	Quaternion	1.376×10^{-21}		4.0208×10^{-13}	5.2864×10^{-4}	57.475 19
pdb2fva	Classic	6.795×10^{-21}			2.2677×10^{-2}	
	Quaternion	7.377×10^{-21}		1.5803×10^{-12}	1.3212×10^{-2}	71.638 97
pdb2fvf	Classic	4.700×10^{-22}			1.1389×10^{-2}	
	Quaternion	4.791×10^{-22}		2.8750×10^{-13}	6.3599×10^{-3}	79.069 50
pdb2fxz	Classic	7.197×10^{-10}			1.6402×10^{-4}	
	Quaternion	7.197×10^{-10}		1.7350×10^{-12}	1.0832×10^{-4}	51.425 70
pdb2g9j	Classic	4.109×10^{-19}			1.2445×10^{-1}	
	Quaternion	4.425×10^{-19}		2.1668×10^{-12}	7.3061×10^{-2}	70.338 77
pdb2g9l	Classic	3.353×10^{-24}			4.5785×10^{-4}	
	Quaternion	5.316×10^{-24}		2.8081×10^{-13}	2.9977×10^{-4}	52.731 65
pdb2h5m	Classic	3.296×10^{-12}			1.4216×10^{-3}	
	Quaternion	3.296×10^{-12}		4.0081×10^{-12}	9.5106×10^{-4}	49.479 32
pdb2hep	Classic	1.540×10^{-20}			1.2278×10^{-3}	
	Quaternion	1.589×10^{-20}		5.5848×10^{-13}	7.6946×10^{-4}	59.571 36
pdb2jmy	Classic	2.970×10^{-21}			1.8695×10^{-4}	
	Quaternion	2.975×10^{-21}		5.0812×10^{-13}	1.2343×10^{-4}	51.462 33
pdb2jn5	Classic	2.618×10^{-13}			1.7306×10^{-4}	
	Quaternion	2.618×10^{-13}		1.4394×10^{-11}	1.1298×10^{-4}	53.177 47
pdb2jnk	Classic	7.596×10^{-12}			3.3034×10^{-3}	
	Quaternion	7.596×10^{-12}		3.7973×10^{-13}	2.1322×10^{-3}	54.928 53
pdb2jpn	Classic	1.441×10^{-22}			1.5704×10^{-3}	
	Quaternion	1.468×10^{-22}		1.9605×10^{-13}	1.0296×10^{-3}	52.520 10
pdb2jua	Classic	5.614×10^{-18}			1.5828×10^{-3}	
	Quaternion	6.136×10^{-18}		1.4391×10^{-11}	1.0529×10^{-3}	50.329 15
pdb2jvd	Classic	3.772×10^{-24}			6.1926×10^{-4}	
	Quaternion	3.831×10^{-24}		2.1712×10^{-14}	4.0308×10^{-4}	53.633 10
pdb2jwe	Classic	8.005×10^{-11}			1.2295	
	Quaternion	8.005×10^{-11}		1.1093×10^{-12}	7.1873×10^{-1}	71.059 48
pdb2jws	Classic	7.594×10^{-11}			7.5918×10^{-4}	
	Quaternion	7.594×10^{-11}		2.9470×10^{-13}	4.9789×10^{-4}	52.480 68
pdb2jwu	Classic	5.598×10^{-11}			2.6866×10^{-3}	

Table 2: Results - continued

	Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
		Quaternion	5.598×10^{-11}	6.2848×10^{-13}	1.6929×10^{-3}	58.699 98
pdb2jxf	Classic	2.087×10^{-11}			3.7257×10^{-4}	
	Quaternion	2.087×10^{-11}		6.1180×10^{-13}	2.4408×10^{-4}	52.646 51
pdb2jz5	Classic	3.724×10^{-22}			2.0711×10^{-3}	
	Quaternion	3.469×10^{-22}		1.7635×10^{-13}	1.3349×10^{-3}	55.147 30
pdb2k2a	Classic	1.403×10^{-24}			9.5943×10^{-4}	
	Quaternion	2.466×10^{-24}		1.3435×10^{-13}	6.4273×10^{-4}	49.274 88
pdb2k36	Classic	1.163×10^{-11}			1.8227×10^{-3}	
	Quaternion	1.163×10^{-11}		9.1745×10^{-14}	1.2356×10^{-3}	47.517 67
pdb2k37	Classic	4.035×10^{-23}			8.2145×10^{-4}	
	Quaternion	5.985×10^{-23}		4.0204×10^{-13}	5.3997×10^{-4}	52.128 45
pdb2k3i	Classic	6.004×10^{-22}			1.8738×10^{-3}	
	Quaternion	6.345×10^{-22}		2.4790×10^{-13}	1.2308×10^{-3}	52.235 74
pdb2k6s	Classic	7.112×10^{-23}			6.8926×10^{-3}	
	Quaternion	9.897×10^{-23}		4.8726×10^{-13}	4.2450×10^{-3}	62.372 47
pdb2k7o	Classic	1.164×10^{-22}			6.4288×10^{-3}	
	Quaternion	1.121×10^{-22}		4.6393×10^{-13}	4.0882×10^{-3}	57.254 14
pdb2kbm	Classic	7.942×10^{-22}			2.6145	
	Quaternion	7.754×10^{-22}		2.6963×10^{-13}	1.5122	72.896 51
pdb2kdh	Classic	1.695×10^{-10}			1.7846×10^{-3}	
	Quaternion	1.695×10^{-10}		7.7869×10^{-11}	1.1561×10^{-3}	54.369 78
pdb2kdl	Classic	4.907×10^{-11}			1.8305×10^{-3}	
	Quaternion	4.907×10^{-11}		3.2157×10^{-13}	1.1429×10^{-3}	60.159 64
pdb2kdm	Classic	5.397×10^{-11}			1.1621×10^{-3}	
	Quaternion	5.397×10^{-11}		9.7911×10^{-13}	7.5139×10^{-4}	54.654 84
pdb2kdp	Classic	2.228×10^{-22}			9.0836×10^{-4}	
	Quaternion	2.410×10^{-22}		1.0772×10^{-13}	6.0087×10^{-4}	51.175 14
pdb2kdr	Classic	2.762×10^{-11}			3.5570×10^{-4}	
	Quaternion	2.762×10^{-11}		6.3191×10^{-14}	2.3252×10^{-4}	52.978 15
pdb2kes	Classic	3.442×10^{-24}			6.5591×10^{-4}	
	Quaternion	3.742×10^{-24}		2.3286×10^{-14}	4.2503×10^{-4}	54.320 36
pdb2kib	Classic	7.789×10^{-21}			9.0020×10^{-1}	
	Quaternion	7.661×10^{-21}		1.3388×10^{-12}	5.4571×10^{-1}	64.959 95
pdb2kjin	Classic	6.977×10^{-14}			3.1725×10^{-4}	
	Quaternion	6.977×10^{-14}		1.3817×10^{-13}	2.0793×10^{-4}	52.574 04
pdb2kjo	Classic	1.095×10^{-10}			2.9379×10^{-4}	
	Quaternion	1.095×10^{-10}		6.4697×10^{-14}	1.9536×10^{-4}	50.380 57
pdb2kjr	Classic	5.549×10^{-10}			1.2604×10^{-2}	
	Quaternion	5.549×10^{-10}		4.1183×10^{-13}	7.0006×10^{-3}	80.045 91
pdb2kko	Classic	6.417×10^{-23}			1.2770×10^{-2}	
	Quaternion	6.445×10^{-23}		2.9766×10^{-14}	7.0428×10^{-3}	81.323 44
pdb2kl5	Classic	9.555×10^{-23}			1.5096×10^{-3}	
	Quaternion	1.109×10^{-22}		1.3796×10^{-13}	1.0143×10^{-3}	48.832 22
pdb2klz	Classic	6.371×10^{-25}			6.1110×10^{-4}	
	Quaternion	8.338×10^{-25}		6.4874×10^{-14}	3.9873×10^{-4}	53.259 12

Table 2: Results - continued

	Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2ko1	Classic	1.529×10^{-12}			1.7957×10^{-2}	
	Quaternion	1.529×10^{-12}	8.2369×10^{-13}		1.0214×10^{-2}	75.800 85
pdb2koz	Classic	2.708×10^{-10}			5.3960×10^{-4}	
	Quaternion	2.708×10^{-10}	8.4351×10^{-13}		3.5227×10^{-4}	53.176 38
pdb2kp0	Classic	1.278×10^{-11}			1.2744×10^{-3}	
	Quaternion	1.278×10^{-11}	5.5654×10^{-12}		7.9691×10^{-4}	59.920 89
pdb2ksg	Classic	6.462×10^{-25}			5.6897×10^{-4}	
	Quaternion	8.842×10^{-25}	2.4678×10^{-14}		3.7533×10^{-4}	51.591 88
pdb2kt8	Classic	3.464×10^{-20}			3.7040×10^{-3}	
	Quaternion	3.826×10^{-20}	7.1394×10^{-13}		2.3359×10^{-3}	58.563 77
pdb2kuh	Classic	9.257×10^{-25}			8.9662×10^{-4}	
	Quaternion	1.163×10^{-24}	4.0485×10^{-14}		5.9829×10^{-4}	49.863 65
pdb2kwh	Classic	8.244×10^{-23}			7.6276×10^{-4}	
	Quaternion	1.133×10^{-22}	2.9549×10^{-13}		4.9908×10^{-4}	52.833 61
pdb2kxa	Classic	8.576×10^{-11}			2.6353×10^{-4}	
	Quaternion	8.576×10^{-11}	3.8041×10^{-13}		1.7827×10^{-4}	47.825 92
pdb2kyb	Classic	4.276×10^{-12}			4.7917×10^{-2}	
	Quaternion	4.276×10^{-12}	2.6711×10^{-12}		2.8516×10^{-2}	68.032 95
pdb2l3m	Classic	3.116×10^{-21}			8.7005×10^{-4}	
	Quaternion	2.523×10^{-21}	6.9725×10^{-13}		5.7461×10^{-4}	51.415 83
pdb2l3n	Classic	8.484×10^{-24}			5.3384×10^{-3}	
	Quaternion	8.131×10^{-24}	4.4517×10^{-14}		3.3484×10^{-3}	59.431 77
pdb2l45	Classic	2.812×10^{-25}			3.2502×10^{-4}	
	Quaternion	4.631×10^{-25}	8.5325×10^{-14}		2.0877×10^{-4}	55.687 02
pdb2l5r	Classic	6.534×10^{-25}			3.1644×10^{-4}	
	Quaternion	9.282×10^{-25}	1.4398×10^{-14}		2.0937×10^{-4}	51.140 20
pdb2l6q	Classic	1.665×10^{-10}			1.8149×10^{-3}	
	Quaternion	1.665×10^{-10}	1.5379×10^{-10}		1.1495×10^{-3}	57.892 24
pdb2l6r	Classic	3.639×10^{-11}			8.1438×10^{-4}	
	Quaternion	3.639×10^{-11}	2.4193×10^{-11}		5.3662×10^{-4}	51.760 74
pdb2l98	Classic	4.508×10^{-22}			2.5711×10^{-3}	
	Quaternion	4.664×10^{-22}	8.9102×10^{-13}		1.6140×10^{-3}	59.299 95
pdb2lci	Classic	3.159×10^{-22}			2.0171×10^{-3}	
	Quaternion	2.617×10^{-22}	8.2767×10^{-14}		1.3367×10^{-3}	50.904 59
pdb2lde	Classic	6.300×10^{-25}			2.9557×10^{-4}	
	Quaternion	8.122×10^{-25}	4.1691×10^{-14}		1.9553×10^{-4}	51.161 19
pdb2le2	Classic	1.089×10^{-22}			1.7669×10^{-2}	
	Quaternion	1.028×10^{-22}	7.7661×10^{-14}		9.9639×10^{-3}	77.325 60
pdb2le7	Classic	2.062×10^{-25}			2.3367×10^{-4}	
	Quaternion	3.381×10^{-25}	3.9789×10^{-14}		1.5418×10^{-4}	51.562 18
pdb2ler	Classic	5.612×10^{-26}			1.2580×10^{-4}	
	Quaternion	6.601×10^{-26}	2.1465×10^{-14}		8.3748×10^{-5}	50.210 75
pdb2lgi	Classic	3.579×10^{-21}			1.4732×10^{-3}	
	Quaternion	3.437×10^{-21}	1.8917×10^{-13}		9.4890×10^{-4}	55.258 63
pdb2lhc	Classic	1.256×10^{-10}			1.2511×10^{-3}	

Table 2: Results - continued

	Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2lhd	Quaternion		1.256×10^{-10}	2.0329×10^{-12}	7.9525×10^{-4}	57.326 28
	Classic		7.034×10^{-21}		6.2545×10^{-3}	
pdb2lhe	Quaternion		6.544×10^{-21}	2.3902×10^{-12}	3.8858×10^{-3}	60.958 67
	Classic		9.704×10^{-18}		2.2600×10^{-3}	
pdb2lhg	Quaternion		9.708×10^{-18}	4.8488×10^{-13}	1.4158×10^{-3}	59.630 38
	Classic		1.568×10^{-23}		7.1222×10^{-4}	
pdb2lix	Quaternion		1.696×10^{-23}	5.9754×10^{-14}	4.7832×10^{-4}	48.900 01
	Classic		4.261×10^{-24}		3.2528×10^{-4}	
pdb2lld	Quaternion		5.093×10^{-24}	7.8975×10^{-14}	2.1445×10^{-4}	51.685 04
	Classic		1.086×10^{-22}		5.0450×10^{-4}	
pdb2lm9	Quaternion		1.061×10^{-22}	2.2642×10^{-13}	3.3912×10^{-4}	48.765 28
	Classic		2.032×10^{-23}		1.1814×10^{-3}	
pdb2lmf	Quaternion		2.297×10^{-23}	1.5079×10^{-13}	7.9263×10^{-4}	49.048 48
	Classic		3.934×10^{-11}		2.5896×10^{-4}	
pdb2ln3	Quaternion		3.934×10^{-11}	6.4067×10^{-14}	1.7311×10^{-4}	49.589 86
	Classic		6.400×10^{-23}		1.0443×10^{-3}	
pdb2lo2	Quaternion		6.609×10^{-23}	8.4114×10^{-14}	6.9931×10^{-4}	49.327 84
	Classic		3.105×10^{-25}		4.4881×10^{-4}	
pdb2lqp	Quaternion		4.558×10^{-25}	3.6944×10^{-14}	2.9627×10^{-4}	51.490 05
	Classic		1.441×10^{-10}		8.7004×10^{-4}	
pdb2lr0	Quaternion		1.441×10^{-10}	4.7992×10^{-13}	5.8176×10^{-4}	49.554 32
	Classic		8.958×10^{-20}		2.7774×10^{-3}	
pdb2lrh	Quaternion		8.036×10^{-20}	6.0485×10^{-13}	1.8014×10^{-3}	54.175 75
	Classic		2.070×10^{-11}		3.3342×10^{-3}	
pdb2ls9	Quaternion		2.070×10^{-11}	3.1935×10^{-13}	2.1277×10^{-3}	56.706 56
	Classic		1.279×10^{-23}		2.6809×10^{-4}	
pdb2lsa	Quaternion		2.226×10^{-23}	3.7128×10^{-13}	1.7877×10^{-4}	49.966 72
	Classic		2.870×10^{-24}		2.6687×10^{-4}	
pdb2lss	Quaternion		4.764×10^{-24}	1.5385×10^{-13}	1.7743×10^{-4}	50.405 51
	Classic		2.190×10^{-23}		8.5190×10^{-4}	
pdb2lt3	Quaternion		3.006×10^{-23}	1.6926×10^{-13}	5.7598×10^{-4}	47.903 93
	Classic		6.850×10^{-23}		1.4141×10^{-3}	
pdb2lu6	Quaternion		6.975×10^{-23}	5.2634×10^{-14}	9.6290×10^{-4}	46.859 70
	Classic		4.905×10^{-26}		1.6714×10^{-4}	
pdb2lwa	Quaternion		5.585×10^{-26}	4.1890×10^{-15}	1.0980×10^{-4}	52.216 74
	Classic		1.578×10^{-10}		8.5808×10^{-4}	
pdb2lx0	Quaternion		1.578×10^{-10}	8.1907×10^{-13}	5.7209×10^{-4}	49.989 73
	Classic		6.031×10^{-11}		4.0696×10^{-4}	
pdb2lxb	Quaternion		6.031×10^{-11}	2.2251×10^{-13}	2.6875×10^{-4}	51.427 25
	Classic		2.298×10^{-22}		2.7812×10^{-3}	
pdb2lxy	Quaternion		1.990×10^{-22}	1.6837×10^{-13}	1.8431×10^{-3}	50.898 81
	Classic		1.602×10^{-10}		5.9755×10^{-3}	
pdb2lxz	Quaternion		1.602×10^{-10}	1.5972×10^{-12}	3.7232×10^{-3}	60.495 04
	Classic		1.239×10^{-20}		4.1928×10^{-3}	
	Quaternion		1.591×10^{-20}	1.9895×10^{-12}	2.5872×10^{-3}	62.059 75
	Classic					

Table 2: Results - continued

	Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2lzf	Classic	1.185×10^{-23}			5.6505×10^{-2}	
	Quaternion	1.232×10^{-23}		1.2991×10^{-13}	3.1515×10^{-2}	79.298 59
pdb2m1a	Classic	1.280×10^{-26}			3.7220×10^{-4}	
	Quaternion	1.526×10^{-26}		6.5801×10^{-15}	2.4318×10^{-4}	53.050 87
pdb2m1j	Classic	2.536×10^{-25}			3.8262×10^{-4}	
	Quaternion	2.900×10^{-25}		6.6915×10^{-14}	2.5216×10^{-4}	51.733 00
pdb2m2y	Classic	1.129×10^{-22}			2.1534×10^{-4}	
	Quaternion	1.161×10^{-22}		1.4386×10^{-13}	1.4143×10^{-4}	52.262 80
pdb2m3f	Classic	9.684×10^{-25}			2.4722×10^{-4}	
	Quaternion	1.447×10^{-24}		5.8107×10^{-14}	1.6429×10^{-4}	50.484 52
pdb2m8m	Classic	6.232×10^{-25}			3.2007×10^{-4}	
	Quaternion	8.684×10^{-25}		1.1738×10^{-13}	2.1351×10^{-4}	49.911 01
pdb2m8o	Classic	1.061×10^{-25}			3.1227×10^{-4}	
	Quaternion	1.792×10^{-25}		2.4755×10^{-14}	2.0978×10^{-4}	48.857 47
pdb2m97	Classic	1.278×10^{-23}			8.4008×10^{-4}	
	Quaternion	1.357×10^{-23}		2.0639×10^{-13}	5.6425×10^{-4}	48.883 00
pdb2m9g	Classic	7.081×10^{-22}			4.4947×10^{-3}	
	Quaternion	6.955×10^{-22}		5.8913×10^{-13}	2.8614×10^{-3}	57.082 41
pdb2m9r	Classic	2.225×10^{-24}			4.9999×10^{-4}	
	Quaternion	2.776×10^{-24}		1.6694×10^{-13}	3.2427×10^{-4}	54.191 51
pdb2mdv	Classic	3.465×10^{-20}			6.9967×10^{-3}	
	Quaternion	3.462×10^{-20}		3.0402×10^{-13}	4.2772×10^{-3}	63.583 65
pdb2me1	Classic	3.641×10^{-23}			3.3047×10^{-4}	
	Quaternion	4.117×10^{-23}		1.6579×10^{-13}	2.1682×10^{-4}	52.420 46
pdb2me2	Classic	2.046×10^{-10}			3.2505×10^{-4}	
	Quaternion	2.046×10^{-10}		1.1547×10^{-12}	2.1368×10^{-4}	52.119 02
pdb2me3	Classic	1.545×10^{-10}			2.9234×10^{-4}	
	Quaternion	1.545×10^{-10}		1.2879×10^{-13}	1.9456×10^{-4}	50.256 35
pdb2me4	Classic	1.290×10^{-10}			3.4920×10^{-4}	
	Quaternion	1.290×10^{-10}		1.0094×10^{-12}	2.2716×10^{-4}	53.721 98
pdb2mg1	Classic	1.404×10^{-24}			3.1566×10^{-4}	
	Quaternion	1.939×10^{-24}		1.5805×10^{-13}	2.1224×10^{-4}	48.728 92
pdb2mg2	Classic	1.731×10^{-25}			3.1957×10^{-4}	
	Quaternion	3.131×10^{-25}		2.5921×10^{-14}	2.1305×10^{-4}	50.000 70
pdb2mg3	Classic	1.819×10^{-24}			3.3142×10^{-4}	
	Quaternion	2.948×10^{-24}		2.4798×10^{-13}	2.2035×10^{-4}	50.408 68
pdb2mh8	Classic	4.294×10^{-23}			7.2721×10^{-4}	
	Quaternion	4.630×10^{-23}		2.9903×10^{-13}	4.8165×10^{-4}	50.982 92
pdb2mhw	Classic	8.747×10^{-24}			3.1867×10^{-4}	
	Quaternion	9.581×10^{-24}		4.9718×10^{-13}	2.1102×10^{-4}	51.011 75
pdb2mi1	Classic	1.105×10^{-10}			1.8634×10^{-3}	
	Quaternion	1.105×10^{-10}		1.8681×10^{-12}	1.1634×10^{-3}	60.174 67
pdb2mi7	Classic	6.468×10^{-11}			7.7983×10^{-4}	
	Quaternion	6.468×10^{-11}		1.5019×10^{-12}	5.1635×10^{-4}	51.026 29
pdb2mij	Classic	1.951×10^{-23}			4.3058×10^{-4}	

Table 2: Results - continued

	Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2mix	Quaternion		2.395×10^{-23}	2.8681×10^{-13}	2.8508×10^{-4}	51.036 02
	Classic		4.178×10^{-24}		2.4118×10^{-4}	
pdb2mj1	Quaternion		3.575×10^{-24}	3.7348×10^{-14}	1.6075×10^{-4}	50.035 93
	Classic		1.396×10^{-23}		2.2765×10^{-4}	
pdb2mj2	Quaternion		2.596×10^{-23}	2.3819×10^{-13}	1.4962×10^{-4}	52.155 33
	Classic		1.094×10^{-23}		4.3903×10^{-4}	
pdb2mjg	Quaternion		1.108×10^{-23}	8.8713×10^{-14}	2.8804×10^{-4}	52.420 86
	Classic		7.804×10^{-24}		2.8825×10^{-3}	
pdb2mji	Quaternion		9.552×10^{-24}	7.0670×10^{-14}	1.8574×10^{-3}	55.188 67
	Classic		1.678×10^{-11}		1.8043×10^{-3}	
pdb2mle	Quaternion		1.678×10^{-11}	2.6848×10^{-13}	1.2121×10^{-3}	48.863 97
	Classic		2.557×10^{-22}		9.0763×10^{-4}	
pdb2mlf	Quaternion		2.484×10^{-22}	3.1271×10^{-13}	6.0392×10^{-4}	50.289 19
	Classic		4.519×10^{-23}		9.3359×10^{-4}	
pdb2mo5	Quaternion		5.232×10^{-23}	9.2903×10^{-14}	6.2528×10^{-4}	49.306 40
	Classic		3.667×10^{-14}		2.8118×10^{-3}	
pdb2mpu	Quaternion		3.667×10^{-14}	1.0204×10^{-12}	1.8462×10^{-3}	52.295 71
	Classic		4.222×10^{-23}		1.1580×10^{-3}	
pdb2mra	Quaternion		4.294×10^{-23}	1.0352×10^{-13}	7.8364×10^{-4}	47.774 80
	Classic		3.623×10^{-22}		2.4941×10^{-3}	
pdb2msu	Quaternion		3.611×10^{-22}	1.2867×10^{-13}	1.6234×10^{-3}	53.632 86
	Classic		9.787×10^{-24}		2.6424×10^{-4}	
pdb2mty	Quaternion		9.927×10^{-24}	3.7025×10^{-14}	1.7245×10^{-4}	53.226 58
	Classic		3.199×10^{-24}		2.7517×10^{-4}	
pdb2muh	Quaternion		3.231×10^{-24}	9.1457×10^{-14}	1.8094×10^{-4}	52.074 13
	Classic		8.261×10^{-11}		2.9780×10^{-4}	
pdb2mvj	Quaternion		8.261×10^{-11}	1.2902×10^{-13}	1.9001×10^{-4}	56.729 08
	Classic		5.040×10^{-23}		3.0826×10^{-4}	
pdb2mvt	Quaternion		5.367×10^{-23}	5.5998×10^{-14}	2.0353×10^{-4}	51.457 77
	Classic		6.070×10^{-11}		8.6118×10^{-4}	
pdb2n00	Quaternion		6.070×10^{-11}	7.9957×10^{-12}	5.5787×10^{-4}	54.368 01
	Classic		4.389×10^{-11}		1.9408×10^{-3}	
pdb2n0b	Quaternion		4.389×10^{-11}	7.6285×10^{-13}	1.2651×10^{-3}	53.406 90
	Classic		8.069×10^{-10}		1.2096×10^{-4}	
pdb2n0c	Quaternion		8.069×10^{-10}	4.9548×10^{-13}	8.0382×10^{-5}	50.476 17
	Classic		7.716×10^{-10}		1.0403×10^{-4}	
pdb2n0d	Quaternion		7.716×10^{-10}	2.8732×10^{-13}	7.0218×10^{-5}	48.155 74
	Classic		1.036×10^{-9}		1.1039×10^{-4}	
pdb2n0e	Quaternion		1.036×10^{-9}	1.6367×10^{-11}	7.4397×10^{-5}	48.372 92
	Classic		1.311×10^{-20}		1.1980×10^{-4}	
pdb2n0f	Quaternion		2.206×10^{-20}	8.3573×10^{-12}	8.0289×10^{-5}	49.215 96
	Classic		2.458×10^{-12}		1.2075×10^{-4}	
pdb2n0g	Quaternion		2.458×10^{-12}	5.8011×10^{-13}	8.0312×10^{-5}	50.351 75
	Classic		4.155×10^{-11}		1.2163×10^{-4}	
	Quaternion		4.155×10^{-11}	1.1957×10^{-13}	8.1061×10^{-5}	50.042 56

Table 2: Results - continued

	Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2n0h	Classic	4.270×10^{-11}			1.2049×10^{-4}	
	Quaternion	4.270×10^{-11}		1.8250×10^{-13}	8.0710×10^{-5}	49.292 53
pdb2n35	Classic	8.043×10^{-25}			6.6189×10^{-4}	
	Quaternion	1.232×10^{-24}		1.0752×10^{-13}	4.3745×10^{-4}	51.308 45
pdb2n3a	Classic	2.832×10^{-23}			2.3951×10^{-2}	
	Quaternion	3.061×10^{-23}		1.0149×10^{-13}	1.3802×10^{-2}	73.533 04
pdb2n41	Classic	1.224×10^{-22}			1.7919×10^{-3}	
	Quaternion	1.164×10^{-22}		8.2539×10^{-14}	1.1787×10^{-3}	52.026 92
pdb2n4e	Classic	5.807×10^{-23}			1.3550×10^{-3}	
	Quaternion	6.977×10^{-23}		1.8433×10^{-13}	9.1229×10^{-4}	48.528 75
pdb2n5q	Classic	1.185×10^{-10}			7.4239×10^{-4}	
	Quaternion	1.185×10^{-10}		1.3595×10^{-12}	4.7378×10^{-4}	56.695 12
pdb2n67	Classic	9.891×10^{-22}			1.1832×10^{-3}	
	Quaternion	9.843×10^{-22}		6.3487×10^{-14}	7.9858×10^{-4}	48.168 43
pdb2n6n	Classic	5.565×10^{-12}			8.6747×10^{-4}	
	Quaternion	5.565×10^{-12}		5.0670×10^{-13}	5.4798×10^{-4}	58.304 67
pdb2n7i	Classic	1.104×10^{-11}			4.6748×10^{-4}	
	Quaternion	1.104×10^{-11}		7.8924×10^{-13}	3.0962×10^{-4}	50.986 22
pdb2n7j	Classic	7.762×10^{-22}			1.1016×10^{-3}	
	Quaternion	8.069×10^{-22}		1.5144×10^{-13}	7.1355×10^{-4}	54.382 74
pdb2n9b	Classic	1.370×10^{-11}			1.2654×10^{-1}	
	Quaternion	1.370×10^{-11}		1.1216×10^{-12}	7.1514×10^{-2}	76.948 86
pdb2na9	Classic	7.057×10^{-24}			5.2023×10^{-4}	
	Quaternion	7.644×10^{-24}		5.4544×10^{-14}	3.3930×10^{-4}	53.326 12
pdb2ndc	Classic	3.774×10^{-25}			2.2237×10^{-4}	
	Quaternion	6.918×10^{-25}		5.1916×10^{-14}	1.4615×10^{-4}	52.146 20
pdb2nde	Classic	5.377×10^{-24}			1.9768×10^{-4}	
	Quaternion	7.565×10^{-24}		2.5156×10^{-13}	1.3110×10^{-4}	50.788 74
pdb2ndk	Classic	2.765×10^{-10}			5.9186×10^{-4}	
	Quaternion	2.765×10^{-10}		2.0544×10^{-12}	3.9171×10^{-4}	51.096 99
pdb2nvj	Classic	4.747×10^{-25}			2.6698×10^{-4}	
	Quaternion	4.939×10^{-25}		1.4035×10^{-14}	1.7972×10^{-4}	48.553 59
pdb2p6j	Classic	4.722×10^{-24}			6.4508×10^{-4}	
	Quaternion	7.445×10^{-24}		1.1404×10^{-13}	4.2207×10^{-4}	52.838 47
pdb2p81	Classic	1.879×10^{-10}			5.1707×10^{-4}	
	Quaternion	1.879×10^{-10}		4.5339×10^{-13}	3.4002×10^{-4}	52.072 38
pdb2pqe	Classic	3.153×10^{-10}			1.2209×10^{-2}	
	Quaternion	3.153×10^{-10}		9.8682×10^{-12}	6.7018×10^{-3}	82.167 95
pdb2rlg	Classic	8.929×10^{-25}			2.1722×10^{-4}	
	Quaternion	1.295×10^{-24}		6.8873×10^{-14}	1.4285×10^{-4}	52.058 41
pdb2rlh	Classic	2.916×10^{-24}			2.3405×10^{-4}	
	Quaternion	3.096×10^{-24}		3.9131×10^{-14}	1.5357×10^{-4}	52.410 35
pdb2rmy	Classic	4.282×10^{-11}			4.2194×10^{-4}	
	Quaternion	4.282×10^{-11}		3.7231×10^{-13}	2.7607×10^{-4}	52.837 05
pdb2rnd	Classic	3.984×10^{-23}			4.0651×10^{-4}	

Table 2: Results - continued

	Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
		Quaternion	6.946×10^{-23}	4.9979×10^{-13}	2.6676×10^{-4}	52.387 13
pdb2roo	Classic	3.028×10^{-20}			4.3472×10^{-3}	
	Quaternion	3.997×10^{-20}		3.5927×10^{-12}	2.7621×10^{-3}	57.390 57
pdb2rql	Classic	6.597×10^{-12}			1.0192×10^{-2}	
	Quaternion	6.597×10^{-12}		8.7082×10^{-13}	5.5074×10^{-3}	85.053 84
pdb2rut	Classic	2.630×10^{-24}			4.3098×10^{-4}	
	Quaternion	2.842×10^{-24}		3.5338×10^{-13}	2.8150×10^{-4}	53.099 99
pdb2ruv	Classic	8.503×10^{-24}			4.5310×10^{-4}	
	Quaternion	1.524×10^{-23}		1.2473×10^{-13}	2.9755×10^{-4}	52.277 59
pdb2rux	Classic	9.101×10^{-25}			4.5177×10^{-4}	
	Quaternion	1.065×10^{-24}		6.2140×10^{-14}	2.9542×10^{-4}	52.925 19
pdb2ruy	Classic	2.386×10^{-25}			4.5327×10^{-4}	
	Quaternion	3.545×10^{-25}		6.4254×10^{-14}	2.9578×10^{-4}	53.243 76
pdb2rv3	Classic	2.522×10^{-24}			4.6256×10^{-4}	
	Quaternion	2.720×10^{-24}		6.3794×10^{-14}	3.0125×10^{-4}	53.544 52
pdb2rv5	Classic	7.467×10^{-26}			4.2585×10^{-4}	
	Quaternion	9.134×10^{-26}		1.6010×10^{-14}	2.8015×10^{-4}	52.008 49
pdb2y4q	Classic	2.386×10^{-11}			2.9896×10^{-3}	
	Quaternion	2.386×10^{-11}		2.6305×10^{-13}	1.8578×10^{-3}	60.918 15