

Table 1: Results

	Problem	Method	LDE	RMSD	Sol	Time	Improv time	
pdb1a57	Classic	2.096×10^{-11}	3.1806×10^{-11}	5	1.5534×10^{-2}			
	Quaternion	2.092×10^{-11}	3.3550×10^{-11}	5	7.9425×10^{-3}		95.575 99	
pdb1b4c	Classic	5.067×10^{-13}	2.6824×10^{-12}	9	2.6034×10^{-2}			
	Quaternion	5.493×10^{-13}	3.4662×10^{-12}	9	1.3762×10^{-2}		89.174 97	
pdb1ba5	Classic	9.359×10^{-13}	3.5621×10^{-2}	6	2.2947×10^{-3}			
	Quaternion	1.069×10^{-12}	3.5621×10^{-2}	6	1.4620×10^{-3}		56.957 26	
pdb1d1n	Classic	1.005×10^{-11}	2.9766×10^{-11}	1	4.1042×10^{-3}			
	Quaternion	9.672×10^{-12}	2.9311×10^{-11}	1	2.3237×10^{-3}		76.627 66	
pdb1dp3	Classic	7.620×10^{-13}	4.9981×10^{-5}	2	2.3648×10^{-3}			
	Quaternion	8.854×10^{-13}	4.9981×10^{-5}	2	1.5050×10^{-3}		57.127 76	
pdb1du1	Classic	8.202×10^{-13}	6.6600×10^{-13}	1	1.0099×10^{-3}			
	Quaternion	1.254×10^{-12}	1.6577×10^{-12}	1	7.2709×10^{-4}		38.891 35	
pdb1eii	Classic	1.393×10^{-11}	1.9451×10^{-10}	1	6.0385×10^{-3}			
	Quaternion	1.365×10^{-11}	1.8740×10^{-10}	1	3.9047×10^{-3}		54.647 39	
pdb1fcl	Classic	4.540×10^{-12}	1.5447×10^{-11}	2	3.2087×10^{-3}			
	Quaternion	4.514×10^{-12}	1.5223×10^{-11}	2	1.9812×10^{-3}		61.959 65	
pdb1fd6	Classic	3.182×10^{-12}	2.0242×10^{-5}	2	2.4658×10^{-3}			
	Quaternion	3.193×10^{-12}	2.0242×10^{-5}	2	1.5942×10^{-3}		54.670 61	
pdb1hf9	Classic	1.156×10^{-11}	9.0139×10^{-10}	6	7.3270×10^{-2}			
	Quaternion	1.180×10^{-11}	9.0282×10^{-10}	6	3.6650×10^{-2}		99.919 89	
pdb1i2u	Classic	5.351×10^{-13}	1.3842×10^{-3}	2	1.9108×10^{-3}			
	Quaternion	5.452×10^{-13}	1.3842×10^{-3}	2	1.2456×10^{-3}		53.402 15	
pdb1i2v	Classic	2.418×10^{-13}	8.9125×10^{-13}	5	1.8894×10^{-3}			
	Quaternion	2.519×10^{-13}	8.8206×10^{-13}	5	1.2176×10^{-3}		55.178 83	
pdb1ijc	Classic	1.408×10^{-11}	9.1858×10^{-11}	2	4.6633×10^{-3}			
	Quaternion	1.426×10^{-11}	9.4110×10^{-11}	2	2.7568×10^{-3}		69.157 54	
pdb1jlz	Classic	5.592×10^{-13}	1.2304×10^{-4}	1	9.5704×10^{-4}			
	Quaternion	5.963×10^{-13}	1.2304×10^{-4}	1	6.2255×10^{-4}		53.728 04	
pdb1jw3	Classic	5.936×10^{-13}	1.9618×10^{-12}	2	6.3360×10^{-3}			
	Quaternion	5.897×10^{-13}	1.8088×10^{-12}	2	4.0710×10^{-3}		55.636 34	
pdb1k0v	Classic	1.893×10^{-13}	8.3940×10^{-5}	2	3.3556×10^{-3}			
	Quaternion	1.894×10^{-13}	8.3940×10^{-5}	2	2.1687×10^{-3}		54.726 39	
pdb1k2h	Classic	5.490×10^{-13}	1.9788×10^{-4}	2	2.8023×10^{-2}			
	Quaternion	5.198×10^{-13}	1.9788×10^{-4}	2	1.3663×10^{-2}		105.110 58	
pdb1k36	Classic	8.820×10^{-12}	1.6100×10^{-10}	1	2.2827×10^{-3}			
	Quaternion	1.081×10^{-11}	1.8077×10^{-10}	1	1.4191×10^{-3}		60.851 31	
pdb1k37	Classic	4.709×10^{-13}	2.1407×10^{-12}	2	3.1804×10^{-3}			
	Quaternion	4.986×10^{-13}	2.0318×10^{-12}	2	1.8765×10^{-3}		69.484 73	
pdb1kuw	Classic	9.220×10^{-14}	1.8706×10^{-4}	1	3.9988×10^{-4}			
	Quaternion	1.115×10^{-13}	1.8706×10^{-4}	1	2.5939×10^{-4}		54.161 91	
pdb1kz0	Classic	4.376×10^{-14}	6.7512×10^{-13}	1	6.5234×10^{-4}			
	Quaternion	5.848×10^{-14}	6.2568×10^{-13}	1	4.2160×10^{-4}		54.728 34	
pdb1kz2	Classic	2.109×10^{-14}	3.1076×10^{-6}	1	6.5878×10^{-4}			
	Quaternion	2.869×10^{-14}	3.1076×10^{-6}	1	4.3098×10^{-4}		52.856 53	
pdb1kz5	Classic	4.080×10^{-14}	4.8094×10^{-13}	1	4.8208×10^{-4}			
	Quaternion	4.734×10^{-14}	5.2716×10^{-13}	1	3.1332×10^{-4}		53.861 07	

Table 2: Results - continued

	Problem	Method	LDE	RMSD	Sol	Time	Improv time
pdb1lvz	Classic	6.336×10^{-14}	1.4708×10^{-3}		1	4.3779×10^{-4}	
	Quaternion	7.315×10^{-14}	1.4708×10^{-3}		1	2.8735×10^{-4}	52.354 00
pdb1m4e	Classic	5.791×10^{-13}	5.4966×10^{-12}		1	8.1157×10^{-4}	
	Quaternion	5.723×10^{-13}	5.5048×10^{-12}		1	5.2877×10^{-4}	53.482 05
pdb1ma2	Classic	8.694×10^{-12}	1.7458×10^{-10}		2	1.0720×10^{-3}	
	Quaternion	8.757×10^{-12}	1.7467×10^{-10}		2	6.4823×10^{-4}	65.379 19
pdb1ma4	Classic	7.247×10^{-14}	5.4569×10^{-4}		2	1.6809×10^{-3}	
	Quaternion	7.976×10^{-14}	5.4569×10^{-4}		2	9.4424×10^{-4}	78.012 05
pdb1ma5	Classic	8.131×10^{-13}	9.6358×10^{-5}		1	6.8965×10^{-4}	
	Quaternion	8.988×10^{-13}	9.6358×10^{-5}		1	4.5083×10^{-4}	52.973 48
pdb1ma6	Classic	6.283×10^{-13}	1.2440×10^{-11}		2	6.9617×10^{-4}	
	Quaternion	8.487×10^{-13}	1.4288×10^{-11}		2	4.5334×10^{-4}	53.565 22
pdb1mpe	Classic	2.617×10^{-11}	5.1722×10^{-10}		2	3.3231×10^{-2}	
	Quaternion	2.624×10^{-11}	5.1751×10^{-10}		2	1.6391×10^{-2}	102.745 18
pdb1nd9	Classic	3.024×10^{-13}	1.0508×10^{-12}		2	3.2505×10^{-3}	
	Quaternion	3.843×10^{-13}	8.9082×10^{-13}		2	2.5284×10^{-3}	28.562 71
pdb1ne5	Classic	1.213×10^{-12}	1.4845×10^{-11}		33	3.2276×10^{-2}	
	Quaternion	1.383×10^{-12}	1.5105×10^{-11}		33	1.9945×10^{-2}	61.825 97
pdb1nmj	Classic	1.235×10^{-14}	2.3883×10^{-13}		7	1.1415×10^{-3}	
	Quaternion	1.422×10^{-14}	2.3832×10^{-13}		7	7.3811×10^{-4}	54.644 72
pdb1o53	Classic	3.999×10^{-13}	1.0887×10^{-11}		2	6.0490×10^{-4}	
	Quaternion	4.527×10^{-13}	1.1252×10^{-11}		2	3.9490×10^{-4}	53.179 75
pdb1oqp	Classic	7.044×10^{-14}	2.9348×10^{-3}		2	2.7079×10^{-2}	
	Quaternion	8.314×10^{-14}	2.9348×10^{-3}		2	1.3080×10^{-2}	107.029 42
pdb1plw	Classic	2.695×10^{-14}	3.0310×10^{-13}		2	1.8576×10^{-4}	
	Quaternion	2.952×10^{-14}	3.2973×10^{-13}		2	1.2422×10^{-4}	49.538 73
pdb1plx	Classic	1.074×10^{-13}	2.8525×10^{-4}		1	1.8626×10^{-4}	
	Quaternion	1.557×10^{-13}	2.8525×10^{-4}		1	1.2426×10^{-4}	49.896 39
pdb1pv0	Classic	2.404×10^{-13}	1.3024×10^{-11}		1	7.4177×10^{-3}	
	Quaternion	2.717×10^{-13}	1.3017×10^{-11}		1	4.7870×10^{-3}	54.955 79
pdb1pzt	Classic	5.644×10^{-12}	3.9940×10^{-10}		1	3.8316×10^{-1}	
	Quaternion	5.871×10^{-12}	3.9046×10^{-10}		1	1.8742×10^{-1}	104.434 56
pdb1qlk	Classic	2.634×10^{-13}	3.1378×10^{-5}		17	4.8013×10^{-2}	
	Quaternion	2.869×10^{-13}	3.1378×10^{-5}		17	2.7734×10^{-2}	73.122 53
pdb1r57	Classic	1.847×10^{-13}	4.3330×10^{-3}		2	4.4864×10^{-3}	
	Quaternion	2.054×10^{-13}	4.3330×10^{-3}		2	2.8991×10^{-3}	54.752 00
pdb1ry3	Classic	4.938×10^{-13}	9.1924×10^{-12}		6	1.1530×10^{-2}	
	Quaternion	5.910×10^{-13}	9.4285×10^{-12}		6	6.2601×10^{-3}	84.182 95
pdb1s4h	Classic	4.622×10^{-13}	1.4643×10^{-4}		18	3.0416×10^{-3}	
	Quaternion	6.285×10^{-13}	1.4643×10^{-4}		18	2.1084×10^{-3}	44.263 02
pdb1s4j	Classic	1.518×10^{-13}	5.8507×10^{-12}		2	6.7382×10^{-4}	
	Quaternion	2.083×10^{-13}	5.8479×10^{-12}		2	4.8849×10^{-4}	37.938 99
pdb1s6j	Classic	6.073×10^{-13}	6.0202×10^{-5}		1	7.0820×10^{-3}	
	Quaternion	7.660×10^{-13}	6.0202×10^{-5}		1	5.5051×10^{-3}	28.643 89
pdb1sa8	Classic	9.339×10^{-13}	1.7170×10^{-3}		1	4.6909×10^{-3}	

Table 2: Results - continued

	Problem	Method	LDE	RMSD	Sol	Time	Improv time	
		Quaternion	1.033×10^{-12}	1.7170×10^{-3}	1	3.0718×10^{-3}		52.71082
pdb1t2y		Classic	1.874×10^{-13}	2.5460×10^{-4}	1	1.0439×10^{-3}		
		Quaternion	2.380×10^{-13}	2.5460×10^{-4}	1	6.7531×10^{-4}		54.57754
pdb1t5q		Classic	3.877×10^{-14}	1.0265×10^{-12}	1	9.7152×10^{-4}		
		Quaternion	5.093×10^{-14}	1.0480×10^{-12}	1	5.4148×10^{-4}		79.41849
pdb1tot		Classic	6.148×10^{-14}	3.4218×10^{-3}	5	2.2952×10^{-3}		
		Quaternion	6.853×10^{-14}	3.4218×10^{-3}	5	1.4724×10^{-3}		55.87658
pdb1v6r		Classic	6.802×10^{-13}	1.3650×10^{-4}	2	1.4159×10^{-3}		
		Quaternion	6.929×10^{-13}	1.3650×10^{-4}	2	8.3607×10^{-4}		69.34588
pdb1v92		Classic	1.463×10^{-13}	3.1327×10^{-5}	1	1.9799×10^{-3}		
		Quaternion	1.611×10^{-13}	3.1327×10^{-5}	1	1.2782×10^{-3}		54.89555
pdb1vd7		Classic	6.342×10^{-13}	7.8801×10^{-12}	5	1.1801×10^{-3}		
		Quaternion	7.433×10^{-13}	7.9022×10^{-12}	5	8.4425×10^{-4}		39.78382
pdb1vd9		Classic	1.290×10^{-12}	1.5514×10^{-11}	1	1.0085×10^{-3}		
		Quaternion	1.554×10^{-12}	1.5541×10^{-11}	1	6.4044×10^{-4}		57.46719
pdb1vdb		Classic	8.908×10^{-13}	8.5740×10^{-12}	2	9.3278×10^{-4}		
		Quaternion	1.059×10^{-12}	8.5291×10^{-12}	2	6.0058×10^{-4}		55.31249
pdb1vpc		Classic	8.500×10^{-15}	4.3482×10^{-4}	6	1.9459×10^{-3}		
		Quaternion	1.002×10^{-14}	4.3482×10^{-4}	6	1.2297×10^{-3}		58.23326
pdb1wnk		Classic	4.109×10^{-12}	2.2292×10^{-10}	1	1.7291×10^{-3}		
		Quaternion	4.625×10^{-12}	2.2177×10^{-10}	1	1.3797×10^{-3}		25.32707
pdb1wo4		Classic	9.957×10^{-13}	4.6193×10^{-5}	2	1.0309×10^{-3}		
		Quaternion	9.634×10^{-13}	4.6193×10^{-5}	2	6.6055×10^{-4}		56.06539
pdb1wo5		Classic	2.370×10^{-12}	2.7147×10^{-10}	13	2.0579×10^{-3}		
		Quaternion	2.511×10^{-12}	2.7625×10^{-10}	13	1.5730×10^{-3}		30.82722
pdb1x60		Classic	1.075×10^{-12}	6.7449×10^{-12}	1	6.7298×10^{-3}		
		Quaternion	1.179×10^{-12}	6.9447×10^{-12}	1	4.3551×10^{-3}		54.52690
pdb1x9v		Classic	8.968×10^{-13}	1.1547×10^{-4}	6	8.4514×10^{-2}		
		Quaternion	9.611×10^{-13}	1.1547×10^{-4}	6	4.1445×10^{-2}		103.91727
pdb1y5c		Classic	7.693×10^{-14}	8.7435×10^{-13}	5	5.5014×10^{-4}		
		Quaternion	9.383×10^{-14}	8.2242×10^{-13}	5	3.9513×10^{-4}		39.23272
pdb1yx7		Classic	3.509×10^{-12}	1.3647×10^{-10}	25	1.2564×10^{-2}		
		Quaternion	4.348×10^{-12}	1.4245×10^{-10}	25	7.3417×10^{-3}		71.13059
pdb1yx8		Classic	7.275×10^{-12}	2.5841×10^{-10}	6	4.1418×10^{-3}		
		Quaternion	8.210×10^{-12}	2.6921×10^{-10}	6	2.6085×10^{-3}		58.78164
pdb1yxr		Classic	6.977×10^{-13}	9.2421×10^{-4}	29	4.0304×10^{-2}		
		Quaternion	7.988×10^{-13}	9.2421×10^{-4}	29	2.7276×10^{-2}		47.76680
pdb2a2y		Classic	1.150×10^{-12}	8.1076×10^{-5}	2	2.1608×10^{-1}		
		Quaternion	1.151×10^{-12}	8.1076×10^{-5}	2	1.0113×10^{-1}		113.67396
pdb2a4j		Classic	2.085×10^{-14}	1.0516×10^{-4}	2	1.1482×10^{-2}		
		Quaternion	2.722×10^{-14}	1.0516×10^{-4}	2	6.0652×10^{-3}		89.31525
pdb2adl		Classic	1.752×10^{-11}	3.1161×10^{-11}	1	2.7094×10^{-1}		
		Quaternion	1.787×10^{-11}	3.3255×10^{-11}	1	1.8499×10^{-1}		46.46223
pdb2adn		Classic	6.693×10^{-12}	2.3364×10^{-10}	1	1.7831×10^{-2}		
		Quaternion	6.464×10^{-12}	2.3188×10^{-10}	1	9.2440×10^{-3}		92.88838

Table 2: Results - continued

	Problem	Method	LDE	RMSD	Sol	Time	Improv time
pdb2ajj	Classic	5.640×10^{-14}	2.9810×10^{-4}	1	1	1.1452×10^{-3}	
	Quaternion	6.584×10^{-14}	2.9810×10^{-4}	1	1	7.3894×10^{-4}	54.979 01
pdb2ajm	Classic	1.183×10^{-13}	2.4063×10^{-12}	2	2	1.1707×10^{-3}	
	Quaternion	1.555×10^{-13}	2.7001×10^{-12}	2	2	7.5006×10^{-4}	56.081 77
pdb2ajn	Classic	1.075×10^{-13}	4.3268×10^{-4}	1	1	1.1535×10^{-3}	
	Quaternion	1.197×10^{-13}	4.3268×10^{-4}	1	1	7.3942×10^{-4}	56.001 22
pdb2ajo	Classic	1.183×10^{-13}	2.4063×10^{-12}	2	2	1.1650×10^{-3}	
	Quaternion	1.555×10^{-13}	2.7001×10^{-12}	2	2	7.4740×10^{-4}	55.869 47
pdb2akk	Classic	1.288×10^{-13}	3.0416×10^{-3}	2	2	4.9711×10^{-3}	
	Quaternion	1.270×10^{-13}	3.0416×10^{-3}	2	2	3.0172×10^{-3}	64.757 86
pdb2bzb	Classic	9.361×10^{-14}	4.6498×10^{-13}	5	5	4.5540×10^{-2}	
	Quaternion	1.224×10^{-13}	6.0113×10^{-13}	5	5	2.3717×10^{-2}	92.016 77
pdb2c0s	Classic	3.028×10^{-13}	1.0793×10^{-2}	6	6	2.8162×10^{-3}	
	Quaternion	3.379×10^{-13}	1.0793×10^{-2}	6	6	1.7931×10^{-3}	57.056 02
pdb2dci	Classic	2.365×10^{-14}	2.0907×10^{-13}	1	1	6.4620×10^{-4}	
	Quaternion	2.949×10^{-14}	3.3732×10^{-13}	1	1	3.6696×10^{-4}	76.095 62
pdb2eem	Classic	5.190×10^{-13}	9.5324×10^{-12}	1	1	1.5240×10^{-3}	
	Quaternion	5.461×10^{-13}	9.5866×10^{-12}	1	1	9.5803×10^{-4}	59.073 81
pdb2fva	Classic	1.047×10^{-12}	1.2680×10^{-11}	2	2	4.5257×10^{-3}	
	Quaternion	1.194×10^{-12}	1.2689×10^{-11}	2	2	2.7730×10^{-3}	63.204 55
pdb2fvf	Classic	3.106×10^{-13}	3.5796×10^{-12}	1	1	3.5428×10^{-3}	
	Quaternion	3.445×10^{-13}	3.3286×10^{-12}	1	1	2.2751×10^{-3}	55.720 48
pdb2fxz	Classic	1.483×10^{-12}	4.2293×10^{-12}	1	1	5.2975×10^{-4}	
	Quaternion	1.746×10^{-12}	5.3169×10^{-12}	1	1	3.4793×10^{-4}	52.257 91
pdb2g9j	Classic	3.282×10^{-12}	5.8011×10^{-4}	2	2	2.6972×10^{-1}	
	Quaternion	3.535×10^{-12}	5.8011×10^{-4}	2	2	1.3134×10^{-1}	105.362 74
pdb2g9l	Classic	6.365×10^{-14}	1.0333×10^{-4}	2	2	1.5770×10^{-3}	
	Quaternion	8.666×10^{-14}	1.0333×10^{-4}	2	2	1.0111×10^{-3}	55.972 64
pdb2h5m	Classic	9.691×10^{-13}	1.2267×10^{-3}	1	1	4.4385×10^{-3}	
	Quaternion	1.032×10^{-12}	1.2267×10^{-3}	1	1	2.8732×10^{-3}	54.480 03
pdb2hep	Classic	1.191×10^{-12}	2.1758×10^{-11}	1	1	1.4073×10^{-3}	
	Quaternion	1.268×10^{-12}	2.2038×10^{-11}	1	1	7.7952×10^{-4}	80.530 98
pdb2j0z	Classic	4.392×10^{-12}	1.3100×10^{-10}	10	10	2.1181	
	Quaternion	4.954×10^{-12}	1.3116×10^{-10}	10	10	1.0565	100.483 01
pdb2j10	Classic	9.188×10^{-12}	2.9618×10^{-5}	6386	6386	5.6287	
	Quaternion	9.521×10^{-12}	2.9618×10^{-5}	6386	6386	5.3531	5.148 75
pdb2j11	Classic	5.254×10^{-12}	2.7803×10^{-11}	2125	2125	5.3744	
	Quaternion	5.626×10^{-12}	2.7661×10^{-11}	2125	2125	3.8721	38.799 06
pdb2jmy	Classic	9.828×10^{-13}	7.0432×10^{-5}	1	1	6.1690×10^{-4}	
	Quaternion	9.959×10^{-13}	7.0432×10^{-5}	1	1	4.1034×10^{-4}	50.337 46
pdb2jn5	Classic	1.103×10^{-11}	6.6339×10^{-12}	5	5	9.1653×10^{-4}	
	Quaternion	2.456×10^{-11}	2.0459×10^{-11}	5	5	5.9548×10^{-4}	53.912 99
pdb2jnk	Classic	2.245×10^{-12}	3.4995×10^{-11}	13	13	1.4221×10^{-2}	
	Quaternion	2.318×10^{-12}	3.4653×10^{-11}	13	13	9.5977×10^{-3}	48.168 45
pdb2jpn	Classic	6.730×10^{-14}	6.4192×10^{-12}	2	2	4.6033×10^{-3}	

Table 2: Results - continued

	Problem	Method	LDE	RMSD	Sol	Time	Improv time	
		Quaternion	6.983×10^{-14}	6.5904×10^{-12}	2	2.8178×10^{-3}		63.363 99
pdb2jua		Classic	1.740×10^{-11}	1.8732×10^{-4}	6	6.0448×10^{-3}		
		Quaternion	1.882×10^{-11}	1.8732×10^{-4}	6	4.2150×10^{-3}		43.414 18
pdb2jvd		Classic	3.336×10^{-14}	9.4244×10^{-13}	1	1.9601×10^{-3}		
		Quaternion	3.895×10^{-14}	9.4967×10^{-13}	1	1.1229×10^{-3}		74.561 20
pdb2jwe		Classic	2.695×10^{-11}	9.2597×10^{-11}	1	1.1846×10^{-2}		
		Quaternion	2.734×10^{-11}	9.2052×10^{-11}	1	5.6874×10^{-3}		108.292 62
pdb2jws		Classic	1.243×10^{-13}	4.5612×10^{-4}	2	2.4562×10^{-3}		
		Quaternion	1.537×10^{-13}	4.5612×10^{-4}	2	1.5800×10^{-3}		55.452 99
pdb2jwu		Classic	4.421×10^{-12}	3.0876×10^{-4}	1	3.3164×10^{-3}		
		Quaternion	4.373×10^{-12}	3.0876×10^{-4}	1	1.9983×10^{-3}		65.963 29
pdb2jxf		Classic	1.399×10^{-13}	2.4000×10^{-4}	1	1.2609×10^{-3}		
		Quaternion	1.733×10^{-13}	2.4000×10^{-4}	1	8.1147×10^{-4}		55.388 24
pdb2jz5		Classic	2.860×10^{-13}	1.7460×10^{-3}	1	4.1509×10^{-3}		
		Quaternion	2.854×10^{-13}	1.7460×10^{-3}	1	2.6573×10^{-3}		56.205 79
pdb2k2a		Classic	3.798×10^{-14}	4.7195×10^{-3}	5	3.1063×10^{-3}		
		Quaternion	5.134×10^{-14}	4.7195×10^{-3}	5	1.9851×10^{-3}		56.478 97
pdb2k2f		Classic	2.639×10^{-13}	1.2926×10^{-11}	1	3.1096×10^1		
		Quaternion	2.818×10^{-13}	1.2956×10^{-11}	1	1.4430×10^1		115.496 79
pdb2k36		Classic	1.922×10^{-13}	1.6972×10^{-12}	1	6.7240×10^{-3}		
		Quaternion	2.045×10^{-13}	1.6007×10^{-12}	1	4.2882×10^{-3}		56.803 96
pdb2k37		Classic	1.918×10^{-13}	3.7147×10^{-12}	1	2.5839×10^{-3}		
		Quaternion	2.514×10^{-13}	3.6185×10^{-12}	1	1.6626×10^{-3}		55.414 68
pdb2k3i		Classic	3.810×10^{-13}	4.6225×10^{-3}	2	6.1625×10^{-3}		
		Quaternion	4.009×10^{-13}	4.6225×10^{-3}	2	3.7791×10^{-3}		63.068 42
pdb2k6s		Classic	2.100×10^{-13}	8.2998×10^{-12}	2	7.7412×10^{-3}		
		Quaternion	2.651×10^{-13}	8.4519×10^{-12}	2	4.3772×10^{-3}		76.852 88
pdb2k7o		Classic	1.278×10^{-13}	1.8663×10^{-4}	1	5.3309×10^{-2}		
		Quaternion	1.416×10^{-13}	1.8663×10^{-4}	1	2.8205×10^{-2}		89.002 24
pdb2kbn		Classic	2.165×10^{-13}	1.5487×10^{-12}	2	2.5988×10^1		
		Quaternion	2.226×10^{-13}	1.6865×10^{-12}	2	1.2170×10^1		113.542 46
pdb2kdh		Classic	1.947×10^{-11}	7.2209×10^{-5}	2	3.8620×10^{-3}		
		Quaternion	2.228×10^{-11}	7.2209×10^{-5}	2	2.3780×10^{-3}		62.404 16
pdb2kdl		Classic	2.301×10^{-13}	4.4591×10^{-12}	2	2.4455×10^{-3}		
		Quaternion	2.919×10^{-13}	4.4513×10^{-12}	2	1.5685×10^{-3}		55.913 35
pdb2kdm		Classic	3.191×10^{-12}	2.1896×10^{-11}	1	2.8818×10^{-3}		
		Quaternion	3.284×10^{-12}	2.1643×10^{-11}	1	1.8030×10^{-3}		59.833 77
pdb2kdp		Classic	2.621×10^{-13}	3.0283×10^{-12}	1	3.1241×10^{-3}		
		Quaternion	2.865×10^{-13}	3.0741×10^{-12}	1	1.9908×10^{-3}		56.928 53
pdb2kdr		Classic	6.617×10^{-14}	6.3024×10^{-5}	2	1.1431×10^{-3}		
		Quaternion	8.490×10^{-14}	6.3024×10^{-5}	2	7.3875×10^{-4}		54.730 95
pdb2kes		Classic	4.465×10^{-14}	1.8528×10^{-4}	7	2.0037×10^{-3}		
		Quaternion	5.420×10^{-14}	1.8528×10^{-4}	7	1.2895×10^{-3}		55.386 76
pdb2kib		Classic	2.533×10^{-12}	2.9706×10^{-5}	1	3.7301×10^{-2}		
		Quaternion	2.539×10^{-12}	2.9706×10^{-5}	1	1.8697×10^{-2}		99.500 32

Table 2: Results - continued

	Problem	Method	LDE	RMSD	Sol	Time	Improv time
pdb2kjn	Classic	9.799×10^{-14}	1.9764×10^{-12}	6	2.0679×10^{-3}		
	Quaternion	1.172×10^{-13}	1.9265×10^{-12}	6	1.3477×10^{-3}	53.439 58	
pdb2kjo	Classic	2.284×10^{-13}	1.2876×10^{-11}	1	1.0638×10^{-3}		
	Quaternion	2.421×10^{-13}	1.2921×10^{-11}	1	6.8219×10^{-4}	55.938 31	
pdb2kjr	Classic	3.247×10^{-12}	5.1341×10^{-11}	2	5.3413×10^{-3}		
	Quaternion	3.251×10^{-12}	5.1082×10^{-11}	2	3.2798×10^{-3}	62.853 33	
pdb2kko	Classic	1.191×10^{-13}	6.9643×10^{-4}	2	6.0287×10^{-2}		
	Quaternion	1.284×10^{-13}	6.9643×10^{-4}	2	3.1005×10^{-2}	94.440 31	
pdb2kl5	Classic	1.820×10^{-13}	2.4505×10^{-12}	1	4.8881×10^{-3}		
	Quaternion	2.019×10^{-13}	2.5206×10^{-12}	1	3.1278×10^{-3}	56.281 75	
pdb2klz	Classic	3.436×10^{-14}	3.9786×10^{-13}	1	1.5630×10^{-3}		
	Quaternion	4.436×10^{-14}	3.7834×10^{-13}	1	8.5837×10^{-4}	82.086 23	
pdb2ko1	Classic	1.150×10^{-12}	9.3273×10^{-4}	2	8.4944×10^{-2}		
	Quaternion	1.151×10^{-12}	9.3273×10^{-4}	2	4.0037×10^{-2}	112.162 48	
pdb2koz	Classic	1.066×10^{-12}	4.5817×10^{-5}	2	2.6730×10^{-3}		
	Quaternion	1.149×10^{-12}	4.5817×10^{-5}	2	2.1054×10^{-3}	26.958 39	
pdb2kp0	Classic	4.893×10^{-12}	7.8392×10^{-11}	2	1.4548×10^{-3}		
	Quaternion	5.588×10^{-12}	8.2404×10^{-11}	2	9.3410×10^{-4}	55.741 96	
pdb2ksg	Classic	3.208×10^{-14}	9.2027×10^{-13}	1	2.0258×10^{-3}		
	Quaternion	3.955×10^{-14}	9.2208×10^{-13}	1	1.2921×10^{-3}	56.788 55	
pdb2kt8	Classic	3.313×10^{-12}	4.1573×10^{-4}	1	3.2551×10^{-3}		
	Quaternion	3.534×10^{-12}	4.1573×10^{-4}	1	2.0991×10^{-3}	55.069 22	
pdb2kuh	Classic	2.015×10^{-14}	1.1667×10^{-3}	6	2.9933×10^{-3}		
	Quaternion	2.491×10^{-14}	1.1667×10^{-3}	6	1.9370×10^{-3}	54.533 21	
pdb2kwh	Classic	1.408×10^{-13}	2.0587×10^{-3}	2	2.4148×10^{-3}		
	Quaternion	1.825×10^{-13}	2.0587×10^{-3}	2	1.5508×10^{-3}	55.709 25	
pdb2kxa	Classic	1.314×10^{-12}	3.9712×10^{-12}	1	8.1241×10^{-4}		
	Quaternion	1.340×10^{-12}	3.7392×10^{-12}	1	4.7225×10^{-4}	72.029 59	
pdb2kyb	Classic	1.321×10^{-11}	3.1200×10^{-6}	6	7.6675×10^{-3}		
	Quaternion	1.373×10^{-11}	3.1200×10^{-6}	6	4.5386×10^{-3}	68.938 58	
pdb2l3m	Classic	1.027×10^{-12}	1.5178×10^{-3}	1	3.0657×10^{-3}		
	Quaternion	9.340×10^{-13}	1.5178×10^{-3}	1	1.9948×10^{-3}	53.680 24	
pdb2l3n	Classic	3.024×10^{-14}	3.9987×10^{-4}	5	1.9085×10^{-2}		
	Quaternion	3.632×10^{-14}	3.9987×10^{-4}	5	9.5408×10^{-3}	100.033 62	
pdb2l45	Classic	2.236×10^{-14}	5.9466×10^{-13}	1	7.7917×10^{-4}		
	Quaternion	2.984×10^{-14}	6.7808×10^{-13}	1	5.0850×10^{-4}	53.228 80	
pdb2l5r	Classic	3.529×10^{-14}	3.0491×10^{-13}	2	7.4223×10^{-4}		
	Quaternion	4.432×10^{-14}	3.0031×10^{-13}	2	4.1651×10^{-4}	78.202 77	
pdb2l6q	Classic	4.435×10^{-11}	1.6115×10^{-9}	29	5.0296×10^{-3}		
	Quaternion	5.413×10^{-11}	1.6752×10^{-9}	29	3.9253×10^{-3}	28.132 16	
pdb2l6r	Classic	2.045×10^{-12}	1.0970×10^{-10}	6	3.4099×10^{-3}		
	Quaternion	2.160×10^{-12}	9.8250×10^{-11}	6	2.4135×10^{-3}	41.287 34	
pdb2l98	Classic	3.273×10^{-13}	5.6413×10^{-12}	2	3.2115×10^{-3}		
	Quaternion	3.637×10^{-13}	6.2089×10^{-12}	2	2.0422×10^{-3}	57.258 16	
pdb2lci	Classic	2.579×10^{-13}	1.2015×10^{-12}	1	5.8525×10^{-3}		

Table 2: Results - continued

	Problem	Method	LDE	RMSD	Sol	Time	Improv time	
		Quaternion	2.403×10^{-13}	1.1830×10^{-12}	1	3.7637×10^{-3}		55.496 78
pdb2lde		Classic	3.153×10^{-14}	6.0406×10^{-3}	2	1.0222×10^{-3}		
		Quaternion	3.762×10^{-14}	6.0406×10^{-3}	2	6.5574×10^{-4}		55.889 53
pdb2le2		Classic	2.064×10^{-13}	1.5317×10^{-12}	2	2.3649×10^{-1}		
		Quaternion	2.042×10^{-13}	1.4989×10^{-12}	2	1.1313×10^{-1}		109.051 40
pdb2le7		Classic	2.109×10^{-14}	8.8940×10^{-14}	2	8.1540×10^{-4}		
		Quaternion	2.747×10^{-14}	1.1008×10^{-13}	2	5.2472×10^{-4}		55.395 31
pdb2ler		Classic	1.283×10^{-14}	5.1096×10^{-14}	2	4.3757×10^{-4}		
		Quaternion	1.498×10^{-14}	6.2001×10^{-14}	2	2.8303×10^{-4}		54.601 97
pdb2lgi		Classic	1.068×10^{-12}	9.7255×10^{-12}	2	2.4414×10^{-3}		
		Quaternion	1.052×10^{-12}	9.6518×10^{-12}	2	1.5704×10^{-3}		55.461 41
pdb2lhc		Classic	2.902×10^{-12}	3.8367×10^{-10}	17	1.1828×10^{-2}		
		Quaternion	2.997×10^{-12}	3.8166×10^{-10}	17	7.4065×10^{-3}		59.703 53
pdb2lhd		Classic	1.930×10^{-12}	1.3048×10^{-11}	2	3.9713×10^{-3}		
		Quaternion	2.033×10^{-12}	1.4592×10^{-11}	2	2.3946×10^{-3}		65.843 94
pdb2lhe		Classic	4.963×10^{-11}	9.7862×10^{-10}	2	3.6615×10^{-3}		
		Quaternion	4.967×10^{-11}	9.7867×10^{-10}	2	2.5253×10^{-3}		44.994 17
pdb2lhg		Classic	6.459×10^{-14}	5.0995×10^{-13}	6	2.4274×10^{-3}		
		Quaternion	7.322×10^{-14}	5.4683×10^{-13}	6	1.5705×10^{-3}		54.563 09
pdb2lix		Classic	4.826×10^{-14}	4.9988×10^{-13}	1	8.9123×10^{-4}		
		Quaternion	5.598×10^{-14}	5.1517×10^{-13}	1	5.0580×10^{-4}		76.200 14
pdb2lld		Classic	1.937×10^{-13}	3.3972×10^{-3}	5	1.7083×10^{-3}		
		Quaternion	2.214×10^{-13}	3.3972×10^{-3}	5	1.1057×10^{-3}		54.503 21
pdb2lm9		Classic	6.247×10^{-14}	2.2967×10^{-3}	2	4.1514×10^{-3}		
		Quaternion	7.706×10^{-14}	2.2967×10^{-3}	2	2.6599×10^{-3}		56.072 09
pdb2lmf		Classic	1.282×10^{-13}	1.0942×10^{-4}	1	9.3858×10^{-4}		
		Quaternion	1.462×10^{-13}	1.0942×10^{-4}	1	6.0694×10^{-4}		54.640 86
pdb2ln3		Classic	1.292×10^{-13}	2.5821×10^{-13}	1	3.5571×10^{-3}		
		Quaternion	1.358×10^{-13}	2.9987×10^{-13}	1	2.2985×10^{-3}		54.760 49
pdb2lo2		Classic	2.068×10^{-14}	1.4423×10^{-2}	2	1.6020×10^{-3}		
		Quaternion	2.565×10^{-14}	1.4423×10^{-2}	2	1.0371×10^{-3}		54.465 80
pdb2lqp		Classic	2.950×10^{-13}	5.7815×10^{-4}	2	3.0592×10^{-3}		
		Quaternion	3.085×10^{-13}	5.7815×10^{-4}	2	1.9721×10^{-3}		55.122 15
pdb2lr0		Classic	3.549×10^{-12}	1.2202×10^{-11}	1	5.8517×10^{-3}		
		Quaternion	3.440×10^{-12}	1.1747×10^{-11}	1	3.7663×10^{-3}		55.372 72
pdb2lrh		Classic	5.631×10^{-13}	2.9721×10^{-12}	1	5.8890×10^{-3}		
		Quaternion	6.564×10^{-13}	2.9099×10^{-12}	1	3.7894×10^{-3}		55.407 19
pdb2ls9		Classic	1.121×10^{-13}	2.7045×10^{-12}	1	1.0372×10^{-3}		
		Quaternion	1.469×10^{-13}	3.0425×10^{-12}	1	6.6408×10^{-4}		56.179 87
pdb2lsa		Classic	5.165×10^{-14}	2.5535×10^{-3}	2	9.6347×10^{-4}		
		Quaternion	6.899×10^{-14}	2.5535×10^{-3}	2	6.2243×10^{-4}		54.791 97
pdb2lss		Classic	1.230×10^{-13}	1.2372×10^{-3}	1	3.1083×10^{-3}		
		Quaternion	1.454×10^{-13}	1.2372×10^{-3}	1	2.0370×10^{-3}		52.588 90
pdb2lt3		Classic	7.245×10^{-14}	9.6961×10^{-13}	6	4.9414×10^{-3}		
		Quaternion	7.760×10^{-14}	1.0253×10^{-12}	6	3.1731×10^{-3}		55.730 55

Table 2: Results - continued

	Problem	Method	LDE	RMSD	Sol	Time	Improv time
pdb2lu6	Classic	5.341×10^{-15}	7.7550×10^{-3}	1	5.7673	10^{-4}	
	Quaternion	6.912×10^{-15}	7.7550×10^{-3}	1	3.7380	10^{-4}	54.288 03
pdb2lwa	Classic	3.593×10^{-13}	4.9078×10^{-12}	897	1.8524		
	Quaternion	4.402×10^{-13}	4.0818×10^{-12}	897	1.6135		14.812 30
pdb2lx0	Classic	3.568×10^{-13}	7.4851×10^{-12}	5	1.6831×10^{-3}		
	Quaternion	4.035×10^{-13}	7.5304×10^{-12}	5	1.2090×10^{-3}		39.220 26
pdb2lxb	Classic	1.541×10^{-13}	9.0172×10^{-13}	1	1.6346×10^{-2}		
	Quaternion	1.583×10^{-13}	8.6577×10^{-13}	1	8.4678×10^{-3}		93.039 12
pdb2lxy	Classic	9.313×10^{-13}	1.1155×10^{-10}	2	3.4027×10^{-3}		
	Quaternion	1.025×10^{-12}	1.1215×10^{-10}	2	2.1198×10^{-3}		60.519 00
pdb2lxz	Classic	2.371×10^{-12}	1.1003×10^{-4}	2	1.3279×10^{-3}		
	Quaternion	2.792×10^{-12}	1.1003×10^{-4}	2	8.5817×10^{-4}		54.741 86
pdb2lzf	Classic	3.214×10^{-14}	5.9653×10^{-4}	2	2.7016×10^{-1}		
	Quaternion	3.957×10^{-14}	5.9653×10^{-4}	2	1.2907×10^{-1}		109.304 68
pdb2mla	Classic	6.322×10^{-15}	9.1771×10^{-14}	1	1.0501×10^{-3}		
	Quaternion	7.594×10^{-15}	9.0451×10^{-14}	1	6.7609×10^{-4}		55.323 91
pdb2mlj	Classic	1.864×10^{-14}	1.5890×10^{-13}	2	1.2756×10^{-3}		
	Quaternion	2.212×10^{-14}	1.6894×10^{-13}	2	8.1246×10^{-4}		56.999 17
pdb2m2y	Classic	2.698×10^{-13}	1.8177×10^{-3}	1	7.2348×10^{-4}		
	Quaternion	2.808×10^{-13}	1.8177×10^{-3}	1	4.7298×10^{-4}		52.962 67
pdb2m3f	Classic	3.629×10^{-14}	9.5240×10^{-14}	1	8.8135×10^{-4}		
	Quaternion	4.630×10^{-14}	5.7597×10^{-14}	1	5.7349×10^{-4}		53.682 44
pdb2m4j	Classic	1.463×10^{-11}	5.2912×10^{-4}	1	1.2503×10^{-1}		
	Quaternion	1.455×10^{-11}	5.2912×10^{-4}	1	6.4279×10^{-2}		94.509 32
pdb2m8m	Classic	2.407×10^{-14}	6.9769×10^{-3}	5	1.1240×10^{-3}		
	Quaternion	3.022×10^{-14}	6.9769×10^{-3}	5	7.3155×10^{-4}		53.639 51
pdb2m8o	Classic	1.672×10^{-14}	4.7097×10^{-3}	5	1.1242×10^{-3}		
	Quaternion	2.039×10^{-14}	4.7097×10^{-3}	5	7.2381×10^{-4}		55.324 45
pdb2m97	Classic	4.646×10^{-14}	2.4560×10^{-12}	6	2.8899×10^{-3}		
	Quaternion	5.841×10^{-14}	2.4592×10^{-12}	6	1.8648×10^{-3}		54.968 11
pdb2m9g	Classic	2.939×10^{-13}	4.9692×10^{-12}	1	9.9888×10^{-3}		
	Quaternion	3.170×10^{-13}	4.9567×10^{-12}	1	5.3403×10^{-3}		87.046 05
pdb2m9r	Classic	3.537×10^{-14}	3.7505×10^{-12}	1	1.6163×10^{-3}		
	Quaternion	4.405×10^{-14}	3.6480×10^{-12}	1	9.9958×10^{-4}		61.697 04
pdb2mdv	Classic	3.178×10^{-12}	4.7210×10^{-4}	2	6.8026×10^{-3}		
	Quaternion	3.178×10^{-12}	4.7210×10^{-4}	2	3.9721×10^{-3}		71.260 21
pdb2me1	Classic	1.863×10^{-13}	1.4934×10^{-4}	2	2.1160×10^{-3}		
	Quaternion	2.186×10^{-13}	1.4934×10^{-4}	2	1.3658×10^{-3}		54.930 09
pdb2me2	Classic	3.663×10^{-13}	1.3863×10^{-4}	1	1.1531×10^{-3}		
	Quaternion	5.093×10^{-13}	1.3863×10^{-4}	1	7.3819×10^{-4}		56.206 58
pdb2me3	Classic	1.387×10^{-13}	3.4823×10^{-5}	6	1.3822×10^{-3}		
	Quaternion	1.563×10^{-13}	3.4823×10^{-5}	6	9.8622×10^{-4}		40.150 75
pdb2me4	Classic	5.535×10^{-13}	2.9902×10^{-5}	2	4.4463×10^{-3}		
	Quaternion	6.210×10^{-13}	2.9902×10^{-5}	2	2.8423×10^{-3}		56.431 99
pdb2mg1	Classic	4.398×10^{-14}	4.4954×10^{-13}	6	1.0856×10^{-3}		

Table 2: Results - continued

	Problem	Method	LDE	RMSD	Sol	Time	Improv time	
		Quaternion	5.374×10^{-14}	5.4976×10^{-13}	6	6	6.9618×10^{-4}	55.933 91
pdb2mg2		Classic	1.828×10^{-14}	1.0745×10^{-3}	6	6	1.1169×10^{-3}	
		Quaternion	2.476×10^{-14}	1.0745×10^{-3}	6	6	7.2533×10^{-4}	53.991 05
pdb2mg3		Classic	3.541×10^{-14}	6.2977×10^{-13}	6	6	1.1289×10^{-3}	
		Quaternion	4.458×10^{-14}	6.7812×10^{-13}	6	6	7.2806×10^{-4}	55.061 17
pdb2mh8		Classic	1.547×10^{-13}	4.2246×10^{-12}	6	6	2.3314×10^{-3}	
		Quaternion	1.883×10^{-13}	4.0208×10^{-12}	6	6	1.5045×10^{-3}	54.962 79
pdb2mhw		Classic	6.224×10^{-14}	3.6932×10^{-3}	2	2	1.1154×10^{-3}	
		Quaternion	7.127×10^{-14}	3.6932×10^{-3}	2	2	7.3096×10^{-4}	52.587 71
pdb2mi1		Classic	1.827×10^{-12}	2.1485×10^{-11}	4	4	1.8596×10^{-3}	
		Quaternion	2.052×10^{-12}	2.2963×10^{-11}	4	4	1.0003×10^{-3}	85.901 58
pdb2mi7		Classic	6.020×10^{-13}	8.0637×10^{-12}	2	2	3.2090×10^{-3}	
		Quaternion	6.814×10^{-13}	8.8714×10^{-12}	2	2	2.0118×10^{-3}	59.511 50
pdb2mij		Classic	1.240×10^{-13}	1.2077×10^{-12}	1	1	1.5205×10^{-3}	
		Quaternion	1.518×10^{-13}	1.2294×10^{-12}	1	1	9.7765×10^{-4}	55.525 61
pdb2mix		Classic	4.816×10^{-14}	3.7545×10^{-13}	1	1	8.5091×10^{-4}	
		Quaternion	4.680×10^{-14}	3.4098×10^{-13}	1	1	5.5712×10^{-4}	52.734 80
pdb2mj1		Classic	1.305×10^{-13}	2.0809×10^{-3}	1	1	7.1929×10^{-4}	
		Quaternion	1.642×10^{-13}	2.0809×10^{-3}	1	1	4.7119×10^{-4}	52.654 94
pdb2mj2		Classic	9.713×10^{-14}	3.9018×10^{-3}	2	2	1.4352×10^{-3}	
		Quaternion	1.185×10^{-13}	3.9018×10^{-3}	2	2	9.2000×10^{-4}	56.004 75
pdb2mjg		Classic	5.493×10^{-14}	1.4497×10^{-3}	2	2	2.1881×10^{-2}	
		Quaternion	6.572×10^{-14}	1.4497×10^{-3}	2	2	1.1068×10^{-2}	97.696 93
pdb2mji		Classic	3.205×10^{-12}	1.3090×10^{-11}	1	1	5.8922×10^{-3}	
		Quaternion	3.245×10^{-12}	1.2949×10^{-11}	1	1	3.8344×10^{-3}	53.666 31
pdb2mle		Classic	1.491×10^{-13}	1.6719×10^{-3}	2	2	3.0805×10^{-3}	
		Quaternion	1.535×10^{-13}	1.6719×10^{-3}	2	2	1.9949×10^{-3}	54.413 97
pdb2mlf		Classic	9.918×10^{-14}	8.3036×10^{-13}	2	2	3.0555×10^{-3}	
		Quaternion	1.127×10^{-13}	8.8493×10^{-13}	2	2	1.9695×10^{-3}	55.139 83
pdb2mo5		Classic	1.394×10^{-12}	1.9007×10^{-11}	5	5	1.4150×10^{-2}	
		Quaternion	1.403×10^{-12}	1.8458×10^{-11}	5	5	7.9790×10^{-3}	77.344 06
pdb2mpu		Classic	9.752×10^{-14}	2.5305×10^{-12}	1	1	3.9626×10^{-3}	
		Quaternion	1.013×10^{-13}	2.5592×10^{-12}	1	1	2.5681×10^{-3}	54.299 23
pdb2mra		Classic	2.632×10^{-13}	4.3616×10^{-12}	1	1	5.9542×10^{-3}	
		Quaternion	2.767×10^{-13}	4.3117×10^{-12}	1	1	3.7235×10^{-3}	59.907 91
pdb2msu		Classic	7.808×10^{-14}	3.6237×10^{-12}	1	1	7.9736×10^{-4}	
		Quaternion	8.759×10^{-14}	3.6441×10^{-12}	1	1	5.2241×10^{-4}	52.630 41
pdb2mty		Classic	1.848×10^{-14}	5.1232×10^{-12}	2	2	6.9073×10^{-4}	
		Quaternion	2.363×10^{-14}	5.2129×10^{-12}	2	2	3.8700×10^{-4}	78.484 49
pdb2muh		Classic	2.008×10^{-13}	8.0615×10^{-5}	2	2	1.2150×10^{-3}	
		Quaternion	2.251×10^{-13}	8.0615×10^{-5}	2	2	7.8724×10^{-4}	54.340 89
pdb2mvj		Classic	1.534×10^{-13}	6.1752×10^{-12}	1	1	9.3087×10^{-4}	
		Quaternion	1.647×10^{-13}	6.1858×10^{-12}	1	1	5.5436×10^{-4}	67.917 00
pdb2mvt		Classic	6.053×10^{-12}	1.5441×10^{-4}	2	2	2.2728×10^{-3}	
		Quaternion	6.225×10^{-12}	1.5441×10^{-4}	2	2	1.4519×10^{-3}	56.536 62

Table 2: Results - continued

	Problem	Method	LDE	RMSD	Sol	Time	Improv time
pdb2mvx	Classic	1.968×10^{-10}	5.8655×10^{-5}	10	1.9605×10^{-1}		
	Quaternion	1.971×10^{-10}	5.8655×10^{-5}	10	1.0213×10^{-1}	91.951 05	
pdb2mz6	Classic	2.141×10^{-11}	2.3371×10^{-10}	5	5.2765×10^{-1}		
	Quaternion	2.153×10^{-11}	2.3374×10^{-10}	5	2.5949×10^{-1}	103.338 74	
pdb2n00	Classic	2.701×10^{-13}	1.2439×10^{-4}	2	4.0782×10^{-3}		
	Quaternion	3.463×10^{-13}	1.2439×10^{-4}	2	2.6434×10^{-3}	54.281 08	
pdb2n0b	Classic	7.104×10^{-13}	1.0219×10^{-11}	4	3.2339×10^{-4}		
	Quaternion	9.458×10^{-13}	1.0781×10^{-11}	4	1.9024×10^{-4}	69.993 53	
pdb2n0c	Classic	1.282×10^{-13}	1.0471×10^{-12}	1	2.9165×10^{-4}		
	Quaternion	1.672×10^{-13}	9.1394×10^{-13}	1	1.6646×10^{-4}	75.207 33	
pdb2n0d	Classic	3.639×10^{-12}	5.2061×10^{-11}	3	5.1383×10^{-4}		
	Quaternion	4.540×10^{-12}	5.7645×10^{-11}	3	2.8948×10^{-4}	77.504 74	
pdb2n0e	Classic	3.314×10^{-12}	1.1503×10^{-11}	2	3.0653×10^{-4}		
	Quaternion	4.286×10^{-12}	1.8786×10^{-11}	2	1.7371×10^{-4}	76.458 60	
pdb2n0f	Classic	3.160×10^{-13}	2.2697×10^{-12}	2	3.2741×10^{-4}		
	Quaternion	3.999×10^{-13}	2.7490×10^{-12}	2	1.9715×10^{-4}	66.073 46	
pdb2n0g	Classic	8.315×10^{-13}	1.4896×10^{-11}	1	3.0180×10^{-4}		
	Quaternion	9.618×10^{-13}	1.4974×10^{-11}	1	1.7090×10^{-4}	76.600 39	
pdb2n0h	Classic	7.690×10^{-13}	4.1935×10^{-12}	2	3.0528×10^{-4}		
	Quaternion	8.730×10^{-13}	4.1379×10^{-12}	2	1.7401×10^{-4}	75.440 14	
pdb2n35	Classic	3.541×10^{-14}	1.4478×10^{-4}	6	2.1691×10^{-3}		
	Quaternion	4.466×10^{-14}	1.4478×10^{-4}	6	1.3871×10^{-3}	56.374 24	
pdb2n3a	Classic	8.761×10^{-14}	2.1457×10^{-3}	5	7.5462×10^{-2}		
	Quaternion	1.049×10^{-13}	2.1457×10^{-3}	5	3.7302×10^{-2}	102.299 40	
pdb2n41	Classic	1.812×10^{-13}	5.9366×10^{-3}	2	4.5146×10^{-3}		
	Quaternion	1.836×10^{-13}	5.9366×10^{-3}	2	2.9191×10^{-3}	54.655 64	
pdb2n4e	Classic	1.494×10^{-13}	5.1960×10^{-3}	2	4.5249×10^{-3}		
	Quaternion	1.687×10^{-13}	5.1960×10^{-3}	2	2.9212×10^{-3}	54.899 14	
pdb2n5q	Classic	1.732×10^{-12}	1.1051×10^{-11}	1	2.1999×10^{-3}		
	Quaternion	1.745×10^{-12}	9.3428×10^{-12}	1	1.4371×10^{-3}	53.076 90	
pdb2n67	Classic	4.443×10^{-13}	2.0736×10^{-12}	1	4.0355×10^{-3}		
	Quaternion	4.465×10^{-13}	2.0936×10^{-12}	1	2.6113×10^{-3}	54.540 49	
pdb2n6n	Classic	6.552×10^{-13}	1.6681×10^{-12}	3	1.4326×10^{-3}		
	Quaternion	7.487×10^{-13}	1.2630×10^{-12}	3	8.2764×10^{-4}	73.094 97	
pdb2n7i	Classic	9.211×10^{-13}	1.3998×10^{-4}	1	2.8437×10^{-3}		
	Quaternion	1.126×10^{-12}	1.3998×10^{-4}	1	1.8370×10^{-3}	54.799 81	
pdb2n7j	Classic	5.969×10^{-13}	2.5110×10^{-12}	1	1.8865×10^{-3}		
	Quaternion	6.094×10^{-13}	2.6436×10^{-12}	1	1.0533×10^{-3}	79.111 85	
pdb2n9b	Classic	1.196×10^{-12}	4.0200×10^{-10}	1	2.0251×10^{-1}		
	Quaternion	1.238×10^{-12}	4.0126×10^{-10}	1	9.7648×10^{-2}	107.385 02	
pdb2na9	Classic	5.437×10^{-14}	2.3390×10^{-12}	1	1.8356×10^{-3}		
	Quaternion	6.688×10^{-14}	2.3721×10^{-12}	1	1.1745×10^{-3}	56.293 11	
pdb2ndc	Classic	3.365×10^{-14}	3.1313×10^{-3}	2	7.1596×10^{-4}		
	Quaternion	4.479×10^{-14}	3.1313×10^{-3}	2	4.6887×10^{-4}	52.699 15	
pdb2nde	Classic	7.016×10^{-14}	8.5286×10^{-5}	2	7.1062×10^{-4}		

Table 2: Results - continued

	Problem	Method	LDE	RMSD	Sol	Time	Improv time	
		Quaternion	8.852×10^{-14}	8.5286×10^{-5}	2	4.6227×10^{-4}		53.721 71
pdb2ndk		Classic	5.005×10^{-13}	9.0150×10^{-5}	1	1.9860×10^{-3}		
		Quaternion	6.266×10^{-13}	9.0150×10^{-5}	1	1.2853×10^{-3}		54.511 46
pdb2nvj		Classic	2.080×10^{-14}	6.7520×10^{-3}	7	1.0301×10^{-3}		
		Quaternion	2.289×10^{-14}	6.7520×10^{-3}	7	6.7523×10^{-4}		52.563 07
pdb2p6j		Classic	4.795×10^{-14}	3.2640×10^{-13}	1	2.1622×10^{-3}		
		Quaternion	6.380×10^{-14}	3.5480×10^{-13}	1	1.3921×10^{-3}		55.320 11
pdb2p81		Classic	7.850×10^{-13}	6.8538×10^{-11}	2	6.7043×10^{-3}		
		Quaternion	8.178×10^{-13}	6.8914×10^{-11}	2	5.2248×10^{-3}		28.315 67
pdb2pqe		Classic	1.127×10^{-11}	2.0306×10^{-5}	26	2.2343×10^{-2}		
		Quaternion	1.248×10^{-11}	2.0306×10^{-5}	26	1.9181×10^{-2}		16.484 24
pdb2rlg		Classic	5.501×10^{-14}	4.8140×10^{-13}	1	5.6452×10^{-4}		
		Quaternion	6.973×10^{-14}	5.3066×10^{-13}	1	3.1970×10^{-4}		76.578 04
pdb2rlh		Classic	4.764×10^{-14}	1.0750×10^{-12}	1	5.6716×10^{-4}		
		Quaternion	5.790×10^{-14}	1.0423×10^{-12}	1	3.2634×10^{-4}		73.792 95
pdb2rmy		Classic	1.867×10^{-13}	1.2240×10^{-4}	1	1.3743×10^{-3}		
		Quaternion	2.493×10^{-13}	1.2240×10^{-4}	1	8.8661×10^{-4}		55.004 01
pdb2rnd		Classic	2.622×10^{-13}	3.4031×10^{-12}	33	4.6985×10^{-2}		
		Quaternion	3.565×10^{-13}	3.8842×10^{-12}	33	2.9143×10^{-2}		61.221 49
pdb2roo		Classic	2.933×10^{-12}	3.3639×10^{-4}	6	3.1999×10^{-3}		
		Quaternion	3.525×10^{-12}	3.3639×10^{-4}	6	1.8892×10^{-3}		69.378 33
pdb2rql		Classic	2.345×10^{-12}	9.9510×10^{-11}	1	4.9303×10^{-3}		
		Quaternion	2.496×10^{-12}	1.0013×10^{-10}	1	3.0994×10^{-3}		59.071 72
pdb2rut		Classic	4.389×10^{-14}	2.0579×10^{-13}	2	1.4529×10^{-3}		
		Quaternion	5.009×10^{-14}	4.0527×10^{-13}	2	9.2881×10^{-4}		56.428 07
pdb2ruv		Classic	5.775×10^{-14}	5.4278×10^{-13}	2	1.5075×10^{-3}		
		Quaternion	7.404×10^{-14}	6.5510×10^{-13}	2	9.6060×10^{-4}		56.935 77
pdb2rux		Classic	2.668×10^{-14}	3.6084×10^{-3}	1	1.4689×10^{-3}		
		Quaternion	3.011×10^{-14}	3.6084×10^{-3}	1	9.3950×10^{-4}		56.344 78
pdb2ruy		Classic	1.960×10^{-14}	4.1535×10^{-13}	1	1.4759×10^{-3}		
		Quaternion	2.372×10^{-14}	3.5981×10^{-13}	1	9.4569×10^{-4}		56.062 55
pdb2rv3		Classic	3.655×10^{-14}	3.0630×10^{-4}	1	1.4480×10^{-3}		
		Quaternion	4.114×10^{-14}	3.0630×10^{-4}	1	9.3084×10^{-4}		55.560 47
pdb2rv5		Classic	1.145×10^{-14}	8.6519×10^{-4}	1	1.4103×10^{-3}		
		Quaternion	1.338×10^{-14}	8.6519×10^{-4}	1	9.0961×10^{-4}		55.042 44
pdb2y4q		Classic	1.410×10^{-12}	4.6451×10^{-11}	2	3.3921×10^{-3}		
		Quaternion	1.451×10^{-12}	4.6324×10^{-11}	2	2.1878×10^{-3}		55.050 15