

Table 1: Results

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
pdb1a57 698	ClassicAll	8	3.1806×10^{-11}	5	2.096×10^{-11}	1.5582×10^{-2}	
	QuaternionAll	8	3.3550×10^{-11}	5	2.092×10^{-11}	7.8981×10^{-3}	97.291
pdb1b4c 1108	ClassicAll	16	2.6824×10^{-12}	9	5.067×10^{-13}	2.7263×10^{-2}	
	QuaternionAll	16	3.4662×10^{-12}	9	5.493×10^{-13}	1.3962×10^{-2}	95.260
pdb1ba5 320	ClassicAll	8	3.5621×10^{-2}	6	9.363×10^{-13}	2.2455×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	3.5621×10^{-2}	6	1.069×10^{-12}	1.4666×10^{-3}	53.109
pdb1d1n 594	ClassicAll	2	2.9766×10^{-11}	1	1.005×10^{-11}	4.1856×10^{-3}	
	QuaternionAll	2	2.9311×10^{-11}	1	9.672×10^{-12}	2.2939×10^{-3}	82.467
pdb1dp3 332	ClassicAll	8	4.9981×10^{-5}	2	7.704×10^{-13}	2.3993×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	4.9981×10^{-5}	2	8.940×10^{-13}	1.5227×10^{-3}	57.567
pdb1du1 122	ClassicAll	16	6.6600×10^{-13}	1	8.225×10^{-13}	1.0090×10^{-3}	
	QuaternionAll	16	1.6577×10^{-12}	1	1.258×10^{-12}	7.1700×10^{-4}	40.723
pdb1eii 806	ClassicAll	8	1.9451×10^{-10}	1	1.393×10^{-11}	6.0430×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.8740×10^{-10}	1	1.365×10^{-11}	3.8672×10^{-3}	56.262
pdb1fcl 338	ClassicAll	8	1.5447×10^{-11}	2	4.542×10^{-12}	3.2112×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.5223×10^{-11}	2	4.515×10^{-12}	1.9689×10^{-3}	63.093
pdb1fd6 344	ClassicAll	8	2.0242×10^{-5}	2	3.182×10^{-12}	2.4705×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	2.0242×10^{-5}	2	3.193×10^{-12}	1.5758×10^{-3}	56.777
pdb1hf9 496	ClassicAll	8	9.0139×10^{-10}	6	1.156×10^{-11}	7.3430×10^{-2}	
	QuaternionAll	8	9.0282×10^{-10}	6	1.180×10^{-11}	3.5948×10^{-2}	104.267
pdb1i2u 266	ClassicAll	8	1.3842×10^{-3}	2	5.562×10^{-13}	1.9314×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.3842×10^{-3}	2	5.609×10^{-13}	1.2355×10^{-3}	56.329
pdb1i2v 266	ClassicAll	8	8.9125×10^{-13}	5	2.422×10^{-13}	1.9038×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	8.8206×10^{-13}	5	2.525×10^{-13}	1.2085×10^{-3}	57.533
pdb1ijc 380	ClassicAll	8	9.1858×10^{-11}	2	1.408×10^{-11}	4.6693×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	9.4110×10^{-11}	2	1.426×10^{-11}	2.7464×10^{-3}	70.016
pdb1jlz 140	ClassicAll	8	1.2304×10^{-4}	1	5.594×10^{-13}	9.2063×10^{-4}	
	QuaternionAll	8	1.2304×10^{-4}	1	5.965×10^{-13}	5.9792×10^{-4}	53.972
pdb1jw3 842	ClassicAll	8	1.9618×10^{-12}	2	5.936×10^{-13}	6.3065×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.8088×10^{-12}	2	5.897×10^{-13}	4.0368×10^{-3}	56.227
pdb1k0v 440	ClassicAll	8	8.3940×10^{-5}	2	1.893×10^{-13}	3.3133×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	8.3940×10^{-5}	2	1.894×10^{-13}	2.1285×10^{-3}	55.665
pdb1k2h 1120	ClassicAll	8	1.9788×10^{-4}	2	5.490×10^{-13}	2.8149×10^{-2}	
	QuaternionAll	8	1.9788×10^{-4}	2	5.198×10^{-13}	1.3472×10^{-2}	108.945
pdb1k36 278	ClassicAll	8	1.6100×10^{-10}	1	8.820×10^{-12}	2.3139×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.8077×10^{-10}	1	1.081×10^{-11}	1.4276×10^{-3}	62.081
pdb1k37 278	ClassicAll	8	2.1407×10^{-12}	2	4.711×10^{-13}	3.1825×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	2.0318×10^{-12}	2	4.988×10^{-13}	1.8609×10^{-3}	71.016
pdb1kuw 62	ClassicAll	8	1.8706×10^{-4}	1	9.229×10^{-14}	3.9958×10^{-4}	
	QuaternionAll	8	1.8706×10^{-4}	1	1.130×10^{-13}	2.5942×10^{-4}	54.027
pdb1kz0 98	ClassicAll	8	6.7512×10^{-13}	1	4.404×10^{-14}	6.4951×10^{-4}	
	QuaternionAll	8	6.2568×10^{-13}	1	5.880×10^{-14}	4.2426×10^{-4}	53.092
pdb1kz2 98	ClassicAll	8	3.1076×10^{-6}	1	2.119×10^{-14}	6.6040×10^{-4}	
	QuaternionAll	8	3.1076×10^{-6}	1	2.886×10^{-14}	4.2818×10^{-4}	54.237
pdb1kz5 74	ClassicAll	8	4.8094×10^{-13}	1	4.081×10^{-14}	4.7413×10^{-4}	
	QuaternionAll	8	5.2716×10^{-13}	1	4.738×10^{-14}	3.1314×10^{-4}	51.411
pdb1lvz 68	ClassicAll	8	1.4708×10^{-3}	1	6.336×10^{-14}	4.3852×10^{-4}	
	QuaternionAll	8	1.4708×10^{-3}	1	7.315×10^{-14}	2.8634×10^{-4}	53.148
pdb1m4e 122	ClassicAll	8	5.4966×10^{-12}	1	5.949×10^{-13}	8.0980×10^{-4}	
	QuaternionAll	8	5.5048×10^{-12}	1	5.972×10^{-13}	5.2536×10^{-4}	54.142
pdb1ma2 104	ClassicAll	8	1.7458×10^{-10}	2	8.695×10^{-12}	1.0891×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.7467×10^{-10}	2	8.757×10^{-12}	6.4654×10^{-4}	68.451
pdb1ma4 104	ClassicAll	8	5.4569×10^{-4}	2	7.247×10^{-14}	1.6868×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	5.4569×10^{-4}	2	7.977×10^{-14}	9.5655×10^{-4}	76.343
pdb1ma5	ClassicAll	8	9.6358×10^{-5}	1	8.169×10^{-13}	6.8469×10^{-4}	

Table 2: 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
104	QuaternionAll	8	9.6358×10^{-5}	1	9.044×10^{-13}	4.4478×10^{-4}	53.938
pd1ma6	ClassicAll	8	1.2440×10^{-11}	2	6.283×10^{-13}	6.9587×10^{-4}	
104	QuaternionAll	8	1.4288×10^{-11}	2	8.487×10^{-13}	4.5448×10^{-4}	53.114
pd1mpe	ClassicAll	8	5.1722×10^{-10}	2	2.617×10^{-11}	3.3665×10^{-2}	
1352	QuaternionAll	8	5.1751×10^{-10}	2	2.624×10^{-11}	1.6555×10^{-2}	103.348
pd1nd9	ClassicAll	24	1.0508×10^{-12}	2	3.026×10^{-13}	3.2628×10^{-3}	
296	QuaternionAll	24	8.9082×10^{-13}	2	3.845×10^{-13}	2.5034×10^{-3}	30.331
pd1ne5	ClassicAll	128	1.4845×10^{-11}	33	1.214×10^{-12}	3.2679×10^{-2}	
254	QuaternionAll	128	1.5105×10^{-11}	33	1.384×10^{-12}	2.0148×10^{-2}	62.201
pd1nmj	ClassicAll	8	2.3883×10^{-13}	7	1.236×10^{-14}	1.1487×10^{-3}	
170	QuaternionAll	8	2.3832×10^{-13}	7	1.422×10^{-14}	7.4061×10^{-4}	55.098
pd1o53	ClassicAll	8	1.0887×10^{-11}	2	3.999×10^{-13}	6.0646×10^{-4}	
92	QuaternionAll	8	1.1252×10^{-11}	2	4.527×10^{-13}	3.9815×10^{-4}	52.318
pd1oqp	ClassicAll	8	2.9348×10^{-3}	2	7.045×10^{-14}	2.8056×10^{-2}	
580	QuaternionAll	8	2.9348×10^{-3}	2	8.314×10^{-14}	1.3171×10^{-2}	113.019
pd1plw	ClassicAll	8	3.0310×10^{-13}	2	2.830×10^{-14}	1.8780×10^{-4}	
32	QuaternionAll	8	3.2973×10^{-13}	2	3.112×10^{-14}	1.2255×10^{-4}	53.241
pd1plx	ClassicAll	8	2.8525×10^{-4}	1	1.574×10^{-13}	1.8351×10^{-4}	
32	QuaternionAll	8	2.8525×10^{-4}	1	2.060×10^{-13}	1.2361×10^{-4}	48.461
pd1pv0	ClassicAll	32	1.3024×10^{-11}	1	2.409×10^{-13}	7.6247×10^{-3}	
278	QuaternionAll	32	1.3017×10^{-11}	1	2.723×10^{-13}	4.7941×10^{-3}	59.045
pd1pzz	ClassicAll	8	3.9940×10^{-10}	1	5.644×10^{-12}	3.8287×10^{-1}	
724	QuaternionAll	8	3.9046×10^{-10}	1	5.871×10^{-12}	1.8116×10^{-1}	111.347
pd1qlk	ClassicAll	32	3.1378×10^{-5}	17	2.634×10^{-13}	4.7288×10^{-2}	
1108	QuaternionAll	32	3.1378×10^{-5}	17	2.870×10^{-13}	2.7151×10^{-2}	74.166
pd1r57	ClassicAll	8	4.3330×10^{-3}	2	1.847×10^{-13}	4.5824×10^{-3}	
614	QuaternionAll	8	4.3330×10^{-3}	2	2.054×10^{-13}	2.9117×10^{-3}	57.382
pd1ry3	ClassicAll	32	9.1924×10^{-12}	6	4.938×10^{-13}	1.1372×10^{-2}	
386	QuaternionAll	32	9.4285×10^{-12}	6	5.913×10^{-13}	6.2893×10^{-3}	80.815
pd1s4h	ClassicAll	64	1.4643×10^{-4}	18	4.696×10^{-13}	3.0563×10^{-3}	
80	QuaternionAll	64	1.4643×10^{-4}	18	6.351×10^{-13}	2.1008×10^{-3}	45.480
pd1s4j	ClassicAll	16	5.8507×10^{-12}	2	1.520×10^{-13}	6.8471×10^{-4}	
80	QuaternionAll	16	5.8479×10^{-12}	2	2.083×10^{-13}	4.9000×10^{-4}	39.738
pd1s6j	ClassicAll	32	6.0202×10^{-5}	1	6.073×10^{-13}	7.1433×10^{-3}	
524	QuaternionAll	32	6.0202×10^{-5}	1	7.660×10^{-13}	5.4481×10^{-3}	31.116
pd1sa8	ClassicAll	8	1.7170×10^{-3}	1	9.340×10^{-13}	4.7296×10^{-3}	
638	QuaternionAll	8	1.7170×10^{-3}	1	1.034×10^{-12}	3.0655×10^{-3}	54.286
pd1t2y	ClassicAll	8	2.5460×10^{-4}	1	1.887×10^{-13}	1.0529×10^{-3}	
152	QuaternionAll	8	2.5460×10^{-4}	1	2.396×10^{-13}	6.8069×10^{-4}	54.683
pd1t5q	ClassicAll	2	1.0265×10^{-12}	1	3.877×10^{-14}	9.7410×10^{-4}	
180	QuaternionAll	2	1.0480×10^{-12}	1	5.093×10^{-14}	5.4331×10^{-4}	79.289
pd1tot	ClassicAll	8	3.4218×10^{-3}	5	6.151×10^{-14}	2.3052×10^{-3}	
314	QuaternionAll	8	3.4218×10^{-3}	5	6.855×10^{-14}	1.4928×10^{-3}	54.424
pd1v6r	ClassicAll	8	1.3650×10^{-4}	2	6.835×10^{-13}	1.4034×10^{-3}	
128	QuaternionAll	8	1.3650×10^{-4}	2	6.971×10^{-13}	8.4369×10^{-4}	66.344
pd1v92	ClassicAll	8	3.1327×10^{-5}	1	1.463×10^{-13}	2.0227×10^{-3}	
278	QuaternionAll	8	3.1327×10^{-5}	1	1.630×10^{-13}	1.2927×10^{-3}	56.472
pd1vd7	ClassicAll	16	7.8801×10^{-12}	5	6.342×10^{-13}	1.1848×10^{-3}	
140	QuaternionAll	16	7.9022×10^{-12}	5	7.439×10^{-13}	8.4587×10^{-4}	40.071
pd1vd9	ClassicAll	8	1.5514×10^{-11}	1	1.290×10^{-12}	1.0107×10^{-3}	
140	QuaternionAll	8	1.5541×10^{-11}	1	1.554×10^{-12}	6.4666×10^{-4}	56.295
pd1vdb	ClassicAll	8	8.5740×10^{-12}	2	9.108×10^{-13}	9.4457×10^{-4}	
140	QuaternionAll	8	8.5291×10^{-12}	2	1.082×10^{-12}	6.1177×10^{-4}	54.399
pd1vpc	ClassicAll	8	4.3482×10^{-4}	6	8.510×10^{-15}	1.9767×10^{-3}	
272	QuaternionAll	8	4.3482×10^{-4}	6	1.002×10^{-14}	1.2487×10^{-3}	58.305

Table 2: 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
pdb1wnk 140	ClassicAll	32	2.2292×10^{-10}	1	4.112×10^{-12}	1.7531×10^{-3}	25.978
	QuaternionAll	32	2.2177×10^{-10}	1	4.632×10^{-12}	1.3916×10^{-3}	
pdb1wo4 152	ClassicAll	8	4.6193×10^{-5}	2	9.957×10^{-13}	1.0321×10^{-3}	55.834
	QuaternionAll	8	4.6193×10^{-5}	2	9.634×10^{-13}	6.6230×10^{-4}	
pdb1wo5 152	ClassicAll	32	2.7147×10^{-10}	13	2.372×10^{-12}	2.0968×10^{-3}	32.812
	QuaternionAll	32	2.7625×10^{-10}	13	2.514×10^{-12}	1.5788×10^{-3}	
pdb1x60 476	ClassicAll	16	6.7449×10^{-12}	1	1.076×10^{-12}	6.7809×10^{-3}	54.067
	QuaternionAll	16	6.9447×10^{-12}	1	1.179×10^{-12}	4.4013×10^{-3}	
pdb1x9v 544	ClassicAll	8	1.1547×10^{-4}	6	8.968×10^{-13}	8.5572×10^{-2}	109.228
	QuaternionAll	8	1.1547×10^{-4}	6	9.611×10^{-13}	4.0899×10^{-2}	
pdb1y5c 68	ClassicAll	16	8.7435×10^{-13}	5	7.693×10^{-14}	5.5640×10^{-4}	38.279
	QuaternionAll	16	8.2242×10^{-13}	5	9.383×10^{-14}	4.0238×10^{-4}	
pdb1yx7 500	ClassicAll	32	1.3647×10^{-10}	25	3.509×10^{-12}	1.3006×10^{-2}	74.164
	QuaternionAll	32	1.4245×10^{-10}	25	4.348×10^{-12}	7.4677×10^{-3}	
pdb1yx8 500	ClassicAll	8	2.5841×10^{-10}	6	7.284×10^{-12}	4.2653×10^{-3}	60.652
	QuaternionAll	8	2.6921×10^{-10}	6	8.217×10^{-12}	2.6550×10^{-3}	
pdb1yxr 464	ClassicAll	128	9.2421×10^{-4}	29	3.514×10^{-10}	4.0949×10^{-2}	47.393
	QuaternionAll	128	9.2421×10^{-4}	29	3.515×10^{-10}	2.7782×10^{-2}	
pdb2a2y 1072	ClassicAll	8	8.1076×10^{-5}	2	1.150×10^{-12}	2.2058×10^{-1}	113.269
	QuaternionAll	8	8.1076×10^{-5}	2	1.151×10^{-12}	1.0343×10^{-1}	
pdb2a4j 580	ClassicAll	16	1.0516×10^{-4}	2	2.085×10^{-14}	1.1612×10^{-2}	91.019
	QuaternionAll	16	1.0516×10^{-4}	2	2.727×10^{-14}	6.0789×10^{-3}	
pdb2adl 868	ClassicAll	384	3.1161×10^{-11}	1	1.752×10^{-11}	2.8493×10^{-1}	45.881
	QuaternionAll	384	3.3255×10^{-11}	1	1.787×10^{-11}	1.9532×10^{-1}	
pdb2adn 868	ClassicAll	8	2.3364×10^{-10}	1	6.693×10^{-12}	1.8348×10^{-2}	95.672
	QuaternionAll	8	2.3188×10^{-10}	1	6.465×10^{-12}	9.3767×10^{-3}	
pdb2ajj 170	ClassicAll	8	2.9810×10^{-4}	1	5.641×10^{-14}	1.1601×10^{-3}	55.577
	QuaternionAll	8	2.9810×10^{-4}	1	6.584×10^{-14}	7.4568×10^{-4}	
pdb2ajm 170	ClassicAll	8	2.4063×10^{-12}	2	1.183×10^{-13}	1.1723×10^{-3}	55.163
	QuaternionAll	8	2.7001×10^{-12}	2	1.555×10^{-13}	7.5551×10^{-4}	
pdb2ajn 170	ClassicAll	8	4.3268×10^{-4}	1	1.076×10^{-13}	1.1681×10^{-3}	55.685
	QuaternionAll	8	4.3268×10^{-4}	1	1.217×10^{-13}	7.5027×10^{-4}	
pdb2ajo 170	ClassicAll	8	2.4063×10^{-12}	2	1.183×10^{-13}	1.1789×10^{-3}	55.902
	QuaternionAll	8	2.7001×10^{-12}	2	1.555×10^{-13}	7.5618×10^{-4}	
pdb2akk 446	ClassicAll	8	3.0416×10^{-3}	2	1.289×10^{-13}	5.0238×10^{-3}	64.773
	QuaternionAll	8	3.0416×10^{-3}	2	1.279×10^{-13}	3.0489×10^{-3}	
pdb2bzb 748	ClassicAll	8	4.6498×10^{-13}	5	9.361×10^{-14}	4.6607×10^{-2}	91.924
	QuaternionAll	8	6.0113×10^{-13}	5	1.224×10^{-13}	2.4284×10^{-2}	
pdb2c0s 386	ClassicAll	8	1.0793×10^{-2}	6	3.028×10^{-13}	2.8494×10^{-3}	55.727
	QuaternionAll	8	1.0793×10^{-2}	6	3.380×10^{-13}	1.8297×10^{-3}	
pdb2dci 120	ClassicAll	2	2.0907×10^{-13}	1	2.366×10^{-14}	6.5207×10^{-4}	75.623
	QuaternionAll	2	3.3732×10^{-13}	1	2.950×10^{-14}	3.7129×10^{-4}	
pdb2eem 206	ClassicAll	8	9.5324×10^{-12}	1	5.190×10^{-13}	1.5235×10^{-3}	57.613
	QuaternionAll	8	9.5866×10^{-12}	1	5.461×10^{-13}	9.6661×10^{-4}	
pdb2fva 494	ClassicAll	8	1.2680×10^{-11}	2	1.047×10^{-12}	4.5968×10^{-3}	62.799
	QuaternionAll	8	1.2689×10^{-11}	2	1.195×10^{-12}	2.8236×10^{-3}	
pdb2fvf 494	ClassicAll	8	3.5796×10^{-12}	1	3.106×10^{-13}	3.5687×10^{-3}	54.384
	QuaternionAll	8	3.3286×10^{-12}	1	3.445×10^{-13}	2.3116×10^{-3}	
pdb2fxz 80	ClassicAll	8	4.2293×10^{-12}	1	1.489×10^{-12}	5.4070×10^{-4}	52.622
	QuaternionAll	8	5.3169×10^{-12}	1	1.749×10^{-12}	3.5427×10^{-4}	
pdb2g9j 848	ClassicAll	8	5.8011×10^{-4}	2	3.282×10^{-12}	2.7630×10^{-1}	109.456
	QuaternionAll	8	5.8011×10^{-4}	2	3.535×10^{-12}	1.3191×10^{-1}	
pdb2g9l 224	ClassicAll	8	1.0333×10^{-4}	2	6.365×10^{-14}	1.5858×10^{-3}	55.849
	QuaternionAll	8	1.0333×10^{-4}	2	8.666×10^{-14}	1.0175×10^{-3}	

Table 2: 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
pdb2h5m 614	ClassicAll	8	1.2267×10^{-3}	1	9.692×10^{-13}	4.5296×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.2267×10^{-3}	1	1.032×10^{-12}	2.9101×10^{-3}	55.652
pdb2hep 252	ClassicAll	2	2.1758×10^{-11}	1	1.191×10^{-12}	1.4180×10^{-3}	
	QuaternionAll	2	2.2038×10^{-11}	1	1.268×10^{-12}	7.8439×10^{-4}	80.778
pdb2j0z 752	ClassicAll	16	1.3100×10^{-10}	10	4.392×10^{-12}	2.1804	
	QuaternionAll	16	1.3116×10^{-10}	10	4.954×10^{-12}	1.0811	101.675
pdb2j10 752	ClassicAll	8192	2.9618×10^{-5}	6386	1.744×10^{-10}	6.8637	
	QuaternionAll	8192	2.9618×10^{-5}	6386	1.747×10^{-10}	5.3660	27.910
pdb2j11 752	ClassicAll	4096	2.7803×10^{-11}	2125	5.256×10^{-12}	5.8081	
	QuaternionAll	4096	2.7661×10^{-11}	2125	5.631×10^{-12}	3.9732	46.183
pdb2jmy 92	ClassicAll	8	7.0432×10^{-5}	1	9.834×10^{-13}	6.2813×10^{-4}	
	QuaternionAll	8	7.0432×10^{-5}	1	9.967×10^{-13}	4.1742×10^{-4}	50.480
pdb2jn5 74	ClassicAll	16	6.6339×10^{-12}	5	1.104×10^{-11}	9.2653×10^{-4}	
	QuaternionAll	16	2.0459×10^{-11}	5	2.456×10^{-11}	6.0082×10^{-4}	54.211
pdb2jnk 842	ClassicAll	32	3.4995×10^{-11}	13	2.246×10^{-12}	1.4689×10^{-2}	
	QuaternionAll	32	3.4653×10^{-11}	13	2.319×10^{-12}	9.8279×10^{-3}	49.462
pdb2jpn 476	ClassicAll	8	6.4192×10^{-12}	2	6.730×10^{-14}	4.7127×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	6.5904×10^{-12}	2	6.984×10^{-14}	2.8586×10^{-3}	64.861
pdb2jua 614	ClassicAll	16	1.8732×10^{-4}	6	1.384×10^{-9}	6.2260×10^{-3}	
	QuaternionAll	16	1.8732×10^{-4}	6	1.385×10^{-9}	4.2501×10^{-3}	46.489
pdb2jvd 288	ClassicAll	4	9.4244×10^{-13}	1	3.339×10^{-14}	1.9734×10^{-3}	
	QuaternionAll	4	9.4967×10^{-13}	1	3.898×10^{-14}	1.1386×10^{-3}	73.323
pdb2jwe 984	ClassicAll	2	9.2597×10^{-11}	1	2.695×10^{-11}	1.1963×10^{-2}	
	QuaternionAll	2	9.2052×10^{-11}	1	2.734×10^{-11}	5.6922×10^{-3}	110.167
pdb2jws 338	ClassicAll	8	4.5612×10^{-4}	2	1.251×10^{-13}	2.4976×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	4.5612×10^{-4}	2	1.543×10^{-13}	1.5844×10^{-3}	57.636
pdb2jwu 338	ClassicAll	8	3.0876×10^{-4}	1	4.421×10^{-12}	3.2823×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	3.0876×10^{-4}	1	4.373×10^{-12}	2.0022×10^{-3}	63.935
pdb2jxf 182	ClassicAll	8	2.4000×10^{-4}	1	1.399×10^{-13}	1.2556×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	2.4000×10^{-4}	1	1.734×10^{-13}	8.0453×10^{-4}	56.060
pdb2jz5 548	ClassicAll	8	1.7460×10^{-3}	1	2.860×10^{-13}	4.2200×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.7460×10^{-3}	1	2.854×10^{-13}	2.6501×10^{-3}	59.240
pdb2k2a 422	ClassicAll	8	4.7195×10^{-3}	5	3.810×10^{-14}	3.1534×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	4.7195×10^{-3}	5	5.148×10^{-14}	1.9931×10^{-3}	58.213
pdb2k2f 1268	ClassicAll	8	1.2926×10^{-11}	1	2.639×10^{-13}	3.1283×10^1	
	QuaternionAll	8	1.2956×10^{-11}	1	2.818×10^{-13}	1.4569×10^1	114.720
pdb2k36 896	ClassicAll	8	1.6972×10^{-12}	1	1.922×10^{-13}	6.7703×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.6007×10^{-12}	1	2.045×10^{-13}	4.3494×10^{-3}	55.659
pdb2k37 356	ClassicAll	8	3.7147×10^{-12}	1	1.921×10^{-13}	2.6339×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	3.6185×10^{-12}	1	2.525×10^{-13}	1.6726×10^{-3}	57.470
pdb2k3i 656	ClassicAll	8	4.6225×10^{-3}	2	3.810×10^{-13}	6.2547×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	4.6225×10^{-3}	2	4.009×10^{-13}	3.7698×10^{-3}	65.915
pdb2k6s 494	ClassicAll	8	8.2998×10^{-12}	2	2.100×10^{-13}	7.7039×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	8.4519×10^{-12}	2	2.651×10^{-13}	4.3824×10^{-3}	75.790
pdb2k7o 1096	ClassicAll	8	1.8663×10^{-4}	1	1.279×10^{-13}	5.5410×10^{-2}	
	QuaternionAll	8	1.8663×10^{-4}	1	1.416×10^{-13}	2.9095×10^{-2}	90.449
pdb2kbm 1268	ClassicAll	8	1.5487×10^{-12}	2	2.165×10^{-13}	2.6533×10^1	
	QuaternionAll	8	1.6865×10^{-12}	2	2.226×10^{-13}	1.2309×10^1	115.553
pdb2kdh 434	ClassicAll	8	7.2209×10^{-5}	2	1.947×10^{-11}	3.8931×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	7.2209×10^{-5}	2	2.228×10^{-11}	2.3979×10^{-3}	62.352
pdb2kdl 338	ClassicAll	8	4.4591×10^{-12}	2	2.301×10^{-13}	2.4427×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	4.4513×10^{-12}	2	2.919×10^{-13}	1.5403×10^{-3}	58.584
pdb2kdm 338	ClassicAll	8	2.1896×10^{-11}	1	3.191×10^{-12}	2.9204×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	2.1643×10^{-11}	1	3.284×10^{-12}	1.8250×10^{-3}	60.027

Table 2: 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
pdb2kdp 428	ClassicAll	8	3.0283×10^{-12}	1	2.621×10^{-13}	3.1413×10^{-3}	56.309
	QuaternionAll	8	3.0741×10^{-12}	1	2.865×10^{-13}	2.0097×10^{-3}	
pdb2kdr 170	ClassicAll	8	6.3024×10^{-5}	2	6.618×10^{-14}	1.1523×10^{-3}	54.996
	QuaternionAll	8	6.3024×10^{-5}	2	8.490×10^{-14}	7.4341×10^{-4}	
pdb2kes 290	ClassicAll	8	1.8528×10^{-4}	7	4.467×10^{-14}	2.0365×10^{-3}	56.953
	QuaternionAll	8	1.8528×10^{-4}	7	5.425×10^{-14}	1.2975×10^{-3}	
pdb2kib 352	ClassicAll	8	2.9706×10^{-5}	1	2.533×10^{-12}	3.7843×10^{-2}	100.673
	QuaternionAll	8	2.9706×10^{-5}	1	2.539×10^{-12}	1.8858×10^{-2}	
pdb2kjin 158	ClassicAll	16	1.9764×10^{-12}	6	9.827×10^{-14}	2.0834×10^{-3}	54.355
	QuaternionAll	16	1.9265×10^{-12}	6	1.174×10^{-13}	1.3497×10^{-3}	
pdb2kjo 158	ClassicAll	8	1.2876×10^{-11}	1	2.284×10^{-13}	1.0729×10^{-3}	56.127
	QuaternionAll	8	1.2921×10^{-11}	1	2.421×10^{-13}	6.8720×10^{-4}	
pdb2kjr 572	ClassicAll	8	5.1341×10^{-11}	2	3.247×10^{-12}	5.4114×10^{-3}	64.447
	QuaternionAll	8	5.1082×10^{-11}	2	3.252×10^{-12}	3.2907×10^{-3}	
pdb2kko 1300	ClassicAll	8	6.9643×10^{-4}	2	1.191×10^{-13}	6.1859×10^{-2}	94.433
	QuaternionAll	8	6.9643×10^{-4}	2	1.284×10^{-13}	3.1815×10^{-2}	
pdb2kl5 662	ClassicAll	8	2.4505×10^{-12}	1	1.820×10^{-13}	4.9361×10^{-3}	59.149
	QuaternionAll	8	2.5206×10^{-12}	1	2.020×10^{-13}	3.1015×10^{-3}	
pdb2klz 276	ClassicAll	2	3.9786×10^{-13}	1	3.439×10^{-14}	1.5731×10^{-3}	82.795
	QuaternionAll	2	3.7834×10^{-13}	1	4.443×10^{-14}	8.6057×10^{-4}	
pdb2ko1 1060	ClassicAll	8	9.3273×10^{-4}	2	1.150×10^{-12}	8.6471×10^{-2}	109.908
	QuaternionAll	8	9.3273×10^{-4}	2	1.151×10^{-12}	4.1195×10^{-2}	
pdb2koz 200	ClassicAll	32	4.5817×10^{-5}	2	1.075×10^{-9}	2.6779×10^{-3}	27.774
	QuaternionAll	32	4.5817×10^{-5}	2	1.075×10^{-9}	2.0958×10^{-3}	
pdb2kp0 200	ClassicAll	8	7.8392×10^{-11}	2	4.894×10^{-12}	1.4671×10^{-3}	57.807
	QuaternionAll	8	8.2404×10^{-11}	2	5.595×10^{-12}	9.2970×10^{-4}	
pdb2ksg 290	ClassicAll	8	9.2027×10^{-13}	1	3.215×10^{-14}	2.0642×10^{-3}	58.428
	QuaternionAll	8	9.2208×10^{-13}	1	3.967×10^{-14}	1.3029×10^{-3}	
pdb2kt8 458	ClassicAll	8	4.1573×10^{-4}	1	3.314×10^{-12}	3.3068×10^{-3}	56.252
	QuaternionAll	8	4.1573×10^{-4}	1	3.535×10^{-12}	2.1163×10^{-3}	
pdb2kuh 404	ClassicAll	8	1.1667×10^{-3}	6	2.015×10^{-14}	2.9990×10^{-3}	57.023
	QuaternionAll	8	1.1667×10^{-3}	6	2.491×10^{-14}	1.9099×10^{-3}	
pdb2kwh 338	ClassicAll	8	2.0587×10^{-3}	2	1.408×10^{-13}	2.4179×10^{-3}	56.482
	QuaternionAll	8	2.0587×10^{-3}	2	1.825×10^{-13}	1.5452×10^{-3}	
pdb2kxa 144	ClassicAll	2	3.9712×10^{-12}	1	1.325×10^{-12}	8.1022×10^{-4}	73.953
	QuaternionAll	2	3.7392×10^{-12}	1	1.351×10^{-12}	4.6577×10^{-4}	
pdb2kyb 362	ClassicAll	16	3.1200×10^{-6}	6	1.321×10^{-11}	7.8145×10^{-3}	71.067
	QuaternionAll	16	3.1200×10^{-6}	6	1.373×10^{-11}	4.5681×10^{-3}	
pdb2l3m 428	ClassicAll	8	1.5178×10^{-3}	1	1.028×10^{-12}	3.1322×10^{-3}	54.897
	QuaternionAll	8	1.5178×10^{-3}	1	9.340×10^{-13}	2.0221×10^{-3}	
pdb2l3n 626	ClassicAll	8	3.9987×10^{-4}	5	3.024×10^{-14}	1.9185×10^{-2}	101.760
	QuaternionAll	8	3.9987×10^{-4}	5	3.632×10^{-14}	9.5090×10^{-3}	
pdb2l45 116	ClassicAll	8	5.9466×10^{-13}	1	2.236×10^{-14}	7.8701×10^{-4}	52.666
	QuaternionAll	8	6.7808×10^{-13}	1	3.033×10^{-14}	5.1551×10^{-4}	
pdb2l5r 138	ClassicAll	2	3.0491×10^{-13}	2	3.535×10^{-14}	7.4203×10^{-4}	76.510
	QuaternionAll	2	3.0031×10^{-13}	2	4.436×10^{-14}	4.2039×10^{-4}	
pdb2l6q 374	ClassicAll	32	1.6115×10^{-9}	29	4.435×10^{-11}	4.9837×10^{-3}	29.346
	QuaternionAll	32	1.6752×10^{-9}	29	5.413×10^{-11}	3.8530×10^{-3}	
pdb2l6r 374	ClassicAll	16	1.0970×10^{-10}	6	2.060×10^{-12}	3.4242×10^{-3}	41.963
	QuaternionAll	16	9.8250×10^{-11}	6	2.174×10^{-12}	2.4121×10^{-3}	
pdb2l98 434	ClassicAll	8	5.6413×10^{-12}	2	3.273×10^{-13}	3.2723×10^{-3}	59.365
	QuaternionAll	8	6.2089×10^{-12}	2	3.637×10^{-13}	2.0533×10^{-3}	
pdb2lci 806	ClassicAll	8	1.2015×10^{-12}	1	2.579×10^{-13}	6.0385×10^{-3}	57.904
	QuaternionAll	8	1.1830×10^{-12}	1	2.404×10^{-13}	3.8242×10^{-3}	

Table 2: 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
pdb2lde 152	ClassicAll	8	6.0406×10^{-3}	2	3.154×10^{-14}	1.0183×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	6.0406×10^{-3}	2	3.766×10^{-14}	6.5139×10^{-4}	56.324
pdb2le2 676	ClassicAll	8	1.5317×10^{-12}	2	2.064×10^{-13}	2.3717×10^{-1}	
	QuaternionAll	8	1.4989×10^{-12}	2	2.042×10^{-13}	1.1331×10^{-1}	109.317
pdb2le7 122	ClassicAll	8	8.8940×10^{-14}	2	2.111×10^{-14}	8.1455×10^{-4}	
	QuaternionAll	8	1.1008×10^{-13}	2	2.749×10^{-14}	5.2815×10^{-4}	54.229
pdb2ler 68	ClassicAll	8	5.1096×10^{-14}	2	1.314×10^{-14}	4.4092×10^{-4}	
	QuaternionAll	8	6.2001×10^{-14}	2	1.532×10^{-14}	2.8479×10^{-4}	54.820
pdb2lgi 338	ClassicAll	8	9.7255×10^{-12}	2	1.068×10^{-12}	2.4736×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	9.6518×10^{-12}	2	1.052×10^{-12}	1.5858×10^{-3}	55.982
pdb2lhc 338	ClassicAll	64	3.8367×10^{-10}	17	2.902×10^{-12}	1.2056×10^{-2}	
	QuaternionAll	64	3.8166×10^{-10}	17	2.997×10^{-12}	7.4845×10^{-3}	61.085
pdb2lhd 338	ClassicAll	8	1.3048×10^{-11}	2	1.930×10^{-12}	3.9836×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.4592×10^{-11}	2	2.033×10^{-12}	2.3787×10^{-3}	67.469
pdb2lhe 338	ClassicAll	16	9.7862×10^{-10}	2	4.963×10^{-11}	3.6513×10^{-3}	
	QuaternionAll	16	9.7867×10^{-10}	2	4.967×10^{-11}	2.5315×10^{-3}	44.233
pdb2lhg 338	ClassicAll	8	5.0995×10^{-13}	6	6.485×10^{-14}	2.4638×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	5.4683×10^{-13}	6	7.343×10^{-14}	1.5721×10^{-3}	56.722
pdb2lix 162	ClassicAll	2	4.9988×10^{-13}	1	4.842×10^{-14}	8.9432×10^{-4}	
	QuaternionAll	2	5.1517×10^{-13}	1	5.614×10^{-14}	5.0476×10^{-4}	77.178
pdb2lld 242	ClassicAll	8	3.3972×10^{-3}	5	1.938×10^{-13}	1.7133×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	3.3972×10^{-3}	5	2.216×10^{-13}	1.0981×10^{-3}	56.016
pdb2lm9 578	ClassicAll	8	2.2967×10^{-3}	2	6.254×10^{-14}	4.1737×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	2.2967×10^{-3}	2	7.713×10^{-14}	2.6702×10^{-3}	56.306
pdb2lmf 140	ClassicAll	8	1.0942×10^{-4}	1	1.282×10^{-13}	9.4562×10^{-4}	
	QuaternionAll	8	1.0942×10^{-4}	1	1.462×10^{-13}	6.1208×10^{-4}	54.493
pdb2ln3 500	ClassicAll	8	2.5821×10^{-13}	1	1.292×10^{-13}	3.6340×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	2.9987×10^{-13}	1	1.359×10^{-13}	2.3342×10^{-3}	55.684
pdb2lo2 230	ClassicAll	8	1.4423×10^{-2}	2	2.068×10^{-14}	1.6126×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.4423×10^{-2}	2	2.571×10^{-14}	1.0287×10^{-3}	56.765
pdb2lqp 428	ClassicAll	8	5.7815×10^{-4}	2	2.950×10^{-13}	3.1162×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	5.7815×10^{-4}	2	3.085×10^{-13}	1.9609×10^{-3}	58.921
pdb2lr0 806	ClassicAll	8	1.2202×10^{-11}	1	3.549×10^{-12}	5.9833×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.1747×10^{-11}	1	3.440×10^{-12}	3.7950×10^{-3}	57.661
pdb2lrh 806	ClassicAll	8	2.9721×10^{-12}	1	5.631×10^{-13}	5.9854×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	2.9099×10^{-12}	1	6.564×10^{-13}	3.7878×10^{-3}	58.021
pdb2ls9 152	ClassicAll	8	2.7045×10^{-12}	1	1.122×10^{-13}	1.0399×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	3.0425×10^{-12}	1	1.471×10^{-13}	6.6369×10^{-4}	56.681
pdb2lsa 140	ClassicAll	8	2.5535×10^{-3}	2	5.235×10^{-14}	9.6545×10^{-4}	
	QuaternionAll	8	2.5535×10^{-3}	2	6.998×10^{-14}	6.2943×10^{-4}	53.386
pdb2lss 422	ClassicAll	8	1.2372×10^{-3}	1	1.230×10^{-13}	3.1514×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.2372×10^{-3}	1	1.455×10^{-13}	2.0425×10^{-3}	54.286
pdb2lt3 680	ClassicAll	8	9.6961×10^{-13}	6	7.245×10^{-14}	5.0044×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.0253×10^{-12}	6	7.760×10^{-14}	3.1911×10^{-3}	56.823
pdb2lu6 86	ClassicAll	8	7.7550×10^{-3}	1	5.356×10^{-15}	5.6714×10^{-4}	
	QuaternionAll	8	7.7550×10^{-3}	1	6.922×10^{-15}	3.6953×10^{-4}	53.476
pdb2lwa 432	ClassicAll	4096	4.9078×10^{-12}	897	3.616×10^{-13}	2.0558	
	QuaternionAll	4096	4.0818×10^{-12}	897	4.436×10^{-13}	1.6482	24.732
pdb2lx0 194	ClassicAll	16	7.4851×10^{-12}	5	3.569×10^{-13}	1.7683×10^{-3}	
	QuaternionAll	16	7.5304×10^{-12}	5	4.035×10^{-13}	1.2700×10^{-3}	39.236
pdb2lxb 892	ClassicAll	8	9.0172×10^{-13}	1	1.542×10^{-13}	1.7199×10^{-2}	
	QuaternionAll	8	8.6577×10^{-13}	1	1.585×10^{-13}	8.7033×10^{-3}	97.619
pdb2lxy 404	ClassicAll	8	1.1155×10^{-10}	2	9.313×10^{-13}	3.5526×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.1215×10^{-10}	2	1.025×10^{-12}	2.1861×10^{-3}	62.506

Table 2: 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
pdb2lxx 194	ClassicAll	8	1.1003×10^{-4}	2	2.371×10^{-12}	1.3678×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.1003×10^{-4}	2	2.792×10^{-12}	8.7784×10^{-4}	55.817
pdb2lzf 820	ClassicAll	8	5.9653×10^{-4}	2	3.217×10^{-14}	2.8020×10^{-1}	
	QuaternionAll	8	5.9653×10^{-4}	2	3.959×10^{-14}	1.3204×10^{-1}	112.206
pdb2m1a 158	ClassicAll	8	9.1771×10^{-14}	1	6.346×10^{-15}	1.0912×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	9.0451×10^{-14}	1	7.612×10^{-15}	7.0330×10^{-4}	55.157
pdb2m1j 182	ClassicAll	8	1.5890×10^{-13}	2	1.865×10^{-14}	1.3146×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.6894×10^{-13}	2	2.212×10^{-14}	8.2991×10^{-4}	58.407
pdb2m2y 110	ClassicAll	8	1.8177×10^{-3}	1	2.699×10^{-13}	7.5009×10^{-4}	
	QuaternionAll	8	1.8177×10^{-3}	1	2.808×10^{-13}	4.8893×10^{-4}	53.413
pdb2m3f 134	ClassicAll	8	9.5240×10^{-14}	1	3.629×10^{-14}	9.0524×10^{-4}	
	QuaternionAll	8	5.7597×10^{-14}	1	4.641×10^{-14}	5.8988×10^{-4}	53.464
pdb2m4j 2178	ClassicAll	8	5.2912×10^{-4}	1	1.463×10^{-11}	1.3037×10^{-1}	
	QuaternionAll	8	5.2912×10^{-4}	1	1.455×10^{-11}	6.6710×10^{-2}	95.427
pdb2m8m 170	ClassicAll	8	6.9769×10^{-3}	5	2.424×10^{-14}	1.1619×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	6.9769×10^{-3}	5	3.058×10^{-14}	7.5389×10^{-4}	54.121
pdb2m8o 170	ClassicAll	8	4.7097×10^{-3}	5	1.798×10^{-14}	1.1671×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	4.7097×10^{-3}	5	2.301×10^{-14}	7.4862×10^{-4}	55.893
pdb2m97 416	ClassicAll	8	2.4560×10^{-12}	6	4.654×10^{-14}	2.9994×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	2.4592×10^{-12}	6	5.847×10^{-14}	1.9209×10^{-3}	56.145
pdb2m9g 1108	ClassicAll	8	4.9692×10^{-12}	1	2.939×10^{-13}	1.0527×10^{-2}	
	QuaternionAll	8	4.9567×10^{-12}	1	3.170×10^{-13}	5.5735×10^{-3}	88.877
pdb2m9r 242	ClassicAll	8	3.7505×10^{-12}	1	3.537×10^{-14}	1.6871×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	3.6480×10^{-12}	1	4.406×10^{-14}	1.0255×10^{-3}	64.513
pdb2mdv 460	ClassicAll	8	4.7210×10^{-4}	2	3.178×10^{-12}	7.0394×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	4.7210×10^{-4}	2	3.178×10^{-12}	4.1026×10^{-3}	71.585
pdb2me1 164	ClassicAll	16	1.4934×10^{-4}	2	1.886×10^{-13}	2.1821×10^{-3}	
	QuaternionAll	16	1.4934×10^{-4}	2	2.202×10^{-13}	1.4122×10^{-3}	54.511
pdb2me2 164	ClassicAll	8	1.3863×10^{-4}	1	3.667×10^{-13}	1.1913×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.3863×10^{-4}	1	5.098×10^{-13}	7.5499×10^{-4}	57.796
pdb2me3 164	ClassicAll	16	3.4823×10^{-5}	6	1.425×10^{-13}	1.4133×10^{-3}	
	QuaternionAll	16	3.4823×10^{-5}	6	1.590×10^{-13}	1.0186×10^{-3}	38.750
pdb2me4 164	ClassicAll	32	2.9902×10^{-5}	2	2.854×10^{-9}	4.5919×10^{-3}	
	QuaternionAll	32	2.9902×10^{-5}	2	2.854×10^{-9}	2.9285×10^{-3}	56.803
pdb2mg1 164	ClassicAll	8	4.4954×10^{-13}	6	4.400×10^{-14}	1.1179×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	5.4976×10^{-13}	6	5.374×10^{-14}	7.1921×10^{-4}	55.431
pdb2mg2 170	ClassicAll	8	1.0745×10^{-3}	6	1.831×10^{-14}	1.1581×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.0745×10^{-3}	6	2.481×10^{-14}	7.4592×10^{-4}	55.258
pdb2mg3 170	ClassicAll	8	6.2977×10^{-13}	6	3.542×10^{-14}	1.1657×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	6.7812×10^{-13}	6	4.459×10^{-14}	7.4607×10^{-4}	56.250
pdb2mh8 338	ClassicAll	8	4.2246×10^{-12}	6	1.547×10^{-13}	2.4174×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	4.0208×10^{-12}	6	1.883×10^{-13}	1.5513×10^{-3}	55.829
pdb2mhw 164	ClassicAll	8	3.6932×10^{-3}	2	6.229×10^{-14}	1.1481×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	3.6932×10^{-3}	2	7.130×10^{-14}	7.4755×10^{-4}	53.584
pdb2mi1 84	ClassicAll	4	2.1485×10^{-11}	4	1.828×10^{-12}	1.9341×10^{-3}	
	QuaternionAll	4	2.2963×10^{-11}	4	2.053×10^{-12}	1.0341×10^{-3}	87.031
pdb2mi7 404	ClassicAll	8	8.0637×10^{-12}	2	6.022×10^{-13}	3.3329×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	8.8714×10^{-12}	2	6.815×10^{-13}	2.0861×10^{-3}	59.768
pdb2mij 224	ClassicAll	8	1.2077×10^{-12}	1	1.244×10^{-13}	1.5629×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.2294×10^{-12}	1	1.522×10^{-13}	1.0061×10^{-3}	55.336
pdb2mix 128	ClassicAll	8	3.7545×10^{-13}	1	4.816×10^{-14}	8.8110×10^{-4}	
	QuaternionAll	8	3.4098×10^{-13}	1	4.684×10^{-14}	5.7309×10^{-4}	53.747
pdb2mj1 110	ClassicAll	8	2.0809×10^{-3}	1	1.309×10^{-13}	7.4187×10^{-4}	
	QuaternionAll	8	2.0809×10^{-3}	1	1.646×10^{-13}	4.8251×10^{-4}	53.752

Table 2: 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
pdb2mj2 218	ClassicAll	8	3.9018×10^{-3}	2	9.775×10^{-14}	1.4852×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	3.9018×10^{-3}	2	1.192×10^{-13}	9.4885×10^{-4}	56.521
pdb2mjg 556	ClassicAll	8	1.4497×10^{-3}	2	5.503×10^{-14}	2.2315×10^{-2}	
	QuaternionAll	8	1.4497×10^{-3}	2	6.579×10^{-14}	1.0919×10^{-2}	104.373
pdb2mji 788	ClassicAll	8	1.3090×10^{-11}	1	3.207×10^{-12}	6.1432×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.2949×10^{-11}	1	3.247×10^{-12}	3.9449×10^{-3}	55.723
pdb2mle 434	ClassicAll	8	1.6719×10^{-3}	2	1.491×10^{-13}	3.2646×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.6719×10^{-3}	2	1.535×10^{-13}	2.0535×10^{-3}	58.974
pdb2mlf 434	ClassicAll	8	8.3036×10^{-13}	2	9.918×10^{-14}	3.1743×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	8.8493×10^{-13}	2	1.127×10^{-13}	2.0248×10^{-3}	56.771
pdb2mo5 854	ClassicAll	16	1.9007×10^{-11}	5	1.394×10^{-12}	1.4842×10^{-2}	
	QuaternionAll	16	1.8458×10^{-11}	5	1.403×10^{-12}	8.2914×10^{-3}	79.004
pdb2mpu 554	ClassicAll	8	2.5305×10^{-12}	1	9.785×10^{-14}	4.1055×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	2.5592×10^{-12}	1	1.016×10^{-13}	2.6442×10^{-3}	55.265
pdb2mra 704	ClassicAll	8	4.3616×10^{-12}	1	2.632×10^{-13}	6.3943×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	4.3117×10^{-12}	1	2.768×10^{-13}	3.9003×10^{-3}	63.943
pdb2msu 122	ClassicAll	8	3.6237×10^{-12}	1	7.813×10^{-14}	8.1934×10^{-4}	
	QuaternionAll	8	3.6441×10^{-12}	1	8.765×10^{-14}	5.3528×10^{-4}	53.066
pdb2mty 120	ClassicAll	2	5.1232×10^{-12}	2	1.848×10^{-14}	7.0059×10^{-4}	
	QuaternionAll	2	5.2129×10^{-12}	2	2.363×10^{-14}	3.8988×10^{-4}	79.695
pdb2muh 98	ClassicAll	16	8.0615×10^{-5}	2	2.008×10^{-13}	1.2490×10^{-3}	
	QuaternionAll	16	8.0615×10^{-5}	2	2.279×10^{-13}	8.1494×10^{-4}	53.268
pdb2mvj 156	ClassicAll	4	6.1752×10^{-12}	1	1.534×10^{-13}	9.6091×10^{-4}	
	QuaternionAll	4	6.1858×10^{-12}	1	1.647×10^{-13}	5.7153×10^{-4}	68.129
pdb2mvt 284	ClassicAll	8	1.5441×10^{-4}	2	6.053×10^{-12}	2.3433×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.5441×10^{-4}	2	6.225×10^{-12}	1.4723×10^{-3}	59.165
pdb2mvx 2360	ClassicAll	16	5.8655×10^{-5}	10	1.968×10^{-10}	2.0382×10^{-1}	
	QuaternionAll	16	5.8655×10^{-5}	10	1.971×10^{-10}	1.0536×10^{-1}	93.459
pdb2mz6 220	ClassicAll	16	2.3371×10^{-10}	5	2.141×10^{-11}	5.4017×10^{-1}	
	QuaternionAll	16	2.3374×10^{-10}	5	2.153×10^{-11}	2.6604×10^{-1}	103.036
pdb2n00 572	ClassicAll	8	1.2439×10^{-4}	2	2.703×10^{-13}	4.1905×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.2439×10^{-4}	2	3.466×10^{-13}	2.7133×10^{-3}	54.443
pdb2n0b 60	ClassicAll	4	1.0219×10^{-11}	4	7.123×10^{-13}	3.2910×10^{-4}	
	QuaternionAll	4	1.0781×10^{-11}	4	9.477×10^{-13}	1.9672×10^{-4}	67.292
pdb2n0c 60	ClassicAll	2	1.0471×10^{-12}	1	1.293×10^{-13}	3.0322×10^{-4}	
	QuaternionAll	2	9.1394×10^{-13}	1	1.682×10^{-13}	1.7002×10^{-4}	78.341
pdb2n0d 60	ClassicAll	4	5.2061×10^{-11}	3	3.639×10^{-12}	5.0940×10^{-4}	
	QuaternionAll	4	5.7645×10^{-11}	3	4.540×10^{-12}	2.9196×10^{-4}	74.474
pdb2n0e 60	ClassicAll	2	1.1503×10^{-11}	2	3.314×10^{-12}	3.1012×10^{-4}	
	QuaternionAll	2	1.8786×10^{-11}	2	4.286×10^{-12}	1.7505×10^{-4}	77.160
pdb2n0f 60	ClassicAll	4	2.2697×10^{-12}	2	3.185×10^{-13}	3.2834×10^{-4}	
	QuaternionAll	4	2.7490×10^{-12}	2	4.023×10^{-13}	1.9783×10^{-4}	65.975
pdb2n0g 60	ClassicAll	2	1.4896×10^{-11}	1	8.315×10^{-13}	3.0468×10^{-4}	
	QuaternionAll	2	1.4974×10^{-11}	1	9.618×10^{-13}	1.7289×10^{-4}	76.232
pdb2n0h 60	ClassicAll	2	4.1935×10^{-12}	2	7.716×10^{-13}	3.0743×10^{-4}	
	QuaternionAll	2	4.1379×10^{-12}	2	8.755×10^{-13}	1.7397×10^{-4}	76.716
pdb2n35 314	ClassicAll	8	1.4478×10^{-4}	6	3.658×10^{-14}	2.2096×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.4478×10^{-4}	6	4.617×10^{-14}	1.4028×10^{-3}	57.511
pdb2n3a 574	ClassicAll	8	2.1457×10^{-3}	5	8.770×10^{-14}	7.6086×10^{-2}	
	QuaternionAll	8	2.1457×10^{-3}	5	1.049×10^{-13}	3.7663×10^{-2}	102.017
pdb2n41 638	ClassicAll	8	5.9366×10^{-3}	2	1.812×10^{-13}	4.6163×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	5.9366×10^{-3}	2	1.836×10^{-13}	2.9655×10^{-3}	55.666
pdb2n4e 638	ClassicAll	8	5.1960×10^{-3}	2	1.494×10^{-13}	4.6201×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	5.1960×10^{-3}	2	1.687×10^{-13}	2.9772×10^{-3}	55.180

Table 2: 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
pdb2n5q 164	ClassicAll	16	1.1051×10^{-11}	1	1.732×10^{-12}	2.2438×10^{-3}	
	QuaternionAll	16	9.3428×10^{-12}	1	1.745×10^{-12}	1.4682×10^{-3}	52.834
pdb2n67 566	ClassicAll	8	2.0736×10^{-12}	1	4.443×10^{-13}	4.1403×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	2.0936×10^{-12}	1	4.465×10^{-13}	2.6665×10^{-3}	55.274
pdb2n6n 192	ClassicAll	4	1.6681×10^{-12}	3	6.557×10^{-13}	1.4597×10^{-3}	
	QuaternionAll	4	1.2630×10^{-12}	3	7.492×10^{-13}	8.3995×10^{-4}	73.786
pdb2n7i 224	ClassicAll	16	1.3998×10^{-4}	1	9.212×10^{-13}	2.8959×10^{-3}	
	QuaternionAll	16	1.3998×10^{-4}	1	1.126×10^{-12}	1.8653×10^{-3}	55.247
pdb2n7j 336	ClassicAll	2	2.5110×10^{-12}	1	5.969×10^{-13}	1.9271×10^{-3}	
	QuaternionAll	2	2.6436×10^{-12}	1	6.094×10^{-13}	1.0682×10^{-3}	80.415
pdb2n9b 832	ClassicAll	16	4.0200×10^{-10}	1	1.196×10^{-12}	2.1235×10^{-1}	
	QuaternionAll	16	4.0126×10^{-10}	1	1.238×10^{-12}	1.0231×10^{-1}	107.558
pdb2na9 266	ClassicAll	8	2.3390×10^{-12}	1	5.440×10^{-14}	1.8676×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	2.3721×10^{-12}	1	6.690×10^{-14}	1.1871×10^{-3}	57.330
pdb2ndc 110	ClassicAll	8	3.1313×10^{-3}	2	3.365×10^{-14}	7.2832×10^{-4}	
	QuaternionAll	8	3.1313×10^{-3}	2	4.481×10^{-14}	4.7423×10^{-4}	53.579
pdb2nde 110	ClassicAll	8	8.5286×10^{-5}	2	7.022×10^{-14}	7.2910×10^{-4}	
	QuaternionAll	8	8.5286×10^{-5}	2	8.855×10^{-14}	4.6949×10^{-4}	55.296
pdb2ndk 290	ClassicAll	8	9.0150×10^{-5}	1	5.022×10^{-13}	2.0478×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	9.0150×10^{-5}	1	6.279×10^{-13}	1.3121×10^{-3}	56.074
pdb2nvj 152	ClassicAll	8	6.7520×10^{-3}	7	2.082×10^{-14}	1.0651×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	6.7520×10^{-3}	7	2.293×10^{-14}	6.8485×10^{-4}	55.523
pdb2p6j 314	ClassicAll	8	3.2640×10^{-13}	1	4.795×10^{-14}	2.2138×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	3.5480×10^{-13}	1	6.389×10^{-14}	1.4166×10^{-3}	56.278
pdb2p81 266	ClassicAll	64	6.8538×10^{-11}	2	7.881×10^{-13}	6.9489×10^{-3}	
	QuaternionAll	64	6.8914×10^{-11}	2	8.226×10^{-13}	5.3471×10^{-3}	29.957
pdb2pqe 896	ClassicAll	64	2.0306×10^{-5}	26	5.532×10^{-10}	2.2839×10^{-2}	
	QuaternionAll	64	2.0306×10^{-5}	26	5.544×10^{-10}	1.9727×10^{-2}	15.774
pdb2rlg 108	ClassicAll	2	4.8140×10^{-13}	1	5.501×10^{-14}	5.6979×10^{-4}	
	QuaternionAll	2	5.3066×10^{-13}	1	6.973×10^{-14}	3.2029×10^{-4}	77.900
pdb2rlh 108	ClassicAll	2	1.0750×10^{-12}	1	4.772×10^{-14}	5.8111×10^{-4}	
	QuaternionAll	2	1.0423×10^{-12}	1	5.801×10^{-14}	3.2645×10^{-4}	78.007
pdb2rmy 206	ClassicAll	8	1.2240×10^{-4}	1	1.872×10^{-13}	1.4034×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.2240×10^{-4}	1	2.498×10^{-13}	8.9473×10^{-4}	56.850
pdb2rnd 206	ClassicAll	256	3.4031×10^{-12}	33	2.626×10^{-13}	4.8818×10^{-2}	
	QuaternionAll	256	3.8842×10^{-12}	33	3.569×10^{-13}	3.0424×10^{-2}	60.459
pdb2roo 260	ClassicAll	8	3.3639×10^{-4}	6	2.933×10^{-12}	3.2928×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	3.3639×10^{-4}	6	3.525×10^{-12}	1.9299×10^{-3}	70.618
pdb2rq1 572	ClassicAll	8	9.9510×10^{-11}	1	2.345×10^{-12}	5.0012×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	1.0013×10^{-10}	1	2.496×10^{-12}	3.1334×10^{-3}	59.609
pdb2rut 218	ClassicAll	8	2.0579×10^{-13}	2	4.389×10^{-14}	1.4784×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	4.0527×10^{-13}	2	5.013×10^{-14}	9.5038×10^{-4}	55.555
pdb2ruv 224	ClassicAll	8	5.4278×10^{-13}	2	5.775×10^{-14}	1.5285×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	6.5510×10^{-13}	2	7.404×10^{-14}	9.6544×10^{-4}	58.316
pdb2rux 218	ClassicAll	8	3.6084×10^{-3}	1	2.671×10^{-14}	1.5040×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	3.6084×10^{-3}	1	3.016×10^{-14}	9.6337×10^{-4}	56.115
pdb2ruy 224	ClassicAll	8	4.1535×10^{-13}	1	1.968×10^{-14}	1.5114×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	3.5981×10^{-13}	1	2.387×10^{-14}	9.6003×10^{-4}	57.430
pdb2rv3 218	ClassicAll	8	3.0630×10^{-4}	1	3.656×10^{-14}	1.4828×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	3.0630×10^{-4}	1	4.118×10^{-14}	9.4685×10^{-4}	56.606
pdb2rv5 212	ClassicAll	8	8.6519×10^{-4}	1	1.145×10^{-14}	1.4554×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	8.6519×10^{-4}	1	1.338×10^{-14}	9.3534×10^{-4}	55.601
pdb2y4q 476	ClassicAll	8	4.6451×10^{-11}	2	1.410×10^{-12}	3.3925×10^{-3}	
	QuaternionAll	8	4.6324×10^{-11}	2	1.451×10^{-12}	2.2156×10^{-3}	53.114