

Table 1: Results

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1a57	Classic	2.096×10^{-11}		1.2229×10^{-2}	
	Quaternion	2.092×10^{-11}	1.8861×10^{-12}	6.0815×10^{-3}	101.090 67
pdb1b4c	Classic	1.015×10^{-8}		1.0759×10^{-2}	
	Quaternion	1.015×10^{-8}	1.0913×10^{-12}	6.0082×10^{-3}	79.074 11
pdb1ba5	Classic	9.359×10^{-13}		1.0443×10^{-3}	
	Quaternion	1.070×10^{-12}	4.1376×10^{-12}	6.6308×10^{-4}	57.484 12
pdb1d1n	Classic	1.250×10^{-8}		1.5776×10^{-3}	
	Quaternion	1.250×10^{-8}	1.3063×10^{-12}	9.8099×10^{-4}	60.822 13
pdb1dp3	Classic	1.076×10^{-7}		1.8876×10^{-3}	
	Quaternion	1.076×10^{-7}	1.4158×10^{-12}	1.1005×10^{-3}	71.520 17
pdb1du1	Classic	8.225×10^{-13}		3.5719×10^{-4}	
	Quaternion	1.258×10^{-12}	1.2376×10^{-12}	2.4078×10^{-4}	48.346 64
pdb1eii	Classic	1.393×10^{-11}		3.0245×10^{-3}	
	Quaternion	1.365×10^{-11}	1.1331×10^{-11}	1.7003×10^{-3}	77.880 05
pdb1fcl	Classic	1.569×10^{-7}		4.2920×10^{-3}	
	Quaternion	1.569×10^{-7}	8.2109×10^{-13}	2.2590×10^{-3}	89.998 88
pdb1fd6	Classic	3.182×10^{-12}		2.0513×10^{-3}	
	Quaternion	3.193×10^{-12}	3.3846×10^{-13}	1.2163×10^{-3}	68.658 27
pdb1hf9	Classic	7.694×10^{-8}		7.0791×10^{-1}	
	Quaternion	7.694×10^{-8}	3.9588×10^{-12}	4.5287×10^{-1}	56.315 67
pdb1i2u	Classic	5.562×10^{-13}		8.4464×10^{-4}	
	Quaternion	5.607×10^{-13}	1.5136×10^{-13}	5.5784×10^{-4}	51.412 78
pdb1i2v	Classic	2.418×10^{-13}		8.8401×10^{-4}	
	Quaternion	2.519×10^{-13}	6.9127×10^{-14}	5.8144×10^{-4}	52.036 92
pdb1ijc	Classic	1.822×10^{-7}		1.4022×10^{-1}	
	Quaternion	1.822×10^{-7}	4.2252×10^{-12}	4.8972×10^{-2}	186.325 26
pdb1jlz	Classic	5.594×10^{-13}		4.1434×10^{-4}	
	Quaternion	5.965×10^{-13}	1.3105×10^{-12}	3.0589×10^{-4}	35.453 81
pdb1jw3	Classic	5.936×10^{-13}		3.6424×10^{-3}	
	Quaternion	5.897×10^{-13}	3.9013×10^{-13}	1.9625×10^{-3}	85.598 82
pdb1k0v	Classic	1.893×10^{-13}		1.2357×10^{-3}	
	Quaternion	1.894×10^{-13}	1.3433×10^{-13}	7.7334×10^{-4}	59.781 31
pdb1k2h	Classic	2.436×10^{-9}		3.7656×10^{-2}	
	Quaternion	2.436×10^{-9}	2.2036×10^{-13}	1.2167×10^{-2}	209.479 30
pdb1k36	Classic	8.820×10^{-12}		1.0448×10^{-1}	
	Quaternion	1.081×10^{-11}	2.8981×10^{-11}	2.3829×10^{-2}	338.447 69
pdb1k37	Classic	4.711×10^{-13}		2.7331×10^{-3}	
	Quaternion	4.988×10^{-13}	1.5479×10^{-13}	1.3410×10^{-3}	103.815 77
pdb1kuw	Classic	9.229×10^{-14}		2.2906×10^{-4}	
	Quaternion	1.130×10^{-13}	7.3457×10^{-14}	1.5896×10^{-4}	44.097 05
pdb1kz0	Classic	4.404×10^{-14}		3.2637×10^{-4}	
	Quaternion	5.880×10^{-14}	2.4335×10^{-13}	2.3635×10^{-4}	38.087 84
pdb1kz2	Classic	2.119×10^{-14}		3.7092×10^{-4}	
	Quaternion	2.886×10^{-14}	2.6112×10^{-14}	2.4114×10^{-4}	53.817 67
pdb1kz5	Classic	4.081×10^{-14}		2.6488×10^{-4}	
	Quaternion	4.738×10^{-14}	4.8348×10^{-14}	1.8465×10^{-4}	43.455 28

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1lvz	Classic	6.483×10^{-8}		2.4020×10^{-4}	
	Quaternion	6.483×10^{-8}	7.9621×10^{-14}	1.7134×10^{-4}	40.182 91
pdb1m4e	Classic	4.154×10^{-8}		3.2686×10^{-4}	
	Quaternion	4.154×10^{-8}	1.0477×10^{-13}	2.2994×10^{-4}	42.147 22
pdb1ma2	Classic	4.593×10^{-7}		2.1338×10^{-3}	
	Quaternion	4.593×10^{-7}	4.3233×10^{-13}	1.1057×10^{-3}	92.988 01
pdb1ma4	Classic	4.764×10^{-8}		7.0178×10^{-4}	
	Quaternion	4.764×10^{-8}	2.4225×10^{-13}	4.0818×10^{-4}	71.930 74
pdb1ma5	Classic	8.169×10^{-13}		3.1186×10^{-4}	
	Quaternion	9.044×10^{-13}	5.0234×10^{-13}	2.4641×10^{-4}	26.561 83
pdb1ma6	Classic	2.322×10^{-8}		3.1466×10^{-4}	
	Quaternion	2.322×10^{-8}	3.3030×10^{-12}	2.9130×10^{-4}	8.018 88
pdb1mpe	Classic	3.168×10^{-8}		4.3610×10^{-1}	
	Quaternion	3.168×10^{-8}	7.1211×10^{-13}	2.7832×10^{-1}	56.692 12
pdb1nd9	Classic	3.026×10^{-13}		2.2650×10^{-3}	
	Quaternion	3.845×10^{-13}	4.7137×10^{-13}	1.2752×10^{-3}	77.624 05
pdb1ne5	Classic	1.214×10^{-12}		1.2821×10^{-3}	
	Quaternion	1.384×10^{-12}	7.5582×10^{-13}	6.9563×10^{-4}	84.312 69
pdb1nmj	Classic	1.237×10^{-14}		5.0664×10^{-4}	
	Quaternion	1.424×10^{-14}	1.3921×10^{-14}	3.7687×10^{-4}	34.430 87
pdb1o53	Classic	7.482×10^{-8}		3.1745×10^{-4}	
	Quaternion	7.482×10^{-8}	6.4225×10^{-13}	2.2572×10^{-4}	40.639 99
pdb1oqp	Classic	7.045×10^{-14}		5.0296×10^{-3}	
	Quaternion	8.315×10^{-14}	9.0066×10^{-14}	2.4969×10^{-3}	101.431 81
pdb1plw	Classic	2.830×10^{-14}		1.7304×10^{-4}	
	Quaternion	3.122×10^{-14}	4.9118×10^{-14}	1.1863×10^{-4}	45.862 91
pdb1plx	Classic	1.574×10^{-13}		1.6917×10^{-4}	
	Quaternion	2.060×10^{-13}	1.7973×10^{-13}	1.1184×10^{-4}	51.266 12
pdb1pv0	Classic	8.104×10^{-8}		8.6844×10^{-4}	
	Quaternion	8.104×10^{-8}	1.0039×10^{-13}	5.2110×10^{-4}	66.655 34
pdb1qlk	Classic	3.456×10^{-8}		5.1766×10^{-2}	
	Quaternion	3.456×10^{-8}	1.2720×10^{-12}	2.9516×10^{-2}	75.382 66
pdb1r57	Classic	2.080×10^{-9}		2.1197×10^{-3}	
	Quaternion	2.080×10^{-9}	1.6053×10^{-13}	1.2244×10^{-3}	73.119 06
pdb1ry3	Classic	9.685×10^{-8}		1.2720×10^{-3}	
	Quaternion	9.685×10^{-8}	5.4489×10^{-13}	7.5594×10^{-4}	68.270 80
pdb1s4h	Classic	4.300×10^{-9}		3.0884×10^{-4}	
	Quaternion	4.300×10^{-9}	1.1103×10^{-12}	2.0169×10^{-4}	53.125 12
pdb1s4j	Classic	8.132×10^{-8}		2.8466×10^{-4}	
	Quaternion	8.132×10^{-8}	1.6581×10^{-13}	1.9318×10^{-4}	47.352 73
pdb1s6j	Classic	3.897×10^{-8}		4.9985×10^{-3}	
	Quaternion	3.897×10^{-8}	1.3676×10^{-12}	2.4874×10^{-3}	100.952 84
pdb1sa8	Classic	9.340×10^{-13}		1.7589×10^{-3}	
	Quaternion	1.034×10^{-12}	1.0370×10^{-12}	9.9975×10^{-4}	75.936 38
pdb1t2y	Classic	1.887×10^{-13}		4.6190×10^{-4}	

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1t5q	Quaternion	2.396×10^{-13}	2.3861×10^{-13}	3.1259×10^{-4}	47.764 80
	Classic	3.877×10^{-14}		4.7191×10^{-4}	
pdb1tot	Quaternion	5.093×10^{-14}	5.3231×10^{-14}	3.1488×10^{-4}	49.870 11
	Classic	6.148×10^{-14}		8.9911×10^{-4}	
pdb1v6r	Quaternion	6.853×10^{-14}	2.8392×10^{-14}	6.4583×10^{-4}	39.216 92
	Classic	6.835×10^{-13}		3.8046×10^{-4}	
pdb1v92	Quaternion	6.970×10^{-13}	3.1917×10^{-13}	2.7396×10^{-4}	38.878 28
	Classic	1.463×10^{-13}		8.7118×10^{-4}	
pdb1vd7	Quaternion	1.630×10^{-13}	5.6062×10^{-14}	5.1445×10^{-4}	69.341 37
	Classic	8.154×10^{-8}		4.0040×10^{-4}	
pdb1vd9	Quaternion	8.154×10^{-8}	5.6018×10^{-13}	3.2299×10^{-4}	23.965 91
	Classic	4.848×10^{-7}		5.2239×10^{-4}	
pdb1vdb	Quaternion	4.848×10^{-7}	1.3255×10^{-12}	3.4926×10^{-4}	49.571 81
	Classic	2.488×10^{-7}		4.0707×10^{-4}	
pdb1vpc	Quaternion	2.488×10^{-7}	3.8541×10^{-13}	2.9233×10^{-4}	39.251 59
	Classic	8.500×10^{-15}		8.9871×10^{-4}	
pdb1wnk	Quaternion	1.002×10^{-14}	8.5436×10^{-15}	5.1318×10^{-4}	75.126 81
	Classic	4.112×10^{-12}		4.2027×10^{-4}	
pdb1wo4	Quaternion	4.632×10^{-12}	2.2335×10^{-11}	2.8181×10^{-4}	49.132 04
	Classic	9.957×10^{-13}		2.2377×10^{-3}	
pdb1wo5	Quaternion	9.639×10^{-13}	2.3523×10^{-12}	1.0929×10^{-3}	104.758 68
	Classic	3.831×10^{-8}		8.2171×10^{-4}	
pdb1x60	Quaternion	3.831×10^{-8}	4.9000×10^{-12}	4.9719×10^{-4}	65.270 03
	Classic	1.666×10^{-8}		1.4910×10^{-2}	
pdb1x9v	Quaternion	1.666×10^{-8}	9.7171×10^{-13}	7.3733×10^{-3}	102.212 11
	Classic	1.757×10^{-9}		2.4968	
pdb1y5c	Quaternion	1.757×10^{-9}	1.3466×10^{-13}	1.4998	66.481 32
	Classic	3.631×10^{-8}		2.4135×10^{-4}	
pdb1yx7	Quaternion	3.631×10^{-8}	2.9129×10^{-13}	1.6743×10^{-4}	44.145 09
	Classic	6.774×10^{-8}		9.9779×10^{-3}	
pdb1yx8	Quaternion	6.774×10^{-8}	7.3116×10^{-12}	4.8751×10^{-3}	104.669 98
	Classic	2.679×10^{-8}		5.0969×10^{-3}	
pdb1yxr	Quaternion	2.679×10^{-8}	1.0853×10^{-11}	2.6566×10^{-3}	91.853 45
	Classic	8.985×10^{-9}		2.4259×10^{-3}	
pdb2a2y	Quaternion	8.985×10^{-9}	3.2120×10^{-13}	1.2664×10^{-3}	91.549 14
	Classic	1.150×10^{-12}		1.8952×10^{-1}	
pdb2a4j	Quaternion	1.151×10^{-12}	3.7416×10^{-13}	1.1331×10^{-1}	67.257 78
	Classic	2.085×10^{-14}		1.7915×10^{-3}	
pdb2adn	Quaternion	2.727×10^{-14}	1.4394×10^{-14}	1.0502×10^{-3}	70.587 61
	Classic	7.605×10^{-9}		4.1979×10^{-1}	
pdb2ajj	Quaternion	7.605×10^{-9}	2.4948×10^{-12}	2.5356×10^{-1}	65.560 51
	Classic	1.022×10^{-7}		4.8036×10^{-4}	
pdb2ajm	Quaternion	1.022×10^{-7}	1.2387×10^{-13}	3.7871×10^{-4}	26.840 31
	Classic	9.968×10^{-8}		5.0433×10^{-4}	
	Quaternion	9.968×10^{-8}	8.8381×10^{-13}	3.9356×10^{-4}	28.143 33

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2ajn	Classic	8.791×10^{-8}		5.0044×10^{-4}	
	Quaternion	8.791×10^{-8}	2.0883×10^{-13}	3.7487×10^{-4}	33.495 70
pdb2ajo	Classic	9.968×10^{-8}		5.1053×10^{-4}	
	Quaternion	9.968×10^{-8}	8.8381×10^{-13}	3.3684×10^{-4}	51.564 69
pdb2akk	Classic	1.288×10^{-13}		2.9212×10^{-3}	
	Quaternion	1.270×10^{-13}	1.1725×10^{-13}	1.5527×10^{-3}	88.136 99
pdb2bzb	Classic	9.365×10^{-14}		2.4876×10^{-2}	
	Quaternion	1.224×10^{-13}	1.5097×10^{-13}	1.1286×10^{-2}	120.414 74
pdb2c0s	Classic	3.028×10^{-13}		1.2112×10^{-3}	
	Quaternion	3.379×10^{-13}	7.2067×10^{-13}	7.0966×10^{-4}	70.675 41
pdb2dci	Classic	2.366×10^{-14}		3.9890×10^{-4}	
	Quaternion	2.950×10^{-14}	1.3479×10^{-13}	2.5729×10^{-4}	55.036 86
pdb2eem	Classic	5.190×10^{-13}		1.1399×10^{-3}	
	Quaternion	5.461×10^{-13}	4.0208×10^{-13}	6.3250×10^{-4}	80.226 66
pdb2fva	Classic	1.047×10^{-12}		2.6920×10^{-2}	
	Quaternion	1.194×10^{-12}	1.5803×10^{-12}	1.3363×10^{-2}	101.459 97
pdb2fvf	Classic	3.106×10^{-13}		1.2675×10^{-2}	
	Quaternion	3.445×10^{-13}	2.8750×10^{-13}	6.1233×10^{-3}	106.998 90
pdb2fxz	Classic	2.898×10^{-7}		3.5412×10^{-4}	
	Quaternion	2.898×10^{-7}	1.7350×10^{-12}	1.9959×10^{-4}	77.421 83
pdb2g9j	Classic	3.282×10^{-12}		1.1927×10^{-1}	
	Quaternion	3.535×10^{-12}	2.1668×10^{-12}	7.5716×10^{-2}	57.528 85
pdb2g9l	Classic	6.366×10^{-14}		6.4312×10^{-4}	
	Quaternion	8.672×10^{-14}	2.8081×10^{-13}	4.5854×10^{-4}	40.254 90
pdb2h5m	Classic	8.355×10^{-9}		1.7734×10^{-3}	
	Quaternion	8.355×10^{-9}	4.0081×10^{-12}	1.0442×10^{-3}	69.828 72
pdb2hep	Classic	1.191×10^{-12}		1.5565×10^{-3}	
	Quaternion	1.268×10^{-12}	5.5848×10^{-13}	8.4995×10^{-4}	83.128 14
pdb2jmy	Classic	9.834×10^{-13}		5.1555×10^{-4}	
	Quaternion	9.967×10^{-13}	5.0812×10^{-13}	2.2606×10^{-4}	128.053 68
pdb2jn5	Classic	3.147×10^{-9}		3.0482×10^{-4}	
	Quaternion	3.160×10^{-9}	1.4394×10^{-11}	2.1266×10^{-4}	43.335 50
pdb2jnk	Classic	5.415×10^{-9}		4.0163×10^{-3}	
	Quaternion	5.416×10^{-9}	3.7973×10^{-13}	2.2352×10^{-3}	79.683 04
pdb2jpn	Classic	6.730×10^{-14}		1.9735×10^{-3}	
	Quaternion	6.983×10^{-14}	1.9605×10^{-13}	1.1309×10^{-3}	74.508 98
pdb2jua	Classic	1.740×10^{-11}		1.9669×10^{-3}	
	Quaternion	1.882×10^{-11}	1.4391×10^{-11}	1.0934×10^{-3}	79.886 61
pdb2jvd	Classic	3.339×10^{-14}		8.4067×10^{-4}	
	Quaternion	3.898×10^{-14}	2.1712×10^{-14}	5.3111×10^{-4}	58.285 07
pdb2jwe	Classic	1.093×10^{-7}		1.1173	
	Quaternion	1.093×10^{-7}	1.1093×10^{-12}	6.6860×10^{-1}	67.108 41
pdb2jws	Classic	2.539×10^{-8}		1.0299×10^{-3}	
	Quaternion	2.539×10^{-8}	2.9470×10^{-13}	6.4809×10^{-4}	58.910 68
pdb2jwu	Classic	1.059×10^{-7}		3.3449×10^{-3}	

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2jxf	Quaternion	1.059×10^{-7}	6.2848×10^{-13}	1.7648×10^{-3}	89.532 68
	Classic	1.310×10^{-8}		5.2566×10^{-4}	
pdb2jz5	Quaternion	1.310×10^{-8}	6.1180×10^{-13}	3.6138×10^{-4}	45.461 64
	Classic	2.860×10^{-13}		2.5850×10^{-3}	
pdb2k2a	Quaternion	2.854×10^{-13}	1.7635×10^{-13}	1.3478×10^{-3}	91.786 52
	Classic	3.798×10^{-14}		1.2781×10^{-3}	
pdb2k36	Quaternion	5.134×10^{-14}	1.3435×10^{-13}	7.6220×10^{-4}	67.688 71
	Classic	5.298×10^{-9}		2.2321×10^{-3}	
pdb2k37	Quaternion	5.298×10^{-9}	9.1745×10^{-14}	1.3273×10^{-3}	68.167 96
	Classic	1.921×10^{-13}		1.1535×10^{-3}	
pdb2k3i	Quaternion	2.525×10^{-13}	4.0204×10^{-13}	6.8485×10^{-4}	68.434 11
	Classic	3.810×10^{-13}		2.3336×10^{-3}	
pdb2k6s	Quaternion	4.009×10^{-13}	2.4790×10^{-13}	1.3052×10^{-3}	78.799 63
	Classic	2.100×10^{-13}		8.2568×10^{-3}	
pdb2k7o	Quaternion	2.651×10^{-13}	4.8726×10^{-13}	4.1420×10^{-3}	99.345 72
	Classic	1.279×10^{-13}		7.7567×10^{-3}	
pdb2kbm	Quaternion	1.416×10^{-13}	4.6393×10^{-13}	4.0352×10^{-3}	92.227 78
	Classic	2.165×10^{-13}		2.3133	
pdb2kdh	Quaternion	2.230×10^{-13}	2.6963×10^{-13}	1.4058	64.555 14
	Classic	8.948×10^{-8}		2.2794×10^{-3}	
pdb2kdl	Quaternion	8.948×10^{-8}	7.7869×10^{-11}	1.3042×10^{-3}	74.766 72
	Classic	1.610×10^{-8}		2.4648×10^{-3}	
pdb2kdm	Quaternion	1.610×10^{-8}	3.2157×10^{-13}	1.2398×10^{-3}	98.805 11
	Classic	4.568×10^{-8}		1.4622×10^{-3}	
pdb2kdp	Quaternion	4.568×10^{-8}	9.7911×10^{-13}	9.6739×10^{-4}	51.152 69
	Classic	2.621×10^{-13}		1.1789×10^{-3}	
pdb2kdr	Quaternion	2.865×10^{-13}	1.0772×10^{-13}	7.3588×10^{-4}	60.198 57
	Classic	1.523×10^{-8}		6.4351×10^{-4}	
pdb2kes	Quaternion	1.523×10^{-8}	6.3191×10^{-14}	3.4755×10^{-4}	85.157 53
	Classic	4.468×10^{-14}		9.1367×10^{-4}	
pdb2kib	Quaternion	5.425×10^{-14}	2.3286×10^{-14}	5.3382×10^{-4}	71.156 01
	Classic	2.533×10^{-12}		8.2940×10^{-1}	
pdb2kjin	Quaternion	2.539×10^{-12}	1.3388×10^{-12}	5.1563×10^{-1}	60.851 18
	Classic	1.125×10^{-9}		4.8941×10^{-4}	
pdb2kjo	Quaternion	1.125×10^{-9}	1.3817×10^{-13}	3.0573×10^{-4}	60.080 14
	Classic	7.554×10^{-8}		4.1979×10^{-4}	
pdb2kjr	Quaternion	7.554×10^{-8}	6.4697×10^{-14}	3.1458×10^{-4}	33.446 93
	Classic	2.951×10^{-7}		1.3367×10^{-2}	
pdb2kko	Quaternion	2.951×10^{-7}	4.1183×10^{-13}	6.5775×10^{-3}	103.224 75
	Classic	1.191×10^{-13}		1.3281×10^{-2}	
pdb2kl5	Quaternion	1.285×10^{-13}	2.9766×10^{-14}	6.6350×10^{-3}	100.162 23
	Classic	1.820×10^{-13}		1.8693×10^{-3}	
pdb2klz	Quaternion	2.020×10^{-13}	1.3796×10^{-13}	1.0991×10^{-3}	70.076 13
	Classic	3.439×10^{-14}		8.2392×10^{-4}	
	Quaternion	4.443×10^{-14}	6.4874×10^{-14}	5.2679×10^{-4}	56.404 39
	Classic				

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2ko1	Classic	1.406×10^{-9}		2.0146×10^{-2}	
	Quaternion	1.406×10^{-9}	8.2369×10^{-13}	9.7054×10^{-3}	107.571 91
pdb2koz	Classic	1.209×10^{-7}		7.3278×10^{-4}	
	Quaternion	1.209×10^{-7}	8.4351×10^{-13}	4.6490×10^{-4}	57.621 27
pdb2kp0	Classic	1.653×10^{-8}		1.5937×10^{-3}	
	Quaternion	1.653×10^{-8}	5.5654×10^{-12}	9.1334×10^{-4}	74.492 96
pdb2ksg	Classic	3.215×10^{-14}		7.4864×10^{-4}	
	Quaternion	3.967×10^{-14}	2.4678×10^{-14}	4.8715×10^{-4}	53.678 66
pdb2kt8	Classic	3.314×10^{-12}		4.4296×10^{-3}	
	Quaternion	3.535×10^{-12}	7.1394×10^{-13}	2.2936×10^{-3}	93.127 52
pdb2kuh	Classic	2.016×10^{-14}		1.1537×10^{-3}	
	Quaternion	2.492×10^{-14}	4.0485×10^{-14}	7.1250×10^{-4}	61.915 58
pdb2kwh	Classic	1.408×10^{-13}		1.0185×10^{-3}	
	Quaternion	1.825×10^{-13}	2.9549×10^{-13}	6.0010×10^{-4}	69.727 39
pdb2kxa	Classic	2.785×10^{-8}		4.0203×10^{-4}	
	Quaternion	2.785×10^{-8}	3.8041×10^{-13}	2.8029×10^{-4}	43.434 15
pdb2kyb	Classic	1.999×10^{-8}		4.7705×10^{-2}	
	Quaternion	1.999×10^{-8}	2.6711×10^{-12}	2.6806×10^{-2}	77.961 47
pdb2l3m	Classic	1.028×10^{-12}		1.0958×10^{-3}	
	Quaternion	9.340×10^{-13}	6.9725×10^{-13}	6.5657×10^{-4}	66.898 17
pdb2l3n	Classic	3.025×10^{-14}		6.2534×10^{-3}	
	Quaternion	3.634×10^{-14}	4.4517×10^{-14}	3.1899×10^{-3}	96.033 72
pdb2l45	Classic	2.236×10^{-14}		4.5364×10^{-4}	
	Quaternion	3.033×10^{-14}	8.5325×10^{-14}	3.1171×10^{-4}	45.535 04
pdb2l5r	Classic	3.529×10^{-14}		4.4771×10^{-4}	
	Quaternion	4.432×10^{-14}	1.4398×10^{-14}	4.1888×10^{-4}	6.882 19
pdb2l6q	Classic	9.628×10^{-8}		2.3252×10^{-3}	
	Quaternion	9.630×10^{-8}	1.5379×10^{-10}	1.2040×10^{-3}	93.120 10
pdb2l6r	Classic	2.836×10^{-8}		1.0832×10^{-3}	
	Quaternion	2.836×10^{-8}	2.4193×10^{-11}	6.4019×10^{-4}	69.205 25
pdb2l98	Classic	3.273×10^{-13}		3.0753×10^{-3}	
	Quaternion	3.638×10^{-13}	8.9102×10^{-13}	1.6189×10^{-3}	89.958 50
pdb2lci	Classic	2.579×10^{-13}		2.5710×10^{-3}	
	Quaternion	2.404×10^{-13}	8.2767×10^{-14}	1.3777×10^{-3}	86.609 73
pdb2lde	Classic	3.153×10^{-14}		4.2209×10^{-4}	
	Quaternion	3.762×10^{-14}	4.1691×10^{-14}	2.9194×10^{-4}	44.581 04
pdb2le2	Classic	2.064×10^{-13}		1.9556×10^{-2}	
	Quaternion	2.042×10^{-13}	7.7661×10^{-14}	9.1873×10^{-3}	112.861 82
pdb2le7	Classic	2.112×10^{-14}		3.7036×10^{-4}	
	Quaternion	2.749×10^{-14}	3.9789×10^{-14}	2.5809×10^{-4}	43.500 94
pdb2ler	Classic	1.315×10^{-14}		2.9570×10^{-4}	
	Quaternion	1.532×10^{-14}	2.1465×10^{-14}	1.7642×10^{-4}	67.608 16
pdb2lgi	Classic	1.068×10^{-12}		1.8841×10^{-3}	
	Quaternion	1.052×10^{-12}	1.8917×10^{-13}	1.0170×10^{-3}	85.258 52
pdb2lhc	Classic	7.854×10^{-8}		1.6106×10^{-3}	

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2lhd	Quaternion	7.854×10^{-8}	2.0329×10^{-12}	8.9025×10^{-4}	80.911 04
	Classic	1.930×10^{-12}		7.5498×10^{-3}	
pdb2lhe	Quaternion	2.033×10^{-12}	2.3902×10^{-12}	3.7337×10^{-3}	102.204 18
	Classic	4.963×10^{-11}		2.7738×10^{-3}	
pdb2lhg	Quaternion	4.967×10^{-11}	4.8488×10^{-13}	1.4376×10^{-3}	92.939 04
	Classic	6.459×10^{-14}		9.3175×10^{-4}	
pdb2lix	Quaternion	7.322×10^{-14}	5.9754×10^{-14}	5.6801×10^{-4}	64.038 76
	Classic	4.842×10^{-14}		4.5108×10^{-4}	
pdb2lld	Quaternion	5.614×10^{-14}	7.8975×10^{-14}	3.1042×10^{-4}	45.314 82
	Classic	1.937×10^{-13}		6.8018×10^{-4}	
pdb2lm9	Quaternion	2.214×10^{-13}	2.2642×10^{-13}	4.3549×10^{-4}	56.188 49
	Classic	6.254×10^{-14}		1.4710×10^{-3}	
pdb2lmf	Quaternion	7.713×10^{-14}	1.5079×10^{-13}	8.4121×10^{-4}	74.865 46
	Classic	4.100×10^{-8}		3.9169×10^{-4}	
pdb2ln3	Quaternion	4.100×10^{-8}	6.4067×10^{-14}	2.8010×10^{-4}	39.839 91
	Classic	1.292×10^{-13}		1.3409×10^{-3}	
pdb2lo2	Quaternion	1.359×10^{-13}	8.4114×10^{-14}	8.0437×10^{-4}	66.702 60
	Classic	2.068×10^{-14}		6.6734×10^{-4}	
pdb2lqp	Quaternion	2.571×10^{-14}	3.6944×10^{-14}	4.1147×10^{-4}	62.183 54
	Classic	1.215×10^{-7}		1.2217×10^{-3}	
pdb2lr0	Quaternion	1.215×10^{-7}	4.7992×10^{-13}	6.7127×10^{-4}	82.000 63
	Classic	3.549×10^{-12}		3.4148×10^{-3}	
pdb2lrh	Quaternion	3.440×10^{-12}	6.0485×10^{-13}	1.8906×10^{-3}	80.617 38
	Classic	6.364×10^{-9}		4.0859×10^{-3}	
pdb2ls9	Quaternion	6.364×10^{-9}	3.1935×10^{-13}	2.1625×10^{-3}	88.943 51
	Classic	1.122×10^{-13}		4.0738×10^{-4}	
pdb2lsa	Quaternion	1.471×10^{-13}	3.7128×10^{-13}	2.8708×10^{-4}	41.906 32
	Classic	5.235×10^{-14}		4.1036×10^{-4}	
pdb2lss	Quaternion	7.034×10^{-14}	1.5385×10^{-13}	2.9869×10^{-4}	37.385 71
	Classic	1.230×10^{-13}		1.1179×10^{-3}	
pdb2lt3	Quaternion	1.455×10^{-13}	1.6926×10^{-13}	6.8971×10^{-4}	62.077 34
	Classic	7.245×10^{-14}		1.7306×10^{-3}	
pdb2lu6	Quaternion	7.760×10^{-14}	5.2634×10^{-14}	1.0044×10^{-3}	72.301 43
	Classic	5.356×10^{-15}		2.9534×10^{-4}	
pdb2lwa	Quaternion	6.922×10^{-15}	4.1890×10^{-15}	2.0748×10^{-4}	42.344 47
	Classic	1.177×10^{-7}		1.1572×10^{-3}	
pdb2lx0	Quaternion	1.177×10^{-7}	8.1907×10^{-13}	7.1130×10^{-4}	62.681 02
	Classic	7.704×10^{-8}		5.7629×10^{-4}	
pdb2lxb	Quaternion	7.704×10^{-8}	2.2251×10^{-13}	4.2520×10^{-4}	35.533 33
	Classic	1.542×10^{-13}		3.3273×10^{-3}	
pdb2lxy	Quaternion	1.585×10^{-13}	1.6837×10^{-13}	1.7958×10^{-3}	85.289 31
	Classic	7.805×10^{-8}		7.1555×10^{-3}	
pdb2lxz	Quaternion	7.805×10^{-8}	1.5972×10^{-12}	3.6156×10^{-3}	97.907 43
	Classic	2.371×10^{-12}		4.9913×10^{-3}	
	Quaternion	2.792×10^{-12}	1.9895×10^{-12}	2.5267×10^{-3}	97.545 18
	Classic				

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2lzf	Classic	3.217×10^{-14}	1.2991×10^{-13}	5.1097×10^{-2}	66.654 75
	Quaternion	3.957×10^{-14}		3.0661×10^{-2}	
pdb2m1a	Classic	6.346×10^{-15}	6.5801×10^{-15}	5.7207×10^{-4}	65.722 47
	Quaternion	7.612×10^{-15}		3.4520×10^{-4}	
pdb2m1j	Classic	1.865×10^{-14}	6.6915×10^{-14}	5.4430×10^{-4}	50.178 38
	Quaternion	2.212×10^{-14}		3.6243×10^{-4}	
pdb2m2y	Classic	2.699×10^{-13}	1.4386×10^{-13}	3.7426×10^{-4}	44.342 97
	Quaternion	2.808×10^{-13}		2.5929×10^{-4}	
pdb2m3f	Classic	3.629×10^{-14}	5.8107×10^{-14}	3.7812×10^{-4}	44.721 50
	Quaternion	4.641×10^{-14}		2.6128×10^{-4}	
pdb2m8m	Classic	2.407×10^{-14}	1.1738×10^{-13}	4.8824×10^{-4}	45.481 99
	Quaternion	3.023×10^{-14}		3.3560×10^{-4}	
pdb2m8o	Classic	1.672×10^{-14}	2.4755×10^{-14}	4.6161×10^{-4}	41.986 84
	Quaternion	2.039×10^{-14}		3.2511×10^{-4}	
pdb2m97	Classic	4.646×10^{-14}	2.0639×10^{-13}	1.0758×10^{-3}	67.979 21
	Quaternion	5.841×10^{-14}		6.4041×10^{-4}	
pdb2m9g	Classic	2.939×10^{-13}	5.8913×10^{-13}	5.3073×10^{-3}	87.625 49
	Quaternion	3.170×10^{-13}		2.8287×10^{-3}	
pdb2m9r	Classic	3.537×10^{-14}	1.6694×10^{-13}	6.9522×10^{-4}	56.995 24
	Quaternion	4.406×10^{-14}		4.4283×10^{-4}	
pdb2mdv	Classic	3.178×10^{-12}	3.0402×10^{-13}	8.1085×10^{-3}	75.205 06
	Quaternion	3.178×10^{-12}		4.6280×10^{-3}	
pdb2me1	Classic	1.886×10^{-13}	1.6579×10^{-13}	5.2601×10^{-4}	54.081 62
	Quaternion	2.208×10^{-13}		3.4138×10^{-4}	
pdb2me2	Classic	5.798×10^{-8}	1.1547×10^{-12}	5.5626×10^{-4}	68.312 00
	Quaternion	5.798×10^{-8}		3.3049×10^{-4}	
pdb2me3	Classic	5.024×10^{-8}	1.2879×10^{-13}	4.5341×10^{-4}	43.153 70
	Quaternion	5.024×10^{-8}		3.1673×10^{-4}	
pdb2me4	Classic	5.204×10^{-8}	1.0094×10^{-12}	5.2556×10^{-4}	47.467 37
	Quaternion	5.204×10^{-8}		3.5639×10^{-4}	
pdb2mg1	Classic	4.398×10^{-14}	1.5805×10^{-13}	4.5459×10^{-4}	49.808 04
	Quaternion	5.374×10^{-14}		3.0345×10^{-4}	
pdb2mg2	Classic	1.829×10^{-14}	2.5921×10^{-14}	4.4722×10^{-4}	45.443 52
	Quaternion	2.480×10^{-14}		3.0749×10^{-4}	
pdb2mg3	Classic	3.541×10^{-14}	2.4798×10^{-13}	4.5542×10^{-4}	43.608 22
	Quaternion	4.461×10^{-14}		3.1713×10^{-4}	
pdb2mh8	Classic	1.547×10^{-13}	2.9903×10^{-13}	1.0248×10^{-3}	79.995 75
	Quaternion	1.883×10^{-13}		5.6935×10^{-4}	
pdb2mhw	Classic	6.229×10^{-14}	4.9718×10^{-13}	4.5732×10^{-4}	45.377 91
	Quaternion	7.129×10^{-14}		3.1458×10^{-4}	
pdb2mi1	Classic	4.784×10^{-8}	1.8681×10^{-12}	2.2427×10^{-3}	91.821 19
	Quaternion	4.784×10^{-8}		1.1692×10^{-3}	
pdb2mi7	Classic	3.782×10^{-8}	1.5019×10^{-12}	1.0485×10^{-3}	72.022 79
	Quaternion	3.782×10^{-8}		6.0949×10^{-4}	
pdb2mij	Classic	1.244×10^{-13}		6.0560×10^{-4}	

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2mix	Quaternion	1.522×10^{-13}	2.8681×10^{-13}	3.8317×10^{-4}	58.048 65
	Classic	4.816×10^{-14}		3.6956×10^{-4}	
pdb2mj1	Quaternion	4.684×10^{-14}	3.7348×10^{-14}	2.6441×10^{-4}	39.768 09
	Classic	1.309×10^{-13}		3.7164×10^{-4}	
pdb2mj2	Quaternion	1.646×10^{-13}	2.3819×10^{-13}	2.6279×10^{-4}	41.419 07
	Classic	9.775×10^{-14}		5.8844×10^{-4}	
pdb2mjg	Quaternion	1.196×10^{-13}	8.8713×10^{-14}	3.7484×10^{-4}	56.984 20
	Classic	5.503×10^{-14}		3.4830×10^{-3}	
pdb2mji	Quaternion	6.580×10^{-14}	7.0670×10^{-14}	1.9482×10^{-3}	78.777 75
	Classic	6.597×10^{-9}		2.2856×10^{-3}	
pdb2mle	Quaternion	6.597×10^{-9}	2.6848×10^{-13}	1.2755×10^{-3}	79.190 35
	Classic	1.491×10^{-13}		1.2236×10^{-3}	
pdb2mlf	Quaternion	1.535×10^{-13}	3.1271×10^{-13}	7.0368×10^{-4}	73.888 81
	Classic	9.918×10^{-14}		1.1885×10^{-3}	
pdb2mo5	Quaternion	1.128×10^{-13}	9.2903×10^{-14}	7.0399×10^{-4}	68.829 05
	Classic	2.527×10^{-10}		3.3853×10^{-3}	
pdb2mpu	Quaternion	2.527×10^{-10}	1.0204×10^{-12}	1.8247×10^{-3}	85.531 27
	Classic	9.785×10^{-14}		1.4789×10^{-3}	
pdb2mra	Quaternion	1.016×10^{-13}	1.0352×10^{-13}	9.1828×10^{-4}	61.054 36
	Classic	2.632×10^{-13}		3.0837×10^{-3}	
pdb2msu	Quaternion	2.768×10^{-13}	1.2867×10^{-13}	1.6876×10^{-3}	82.726 83
	Classic	7.813×10^{-14}		3.9274×10^{-4}	
pdb2mty	Quaternion	8.765×10^{-14}	3.7025×10^{-14}	2.6756×10^{-4}	46.786 71
	Classic	1.849×10^{-14}		4.2777×10^{-4}	
pdb2muh	Quaternion	2.364×10^{-14}	9.1457×10^{-14}	2.7215×10^{-4}	57.178 66
	Classic	3.764×10^{-8}		4.3024×10^{-4}	
pdb2mvj	Quaternion	3.764×10^{-8}	1.2902×10^{-13}	2.8729×10^{-4}	49.759 13
	Classic	1.534×10^{-13}		4.4794×10^{-4}	
pdb2mvt	Quaternion	1.647×10^{-13}	5.5998×10^{-14}	2.9777×10^{-4}	50.430 37
	Classic	5.513×10^{-8}		1.1119×10^{-3}	
pdb2n00	Quaternion	5.513×10^{-8}	7.9957×10^{-12}	6.4994×10^{-4}	71.074 23
	Classic	1.803×10^{-8}		2.4561×10^{-3}	
pdb2n0b	Quaternion	1.803×10^{-8}	7.6285×10^{-13}	1.3498×10^{-3}	81.962 07
	Classic	2.679×10^{-7}		2.6092×10^{-4}	
pdb2n0c	Quaternion	2.679×10^{-7}	4.9548×10^{-13}	1.7626×10^{-4}	48.031 00
	Classic	2.587×10^{-7}		2.4741×10^{-4}	
pdb2n0d	Quaternion	2.587×10^{-7}	2.8732×10^{-13}	1.6681×10^{-4}	48.314 58
	Classic	4.590×10^{-7}		2.5569×10^{-4}	
pdb2n0e	Quaternion	4.590×10^{-7}	1.6367×10^{-11}	1.6910×10^{-4}	51.209 66
	Classic	3.314×10^{-12}		2.4677×10^{-4}	
pdb2n0f	Quaternion	4.286×10^{-12}	8.3573×10^{-12}	1.6915×10^{-4}	45.886 17
	Classic	8.103×10^{-9}		2.4902×10^{-4}	
pdb2n0g	Quaternion	8.103×10^{-9}	5.8011×10^{-13}	1.5992×10^{-4}	55.718 21
	Classic	8.235×10^{-8}		2.5328×10^{-4}	
pdb2n0g	Quaternion	8.235×10^{-8}	1.1957×10^{-13}	1.8531×10^{-4}	36.680 75
	Classic				

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2n0h	Classic	8.479×10^{-8}		2.4672×10^{-4}	
	Quaternion	8.479×10^{-8}	1.8250×10^{-13}	1.7091×10^{-4}	44.362 66
pdb2n35	Classic	3.541×10^{-14}		8.8821×10^{-4}	
	Quaternion	4.466×10^{-14}	1.0752×10^{-13}	6.0192×10^{-4}	47.562 55
pdb2n3a	Classic	8.761×10^{-14}		2.7190×10^{-2}	
	Quaternion	1.049×10^{-13}	1.0149×10^{-13}	1.3169×10^{-2}	106.466 64
pdb2n41	Classic	1.812×10^{-13}		2.2013×10^{-3}	
	Quaternion	1.836×10^{-13}	8.2539×10^{-14}	1.2971×10^{-3}	69.714 61
pdb2n4e	Classic	1.494×10^{-13}		1.7083×10^{-3}	
	Quaternion	1.687×10^{-13}	1.8433×10^{-13}	1.0516×10^{-3}	62.454 79
pdb2n5q	Classic	5.206×10^{-8}		9.5784×10^{-4}	
	Quaternion	5.206×10^{-8}	1.3595×10^{-12}	5.5340×10^{-4}	73.081 95
pdb2n67	Classic	4.443×10^{-13}		1.5469×10^{-3}	
	Quaternion	4.465×10^{-13}	6.3487×10^{-14}	9.4884×10^{-4}	63.030 87
pdb2n6n	Classic	4.139×10^{-8}		1.1132×10^{-3}	
	Quaternion	4.139×10^{-8}	5.0670×10^{-13}	6.3135×10^{-4}	76.327 91
pdb2n7i	Classic	1.043×10^{-8}		6.4299×10^{-4}	
	Quaternion	1.043×10^{-8}	7.8924×10^{-13}	4.2168×10^{-4}	52.481 84
pdb2n7j	Classic	5.969×10^{-13}		1.4176×10^{-3}	
	Quaternion	6.094×10^{-13}	1.5144×10^{-13}	8.3530×10^{-4}	69.714 69
pdb2n9b	Classic	1.139×10^{-8}		1.1613×10^{-1}	
	Quaternion	1.139×10^{-8}	1.1216×10^{-12}	7.1201×10^{-2}	63.097 92
pdb2na9	Classic	5.440×10^{-14}		7.4359×10^{-4}	
	Quaternion	6.690×10^{-14}	5.4544×10^{-14}	4.9925×10^{-4}	48.939 82
pdb2ndc	Classic	3.365×10^{-14}		3.4865×10^{-4}	
	Quaternion	4.479×10^{-14}	5.1916×10^{-14}	2.4570×10^{-4}	41.900 35
pdb2nde	Classic	7.022×10^{-14}		3.5443×10^{-4}	
	Quaternion	8.868×10^{-14}	2.5156×10^{-13}	2.3981×10^{-4}	47.797 59
pdb2ndk	Classic	1.130×10^{-7}		8.1475×10^{-4}	
	Quaternion	1.130×10^{-7}	2.0544×10^{-12}	5.1857×10^{-4}	57.114 15
pdb2nvj	Classic	2.082×10^{-14}		4.0372×10^{-4}	
	Quaternion	2.293×10^{-14}	1.4035×10^{-14}	2.7842×10^{-4}	45.004 44
pdb2p6j	Classic	4.795×10^{-14}		8.8297×10^{-4}	
	Quaternion	6.389×10^{-14}	1.1404×10^{-13}	5.1121×10^{-4}	72.720 27
pdb2p81	Classic	1.475×10^{-7}		7.2004×10^{-4}	
	Quaternion	1.475×10^{-7}	4.5339×10^{-13}	4.6368×10^{-4}	55.288 66
pdb2pqe	Classic	2.405×10^{-7}		1.2705×10^{-2}	
	Quaternion	2.405×10^{-7}	9.8682×10^{-12}	6.3326×10^{-3}	100.632 33
pdb2rlg	Classic	5.501×10^{-14}		4.3732×10^{-4}	
	Quaternion	6.973×10^{-14}	6.8873×10^{-14}	2.4351×10^{-4}	79.590 33
pdb2rlh	Classic	4.772×10^{-14}		3.8880×10^{-4}	
	Quaternion	5.801×10^{-14}	3.9131×10^{-14}	2.6657×10^{-4}	45.852 67
pdb2rmy	Classic	2.475×10^{-8}		6.1429×10^{-4}	
	Quaternion	2.475×10^{-8}	3.7231×10^{-13}	4.5926×10^{-4}	33.757 13
pdb2rnd	Classic	2.626×10^{-13}		5.8067×10^{-4}	

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2roo	Quaternion	3.581×10^{-13}	4.9979×10^{-13}	3.8346×10^{-4}	51.428 44
	Classic	2.933×10^{-12}		5.1759×10^{-3}	
pdb2rq1	Quaternion	3.525×10^{-12}	3.5927×10^{-12}	2.6916×10^{-3}	92.298 16
	Classic	8.240×10^{-9}		1.0513×10^{-2}	
pdb2rut	Quaternion	8.240×10^{-9}	8.7082×10^{-13}	5.2573×10^{-3}	99.967 07
	Classic	4.389×10^{-14}		6.0219×10^{-4}	
pdb2ruv	Quaternion	5.014×10^{-14}	3.5338×10^{-13}	3.8883×10^{-4}	54.873 65
	Classic	5.776×10^{-14}		6.3383×10^{-4}	
pdb2rux	Quaternion	7.408×10^{-14}	1.2473×10^{-13}	4.0632×10^{-4}	55.991 45
	Classic	2.671×10^{-14}		6.3613×10^{-4}	
pdb2ruy	Quaternion	3.016×10^{-14}	6.2140×10^{-14}	4.2348×10^{-4}	50.215 00
	Classic	1.968×10^{-14}		6.2311×10^{-4}	
pdb2rv3	Quaternion	2.387×10^{-14}	6.4254×10^{-14}	3.9490×10^{-4}	57.789 97
	Classic	3.656×10^{-14}		6.2750×10^{-4}	
pdb2rv5	Quaternion	4.118×10^{-14}	6.3794×10^{-14}	3.9439×10^{-4}	59.105 00
	Classic	1.145×10^{-14}		6.2441×10^{-4}	
pdb2y4q	Quaternion	1.338×10^{-14}	1.6010×10^{-14}	3.8647×10^{-4}	61.568 58
	Classic	2.896×10^{-8}		3.5832×10^{-3}	
pdb2y4q	Quaternion	2.896×10^{-8}	2.6305×10^{-13}	1.8466×10^{-3}	94.043 09
	Classic				