Table 1: Results

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1a57	Classic	2.096×10^{-11}		1.7078×10^{-3}	
698	Quaternion	2.092×10^{-11}	1.8861×10^{-12}	1.0276×10^{-3}	0.602
pdb1b4c	Classic	5.070×10^{-13}		3.5365×10^{-3}	
1108	Quaternion	5.498×10^{-13}	1.0757×10^{-12}	2.5634×10^{-3}	0.725
pdb1ba5	Classic	9.359×10^{-13}		3.6012×10^{-4}	
320	Quaternion	1.070×10^{-12}	4.1376×10^{-12}	2.7669×10^{-4}	0.768
pdb1d1n	Classic	1.005×10^{-11}		5.9682×10^{-4}	
594	Quaternion	9.672×10^{-12}	1.2689×10^{-12}	4.7694×10^{-4}	0.799
pdb1dp3	Classic	7.704×10^{-13}		2.9789×10^{-4}	
332	Quaternion	8.939×10^{-13}	1.4697×10^{-12}	2.3080×10^{-4}	0.775
pdb1du1	Classic	8.225×10^{-13}		1.0246×10^{-4}	
122	Quaternion	1.258×10^{-12}	1.2376×10^{-12}	7.8000×10^{-5}	0.761
pdb1eii	Classic	1.393×10^{-11}		8.2178×10^{-4}	
806	Quaternion	1.365×10^{-11}	1.1331×10^{-11}	6.5466×10^{-4}	0.797
pdb1fcl	Classic	4.542×10^{-12}		4.5137×10^{-4}	
338	Quaternion	4.515×10^{-12}	8.0786×10^{-13}	3.4246×10^{-4}	0.759
pdb1fd6	Classic	3.182×10^{-12}		3.4143×10^{-4}	
344	Quaternion	3.193×10^{-12}	3.3846×10^{-13}	2.6441×10^{-4}	0.774
pdb1hf9	Classic	1.157×10^{-11}		9.6480×10^{-3}	
496	Quaternion	1.180×10^{-11}	3.9332×10^{-12}	6.1200×10^{-3}	0.634
pdb1i2u	Classic	5.562×10^{-13}		2.5459×10^{-4}	
266	Quaternion	5.607×10^{-13}	1.5136×10^{-13}	2.0184×10^{-4}	0.793
pdb1i2v	Classic	2.418×10^{-13}		2.7989×10^{-4}	
266	Quaternion	2.519×10^{-13}	6.9127×10^{-14}	2.2032×10^{-4}	0.787
pdb1ijc	Classic	1.408×10^{-11}		5.5728×10^{-4}	
380	Quaternion	1.426×10^{-11}	2.4877×10^{-12}	4.1998×10^{-4}	0.754
pdb1jlz	Classic	5.594×10^{-13}		1.2392×10^{-4}	
140	Quaternion	5.965×10^{-13}	1.3105×10^{-12}	9.5602×10^{-5}	0.771
pdb1jw3	Classic	5.936×10^{-13}		8.6446×10^{-4}	
842	Quaternion	5.897×10^{-13}	3.9013×10^{-13}	6.7580×10^{-4}	0.782
pdb1k0v	Classic	1.893×10^{-13}		4.6703×10^{-4}	
440	Quaternion	1.894×10^{-13}	1.3433×10^{-13}	3.5593×10^{-4}	0.762
pdb1k2h	Classic	5.491×10^{-13}		2.9241×10^{-3}	
1120	Quaternion	5.199×10^{-13}	2.2039×10^{-13}	1.9975×10^{-3}	0.683
pdb1k36	Classic	8.820×10^{-12}		2.6454×10^{-4}	
278	Quaternion	1.081×10^{-11}	2.8981×10^{-11}	1.9812×10^{-4}	0.749
pdb1k37	Classic	4.711×10^{-13}		3.8419×10^{-4}	
278	Quaternion	4.988×10^{-13}	1.5479×10^{-13}	2.7588×10^{-4}	0.718
pdb1kuw	Classic	9.229×10^{-14}		5.8623×10^{-5}	
62	Quaternion	1.130×10^{-13}	7.3457×10^{-14}	4.3799×10^{-5}	0.747
pdb1kz0	Classic	4.404×10^{-14}		9.2082×10^{-5}	
98	Quaternion	5.880×10^{-14}	2.4335×10^{-13}	6.9233×10^{-5}	0.752
pdb1kz2	Classic	2.119×10^{-14}		1.0225×10^{-4}	
98	Quaternion	2.886×10^{-14}	2.6112×10^{-14}	7.2798×10^{-5}	0.712
pdb1kz5	Classic	4.081×10^{-14}		7.3916×10^{-5}	
74	Quaternion	4.738×10^{-14}	4.8348×10^{-14}	5.2574×10^{-5}	0.711
pdb1lvz	Classic	6.336×10^{-14}		6.5156×10^{-5}	
68	Quaternion	7.315×10^{-14}	7.3919×10^{-14}	4.6871×10^{-5}	0.719
pdb1m4e	Classic	5.949×10^{-13}		1.3874×10^{-4}	
122	Quaternion	5.972×10^{-13}	1.1702×10^{-13}	8.5423×10^{-5}	0.616
pdb1ma2	Classic	8.695×10^{-12}		2.3923×10^{-4}	
104	Quaternion	8.758×10^{-12}	4.7062×10^{-13}	1.0667×10^{-4}	0.446
pdb1ma4	Classic	7.247×10^{-14}		4.1287×10^{-4}	
104	Quaternion	7.981×10^{-14}	1.8851×10^{-13}	1.7248×10^{-4}	0.418
pdb1ma5	Classic	8.169×10^{-13}		1.5005×10^{-4}	

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
104	Quaternion	9.044×10^{-13}	5.0234×10^{-13}	7.2148×10^{-5}	0.481
pdb1ma6	Classic	6.283×10^{-13}		1.4103×10^{-4}	
104	Quaternion	8.522×10^{-13}	3.3052×10^{-12}	7.0075×10^{-5}	0.497
pdb1mpe	Classic	2.617×10^{-11}		8.1131×10^{-3}	
1352	Quaternion	2.624×10^{-11}	7.1261×10^{-13}	3.4902×10^{-3}	0.430
pdb1nd9	Classic	3.026×10^{-13}		4.5081×10^{-4}	
296	Quaternion	3.845×10^{-13}	4.7137×10^{-13}	2.2590×10^{-4}	0.501
pdb1ne5	Classic	1.214×10^{-12}		3.6696×10^{-4}	
254	Quaternion	1.384×10^{-12}	7.5582×10^{-13}	1.8293×10^{-4}	0.498
pdb1nmj	Classic	1.237×10^{-14}		2.6603×10^{-4}	
170	Quaternion	1.424×10^{-14}	1.3921×10^{-14}	1.3008×10^{-4}	0.489
pdb1o53	Classic	3.999×10^{-13}		1.4899×10^{-4}	
92	Quaternion	4.545×10^{-13}	6.5350×10^{-13}	6.9913×10^{-5}	0.469
pdb1oqp	Classic	7.045×10^{-14}		3.0062×10^{-3}	
580	Quaternion	8.315×10^{-14}	9.0066×10^{-14}	1.6903×10^{-3}	0.562
pdb1plw	Classic	2.830×10^{-14}		4.5461×10^{-5}	
32	Quaternion	3.122×10^{-14}	4.9118×10^{-14}	2.2201×10^{-5}	0.488
pdb1plx	Classic	1.574×10^{-13}		4.2650×10^{-5}	
32	Quaternion	2.060×10^{-13}	1.7973×10^{-13}	2.0929×10^{-5}	0.491
pdb1pv0	Classic	2.409×10^{-13}		4.4412×10^{-4}	
278	Quaternion	2.723×10^{-13}	1.0662×10^{-13}	2.0904×10^{-4}	0.471
pdb1pzr	Classic	5.644×10^{-12}		6.4490×10^{-3}	
724	Quaternion	5.871×10^{-12}	9.9935×10^{-12}	3.5690×10^{-3}	0.553
pdb1qlk	Classic	9.019×10^{-10}		1.0829×10^{-2}	
1108	Quaternion	9.019×10^{-10}	1.3287×10^{-12}	5.9579×10^{-3}	0.550
pdb1r57	Classic	1.847×10^{-13}		9.6998×10^{-4}	
614	Quaternion	2.054×10^{-13}	1.4866×10^{-13}	4.8680×10^{-4}	0.502
pdb1ry3	Classic	4.938×10^{-13}		6.3087×10^{-4}	
386	Quaternion	5.910×10^{-13}	4.7678×10^{-13}	3.0993×10^{-4}	0.491
pdb1s4h	Classic	4.300×10^{-9}		1.0674×10^{-4}	
80	Quaternion	4.300×10^{-9}	1.1103×10^{-12}	5.3186×10^{-5}	0.498
pdb1s4j	Classic	1.520×10^{-13}		1.2866×10^{-4}	
80	Quaternion	2.230×10^{-13}	1.6407×10^{-13}	6.7311×10^{-5}	0.523
pdb1s6j	Classic	6.073×10^{-13}		7.9899×10^{-4}	
524	Quaternion	7.660×10^{-13}	5.9201×10^{-13}	4.0640×10^{-4}	0.509
pdb1sa8	Classic	9.340×10^{-13}		9.9482×10^{-4}	
638	Quaternion	1.034×10^{-12}	1.0370×10^{-12}	5.2774×10^{-4}	0.530
pdb1t2y	Classic	1.887×10^{-13}		2.3413×10^{-4}	
152	Quaternion	2.396×10^{-13}	2.3861×10^{-13}	1.4533×10^{-4}	0.621
pdb1t5q	Classic	3.877×10^{-14}		2.5394×10^{-4}	
180	Quaternion	5.093×10^{-14}	5.3231×10^{-14}	1.3255×10^{-4}	0.522
pdb1tot	Classic	6.148×10^{-14}		5.0126×10^{-4}	
314	Quaternion	6.853×10^{-14}	2.8392×10^{-14}	3.1670×10^{-4}	0.632
pdb1v6r	Classic	6.835×10^{-13}		1.9619×10^{-4}	
128	Quaternion	6.970×10^{-13}	3.1917×10^{-13}	1.1899×10^{-4}	0.607
pdb1v92	Classic	1.463×10^{-13}		4.3360×10^{-4}	
278	Quaternion	1.630×10^{-13}	5.6062×10^{-14}	2.6571×10^{-4}	0.613
pdb1vd7	Classic	3.741×10^{-9}		2.0593×10^{-4}	
140	Quaternion	3.741×10^{-9}	5.8433×10^{-13}	1.2499×10^{-4}	0.607
pdb1vd9	Classic	1.290×10^{-12}		2.4388×10^{-4}	
140	Quaternion	1.554×10^{-12}	9.0327×10^{-13}	1.4591×10^{-4}	0.598
pdb1vdb	Classic	9.108×10^{-13}		1.9946×10^{-4}	
140	Quaternion	1.083×10^{-12}	3.8641×10^{-13}	1.1987×10^{-4}	0.601
pdb1vpc	Classic	8.500×10^{-15}		4.1694×10^{-4}	
272	Quaternion	1.002×10^{-14}	8.5436×10^{-15}	2.6033×10^{-4}	0.624

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1wnk 140	Classic	4.112×10^{-12}		2.0699×10^{-4}	
	Quaternion	4.632×10^{-12}	2.2335×10^{-11}	1.2347×10^{-4}	0.596
pdb1wo4 152	Classic	9.957×10^{-13}		2.3205×10^{-4}	
	Quaternion	9.639×10^{-13}	2.3523×10^{-12}	1.4194×10^{-4}	0.612
pdb1wo5 152	Classic	5.257×10^{-9}		2.3551×10^{-4}	
	Quaternion	5.258×10^{-9}	4.9063×10^{-12}	1.4405×10^{-4}	0.612
pdb1x60 476	Classic	1.076×10^{-12}		7.9397×10^{-4}	
	Quaternion	1.179×10^{-12}	3.9684×10^{-13}	4.9474×10^{-4}	0.623
pdb1x9v 544	Classic	8.975×10^{-13}		2.7541×10^{-2}	
	Quaternion	9.632×10^{-13}	1.3900×10^{-13}	1.4581×10^{-2}	0.529
pdb1y5c 68	Classic	8.980×10^{-9}		9.7438×10^{-5}	
	Quaternion	8.980×10^{-9}	2.9085×10^{-13}	5.8897×10^{-5}	0.604
pdb1yx7 500	Classic	8.116×10^{-10}		1.1530×10^{-3}	
	Quaternion	8.125×10^{-10}	7.6614×10^{-12}	7.0746×10^{-4}	0.614
pdb1yx8 500	Classic	7.276×10^{-12}		9.4071×10^{-4}	
	Quaternion	8.217×10^{-12}	1.0819×10^{-11}	5.8516×10^{-4}	0.622
pdb1yxr 464	Classic	5.838×10^{-10}		6.7687×10^{-4}	
	Quaternion	5.839×10^{-10}	2.5240×10^{-13}	4.1626×10^{-4}	0.615
pdb2a2y 1072	Classic	1.150×10^{-12}		3.1010×10^{-2}	
	Quaternion	1.151×10^{-12}	3.7416×10^{-13}	1.7439×10^{-2}	0.562
pdb2a4j 580	Classic	2.085×10^{-14}		1.0563×10^{-3}	
	Quaternion	2.727×10^{-14}	1.4394×10^{-14}	6.4214×10^{-4}	0.608
pdb2adl 868	Classic	1.752×10^{-11}		3.5641×10^{-2}	
	Quaternion	1.787×10^{-11}	3.0093×10^{-12}	2.3248×10^{-2}	0.652
pdb2adn 868	Classic	6.693×10^{-12}		1.9119×10^{-3}	
	Quaternion	6.465×10^{-12}	2.4957×10^{-12}	1.1481×10^{-3}	0.601
pdb2ajj 170	Classic	5.641×10^{-14}		2.5994×10^{-4}	
	Quaternion	6.584×10^{-14}	1.2744×10^{-13}	1.5702×10^{-4}	0.604
pdb2ajm 170	Classic	1.183×10^{-13}		2.7954×10^{-4}	
	Quaternion	1.555×10^{-13}	8.9439×10^{-13}	1.6885×10^{-4}	0.604
pdb2ajn 170	Classic	1.076×10^{-13}		2.7914×10^{-4}	
	Quaternion	1.217×10^{-13}	1.5981×10^{-13}	1.6719×10^{-4}	0.599
pdb2ajo 170	Classic	1.183×10^{-13}		2.7899×10^{-4}	
	Quaternion	1.555×10^{-13}	8.9439×10^{-13}	1.6861×10^{-4}	0.604
pdb2akk 446	Classic	1.288×10^{-13}		1.4448×10^{-3}	
	Quaternion	1.270×10^{-13}	1.1725×10^{-13}	8.4721×10^{-4}	0.586
pdb2bzb 748	Classic	9.365×10^{-14}		1.4315×10^{-2}	
	Quaternion	1.224×10^{-13}	1.5097×10^{-13}	7.7992×10^{-3}	0.545
pdb2c0s 386	Classic	3.028×10^{-13}		6.2433×10^{-4}	
	Quaternion	3.379×10^{-13}	7.2067×10^{-13}	3.8866×10^{-4}	0.623
pdb2dci 120	Classic	2.366×10^{-14}		1.7238×10^{-4}	
	Quaternion	2.950×10^{-14}	1.3479×10^{-13}	1.0593×10^{-4}	0.615
pdb2eem 206	Classic	5.190×10^{-13}		3.6143×10^{-4}	
	Quaternion	5.461×10^{-13}	4.0208×10^{-13}	2.1835×10^{-4}	0.604
pdb2fva 494	Classic	1.047×10^{-12}		1.0303×10^{-3}	
	Quaternion	1.194×10^{-12}	1.5803×10^{-12}	6.1618×10^{-4}	0.598
pdb2fvf 494	Classic	3.106×10^{-13}		7.4317×10^{-4}	
	Quaternion	3.445×10^{-13}	2.8750×10^{-13}	4.6101×10^{-4}	0.620
pdb2fxz 80	Classic	1.489×10^{-12}		1.2207×10^{-4}	
	Quaternion	1.749×10^{-12}	2.0430×10^{-12}	7.5061×10^{-5}	0.615
pdb2g9j 848	Classic	3.282×10^{-12}		4.9852×10^{-2}	
	Quaternion	3.535×10^{-12}	2.1668×10^{-12}	2.6562×10^{-2}	0.533
pdb2g9l 224	Classic	6.366×10^{-14}		3.5082×10^{-4}	
	Quaternion	8.672×10^{-14}	2.8081×10^{-13}	2.1658×10^{-4}	0.617

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2h5m	Classic	9.692×10^{-13}		9.9657×10^{-4}	
614	Quaternion	1.032×10^{-12}	4.1376×10^{-12}	6.2269×10^{-4}	0.625
pdb2hep	Classic	1.191×10^{-12}		3.9601×10^{-4}	
252	Quaternion	1.268×10^{-12}	5.5848×10^{-13}	2.3695×10^{-4}	0.598
pdb2j0z	Classic	3.192×10^{-10}		2.3683×10^{-1}	
752	Quaternion	3.197×10^{-10}	4.5324×10^{-12}	1.4497×10^{-1}	0.612
pdb2j10	Classic	5.870×10^{-10}		4.3767×10^{-3}	
752	Quaternion	5.873×10^{-10}	9.5552×10^{-13}	2.4477×10^{-3}	0.559
pdb2j11	Classic	7.191×10^{-10}		3.7834×10^{-3}	
752	Quaternion	7.194×10^{-10}	1.6970×10^{-12}	2.1799×10^{-3}	0.576
pdb2jmy	Classic	9.834×10^{-13}		1.4579×10^{-4}	
92	Quaternion	9.967×10^{-13}	5.0812×10^{-13}	8.8216×10^{-5}	0.605
pdb2jn5	Classic	3.147×10^{-9}		1.0386×10^{-4}	
74	Quaternion	3.160×10^{-9}	1.4394×10^{-11}	6.2820×10^{-5}	0.605
pdb2jnk	Classic	4.387×10^{-10}		1.3640×10^{-3}	
842	Quaternion	4.388×10^{-10}	3.9471×10^{-13}	8.6217×10^{-4}	0.632
pdb2jpn	Classic	6.730×10^{-14}		1.1801×10^{-3}	
476	Quaternion	6.983×10^{-14}	1.9605×10^{-13}	6.8326×10^{-4}	0.579
pdb2jua	Classic	1.740×10^{-11}		1.0169×10^{-3}	
614	Quaternion	1.882×10^{-11}	1.4391×10^{-11}	6.2303×10^{-4}	0.613
pdb2jvd	Classic	3.339×10^{-14}		4.7167×10^{-4}	
288	Quaternion	3.898×10^{-14}	2.1712×10^{-14}	2.8141×10^{-4}	0.597
pdb2jwe	Classic	2.695×10^{-11}		1.6909×10^{-3}	
984	Quaternion	2.734×10^{-11}	1.0970×10^{-12}	1.0624×10^{-3}	0.628
pdb2jws	Classic	1.251×10^{-13}		5.6601×10^{-4}	
338	Quaternion	1.543×10^{-13}	2.8647×10^{-13}	3.4449×10^{-4}	0.609
pdb2jwu	Classic	4.421×10^{-12}		7.6507×10^{-4}	
338	Quaternion	4.373×10^{-12}	6.2322×10^{-13}	4.5845×10^{-4}	0.599
pdb2jxf	Classic	1.399×10^{-13}		2.8468×10^{-4}	
182	Quaternion	1.734×10^{-13}	5.8450×10^{-13}	1.6879×10^{-4}	0.593
pdb2jz5	Classic	2.860×10^{-13}		1.0063×10^{-3}	
548	Quaternion	2.854×10^{-13}	1.7635×10^{-13}	6.1011×10^{-4}	0.606
pdb2k2a	Classic	3.798×10^{-14}		7.2133×10^{-4}	
422	Quaternion	5.134×10^{-14}	1.3435×10^{-13}	4.5278×10^{-4}	0.628
pdb2k2f	Classic	2.639×10^{-13}		2.9933	
1268	Quaternion	2.818×10^{-13}	7.2949×10^{-14}	1.5659	0.523
pdb2k36	Classic	1.922×10^{-13}		1.4278×10^{-3}	
896	Quaternion	2.045×10^{-13}	1.2563×10^{-13}	8.9244×10^{-4}	0.625
pdb2k37	Classic	1.921×10^{-13}		5.7554×10^{-4}	
356	Quaternion	2.525×10^{-13}	4.0204×10^{-13}	3.5444×10^{-4}	0.616
pdb2k3i	Classic	3.810×10^{-13}		1.4433×10^{-3}	
656	Quaternion	4.009×10^{-13}	2.4790×10^{-13}	8.6964×10^{-4}	0.603
pdb2k6s	Classic	2.100×10^{-13}		1.2378×10^{-3}	
494	Quaternion	2.651×10^{-13}	4.8726×10^{-13}	7.1448×10^{-4}	0.577
pdb2k7o	Classic	1.279×10^{-13}		4.8228×10^{-3}	
1096	Quaternion	1.416×10^{-13}	4.6393×10^{-13}	2.7638×10^{-3}	0.573
pdb2kbm	Classic	2.165×10^{-13}		1.1020	
1268	Quaternion	2.230×10^{-13}	2.6963×10^{-13}	6.7994×10^{-1}	0.617
pdb2kdh	Classic	1.947×10^{-11}		7.8981×10^{-4}	
434	Quaternion	2.228×10^{-11}	7.6317×10^{-11}	4.7942×10^{-4}	0.607
pdb2kdl	Classic	2.301×10^{-13}		5.4839×10^{-4}	
338	Quaternion	2.927×10^{-13}	3.1526×10^{-13}	3.3213×10^{-4}	0.606
pdb2kdm	Classic	3.191×10^{-12}		5.3480×10^{-4}	
338	Quaternion	3.284×10^{-12}	9.9439×10^{-13}	3.3159×10^{-4}	0.620

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2kdp	Classic	2.621×10^{-13}		6.8306×10^{-4}	
428	Quaternion	2.865×10^{-13}	1.0772×10^{-13}	4.2205×10^{-4}	0.618
pdb2kdr	Classic	6.617×10^{-14}		2.7330×10^{-4}	
170	Quaternion	8.490×10^{-14}	6.1679×10^{-14}	1.5899×10^{-4}	0.582
pdb2kes	Classic	4.468×10^{-14}		5.0386×10^{-4}	
290	Quaternion	5.425×10^{-14}	2.3286×10^{-14}	2.9163×10^{-4}	0.579
pdb2kib	Classic	2.533×10^{-12}		6.0079×10^{-3}	
352	Quaternion	2.539×10^{-12}	1.3388×10^{-12}	3.2111×10^{-3}	0.534
pdb2kjn	Classic	1.125×10^{-9}		2.4788×10^{-4}	
158	Quaternion	1.125×10^{-9}	1.3817×10^{-13}	1.4894×10^{-4}	0.601
pdb2kjo	Classic	2.284×10^{-13}		2.3357×10^{-4}	
158	Quaternion	2.421×10^{-13}	6.7185×10^{-14}	1.4172×10^{-4}	0.607
pdb2kjr	Classic	3.247×10^{-12}		1.4415×10^{-3}	
572	Quaternion	3.251×10^{-12}	4.0637×10^{-13}	8.5930×10^{-4}	0.596
pdb2kko	Classic	1.191×10^{-13}		8.6106×10^{-3}	
1300	Quaternion	1.285×10^{-13}	2.9766×10^{-14}	4.8727×10^{-3}	0.566
pdb2kl5	Classic	1.820×10^{-13}		1.0275×10^{-3}	
662	Quaternion	2.020×10^{-13}	1.3796×10^{-13}	6.4496×10^{-4}	0.628
pdb2klz	Classic	3.439×10^{-14}		4.7020×10^{-4}	
276	Quaternion	4.443×10^{-14}	6.4874×10^{-14}	2.7869×10^{-4}	0.593
pdb2ko1	Classic	1.150×10^{-12}		1.2485×10^{-2}	
1060	Quaternion	1.151×10^{-12}	7.8450×10^{-13}	7.0322×10^{-3}	0.563
pdb2koz	Classic	1.075×10^{-9}		3.0575×10^{-4}	
200	Quaternion	1.075×10^{-9}	8.8024×10^{-13}	1.9136×10^{-4}	0.626
pdb2kp0	Classic	4.893×10^{-12}		3.0698×10^{-4}	
200	Quaternion	5.588×10^{-12}	4.2756×10^{-12}	1.8959×10^{-4}	0.618
pdb2ksg	Classic	3.215×10^{-14}		4.3551×10^{-4}	
290	Quaternion	3.967×10^{-14}	2.4678×10^{-14}	2.6495×10^{-4}	0.608
pdb2kt8	Classic	3.314×10^{-12}		7.0930×10^{-4}	
458	Quaternion	3.535×10^{-12}	7.1394×10^{-13}	4.4313×10^{-4}	0.625
pdb2kuh	Classic	2.016×10^{-14}		6.8106×10^{-4}	
404	Quaternion	2.492×10^{-14}	4.0485×10^{-14}	4.3151×10^{-4}	0.634
pdb2kwh	Classic	1.408×10^{-13}		5.2925×10^{-4}	
338	Quaternion	1.825×10^{-13}	2.9549×10^{-13}	3.1747×10^{-4}	0.600
pdb2kxa	Classic	1.325×10^{-12}		2.1473×10^{-4}	
144	Quaternion	1.351×10^{-12}	3.5240×10^{-13}	1.3425×10^{-4}	0.625
pdb2kyb	Classic	1.321×10^{-11}		1.6400×10^{-3}	
362	Quaternion	1.373×10^{-11}	2.6755×10^{-12}	9.2684×10^{-4}	0.565
pdb2l3m	Classic	1.028×10^{-12}		6.7557×10^{-4}	
428	Quaternion	9.340×10^{-13}	6.9725×10^{-13}	4.1986×10^{-4}	0.621
pdb2l3n	Classic	3.025×10^{-14}		4.0176×10^{-3}	
626	Quaternion	3.634×10^{-14}	4.4517×10^{-14}	2.2465×10^{-3}	0.559
pdb2l45	Classic	2.236×10^{-14}		1.8187×10^{-4}	
116	Quaternion	3.033×10^{-14}	8.5325×10^{-14}	1.1228×10^{-4}	0.617
pdb2l5r	Classic	3.529×10^{-14}		2.4104×10^{-4}	
138	Quaternion	4.432×10^{-14}	1.4398×10^{-14}	1.4613×10^{-4}	0.606
pdb2l6q	Classic	4.959×10^{-9}		5.7492×10^{-4}	
374	Quaternion	6.131×10^{-9}	1.7792×10^{-8}	3.4945×10^{-4}	0.608
pdb2l6r	Classic	7.323×10^{-10}		6.1184×10^{-4}	
374	Quaternion	7.325×10^{-10}	2.4265×10^{-11}	3.7345×10^{-4}	0.610
pdb2l98	Classic	3.273×10^{-13}		6.8739×10^{-4}	
434	Quaternion	3.638×10^{-13}	8.9102×10^{-13}	4.2127×10^{-4}	0.613
pdb2lci	Classic	2.579×10^{-13}		1.3251×10^{-3}	
806	Quaternion	2.404×10^{-13}	8.2767×10^{-14}	8.1420×10^{-4}	0.614

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2lde	Classic	3.153×10^{-14}		2.2579×10^{-4}	
152	Quaternion	3.762×10^{-14}	4.1691×10^{-14}	1.3643×10^{-4}	0.604
pdb2le2	Classic	2.064×10^{-13}		1.2162×10^{-2}	
676	Quaternion	2.042×10^{-13}	7.7661×10^{-14}	6.8292×10^{-3}	0.562
pdb2le7	Classic	2.112×10^{-14}		1.8287×10^{-4}	
122	Quaternion	2.749×10^{-14}	3.9789×10^{-14}	1.1091×10^{-4}	0.606
pdb2ler	Classic	1.315×10^{-14}		9.8364×10^{-5}	
68	Quaternion	1.532×10^{-14}	2.1465×10^{-14}	5.9976×10^{-5}	0.610
pdb2lgi	Classic	1.068×10^{-12}		5.3405×10^{-4}	
338	Quaternion	1.052×10^{-12}	1.8917×10^{-13}	3.3074×10^{-4}	0.619
pdb2lhc	Classic	5.829×10^{-10}		5.7812×10^{-4}	
338	Quaternion	5.830×10^{-10}	2.1362×10^{-12}	3.4725×10^{-4}	0.601
pdb2lhd	Classic	1.930×10^{-12}		7.2693×10^{-4}	
338	Quaternion	2.033×10^{-12}	2.3902×10^{-12}	4.3294×10^{-4}	0.596
pdb2lhe	Classic	4.963×10^{-11}		6.9959×10^{-4}	
338	Quaternion	4.967×10^{-11}	4.8488×10^{-13}	4.2128×10^{-4}	0.602
pdb2lhg	Classic	6.459×10^{-14}		5.4166×10^{-4}	
338	Quaternion	7.322×10^{-14}	5.9754×10^{-14}	3.4252×10^{-4}	0.632
pdb2lix	Classic	4.842×10^{-14}		2.5511×10^{-4}	
162	Quaternion	5.614×10^{-14}	7.8975×10^{-14}	1.5798×10^{-4}	0.619
pdb2lld	Classic	1.937×10^{-13}		3.8603×10^{-4}	
242	Quaternion	2.214×10^{-13}	2.2642×10^{-13}	2.4657×10^{-4}	0.639
pdb2lm9	Classic	6.254×10^{-14}		9.2867×10^{-4}	
578	Quaternion	7.713×10^{-14}	1.5079×10^{-13}	5.5919×10^{-4}	0.602
pdb2lmf	Classic	1.282×10^{-13}		2.0512×10^{-4}	
140	Quaternion	1.462×10^{-13}	7.9808×10^{-14}	1.2216×10^{-4}	0.596
pdb2ln3	Classic	1.292×10^{-13}		8.2481×10^{-4}	
500	Quaternion	1.359×10^{-13}	8.4114×10^{-14}	5.0672×10^{-4}	0.614
pdb2lo2	Classic	2.068×10^{-14}		3.5286×10^{-4}	
230	Quaternion	2.571×10^{-14}	3.6944×10^{-14}	2.1708×10^{-4}	0.615
pdb2lqp	Classic	2.950×10^{-13}		6.8026×10^{-4}	
428	Quaternion	3.085×10^{-13}	4.7561×10^{-13}	4.1891×10^{-4}	0.616
pdb2lr0	Classic	3.549×10^{-12}		1.3663×10^{-3}	
806	Quaternion	3.440×10^{-12}	6.0485×10^{-13}	8.4248×10^{-4}	0.617
pdb2lrh	Classic	5.631×10^{-13}		1.3271×10^{-3}	
806	Quaternion	6.564×10^{-13}	3.2048×10^{-13}	8.1453×10^{-4}	0.614
pdb2ls9	Classic	1.122×10^{-13}		2.1166×10^{-4}	
152	Quaternion	1.471×10^{-13}	3.7128×10^{-13}	1.2974×10^{-4}	0.613
pdb2lsa	Classic	5.235×10^{-14}		2.0973×10^{-4}	
140	Quaternion	7.034×10^{-14}	1.5385×10^{-13}	1.3006×10^{-4}	0.620
pdb2lss	Classic	1.230×10^{-13}		6.5717×10^{-4}	
422	Quaternion	1.455×10^{-13}	1.6926×10^{-13}	4.1698×10^{-4}	0.635
pdb2lt3	Classic	7.245×10^{-14}		1.0848×10^{-3}	
680	Quaternion	7.760×10^{-14}	5.2634×10^{-14}	6.8766×10^{-4}	0.634
pdb2lu6	Classic	5.356×10^{-15}		1.3180×10^{-4}	
86	Quaternion	6.922×10^{-15}	4.1890×10^{-15}	7.8526×10^{-5}	0.596
pdb2lwa	Classic	3.615×10^{-13}		6.6402×10^{-4}	
432	Quaternion	4.427×10^{-13}	9.3395×10^{-13}	4.1102×10^{-4}	0.619
pdb2lx0	Classic	1.940×10^{-9}		3.1226×10^{-4}	
194	Quaternion	1.940×10^{-9}	2.0923×10^{-13}	1.9112×10^{-4}	0.612
pdb2lxb	Classic	1.542×10^{-13}		1.8311×10^{-3}	
892	Quaternion	1.585×10^{-13}	1.6837×10^{-13}	1.1032×10^{-3}	0.602
pdb2lxy	Classic	9.313×10^{-13}		8.0258×10^{-4}	
404	Quaternion	1.025×10^{-12}	1.6618×10^{-12}	4.8297×10^{-4}	0.602

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2lxz 194	Classic Quaternion	2.371×10^{-12} 2.792×10^{-12}	1.9895×10^{-12}	3.2047×10^{-4} 1.9884×10^{-4}	0.620
pdb2lzf 820	Classic Quaternion	3.217×10^{-14} 3.957×10^{-14}	1.2991×10^{-13}	3.6701×10^{-2} 2.0489×10^{-2}	0.558
pdb2m1a 158	Classic Quaternion	6.346×10^{-15} 7.612×10^{-15}	6.5801×10^{-15}	2.8770×10^{-4} 1.6947×10^{-4}	0.589
pdb2m1j 182	Classic Quaternion	1.865×10^{-14} 2.212×10^{-14}	6.6915×10^{-14}	2.9298×10^{-4} 1.7721×10^{-4}	0.605
pdb2m2y 110	Classic Quaternion	2.699×10^{-13} 2.808×10^{-13}	1.4386×10^{-13}	1.6766×10^{-4} 1.0300×10^{-4}	0.614
pdb2m3f 134	Classic Quaternion	3.629×10^{-14} 4.641×10^{-14}	5.8107×10^{-14}	1.9549×10^{-4} 1.1839×10^{-4}	0.606
pdb2m4j 2178	Classic Quaternion	1.463×10^{-11} 1.455×10^{-11}	1.8385×10^{-13}	3.0899×10^{-2} 1.6683×10^{-2}	0.540
pdb2m8m 170	Classic Quaternion	2.407×10^{-14} 3.023×10^{-14}	1.1738×10^{-13}	2.4356×10^{-4} 1.5232×10^{-4}	0.625
pdb2m8o 170	Classic Quaternion	1.672×10^{-14} 2.039×10^{-14}	2.4755×10^{-14}	2.3852×10^{-4} 1.5126×10^{-4}	0.634
pdb2m97 416	Classic Quaternion	4.646×10^{-14} 5.841×10^{-14}	2.0639×10^{-13}	6.4149×10^{-4} 4.0543×10^{-4}	0.632
pdb2m9g 1108	Classic Quaternion	2.939×10^{-13} 3.170×10^{-13}	5.8913×10^{-13}	1.8543×10^{-3} 1.1475×10^{-3}	0.619
pdb2m9r 242	Classic Quaternion	3.537×10^{-14} 4.406×10^{-14}	1.6694×10^{-13}	3.8746×10^{-4} 2.2436×10^{-4}	0.579
pdb2mdv 460	Classic Quaternion	3.178×10^{-12} 3.178×10^{-12}	3.0402×10^{-13}	1.7907×10^{-3} 1.0462×10^{-3}	0.584
pdb2me1 164	Classic Quaternion	1.886×10^{-13} 2.208×10^{-13}	1.6579×10^{-13}	2.4024×10^{-4} 1.4629×10^{-4}	0.609
pdb2me2 164	Classic Quaternion	3.667×10^{-13} 5.098×10^{-13}	1.1486×10^{-12}	2.5397×10^{-4} 1.5353×10^{-4}	0.605
pdb2me3 164	Classic Quaternion	2.593×10^{-9} 2.593×10^{-9}	9.2137×10^{-14}	2.3516×10^{-4} 1.4335×10^{-4}	0.610
pdb2me4 164	Classic Quaternion	2.854×10^{-9} 2.854×10^{-9}	9.9945×10^{-13}	2.7671×10^{-4} 1.6638×10^{-4}	0.601
pdb2mg1 164	Classic Quaternion	4.398×10^{-14} 5.374×10^{-14}	1.5805×10^{-13}	2.3575×10^{-4} 1.4662×10^{-4}	0.622
pdb2mg2 170	Classic Quaternion	1.829×10^{-14} 2.480×10^{-14}	2.5921×10^{-14}	2.4349×10^{-4} 1.5351×10^{-4}	0.630
pdb2mg3 170	Classic Quaternion	3.541×10^{-14} 4.461×10^{-14}	2.4798×10^{-13}	2.5354×10^{-4} 1.5851×10^{-4}	0.625
pdb2mh8 338	Classic Quaternion	1.547×10^{-13} 1.883×10^{-13}	2.9903×10^{-13}	5.5605×10^{-4} 3.4429×10^{-4}	0.619
pdb2mhw 164	Classic Quaternion	6.229×10^{-14} 7.129×10^{-14}	4.9718×10^{-13}	2.5108×10^{-4} 1.5714×10^{-4}	0.626
pdb2mi1 84	Classic Quaternion	1.827×10^{-12} 2.052×10^{-12}	1.5687×10^{-12}	1.3281×10^{-4} 8.2475×10^{-5}	0.621
pdb2mi7 404	Classic Quaternion	6.022×10^{-13} 6.817×10^{-13}	1.3690×10^{-12}	5.8600×10^{-4} 3.5786×10^{-4}	0.611
pdb2mij 224	Classic Quaternion	1.244×10^{-13} 1.522×10^{-13}	2.8681×10^{-13}	3.3831×10^{-4} 2.0663×10^{-4}	0.611
pdb2mix 128	Classic Quaternion	4.816×10^{-14} 4.684×10^{-14}	3.7348×10^{-14}	1.9065×10^{-4} 1.1873×10^{-4}	0.623
pdb2mj1 110	Classic Quaternion	1.309×10^{-13} 1.646×10^{-13}	2.3819×10^{-13}	1.7651×10^{-4} 1.0746×10^{-4}	0.609

7

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2mj2 218	Classic Quaternion	9.775×10^{-14} 1.196×10^{-13}	 8.8713×10^{-14}	3.4006×10^{-4} 2.0304×10^{-4}	 0.597
pdb2mjg 556	Classic Quaternion	5.503×10^{-14} 6.580×10^{-14}	 7.0670×10^{-14}	2.1403×10^{-3} 1.2087×10^{-3}	 0.565
pdb2mji 788	Classic Quaternion	3.207×10^{-12} 3.247×10^{-12}	 2.7336×10^{-13}	1.2480×10^{-3} 7.9502×10^{-4}	 0.637
pdb2mle 434	Classic Quaternion	1.491×10^{-13} 1.535×10^{-13}	 3.1271×10^{-13}	7.0584×10^{-4} 4.2886×10^{-4}	 0.608
pdb2mlf 434	Classic Quaternion	9.918×10^{-14} 1.128×10^{-13}	 9.2903×10^{-14}	7.0616×10^{-4} 4.3297×10^{-4}	 0.613
pdb2mo5 854	Classic Quaternion	2.527×10^{-10} 2.527×10^{-10}	 1.0204×10^{-12}	1.3908×10^{-3} 8.7516×10^{-4}	 0.629
pdb2mpu 554	Classic Quaternion	9.785×10^{-14} 1.016×10^{-13}	 1.0352×10^{-13}	8.9773×10^{-4} 5.6068×10^{-4}	 0.625
pdb2mra 704	Classic Quaternion	2.632×10^{-13} 2.768×10^{-13}	 1.2867×10^{-13}	1.4008×10^{-3} 8.4120×10^{-4}	 0.601
pdb2msu 122	Classic Quaternion	7.813×10^{-14} 8.765×10^{-14}	 3.7025×10^{-14}	2.0173×10^{-4} 1.2208×10^{-4}	 0.605
pdb2mty 120	Classic Quaternion	1.849×10^{-14} 2.364×10^{-14}	 9.1457×10^{-14}	2.1012×10^{-4} 1.2629×10^{-4}	 0.601
pdb2muh 98	Classic Quaternion	2.008×10^{-13} 2.251×10^{-13}	 1.4292×10^{-13}	1.4547×10^{-4} 8.7958×10^{-5}	 0.605
pdb2mvj 156	Classic Quaternion	1.534×10^{-13} 1.647×10^{-13}	 5.5998×10^{-14}	2.4181×10^{-4} 1.4392×10^{-4}	 0.595
pdb2mvt 284	Classic Quaternion	6.053×10^{-12} 6.226×10^{-12}	 3.1969×10^{-12}	5.6681×10^{-4} 3.3934×10^{-4}	 0.599
pdb2mvx 2360	Classic Quaternion	4.728×10^{-9} 4.729×10^{-9}	 3.7181×10^{-11}	2.1984×10^{-2} 1.2119×10^{-2}	 0.551
pdb2mz6 220	Classic Quaternion	4.129×10^{-8} 4.129×10^{-8}	 4.4231×10^{-13}	2.8851×10^{-2} 1.5215×10^{-2}	 0.527
pdb2n00 572	Classic Quaternion	2.703×10^{-13} 3.467×10^{-13}	 7.3499×10^{-13}	7.8567×10^{-4} 4.9399×10^{-4}	 0.629
pdb2n0b 60	Classic Quaternion	7.104×10^{-13} 9.458×10^{-13}	 8.9441×10^{-13}	9.1258×10^{-5} 5.5481×10^{-5}	 0.608
pdb2n0c 60	Classic Quaternion	1.293×10^{-13} 1.682×10^{-13}	 2.8483×10^{-13}	8.9546×10^{-5} 5.3031×10^{-5}	 0.592
pdb2n0d 60	Classic Quaternion	1.925×10^{-9} 1.926×10^{-9}	 1.6149×10^{-11}	8.7136×10^{-5} 5.3740×10^{-5}	 0.617
pdb2n0e 60	Classic Quaternion	3.314×10^{-12} 4.286×10^{-12}	 8.3573×10^{-12}	8.9640×10^{-5} 5.5845×10^{-5}	 0.623
pdb2n0f 60	Classic Quaternion	8.103×10^{-9} 8.103×10^{-9}	 5.8011×10^{-13}	8.4756×10^{-5} 5.1625×10^{-5}	 0.609
pdb2n0g 60	Classic Quaternion	8.315×10^{-13} 9.618×10^{-13}	 1.3124×10^{-13}	1.0130×10^{-4} 6.0317×10^{-5}	 0.595
pdb2n0h 60	Classic Quaternion	7.690×10^{-13} 8.730×10^{-13}	 1.8191×10^{-13}	9.3479×10^{-5} 5.8237×10^{-5}	 0.623
pdb2n35 314	Classic Quaternion	3.541×10^{-14} 4.466×10^{-14}	 1.0752×10^{-13}	4.9604×10^{-4} 3.0774×10^{-4}	 0.620
pdb2n3a 574	Classic Quaternion	8.761×10^{-14} 1.049×10^{-13}	 1.0149×10^{-13}	1.6767×10^{-2} 8.9551×10^{-3}	 0.534
pdb2n41 638	Classic Quaternion	1.812×10^{-13} 1.836×10^{-13}	 8.2539×10^{-14}	1.0753×10^{-3} 6.5707×10^{-4}	 0.611
pdb2n4e 638	Classic Quaternion	1.494×10^{-13} 1.687×10^{-13}	 1.8433×10^{-13}	1.0563×10^{-3} 6.5324×10^{-4}	 0.618

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2n5q	Classic	1.732×10^{-12}		2.5502×10^{-4}	
164	Quaternion	1.745×10^{-12}	1.7589×10^{-12}	1.6074×10^{-4}	0.630
pdb2n67	Classic	4.443×10^{-13}		9.0517×10^{-4}	
566	Quaternion	4.465×10^{-13}	6.3487×10^{-14}	5.6303×10^{-4}	0.622
pdb2n6n	Classic	4.139×10^{-8}		3.0612×10^{-4}	
192	Quaternion	4.139×10^{-8}	5.0670×10^{-13}	1.9266×10^{-4}	0.629
pdb2n7i	Classic	9.212×10^{-13}		3.4800×10^{-4}	
224	Quaternion	1.126×10^{-12}	3.0537×10^{-12}	2.1033×10^{-4}	0.604
pdb2n7j	Classic	5.969×10^{-13}		5.5604×10^{-4}	
336	Quaternion	6.094×10^{-13}	1.5144×10^{-13}	3.3764×10^{-4}	0.607
pdb2n9b	Classic	1.196×10^{-12}		7.5212×10^{-3}	
832	Quaternion	1.238×10^{-12}	1.1231×10^{-12}	4.0541×10^{-3}	0.539
pdb2na9	Classic	5.440×10^{-14}		3.9985×10^{-4}	
266	Quaternion	6.690×10^{-14}	5.4544×10^{-14}	2.3943×10^{-4}	0.599
pdb2ndc	Classic	3.365×10^{-14}		1.7449×10^{-4}	
110	Quaternion	4.479×10^{-14}	5.1916×10^{-14}	1.0603×10^{-4}	0.608
pdb2nde	Classic	7.022×10^{-14}		1.5498×10^{-4}	
110	Quaternion	8.868×10^{-14}	2.5156×10^{-13}	9.5265×10^{-5}	0.615
pdb2ndk	Classic	5.022×10^{-13}		4.3875×10^{-4}	
290	Quaternion	6.279×10^{-13}	2.0516×10^{-12}	2.6635×10^{-4}	0.607
pdb2nvj	Classic	2.082×10^{-14}		2.1106×10^{-4}	
152	Quaternion	2.293×10^{-14}	1.4035×10^{-14}	1.3248×10^{-4}	0.628
pdb2p6j	Classic	4.795×10^{-14}		4.9868×10^{-4}	
314	Quaternion	6.389×10^{-14}	1.1404×10^{-13}	3.0174×10^{-4}	0.605
pdb2p81	Classic	7.881×10^{-13}		4.0170×10^{-4}	
266	Quaternion	8.250×10^{-13}	4.3715×10^{-13}	2.4128×10^{-4}	0.601
pdb2pqe	Classic	6.484×10^{-10}		1.7464×10^{-3}	
896	Quaternion	6.496×10^{-10}	8.5673×10^{-12}	1.0742×10^{-3}	0.615
pdb2rlg	Classic	5.501×10^{-14}		1.7141×10^{-4}	
108	Quaternion	6.973×10^{-14}	6.8873×10^{-14}	1.0328×10^{-4}	0.603
pdb2rlh	Classic	4.772×10^{-14}		1.8381×10^{-4}	
108	Quaternion	5.801×10^{-14}	3.9131×10^{-14}	1.1035×10^{-4}	0.600
pdb2rmy	Classic	1.872×10^{-13}		3.2133×10^{-4}	
206	Quaternion	2.498×10^{-13}	3.6453×10^{-13}	1.9158×10^{-4}	0.596
pdb2rnd	Classic	2.626×10^{-13}		3.1245×10^{-4}	
206	Quaternion	3.581×10^{-13}	4.9979×10^{-13}	1.8852×10^{-4}	0.603
pdb2roo	Classic	2.933×10^{-12}		9.2680×10^{-4}	
260	Quaternion	3.525×10^{-12}	3.5927×10^{-12}	5.2709×10^{-4}	0.569
pdb2rql	Classic	2.345×10^{-12}		1.2692×10^{-3}	
572	Quaternion	2.496×10^{-12}	8.7086×10^{-13}	7.5430×10^{-4}	0.594
pdb2rut	Classic	4.389×10^{-14}		3.3457×10^{-4}	
218	Quaternion	5.014×10^{-14}	3.5338×10^{-13}	2.0440×10^{-4}	0.611
pdb2ruv	Classic	5.776×10^{-14}		3.4892×10^{-4}	
224	Quaternion	7.408×10^{-14}	1.2473×10^{-13}	2.1174×10^{-4}	0.607
pdb2rux	Classic	2.671×10^{-14}		3.5268×10^{-4}	
218	Quaternion	3.016×10^{-14}	6.2140×10^{-14}	2.1558×10^{-4}	0.611
pdb2ruy	Classic	1.968×10^{-14}		3.5150×10^{-4}	
224	Quaternion	2.387×10^{-14}	6.4254×10^{-14}	2.1187×10^{-4}	0.603
pdb2rv3	Classic	3.656×10^{-14}		3.5977×10^{-4}	
218	Quaternion	4.118×10^{-14}	6.3794×10^{-14}	2.1748×10^{-4}	0.605
pdb2rv5	Classic	1.145×10^{-14}		3.3397×10^{-4}	
212	Quaternion	1.338×10^{-14}	1.6010×10^{-14}	2.0422×10^{-4}	0.611
pdb2y4q	Classic	1.410×10^{-12}		7.3303×10^{-4}	
476	Quaternion	1.451×10^{-12}	2.0648×10^{-13}	4.5092×10^{-4}	0.615

```
time_limit=120 seconds
function_of_central_tendency_meansure=median
function_of_improvement=#14
precision=1.0e-5
precision_virtual=1.0e-8
benchmark_seconds=300
benchmark_samples_limit=100000
all_solutions=False
list_of_problems=["pdb1a57", "pdb1b4c", "pdb1ba5", "pdb1d1n", "pdb1dp3", "pdb1du1", "pdb1eii", "pdb1fcl", "pdb1fd6", "pdb
start_time=2023-04-14T15:29:01.778
end_time=2023-04-15T13:10:15.373
```

Merge with

```
time_limit=120 seconds
function_of_central_tendency_meansure=median
function_of_improvement=#16
precision=1.0e-5
precision_virtual=1.0e-8
benchmark_seconds=6000
benchmark_samples_limit=100000
all_solutions=False
list_of_problems=["pdb2k2f", "pdb2kbm", "pdb2j10", "pdb2j11", "pdb2lwa", "pdb2j0z", "pdb2adl", "pdb1pzr", "pdb2lzf", "pdb
start_time=2023-04-25T10:34:45.483
end_time=2023-04-27T21:52:14.682
```