

Table 1: Results

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1a57	Classic	1.797×10^{-18}		2.9098×10^{-2}	
	Quaternion	3.139×10^{-18}	2.0781×10^{-11}	2.1398×10^{-2}	35.982 81
pdb1b4c	Classic	1.613×10^{-11}		3.9654×10^{-2}	
	Quaternion	1.613×10^{-11}	5.6252×10^{-12}	3.2451×10^{-2}	22.197 28
pdb1ba5	Classic	1.668×10^{-20}		1.6721×10^{-3}	
	Quaternion	4.257×10^{-21}	1.8249×10^{-10}	1.2044×10^{-3}	38.841 08
pdb1d1n	Classic	4.268×10^{-11}		3.6884×10^{-3}	
	Quaternion	4.268×10^{-11}	1.1200×10^{-11}	2.9859×10^{-3}	23.528 29
pdb1dp3	Classic	2.048×10^{-10}		3.3162×10^{-3}	
	Quaternion	2.048×10^{-10}	8.2794×10^{-11}	2.4070×10^{-3}	37.769 85
pdb1du1	Classic	1.486×10^{-21}		4.1667×10^{-4}	
	Quaternion	2.921×10^{-21}	1.1862×10^{-12}	2.8124×10^{-4}	48.155 11
pdb1eii	Classic	9.164×10^{-19}		7.9916×10^{-3}	
	Quaternion	1.088×10^{-18}	5.6791×10^{-11}	6.5717×10^{-3}	21.607 17
pdb1fcl	Classic	1.650×10^{-10}		7.5777×10^{-3}	
	Quaternion	1.650×10^{-10}	2.5527×10^{-12}	5.2775×10^{-3}	43.586 16
pdb1fd6	Classic	7.499×10^{-20}		3.5594×10^{-3}	
	Quaternion	3.248×10^{-20}	1.4000×10^{-11}	2.5835×10^{-3}	37.776 78
pdb1hf9	Classic	1.832×10^{-10}		2.0095	
	Quaternion	1.832×10^{-10}	1.4254×10^{-10}	1.4836	35.447 86
pdb1i2u	Classic	3.527×10^{-21}		1.2338×10^{-3}	
	Quaternion	4.779×10^{-22}	9.1058×10^{-12}	9.0893×10^{-4}	35.741 08
pdb1i2v	Classic	7.063×10^{-22}		1.3377×10^{-3}	
	Quaternion	3.179×10^{-22}	9.5660×10^{-13}	9.8367×10^{-4}	35.994 96
pdb1ijc	Classic	2.932×10^{-10}		1.9777×10^{-1}	
	Quaternion	2.932×10^{-10}	1.7671×10^{-10}	1.3746×10^{-1}	43.873 32
pdb1jlz	Classic	1.660×10^{-21}		5.2421×10^{-4}	
	Quaternion	3.852×10^{-22}	8.6556×10^{-12}	3.6003×10^{-4}	45.601 86
pdb1jw3	Classic	1.448×10^{-21}		1.0883×10^{-2}	
	Quaternion	7.425×10^{-22}	2.0462×10^{-12}	8.9225×10^{-3}	21.970 76
pdb1k0v	Classic	1.606×10^{-22}		2.3956×10^{-3}	
	Quaternion	8.541×10^{-23}	3.0991×10^{-13}	1.8990×10^{-3}	26.156 18
pdb1k2h	Classic	4.831×10^{-12}		8.7978×10^{-2}	
	Quaternion	4.831×10^{-12}	1.3507×10^{-11}	7.0513×10^{-2}	24.768 76
pdb1k36	Classic	8.903×10^{-19}		9.0923×10^{-2}	
	Quaternion	9.755×10^{-19}	2.0842×10^{-11}	5.8287×10^{-2}	55.991 79
pdb1k37	Classic	7.963×10^{-22}		4.0627×10^{-3}	
	Quaternion	6.716×10^{-22}	6.5474×10^{-13}	2.7636×10^{-3}	47.005 83
pdb1kuw	Classic	3.312×10^{-23}		1.8909×10^{-4}	
	Quaternion	8.201×10^{-24}	6.6737×10^{-13}	1.2278×10^{-4}	54.010 93
pdb1kz0	Classic	1.526×10^{-24}		3.1205×10^{-4}	
	Quaternion	2.722×10^{-24}	6.9116×10^{-13}	2.0807×10^{-4}	49.968 88
pdb1kz2	Classic	7.777×10^{-25}		3.2766×10^{-4}	
	Quaternion	4.694×10^{-25}	4.2483×10^{-12}	2.1897×10^{-4}	49.637 61
pdb1kz5	Classic	1.825×10^{-23}		2.2949×10^{-4}	
	Quaternion	2.280×10^{-24}	2.9273×10^{-12}	1.4943×10^{-4}	53.576 15

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1lvz	Classic	2.004×10^{-10}		1.9579×10^{-4}	
	Quaternion	2.004×10^{-10}	6.6194×10^{-13}	1.2682×10^{-4}	54.391 44
pdb1m4e	Classic	1.304×10^{-10}		3.9704×10^{-4}	
	Quaternion	1.304×10^{-10}	5.9826×10^{-12}	2.7201×10^{-4}	45.964 81
pdb1ma2	Classic	8.239×10^{-10}		3.0943×10^{-3}	
	Quaternion	8.239×10^{-10}	4.8491×10^{-11}	1.9761×10^{-3}	56.583 03
pdb1ma4	Classic	1.637×10^{-10}		9.0706×10^{-4}	
	Quaternion	1.637×10^{-10}	5.5679×10^{-13}	5.8682×10^{-4}	54.572 38
pdb1ma5	Classic	2.268×10^{-22}		3.3857×10^{-4}	
	Quaternion	7.238×10^{-22}	4.1675×10^{-12}	2.2962×10^{-4}	47.450 00
pdb1ma6	Classic	3.569×10^{-11}		3.1948×10^{-4}	
	Quaternion	3.569×10^{-11}	6.0995×10^{-11}	2.1759×10^{-4}	46.826 13
pdb1mpe	Classic	1.796×10^{-11}		1.9657	
	Quaternion	1.797×10^{-11}	3.8326×10^{-10}	1.5633	25.744 39
pdb1nd9	Classic	4.573×10^{-22}		4.0226×10^{-3}	
	Quaternion	2.343×10^{-22}	1.8713×10^{-12}	2.9019×10^{-3}	38.621 58
pdb1ne5	Classic	2.641×10^{-20}		2.0728×10^{-3}	
	Quaternion	3.682×10^{-21}	9.1988×10^{-12}	1.5088×10^{-3}	37.379 72
pdb1nmj	Classic	5.850×10^{-26}		6.3517×10^{-4}	
	Quaternion	1.380×10^{-25}	1.6907×10^{-13}	4.4265×10^{-4}	43.493 04
pdb1o53	Classic	1.022×10^{-10}		3.1641×10^{-4}	
	Quaternion	1.022×10^{-10}	1.1873×10^{-12}	2.0911×10^{-4}	51.311 49
pdb1oqp	Classic	7.421×10^{-23}		1.4400×10^{-2}	
	Quaternion	2.508×10^{-23}	1.3196×10^{-12}	9.9126×10^{-3}	45.267 53
pdb1plw	Classic	6.936×10^{-25}		8.3448×10^{-5}	
	Quaternion	5.299×10^{-25}	4.6242×10^{-13}	5.0954×10^{-5}	63.772 85
pdb1plx	Classic	5.513×10^{-23}		7.8097×10^{-5}	
	Quaternion	5.592×10^{-24}	4.7012×10^{-12}	4.8648×10^{-5}	60.534 86
pdb1pv0	Classic	1.232×10^{-10}		1.3564×10^{-3}	
	Quaternion	1.232×10^{-10}	3.3931×10^{-12}	9.7063×10^{-4}	39.745 22
pdb1qlk	Classic	6.488×10^{-11}		2.1197×10^{-1}	
	Quaternion	6.488×10^{-11}	9.4346×10^{-11}	1.6747×10^{-1}	26.566 89
pdb1r57	Classic	1.769×10^{-12}		4.9544×10^{-3}	
	Quaternion	1.769×10^{-12}	2.1316×10^{-12}	3.9002×10^{-3}	27.028 29
pdb1ry3	Classic	2.466×10^{-10}		2.1395×10^{-3}	
	Quaternion	2.466×10^{-10}	3.4230×10^{-12}	1.5831×10^{-3}	35.151 35
pdb1s4h	Classic	8.706×10^{-13}		2.2472×10^{-4}	
	Quaternion	8.707×10^{-13}	8.7429×10^{-12}	1.4641×10^{-4}	53.491 95
pdb1s4j	Classic	3.470×10^{-10}		2.6109×10^{-4}	
	Quaternion	3.470×10^{-10}	9.2762×10^{-13}	1.7316×10^{-4}	50.776 86
pdb1s6j	Classic	1.096×10^{-10}		1.3378×10^{-2}	
	Quaternion	1.096×10^{-10}	1.9714×10^{-12}	8.8999×10^{-3}	50.315 90
pdb1sa8	Classic	9.204×10^{-21}		4.0453×10^{-3}	
	Quaternion	7.551×10^{-21}	2.7989×10^{-12}	3.2587×10^{-3}	24.139 22
pdb1t2y	Classic	5.709×10^{-23}		5.8334×10^{-4}	

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb1t5q	Quaternion	6.970×10^{-23}	2.7851×10^{-12}	4.0712×10^{-4}	43.282 60
	Classic	1.910×10^{-24}		6.0083×10^{-4}	
pdb1tot	Quaternion	1.372×10^{-24}	1.4825×10^{-13}	4.1178×10^{-4}	45.909 60
	Classic	6.807×10^{-24}		1.4564×10^{-3}	
pdb1v6r	Quaternion	9.344×10^{-24}	2.3697×10^{-13}	1.0877×10^{-3}	33.899 92
	Classic	1.133×10^{-21}		4.5162×10^{-4}	
pdb1v92	Quaternion	1.378×10^{-21}	3.7304×10^{-12}	3.0673×10^{-4}	47.235 83
	Classic	1.867×10^{-23}		1.2557×10^{-3}	
pdb1vd7	Quaternion	2.846×10^{-23}	2.4804×10^{-12}	8.9852×10^{-4}	39.756 89
	Classic	2.704×10^{-10}		5.0538×10^{-4}	
pdb1vd9	Quaternion	2.704×10^{-10}	2.3012×10^{-12}	3.4422×10^{-4}	46.819 54
	Classic	1.193×10^{-9}		6.2955×10^{-4}	
pdb1vdb	Quaternion	1.193×10^{-9}	3.8355×10^{-11}	4.1655×10^{-4}	51.134 73
	Classic	4.944×10^{-10}		4.7102×10^{-4}	
pdb1vpc	Quaternion	4.944×10^{-10}	1.1210×10^{-11}	3.1632×10^{-4}	48.908 93
	Classic	1.062×10^{-25}		1.1209×10^{-3}	
pdb1wnk	Quaternion	1.105×10^{-25}	1.0206×10^{-13}	8.0695×10^{-4}	38.903 83
	Classic	3.206×10^{-19}		4.8438×10^{-4}	
pdb1wo4	Quaternion	6.740×10^{-20}	7.6026×10^{-10}	3.2548×10^{-4}	48.820 13
	Classic	7.461×10^{-22}		3.2958×10^{-3}	
pdb1wo5	Quaternion	3.313×10^{-21}	1.3690×10^{-11}	2.0923×10^{-3}	57.517 11
	Classic	4.597×10^{-11}		1.1051×10^{-3}	
pdb1x60	Quaternion	4.597×10^{-11}	1.6851×10^{-11}	7.1921×10^{-4}	53.659 70
	Classic	4.333×10^{-11}		3.6735×10^{-2}	
pdb1y5c	Quaternion	4.333×10^{-11}	7.5574×10^{-12}	2.5071×10^{-2}	46.527 99
	Classic	4.251×10^{-11}		1.8744×10^{-4}	
pdb1yx7	Quaternion	4.251×10^{-11}	9.7008×10^{-12}	1.2015×10^{-4}	56.011 99
	Classic	1.639×10^{-10}		2.6211×10^{-2}	
pdb1yx8	Quaternion	1.639×10^{-10}	3.9690×10^{-11}	1.8849×10^{-2}	39.054 93
	Classic	5.858×10^{-11}		1.3688×10^{-2}	
pdb1yxr	Quaternion	5.858×10^{-11}	3.8894×10^{-10}	9.2531×10^{-3}	47.929 66
	Classic	2.219×10^{-11}		4.8751×10^{-3}	
pdb2a2y	Quaternion	2.219×10^{-11}	2.3743×10^{-12}	3.6827×10^{-3}	32.378 17
	Classic	1.090×10^{-20}		8.6211×10^{-1}	
pdb2a4j	Quaternion	4.078×10^{-21}	1.0394×10^{-11}	7.0229×10^{-1}	22.757 31
	Classic	1.197×10^{-24}		3.9556×10^{-3}	
pdb2adn	Quaternion	4.366×10^{-24}	2.9037×10^{-13}	3.1527×10^{-3}	25.466 30
	Classic	1.237×10^{-11}		1.8179	
pdb2ajj	Quaternion	1.237×10^{-11}	7.9476×10^{-11}	1.4527	25.134 73
	Classic	3.438×10^{-10}		6.0351×10^{-4}	
pdb2ajm	Quaternion	3.438×10^{-10}	1.1290×10^{-12}	4.1611×10^{-4}	45.038 39
	Classic	2.889×10^{-10}		6.5003×10^{-4}	
pdb2ajn	Quaternion	2.889×10^{-10}	3.0199×10^{-12}	4.4517×10^{-4}	46.017 75
	Classic	1.802×10^{-10}		6.3176×10^{-4}	
	Quaternion	1.802×10^{-10}	4.6193×10^{-13}	4.2873×10^{-4}	47.353 67
	Classic				

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2ajo	Classic	2.889×10^{-10}	3.0199×10^{-12}	6.5454×10^{-4}	46.389 17
	Quaternion	2.889×10^{-10}		4.4712×10^{-4}	
pdb2akk	Classic	8.363×10^{-23}	1.1166×10^{-12}	6.0795×10^{-3}	33.964 68
	Quaternion	2.487×10^{-23}		4.5381×10^{-3}	
pdb2bzb	Classic	6.719×10^{-24}	1.9550×10^{-12}	7.2818×10^{-2}	34.188 29
	Quaternion	9.294×10^{-23}		5.4266×10^{-2}	
pdb2c0s	Classic	7.695×10^{-21}	1.3872×10^{-11}	1.9075×10^{-3}	32.571 36
	Quaternion	6.254×10^{-22}		1.4388×10^{-3}	
pdb2dci	Classic	5.231×10^{-25}	1.0732×10^{-13}	3.8069×10^{-4}	45.178 39
	Quaternion	5.202×10^{-25}		2.6222×10^{-4}	
pdb2eem	Classic	1.971×10^{-22}	7.6795×10^{-12}	1.6159×10^{-3}	46.123 48
	Quaternion	1.553×10^{-21}		1.1058×10^{-3}	
pdb2fva	Classic	3.374×10^{-20}	1.5968×10^{-11}	6.6016×10^{-2}	40.770 06
	Quaternion	8.330×10^{-21}		4.6896×10^{-2}	
pdb2fvf	Classic	5.875×10^{-21}	1.1819×10^{-11}	2.8267×10^{-2}	43.396 99
	Quaternion	5.396×10^{-22}		1.9712×10^{-2}	
pdb2fxz	Classic	8.123×10^{-10}	4.9386×10^{-12}	2.6655×10^{-4}	51.174 85
	Quaternion	8.123×10^{-10}		1.7632×10^{-4}	
pdb2g9j	Classic	2.410×10^{-19}	9.8079×10^{-12}	4.6825×10^{-1}	26.987 39
	Quaternion	4.969×10^{-19}		3.6874×10^{-1}	
pdb2g9l	Classic	3.224×10^{-24}	1.9157×10^{-12}	8.8147×10^{-4}	41.402 05
	Quaternion	5.977×10^{-24}		6.2338×10^{-4}	
pdb2h5m	Classic	3.715×10^{-12}	2.4650×10^{-11}	3.9564×10^{-3}	25.751 84
	Quaternion	3.715×10^{-12}		3.1462×10^{-3}	
pdb2hep	Classic	3.189×10^{-21}	1.7197×10^{-11}	2.5879×10^{-3}	42.607 71
	Quaternion	1.788×10^{-20}		1.8147×10^{-3}	
pdb2jmy	Classic	2.980×10^{-21}	1.2262×10^{-12}	3.1041×10^{-4}	50.376 42
	Quaternion	3.343×10^{-21}		2.0642×10^{-4}	
pdb2jn5	Classic	2.985×10^{-13}	1.1243×10^{-11}	2.7442×10^{-4}	55.382 39
	Quaternion	2.985×10^{-13}		1.7661×10^{-4}	
pdb2jnk	Classic	8.533×10^{-12}	2.5256×10^{-11}	1.1230×10^{-2}	23.849 68
	Quaternion	8.533×10^{-12}		9.0672×10^{-3}	
pdb2jpn	Classic	1.049×10^{-23}	4.9731×10^{-12}	4.1737×10^{-3}	30.663 45
	Quaternion	1.655×10^{-22}		3.1942×10^{-3}	
pdb2jua	Classic	1.231×10^{-17}	2.0200×10^{-11}	4.6704×10^{-3}	26.499 75
	Quaternion	6.900×10^{-18}		3.6920×10^{-3}	
pdb2jvd	Classic	5.270×10^{-24}	3.6252×10^{-13}	1.3154×10^{-3}	41.069 19
	Quaternion	4.315×10^{-24}		9.3244×10^{-4}	
pdb2jws	Classic	8.553×10^{-11}	1.0841×10^{-12}	1.6913×10^{-3}	35.387 43
	Quaternion	8.553×10^{-11}		1.2492×10^{-3}	
pdb2jwu	Classic	6.308×10^{-11}	6.6652×10^{-12}	5.9803×10^{-3}	43.951 20
	Quaternion	6.308×10^{-11}		4.1544×10^{-3}	
pdb2jxf	Classic	2.349×10^{-11}	1.2542×10^{-12}	6.8525×10^{-4}	46.257 03
	Quaternion	2.349×10^{-11}		4.6852×10^{-4}	
pdb2jz5	Classic	9.033×10^{-23}		5.7953×10^{-3}	

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2k2a	Quaternion	3.915×10^{-22}	6.3878×10^{-13}	4.4357×10^{-3}	30.649 55
	Classic	9.674×10^{-24}		2.3058×10^{-3}	
pdb2k36	Quaternion	2.783×10^{-24}	2.8282×10^{-12}	1.7536×10^{-3}	31.487 60
	Classic	1.309×10^{-11}		6.5825×10^{-3}	
pdb2k37	Quaternion	1.309×10^{-11}	1.8097×10^{-12}	5.5101×10^{-3}	19.462 26
	Classic	8.119×10^{-23}		1.8296×10^{-3}	
pdb2k3i	Quaternion	6.702×10^{-23}	2.5914×10^{-12}	1.3243×10^{-3}	38.152 00
	Classic	7.836×10^{-22}		5.7578×10^{-3}	
pdb2k6s	Quaternion	7.168×10^{-22}	1.8935×10^{-12}	4.5636×10^{-3}	26.167 82
	Classic	1.710×10^{-22}		2.0836×10^{-2}	
pdb2k7o	Quaternion	1.115×10^{-22}	2.3522×10^{-12}	1.3934×10^{-2}	49.529 11
	Classic	1.023×10^{-22}		2.9236×10^{-2}	
pdb2kdh	Quaternion	1.265×10^{-22}	4.8884×10^{-12}	2.2295×10^{-2}	31.132 72
	Classic	1.914×10^{-10}		4.2610×10^{-3}	
pdb2kdl	Quaternion	1.914×10^{-10}	1.2342×10^{-9}	3.1395×10^{-3}	35.721 65
	Classic	5.538×10^{-11}		4.2264×10^{-3}	
pdb2kdm	Quaternion	5.538×10^{-11}	3.8154×10^{-12}	3.0241×10^{-3}	39.758 56
	Classic	6.081×10^{-11}		2.6974×10^{-3}	
pdb2kdp	Quaternion	6.081×10^{-11}	7.3936×10^{-12}	1.9960×10^{-3}	35.137 63
	Classic	1.285×10^{-22}		2.1900×10^{-3}	
pdb2kdr	Quaternion	2.725×10^{-22}	1.7049×10^{-12}	1.6598×10^{-3}	31.938 11
	Classic	3.104×10^{-11}		6.4023×10^{-4}	
pdb2kes	Quaternion	3.104×10^{-11}	3.3412×10^{-13}	4.3133×10^{-4}	48.431 60
	Classic	3.820×10^{-24}		1.3623×10^{-3}	
pdb2kib	Quaternion	4.201×10^{-24}	3.1744×10^{-13}	9.5874×10^{-4}	42.088 69
	Classic	7.490×10^{-21}		2.1990	
pdb2kijn	Quaternion	8.659×10^{-21}	1.0782×10^{-11}	1.4995	46.654 81
	Classic	7.890×10^{-14}		5.7694×10^{-4}	
pdb2kjo	Quaternion	7.890×10^{-14}	1.3838×10^{-12}	3.8867×10^{-4}	48.441 97
	Classic	1.239×10^{-10}		5.2952×10^{-4}	
pdb2kjr	Quaternion	1.239×10^{-10}	9.3751×10^{-12}	3.6288×10^{-4}	45.921 74
	Classic	6.278×10^{-10}		4.0667×10^{-2}	
pdb2kko	Quaternion	6.278×10^{-10}	2.4446×10^{-11}	2.8746×10^{-2}	41.471 50
	Classic	3.728×10^{-22}		5.7009×10^{-2}	
pdb2kl5	Quaternion	7.250×10^{-23}	3.0140×10^{-12}	4.4676×10^{-2}	27.606 60
	Classic	3.622×10^{-22}		4.5137×10^{-3}	
pdb2klz	Quaternion	1.254×10^{-22}	3.1368×10^{-12}	3.6123×10^{-3}	24.953 87
	Classic	7.720×10^{-25}		1.2773×10^{-3}	
pdb2ko1	Quaternion	9.391×10^{-25}	4.6317×10^{-13}	8.9659×10^{-4}	42.457 33
	Classic	1.723×10^{-12}		7.5512×10^{-2}	
pdb2koz	Quaternion	1.723×10^{-12}	4.1399×10^{-12}	6.1186×10^{-2}	23.413 46
	Classic	3.052×10^{-10}		1.0232×10^{-3}	
pdb2kp0	Quaternion	3.052×10^{-10}	1.6248×10^{-11}	7.1579×10^{-4}	42.948 16
	Classic	1.444×10^{-11}		2.5155×10^{-3}	
pdb2kp0	Quaternion	1.444×10^{-11}	6.2079×10^{-11}	1.7144×10^{-3}	46.727 70
	Classic				

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2ksg	Classic	1.069×10^{-24}	6.1641×10^{-13}	1.1726×10^{-3}	38.205 42
	Quaternion	9.982×10^{-25}		8.4842×10^{-4}	
pdb2kt8	Classic	3.760×10^{-20}	4.9046×10^{-12}	9.5425×10^{-3}	38.583 14
	Quaternion	4.331×10^{-20}		6.8858×10^{-3}	
pdb2kuh	Classic	4.485×10^{-24}	7.0876×10^{-13}	2.1056×10^{-3}	30.355 97
	Quaternion	1.309×10^{-24}		1.6152×10^{-3}	
pdb2kwh	Classic	1.137×10^{-23}	3.6703×10^{-12}	1.6935×10^{-3}	37.391 25
	Quaternion	1.274×10^{-22}		1.2326×10^{-3}	
pdb2kxa	Classic	9.598×10^{-11}	4.1552×10^{-12}	4.9427×10^{-4}	42.080 66
	Quaternion	9.598×10^{-11}		3.4788×10^{-4}	
pdb2kyb	Classic	4.852×10^{-12}	4.3349×10^{-11}	1.1214×10^{-1}	50.682 75
	Quaternion	4.854×10^{-12}		7.4421×10^{-2}	
pdb2l3m	Classic	3.284×10^{-21}	6.0669×10^{-13}	2.1461×10^{-3}	30.106 49
	Quaternion	2.841×10^{-21}		1.6495×10^{-3}	
pdb2l3n	Classic	1.604×10^{-24}	1.5025×10^{-12}	1.9397×10^{-2}	44.104 90
	Quaternion	9.202×10^{-24}		1.3461×10^{-2}	
pdb2l45	Classic	2.567×10^{-25}	1.5900×10^{-13}	5.5214×10^{-4}	51.779 16
	Quaternion	5.244×10^{-25}		3.6378×10^{-4}	
pdb2l5r	Classic	3.044×10^{-24}	6.2394×10^{-13}	5.4755×10^{-4}	50.291 22
	Quaternion	1.046×10^{-24}		3.6433×10^{-4}	
pdb2l6q	Classic	1.881×10^{-10}	9.8136×10^{-10}	4.5253×10^{-3}	36.353 43
	Quaternion	1.881×10^{-10}		3.3188×10^{-3}	
pdb2l6r	Classic	4.111×10^{-11}	1.8748×10^{-11}	1.8943×10^{-3}	35.670 46
	Quaternion	4.111×10^{-11}		1.3962×10^{-3}	
pdb2l98	Classic	9.739×10^{-20}	3.2376×10^{-11}	6.6837×10^{-3}	34.355 26
	Quaternion	5.266×10^{-22}		4.9746×10^{-3}	
pdb2lci	Classic	6.861×10^{-22}	8.2620×10^{-13}	6.8512×10^{-3}	23.626 28
	Quaternion	2.948×10^{-22}		5.5419×10^{-3}	
pdb2lde	Classic	8.378×10^{-25}	3.3386×10^{-13}	5.2914×10^{-4}	48.405 77
	Quaternion	9.211×10^{-25}		3.5655×10^{-4}	
pdb2le2	Classic	5.817×10^{-22}	1.3059×10^{-12}	6.1907×10^{-2}	25.231 92
	Quaternion	1.157×10^{-22}		4.9434×10^{-2}	
pdb2le7	Classic	1.153×10^{-24}	1.0978×10^{-13}	4.0371×10^{-4}	49.101 14
	Quaternion	3.827×10^{-25}		2.7076×10^{-4}	
pdb2ler	Classic	9.732×10^{-26}	4.8108×10^{-14}	2.0264×10^{-4}	57.072 76
	Quaternion	7.513×10^{-26}		1.2901×10^{-4}	
pdb2lgi	Classic	8.360×10^{-21}	5.4589×10^{-12}	3.3563×10^{-3}	39.240 59
	Quaternion	3.866×10^{-21}		2.4105×10^{-3}	
pdb2lhc	Classic	1.418×10^{-10}	1.2994×10^{-9}	2.6546×10^{-3}	44.077 90
	Quaternion	1.418×10^{-10}		1.8424×10^{-3}	
pdb2lhd	Classic	8.210×10^{-21}	2.5655×10^{-11}	1.7869×10^{-2}	54.759 15
	Quaternion	7.377×10^{-21}		1.1547×10^{-2}	
pdb2lhe	Classic	1.106×10^{-17}	6.3217×10^{-12}	5.3215×10^{-3}	39.422 81
	Quaternion	1.092×10^{-17}		3.8168×10^{-3}	
pdb2lhg	Classic	2.135×10^{-23}		1.6097×10^{-3}	

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2lix	Quaternion	1.904×10^{-23}	3.2233×10^{-13}	1.1963×10^{-3}	34.559 04
	Classic	4.386×10^{-23}		5.9443×10^{-4}	
pdb2lld	Quaternion	5.759×10^{-24}	1.4715×10^{-12}	4.0621×10^{-4}	46.336 89
	Classic	6.260×10^{-22}		1.0147×10^{-3}	
pdb2lm9	Quaternion	1.197×10^{-22}	1.9602×10^{-12}	7.2424×10^{-4}	40.103 57
	Classic	1.758×10^{-23}		3.3756×10^{-3}	
pdb2lmf	Quaternion	2.575×10^{-23}	7.9847×10^{-13}	2.6309×10^{-3}	28.307 26
	Classic	4.430×10^{-11}		4.5042×10^{-4}	
pdb2ln3	Quaternion	4.430×10^{-11}	2.3248×10^{-12}	3.0057×10^{-4}	49.856 27
	Classic	1.980×10^{-22}		2.7664×10^{-3}	
pdb2lo2	Quaternion	7.449×10^{-23}	9.4479×10^{-14}	2.1413×10^{-3}	29.189 69
	Classic	8.469×10^{-25}		8.9283×10^{-4}	
pdb2lqp	Quaternion	5.148×10^{-25}	5.0804×10^{-13}	6.2465×10^{-4}	42.934 08
	Classic	1.624×10^{-10}		2.1138×10^{-3}	
pdb2lr0	Quaternion	1.624×10^{-10}	1.9702×10^{-11}	1.5957×10^{-3}	32.465 60
	Classic	1.029×10^{-19}		9.2633×10^{-3}	
pdb2lrh	Quaternion	9.051×10^{-20}	1.7837×10^{-11}	7.2667×10^{-3}	27.474 71
	Classic	2.335×10^{-11}		1.0941×10^{-2}	
pdb2ls9	Quaternion	2.335×10^{-11}	4.1703×10^{-12}	8.3910×10^{-3}	30.386 47
	Classic	2.860×10^{-23}		4.7790×10^{-4}	
pdb2lsa	Quaternion	2.515×10^{-23}	6.9713×10^{-13}	3.2547×10^{-4}	46.833 15
	Classic	8.473×10^{-25}		4.7781×10^{-4}	
pdb2lss	Quaternion	5.354×10^{-24}	3.4845×10^{-13}	3.2595×10^{-4}	46.588 93
	Classic	1.966×10^{-22}		2.0954×10^{-3}	
pdb2lt3	Quaternion	3.382×10^{-23}	3.6848×10^{-12}	1.6117×10^{-3}	30.010 19
	Classic	7.866×10^{-23}		4.3532×10^{-3}	
pdb2lu6	Quaternion	7.866×10^{-23}	3.4123×10^{-13}	3.5023×10^{-3}	24.296 64
	Classic	3.839×10^{-23}		4.3532×10^{-3}	
pdb2lwa	Quaternion	3.603×10^{-26}	1.9324×10^{-14}	1.7187×10^{-4}	56.424 22
	Classic	6.370×10^{-26}		2.6885×10^{-4}	
pdb2lwa	Quaternion	1.773×10^{-10}	4.6809×10^{-12}	1.6012×10^{-3}	32.088 33
	Classic	1.773×10^{-10}		2.1150×10^{-3}	
pdb2lx0	Quaternion	6.786×10^{-11}	1.9476×10^{-12}	5.3390×10^{-4}	43.916 13
	Classic	6.786×10^{-11}		7.6836×10^{-4}	
pdb2lxb	Quaternion	1.666×10^{-22}	2.4435×10^{-12}	8.0947×10^{-3}	22.269 72
	Classic	2.240×10^{-22}		9.8974×10^{-3}	
pdb2lxy	Quaternion	1.805×10^{-10}	3.8258×10^{-11}	1.2247×10^{-2}	48.128 29
	Classic	1.805×10^{-10}		1.8141×10^{-2}	
pdb2lxz	Quaternion	7.052×10^{-21}	8.0453×10^{-12}	5.4448×10^{-3}	83.026 61
	Classic	1.797×10^{-20}		9.9654×10^{-3}	
pdb2lzf	Quaternion	1.388×10^{-23}	1.3098×10^{-12}	1.6460×10^{-1}	27.157 54
	Classic	2.786×10^{-23}		2.0930×10^{-1}	
pdb2mla	Quaternion	1.720×10^{-26}	1.3767×10^{-13}	4.4215×10^{-4}	49.525 56
	Classic	4.881×10^{-26}		6.6113×10^{-4}	
pdb2mlj	Quaternion	3.282×10^{-25}	5.4650×10^{-13}	4.9133×10^{-4}	44.956 93
	Classic	7.378×10^{-25}		7.1221×10^{-4}	

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2m2y	Classic	3.076×10^{-23}		3.8690×10^{-4}	
	Quaternion	1.315×10^{-22}	1.1427×10^{-12}	2.5008×10^{-4}	54.710 42
pdb2m3f	Classic	4.029×10^{-25}		4.2168×10^{-4}	
	Quaternion	1.628×10^{-24}	3.2592×10^{-13}	2.9283×10^{-4}	43.999 58
pdb2m8m	Classic	1.870×10^{-24}		5.7919×10^{-4}	
	Quaternion	9.789×10^{-25}	1.5744×10^{-12}	3.9731×10^{-4}	45.778 12
pdb2m8o	Classic	1.277×10^{-25}		5.7597×10^{-4}	
	Quaternion	2.020×10^{-25}	2.0793×10^{-13}	3.9151×10^{-4}	47.117 73
pdb2m97	Classic	8.762×10^{-23}		2.1320×10^{-3}	
	Quaternion	1.529×10^{-23}	4.2576×10^{-12}	1.6021×10^{-3}	33.077 47
pdb2m9g	Classic	4.010×10^{-22}		2.0472×10^{-2}	
	Quaternion	7.823×10^{-22}	5.3689×10^{-12}	1.5058×10^{-2}	35.955 20
pdb2m9r	Classic	4.190×10^{-24}		1.0180×10^{-3}	
	Quaternion	3.184×10^{-24}	1.2995×10^{-12}	7.0049×10^{-4}	45.328 17
pdb2mdv	Classic	2.373×10^{-20}		1.9944×10^{-2}	
	Quaternion	3.890×10^{-20}	3.0056×10^{-12}	1.3345×10^{-2}	49.454 81
pdb2me1	Classic	2.858×10^{-22}		6.0590×10^{-4}	
	Quaternion	4.660×10^{-23}	4.1648×10^{-12}	4.1696×10^{-4}	45.314 83
pdb2me2	Classic	2.316×10^{-10}		5.8623×10^{-4}	
	Quaternion	2.316×10^{-10}	1.8283×10^{-12}	3.9705×10^{-4}	47.644 52
pdb2me3	Classic	1.748×10^{-10}		5.2962×10^{-4}	
	Quaternion	1.748×10^{-10}	2.5263×10^{-12}	3.6366×10^{-4}	45.635 01
pdb2me4	Classic	1.462×10^{-10}		6.2802×10^{-4}	
	Quaternion	1.462×10^{-10}	9.3376×10^{-13}	4.2484×10^{-4}	47.823 03
pdb2mg1	Classic	1.125×10^{-24}		5.4822×10^{-4}	
	Quaternion	2.185×10^{-24}	1.3041×10^{-12}	3.7163×10^{-4}	47.515 03
pdb2mg2	Classic	1.707×10^{-25}		5.7009×10^{-4}	
	Quaternion	3.530×10^{-25}	1.4276×10^{-13}	3.8993×10^{-4}	46.204 34
pdb2mg3	Classic	6.270×10^{-24}		5.9457×10^{-4}	
	Quaternion	3.333×10^{-24}	8.2131×10^{-13}	4.0838×10^{-4}	45.592 33
pdb2mh8	Classic	2.558×10^{-23}		1.6076×10^{-3}	
	Quaternion	5.209×10^{-23}	1.4713×10^{-12}	1.1794×10^{-3}	36.303 55
pdb2mhw	Classic	8.217×10^{-24}		6.0072×10^{-4}	
	Quaternion	1.076×10^{-23}	4.0488×10^{-13}	4.1879×10^{-4}	43.442 04
pdb2mi1	Classic	1.251×10^{-10}		3.1917×10^{-3}	
	Quaternion	1.251×10^{-10}	3.2567×10^{-12}	1.9852×10^{-3}	60.775 90
pdb2mi7	Classic	7.286×10^{-11}		1.8342×10^{-3}	
	Quaternion	7.286×10^{-11}	1.0262×10^{-11}	1.3729×10^{-3}	33.604 32
pdb2mij	Classic	2.770×10^{-23}		8.5498×10^{-4}	
	Quaternion	2.702×10^{-23}	3.5837×10^{-12}	5.9731×10^{-4}	43.138 04
pdb2mix	Classic	2.388×10^{-24}		4.2811×10^{-4}	
	Quaternion	4.043×10^{-24}	2.2543×10^{-13}	2.9164×10^{-4}	46.791 56
pdb2mj1	Classic	8.148×10^{-24}		3.8621×10^{-4}	
	Quaternion	2.934×10^{-23}	1.5286×10^{-12}	2.5389×10^{-4}	52.115 25
pdb2mj2	Classic	3.199×10^{-23}		8.4139×10^{-4}	

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2mjg	Quaternion	1.252×10^{-23}	2.8888×10^{-12}	5.7428×10^{-4}	46.512 21
	Classic	4.876×10^{-23}		8.4214×10^{-3}	
pdb2mji	Quaternion	1.077×10^{-23}	2.3581×10^{-13}	6.5199×10^{-3}	29.163 88
	Classic	1.888×10^{-11}		6.0958×10^{-3}	
pdb2mle	Quaternion	1.888×10^{-11}	2.9688×10^{-11}	5.0308×10^{-3}	21.169 48
	Classic	2.703×10^{-22}		2.2394×10^{-3}	
pdb2mlf	Quaternion	2.802×10^{-22}	1.1519×10^{-12}	1.6983×10^{-3}	31.860 32
	Classic	5.630×10^{-23}		2.3018×10^{-3}	
pdb2mo5	Quaternion	5.903×10^{-23}	1.9392×10^{-12}	1.7436×10^{-3}	32.009 34
	Classic	4.136×10^{-14}		9.6595×10^{-3}	
pdb2mpu	Quaternion	4.136×10^{-14}	6.7951×10^{-11}	7.8298×10^{-3}	23.368 90
	Classic	8.827×10^{-23}		3.1572×10^{-3}	
pdb2mra	Quaternion	4.845×10^{-23}	9.0462×10^{-13}	2.4981×10^{-3}	26.382 24
	Classic	1.191×10^{-20}		7.6427×10^{-3}	
pdb2msu	Quaternion	4.077×10^{-22}	1.2730×10^{-11}	6.0037×10^{-3}	27.300 20
	Classic	1.417×10^{-23}		4.6094×10^{-4}	
pdb2mty	Quaternion	1.122×10^{-23}	8.7849×10^{-13}	3.0825×10^{-4}	49.537 22
	Classic	1.003×10^{-24}		4.6551×10^{-4}	
pdb2muh	Quaternion	3.669×10^{-24}	2.2229×10^{-12}	3.0995×10^{-4}	50.190 60
	Classic	9.401×10^{-11}		4.9712×10^{-4}	
pdb2mvj	Quaternion	9.401×10^{-11}	9.0669×10^{-12}	3.1944×10^{-4}	55.619 78
	Classic	3.303×10^{-22}		5.4585×10^{-4}	
pdb2mvt	Quaternion	6.049×10^{-23}	1.4707×10^{-11}	3.6731×10^{-4}	48.609 28
	Classic	6.824×10^{-11}		1.8828×10^{-3}	
pdb2n00	Quaternion	6.824×10^{-11}	2.7781×10^{-10}	1.3590×10^{-3}	38.543 44
	Classic	4.943×10^{-11}		5.3786×10^{-3}	
pdb2n0b	Quaternion	4.943×10^{-11}	3.0781×10^{-12}	4.1342×10^{-3}	30.100 25
	Classic	9.255×10^{-10}		1.8642×10^{-4}	
pdb2n0c	Quaternion	9.255×10^{-10}	8.1641×10^{-13}	1.1712×10^{-4}	59.163 11
	Classic	8.868×10^{-10}		1.5672×10^{-4}	
pdb2n0d	Quaternion	8.868×10^{-10}	3.1194×10^{-13}	1.0011×10^{-4}	56.552 05
	Classic	1.185×10^{-9}		1.6861×10^{-4}	
pdb2n0e	Quaternion	1.185×10^{-9}	1.1993×10^{-11}	1.0865×10^{-4}	55.186 12
	Classic	1.631×10^{-20}		1.8574×10^{-4}	
pdb2n0f	Quaternion	2.503×10^{-20}	3.9902×10^{-12}	1.1965×10^{-4}	55.242 78
	Classic	2.798×10^{-12}		1.9041×10^{-4}	
pdb2n0g	Quaternion	2.798×10^{-12}	1.3315×10^{-12}	1.2074×10^{-4}	57.696 93
	Classic	4.724×10^{-11}		1.8809×10^{-4}	
pdb2n0h	Quaternion	4.724×10^{-11}	1.1667×10^{-11}	1.1915×10^{-4}	57.867 00
	Classic	4.855×10^{-11}		1.8542×10^{-4}	
pdb2n35	Quaternion	4.855×10^{-11}	1.1609×10^{-11}	1.1859×10^{-4}	56.353 30
	Classic	3.985×10^{-24}		1.4157×10^{-3}	
pdb2n3a	Quaternion	1.389×10^{-24}	1.2116×10^{-12}	1.0314×10^{-3}	37.255 67
	Classic	1.669×10^{-22}		6.7403×10^{-2}	
	Quaternion	3.455×10^{-23}	1.6007×10^{-12}	4.6575×10^{-2}	44.719 23
	Classic				

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2n41	Classic	4.628×10^{-23}		5.2429×10^{-3}	
	Quaternion	1.314×10^{-22}	3.5667×10^{-13}	4.1297×10^{-3}	26.956 56
pdb2n4e	Classic	2.212×10^{-22}		4.0207×10^{-3}	
	Quaternion	7.882×10^{-23}	8.8287×10^{-13}	3.1866×10^{-3}	26.175 31
pdb2n5q	Classic	1.337×10^{-10}		1.4371×10^{-3}	
	Quaternion	1.337×10^{-10}	5.7950×10^{-12}	9.5907×10^{-4}	49.847 61
pdb2n67	Classic	1.030×10^{-21}		3.2509×10^{-3}	
	Quaternion	1.111×10^{-21}	4.6338×10^{-13}	2.5641×10^{-3}	26.785 27
pdb2n6n	Classic	6.310×10^{-12}		1.7435×10^{-3}	
	Quaternion	6.309×10^{-12}	8.3196×10^{-12}	1.1731×10^{-3}	48.620 69
pdb2n7i	Classic	1.245×10^{-11}		9.0977×10^{-4}	
	Quaternion	1.245×10^{-11}	1.4499×10^{-11}	6.2768×10^{-4}	44.942 38
pdb2n7j	Classic	3.115×10^{-22}		2.5361×10^{-3}	
	Quaternion	9.101×10^{-22}	9.7846×10^{-13}	1.8139×10^{-3}	39.810 69
pdb2n9b	Classic	1.536×10^{-11}		4.5522×10^{-1}	
	Quaternion	1.536×10^{-11}	2.0585×10^{-11}	3.4824×10^{-1}	30.721 69
pdb2na9	Classic	2.734×10^{-23}		1.0394×10^{-3}	
	Quaternion	8.610×10^{-24}	1.0478×10^{-12}	7.2562×10^{-4}	43.247 51
pdb2ndc	Classic	5.633×10^{-25}		3.8387×10^{-4}	
	Quaternion	7.826×10^{-25}	5.7876×10^{-13}	2.5467×10^{-4}	50.729 46
pdb2nde	Classic	7.159×10^{-24}		3.3621×10^{-4}	
	Quaternion	8.570×10^{-24}	8.1870×10^{-13}	2.2508×10^{-4}	49.374 54
pdb2ndk	Classic	3.106×10^{-10}		1.2716×10^{-3}	
	Quaternion	3.106×10^{-10}	1.5147×10^{-11}	9.2045×10^{-4}	38.146 99
pdb2nvj	Classic	4.326×10^{-24}		4.9680×10^{-4}	
	Quaternion	5.563×10^{-25}	5.8671×10^{-14}	3.4778×10^{-4}	42.851 31
pdb2p6j	Classic	4.017×10^{-24}		1.4103×10^{-3}	
	Quaternion	8.387×10^{-24}	1.7099×10^{-13}	1.0287×10^{-3}	37.102 85
pdb2p81	Classic	2.121×10^{-10}		1.0760×10^{-3}	
	Quaternion	2.121×10^{-10}	8.9719×10^{-12}	7.6812×10^{-4}	40.080 39
pdb2pqe	Classic	3.549×10^{-10}		4.3668×10^{-2}	
	Quaternion	3.549×10^{-10}	1.6451×10^{-10}	3.3771×10^{-2}	29.304 37
pdb2rlg	Classic	8.367×10^{-25}		3.7522×10^{-4}	
	Quaternion	1.460×10^{-24}	6.7346×10^{-13}	2.4759×10^{-4}	51.547 90
pdb2rlh	Classic	1.086×10^{-23}		4.0532×10^{-4}	
	Quaternion	3.476×10^{-24}	1.0733×10^{-12}	2.6995×10^{-4}	50.147 99
pdb2rmy	Classic	4.829×10^{-11}		8.0480×10^{-4}	
	Quaternion	4.829×10^{-11}	1.7484×10^{-12}	5.4713×10^{-4}	47.093 98
pdb2rnd	Classic	6.754×10^{-23}		7.9029×10^{-4}	
	Quaternion	7.833×10^{-23}	5.1117×10^{-12}	5.4486×10^{-4}	45.043 29
pdb2roo	Classic	3.674×10^{-20}		1.2650×10^{-2}	
	Quaternion	4.516×10^{-20}	5.3127×10^{-12}	7.9123×10^{-3}	59.881 34
pdb2rql	Classic	7.439×10^{-12}		2.5663×10^{-2}	
	Quaternion	7.439×10^{-12}	6.2570×10^{-11}	1.7438×10^{-2}	47.169 35
pdb2rut	Classic	1.305×10^{-24}		8.3015×10^{-4}	

Table 2: Results - continued

Problem	Method	LDE	RMSD	Time	Improv time
pdb2ruv	Quaternion	3.227×10^{-24}	1.0520×10^{-12}	5.6818×10^{-4}	46.107 81
	Classic	6.723×10^{-23}		8.7768×10^{-4}	
pdb2ruv	Quaternion	1.728×10^{-23}	1.2232×10^{-12}	6.1032×10^{-4}	43.807 27
	Classic	7.500×10^{-25}		8.8084×10^{-4}	
pdb2ruv	Quaternion	1.207×10^{-24}	9.3591×10^{-14}	6.0709×10^{-4}	45.090 87
	Classic	6.585×10^{-25}		8.9490×10^{-4}	
pdb2ruv	Quaternion	4.031×10^{-25}	1.1711×10^{-12}	6.1514×10^{-4}	45.477 97
	Classic	3.543×10^{-24}		9.0262×10^{-4}	
pdb2rv3	Quaternion	3.084×10^{-24}	8.5139×10^{-13}	6.1883×10^{-4}	45.859 61
	Classic	2.414×10^{-25}		8.2770×10^{-4}	
pdb2rv5	Quaternion	1.035×10^{-25}	1.3358×10^{-13}	5.7082×10^{-4}	45.000 64
	Classic	2.687×10^{-11}		8.0108×10^{-3}	
pdb2y4q	Quaternion	2.687×10^{-11}	2.2850×10^{-11}	5.9419×10^{-3}	34.818 87
	Classic				