Consolidated Performance Tests

Felipe Fidalgo[*1], Emerson Castelani[†2], and Guilherme Philippi[‡1]

[1]Department of Mathematics, Universidade Federal de Santa Catarina, 2514 João Pessoa street, Velha, Blumenau, Santa Catarina, Brazil, 89036-004
[2]Department of Mathematics, Universidade Estadual de Maringá, 5790 Colombo Avenue, , Jardim Universitário, Maringá, Paraná, Brazil, 87020-900

June 29, 2023

Contents

---
[*]felipe.fidalgo@ufsc.br
[†]evcastelani@uem.br
[‡]g.philippi@grad.ufsc.br

1 Benchmark's tables

1.1 Using BP-One versions

Table 1: Results

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

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Ratio
pdb1ma2 104	Classic	8.695×10^{-12}		2.3923×10^{-4}	
	Quaternion	8.758×10^{-12}	4.7062×10^{-13}	1.0667×10^{-4}	0.446
pdb1ma4 104	Classic	7.247×10^{-14}		4.1287×10^{-4}	
	Quaternion	7.981×10^{-14}	1.8851×10^{-13}	1.7248×10^{-4}	0.418
pdb1ma5 104	Classic	8.169×10^{-13}		1.5005×10^{-4}	
	Quaternion	9.044×10^{-13}	5.0234×10^{-13}	7.2148×10^{-5}	0.481
pdb1ma6 104	Classic	6.283×10^{-13}		1.4103×10^{-4}	
	Quaternion	8.522×10^{-13}	3.3052×10^{-12}	7.0075×10^{-5}	0.497
pdb1mpe 1352	Classic	2.617×10^{-11}		8.1131×10^{-3}	
	Quaternion	2.624×10^{-11}	7.1261×10^{-13}	3.4902×10^{-3}	0.430
pdb1nd9 296	Classic	3.026×10^{-13}		4.5081×10^{-4}	
	Quaternion	3.845×10^{-13}	4.7137×10^{-13}	2.2590×10^{-4}	0.501
pdb1ne5 254	Classic	1.214×10^{-12}		3.6696×10^{-4}	
	Quaternion	1.384×10^{-12}	7.5582×10^{-13}	1.8293×10^{-4}	0.498
pdb1nmj 170	Classic	1.237×10^{-14}		2.6603×10^{-4}	
	Quaternion	1.424×10^{-14}	1.3921×10^{-14}	1.3008×10^{-4}	0.489
pdb1o53 92	Classic	3.999×10^{-13}		1.4899×10^{-4}	
	Quaternion	4.545×10^{-13}	6.5350×10^{-13}	6.9913×10^{-5}	0.469
pdb1oqp 580	Classic	7.045×10^{-14}		3.0062×10^{-3}	
	Quaternion	8.315×10^{-14}	9.0066×10^{-14}	1.6903×10^{-3}	0.562
pdb1plw 32	Classic	2.830×10^{-14}		4.5461×10^{-5}	
	Quaternion	3.122×10^{-14}	4.9118×10^{-14}	2.2201×10^{-5}	0.488
pdb1plx 32	Classic	1.574×10^{-13}		4.2650×10^{-5}	
	Quaternion	2.060×10^{-13}	1.7973×10^{-13}	2.0929×10^{-5}	0.491
pdb1pv0 278	Classic	2.409×10^{-13}		4.4412×10^{-4}	
	Quaternion	2.723×10^{-13}	1.0662×10^{-13}	2.0904×10^{-4}	0.471
pdb1pzr 724	Classic	5.644×10^{-12}		6.4490×10^{-3}	
	Quaternion	5.871×10^{-12}	9.9935×10^{-12}	3.5690×10^{-3}	0.553
pdb1qlk 1108	Classic	9.019×10^{-10}		1.0829×10^{-2}	
	Quaternion	9.019×10^{-10}	1.3287×10^{-12}	5.9579×10^{-3}	0.550
pdb1r57 614	Classic	1.847×10^{-13}		9.6998×10^{-4}	
	Quaternion	2.054×10^{-13}	1.4866×10^{-13}	4.8680×10^{-4}	0.502
pdb1ry3 386	Classic	4.938×10^{-13}		6.3087×10^{-4}	
	Quaternion	5.910×10^{-13}	4.7678×10^{-13}	3.0993×10^{-4}	0.491
pdb1s4h 80	Classic	4.300×10^{-9}		1.0674×10^{-4}	
	Quaternion	4.300×10^{-9}	1.1103×10^{-12}	5.3186×10^{-5}	0.498
pdb1s4j 80	Classic	1.520×10^{-13}		1.2866×10^{-4}	
	Quaternion	2.230×10^{-13}	1.6407×10^{-13}	6.7311×10^{-5}	0.523
pdb1s6j 524	Classic	6.073×10^{-13}		7.9899×10^{-4}	
	Quaternion	7.660×10^{-13}	5.9201×10^{-13}	4.0640×10^{-4}	0.509
pdb1sa8 638	Classic	9.340×10^{-13}		9.9482×10^{-4}	
	Quaternion	1.034×10^{-12}	1.0370×10^{-12}	5.2774×10^{-4}	0.530
pdb1t2y 152	Classic	1.887×10^{-13}		2.3413×10^{-4}	
	Quaternion	2.396×10^{-13}	2.3861×10^{-13}	1.4533×10^{-4}	0.621
pdb1t5q 180	Classic	3.877×10^{-14}		2.5394×10^{-4}	
	Quaternion	5.093×10^{-14}	5.3231×10^{-14}	1.3255×10^{-4}	0.522
pdb1tot 314	Classic	6.148×10^{-14}		5.0126×10^{-4}	
	Quaternion	6.853×10^{-14}	2.8392×10^{-14}	3.1670×10^{-4}	0.632
pdb1v6r 128	Classic	6.835×10^{-13}		1.9619×10^{-4}	
	Quaternion	6.970×10^{-13}	3.1917×10^{-13}	1.1899×10^{-4}	0.607
pdb1v92 278	Classic	1.463×10^{-13}		4.3360×10^{-4}	
	Quaternion	1.630×10^{-13}	5.6062×10^{-14}	2.6571×10^{-4}	0.613
pdb1vd7 140	Classic	3.741×10^{-9}		2.0593×10^{-4}	
	Quaternion	3.741×10^{-9}	5.8433×10^{-13}	1.2499×10^{-4}	0.607

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Ratio
pdb1vd9 140	Classic	1.290×10^{-12}		2.4388×10^{-4}	
	Quaternion	1.554×10^{-12}	9.0327×10^{-13}	1.4591×10^{-4}	0.598
pdb1vdb 140	Classic	9.108×10^{-13}		1.9946×10^{-4}	
	Quaternion	1.083×10^{-12}	3.8641×10^{-13}	1.1987×10^{-4}	0.601
pdb1vpc 272	Classic	8.500×10^{-15}		4.1694×10^{-4}	
	Quaternion	1.002×10^{-14}	8.5436×10^{-15}	2.6033×10^{-4}	0.624
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

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Ratio
pdb2fxz	Classic	1.489×10^{-12}		1.2207×10^{-4}	
80	Quaternion	1.749×10^{-12}	2.0430×10^{-12}	7.5061×10^{-5}	0.615
pdb2g9j	Classic	3.282×10^{-12}		4.9852×10^{-2}	
848	Quaternion	3.535×10^{-12}	2.1668×10^{-12}	2.6562×10^{-2}	0.533
pdb2g9l	Classic	6.366×10^{-14}		3.5082×10^{-4}	
224	Quaternion	8.672×10^{-14}	2.8081×10^{-13}	2.1658×10^{-4}	0.617
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

5

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Ratio
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
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

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Ratio
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
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

Table 2: Results - continued

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

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Ratio
pdb2mij	Classic	1.244×10^{-13}		3.3831×10^{-4}	
224	Quaternion	1.522×10^{-13}	2.8681×10^{-13}	2.0663×10^{-4}	0.611
pdb2mix	Classic	4.816×10^{-14}		1.9065×10^{-4}	
128	Quaternion	4.684×10^{-14}	3.7348×10^{-14}	1.1873×10^{-4}	0.623
pdb2mj1	Classic	1.309×10^{-13}		1.7651×10^{-4}	
110	Quaternion	1.646×10^{-13}	2.3819×10^{-13}	1.0746×10^{-4}	0.609
pdb2mj2	Classic	9.775×10^{-14}		3.4006×10^{-4}	
218	Quaternion	1.196×10^{-13}	8.8713×10^{-14}	2.0304×10^{-4}	0.597
pdb2mjg	Classic	5.503×10^{-14}		2.1403×10^{-3}	
556	Quaternion	6.580×10^{-14}	7.0670×10^{-14}	1.2087×10^{-3}	0.565
pdb2mji	Classic	3.207×10^{-12}		1.2480×10^{-3}	
788	Quaternion	3.247×10^{-12}	2.7336×10^{-13}	7.9502×10^{-4}	0.637
pdb2mle	Classic	1.491×10^{-13}		7.0584×10^{-4}	
434	Quaternion	1.535×10^{-13}	3.1271×10^{-13}	4.2886×10^{-4}	0.608
pdb2mlf	Classic	9.918×10^{-14}		7.0616×10^{-4}	
434	Quaternion	1.128×10^{-13}	9.2903×10^{-14}	4.3297×10^{-4}	0.613
pdb2mo5	Classic	2.527×10^{-10}		1.3908×10^{-3}	
854	Quaternion	2.527×10^{-10}	1.0204×10^{-12}	8.7516×10^{-4}	0.629
pdb2mpu	Classic	9.785×10^{-14}		8.9773×10^{-4}	
554	Quaternion	1.016×10^{-13}	1.0352×10^{-13}	5.6068×10^{-4}	0.625
pdb2mra	Classic	2.632×10^{-13}		1.4008×10^{-3}	
704	Quaternion	2.768×10^{-13}	1.2867×10^{-13}	8.4120×10^{-4}	0.601
pdb2msu	Classic	7.813×10^{-14}		2.0173×10^{-4}	
122	Quaternion	8.765×10^{-14}	3.7025×10^{-14}	1.2208×10^{-4}	0.605
pdb2mty	Classic	1.849×10^{-14}		2.1012×10^{-4}	
120	Quaternion	2.364×10^{-14}	9.1457×10^{-14}	1.2629×10^{-4}	0.601
pdb2muh	Classic	2.008×10^{-13}		1.4547×10^{-4}	
98	Quaternion	2.251×10^{-13}	1.4292×10^{-13}	8.7958×10^{-5}	0.605
pdb2mvj	Classic	1.534×10^{-13}		2.4181×10^{-4}	
156	Quaternion	1.647×10^{-13}	5.5998×10^{-14}	1.4392×10^{-4}	0.595
pdb2mvt	Classic	6.053×10^{-12}		5.6681×10^{-4}	
284	Quaternion	6.226×10^{-12}	3.1969×10^{-12}	3.3934×10^{-4}	0.599
pdb2mvx	Classic	4.728×10^{-9}		2.1984×10^{-2}	
2360	Quaternion	4.729×10^{-9}	3.7181×10^{-11}	1.2119×10^{-2}	0.551
pdb2mz6	Classic	4.129×10^{-8}		2.8851×10^{-2}	
220	Quaternion	4.129×10^{-8}	4.4231×10^{-13}	1.5215×10^{-2}	0.527
pdb2n00	Classic	2.703×10^{-13}		7.8567×10^{-4}	
572	Quaternion	3.467×10^{-13}	7.3499×10^{-13}	4.9399×10^{-4}	0.629
pdb2n0b	Classic	7.104×10^{-13}		9.1258×10^{-5}	
60	Quaternion	9.458×10^{-13}	8.9441×10^{-13}	5.5481×10^{-5}	0.608
pdb2n0c	Classic	1.293×10^{-13}		8.9546×10^{-5}	
60	Quaternion	1.682×10^{-13}	2.8483×10^{-13}	5.3031×10^{-5}	0.592
pdb2n0d	Classic	1.925×10^{-9}		8.7136×10^{-5}	
60	Quaternion	1.926×10^{-9}	1.6149×10^{-11}	5.3740×10^{-5}	0.617
pdb2n0e	Classic	3.314×10^{-12}		8.9640×10^{-5}	
60	Quaternion	4.286×10^{-12}	8.3573×10^{-12}	5.5845×10^{-5}	0.623
pdb2n0f	Classic	8.103×10^{-9}		8.4756×10^{-5}	
60	Quaternion	8.103×10^{-9}	5.8011×10^{-13}	5.1625×10^{-5}	0.609
pdb2n0g	Classic	8.315×10^{-13}		1.0130×10^{-4}	
60	Quaternion	9.618×10^{-13}	1.3124×10^{-13}	6.0317×10^{-5}	0.595
pdb2n0h	Classic	7.690×10^{-13}		9.3479×10^{-5}	
60	Quaternion	8.730×10^{-13}	1.8191×10^{-13}	5.8237×10^{-5}	0.623
pdb2n35	Classic	3.541×10^{-14}		4.9604×10^{-4}	
314	Quaternion	4.466×10^{-14}	1.0752×10^{-13}	3.0774×10^{-4}	0.620

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Ratio
pdb2n3a 574	Classic	8.761×10^{-14}		1.6767×10^{-2}	
	Quaternion	1.049×10^{-13}	1.0149×10^{-13}	8.9551×10^{-3}	0.534
pdb2n41 638	Classic	1.812×10^{-13}		1.0753×10^{-3}	
	Quaternion	1.836×10^{-13}	8.2539×10^{-14}	6.5707×10^{-4}	0.611
pdb2n4e 638	Classic	1.494×10^{-13}		1.0563×10^{-3}	
	Quaternion	1.687×10^{-13}	1.8433×10^{-13}	6.5324×10^{-4}	0.618
pdb2n5q 164	Classic	1.732×10^{-12}		2.5502×10^{-4}	
	Quaternion	1.745×10^{-12}	1.7589×10^{-12}	1.6074×10^{-4}	0.630
pdb2n67 566	Classic	4.443×10^{-13}		9.0517×10^{-4}	
	Quaternion	4.465×10^{-13}	6.3487×10^{-14}	5.6303×10^{-4}	0.622
pdb2n6n 192	Classic	4.139×10^{-8}		3.0612×10^{-4}	
	Quaternion	4.139×10^{-8}	5.0670×10^{-13}	1.9266×10^{-4}	0.629
pdb2n7i 224	Classic	9.212×10^{-13}		3.4800×10^{-4}	
	Quaternion	1.126×10^{-12}	3.0537×10^{-12}	2.1033×10^{-4}	0.604
pdb2n7j 336	Classic	5.969×10^{-13}		5.5604×10^{-4}	
	Quaternion	6.094×10^{-13}	1.5144×10^{-13}	3.3764×10^{-4}	0.607
pdb2n9b 832	Classic	1.196×10^{-12}		7.5212×10^{-3}	
	Quaternion	1.238×10^{-12}	1.1231×10^{-12}	4.0541×10^{-3}	0.539
pdb2na9 266	Classic	5.440×10^{-14}		3.9985×10^{-4}	
	Quaternion	6.690×10^{-14}	5.4544×10^{-14}	2.3943×10^{-4}	0.599
pdb2ndc 110	Classic	3.365×10^{-14}		1.7449×10^{-4}	
	Quaternion	4.479×10^{-14}	5.1916×10^{-14}	1.0603×10^{-4}	0.608
pdb2nde 110	Classic	7.022×10^{-14}		1.5498×10^{-4}	
	Quaternion	8.868×10^{-14}	2.5156×10^{-13}	9.5265×10^{-5}	0.615
pdb2ndk 290	Classic	5.022×10^{-13}		4.3875×10^{-4}	
	Quaternion	6.279×10^{-13}	2.0516×10^{-12}	2.6635×10^{-4}	0.607
pdb2nvj 152	Classic	2.082×10^{-14}		2.1106×10^{-4}	
	Quaternion	2.293×10^{-14}	1.4035×10^{-14}	1.3248×10^{-4}	0.628
pdb2p6j 314	Classic	4.795×10^{-14}		4.9868×10^{-4}	
	Quaternion	6.389×10^{-14}	1.1404×10^{-13}	3.0174×10^{-4}	0.605
pdb2p81 266	Classic	7.881×10^{-13}		4.0170×10^{-4}	
	Quaternion	8.250×10^{-13}	4.3715×10^{-13}	2.4128×10^{-4}	0.601
pdb2pqe 896	Classic	6.484×10^{-10}		1.7464×10^{-3}	
	Quaternion	6.496×10^{-10}	8.5673×10^{-12}	1.0742×10^{-3}	0.615
pdb2rlg 108	Classic	5.501×10^{-14}		1.7141×10^{-4}	
	Quaternion	6.973×10^{-14}	6.8873×10^{-14}	1.0328×10^{-4}	0.603
pdb2rlh 108	Classic	4.772×10^{-14}		1.8381×10^{-4}	
	Quaternion	5.801×10^{-14}	3.9131×10^{-14}	1.1035×10^{-4}	0.600
pdb2rmy 206	Classic	1.872×10^{-13}		3.2133×10^{-4}	
	Quaternion	2.498×10^{-13}	3.6453×10^{-13}	1.9158×10^{-4}	0.596
pdb2rnd 206	Classic	2.626×10^{-13}		3.1245×10^{-4}	
	Quaternion	3.581×10^{-13}	4.9979×10^{-13}	1.8852×10^{-4}	0.603
pdb2roo 260	Classic	2.933×10^{-12}		9.2680×10^{-4}	
	Quaternion	3.525×10^{-12}	3.5927×10^{-12}	5.2709×10^{-4}	0.569
pdb2rql 572	Classic	2.345×10^{-12}		1.2692×10^{-3}	
	Quaternion	2.496×10^{-12}	8.7086×10^{-13}	7.5430×10^{-4}	0.594
pdb2rut 218	Classic	4.389×10^{-14}		3.3457×10^{-4}	
	Quaternion	5.014×10^{-14}	3.5338×10^{-13}	2.0440×10^{-4}	0.611
pdb2ruv 224	Classic	5.776×10^{-14}		3.4892×10^{-4}	
	Quaternion	7.408×10^{-14}	1.2473×10^{-13}	2.1174×10^{-4}	0.607
pdb2rux 218	Classic	2.671×10^{-14}		3.5268×10^{-4}	
	Quaternion	3.016×10^{-14}	6.2140×10^{-14}	2.1558×10^{-4}	0.611
pdb2ruy 224	Classic	1.968×10^{-14}		3.5150×10^{-4}	
	Quaternion	2.387×10^{-14}	6.4254×10^{-14}	2.1187×10^{-4}	0.603

Table 2: Results - continued

Problem Size	Method	MDE	RMSD	Time	Ratio
pdb2rv3 218	Classic	3.656×10^{-14}		3.5977×10^{-4}	
	Quaternion	4.118×10^{-14}	6.3794×10^{-14}	2.1748×10^{-4}	0.605
pdb2rv5 212	Classic	1.145×10^{-14}		3.3397×10^{-4}	
	Quaternion	1.338×10^{-14}	1.6010×10^{-14}	2.0422×10^{-4}	0.611
pdb2y4q 476	Classic	1.410×10^{-12}		7.3303×10^{-4}	
	Quaternion	1.451×10^{-12}	2.0648×10^{-13}	4.5092×10^{-4}	0.615

```
                              log.txt

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
```

1.2 Using BP-All versions

Table 3: Results

Problem Size	Method	$|\mathcal{X}|$	$\min_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}}\mathrm{RMSD}(\mathbf{x},\mathbf{x}_o)$	$i:\mathbf{x_i}\sim\mathbf{x}_o$	$\mathrm{MDE}(\mathbf{x}_i)$	Time	Improv time
pdb1a57	ClassicAll	8	3.1806×10^{-11}	5	2.096×10^{-11}	3.8599×10^{-3}	
698	QuaternionAll	8	3.3550×10^{-11}	5	2.092×10^{-11}	3.0950×10^{-3}	0.802
pdb1b4c	ClassicAll	8	2.6824×10^{-12}	5	5.067×10^{-13}	1.0100×10^{-2}	
1108	QuaternionAll	8	3.4662×10^{-12}	5	5.493×10^{-13}	7.3092×10^{-3}	0.724
pdb1ba5	ClassicAll	8	3.5621×10^{-2}	6	9.363×10^{-13}	1.2512×10^{-3}	
320	QuaternionAll	8	3.5621×10^{-2}	6	1.069×10^{-12}	1.0356×10^{-3}	0.828
pdb1d1n	ClassicAll	2	2.9766×10^{-11}	1	1.005×10^{-11}	1.7800×10^{-3}	
594	QuaternionAll	2	2.9311×10^{-11}	1	9.672×10^{-12}	1.3701×10^{-3}	0.770
pdb1dp3	ClassicAll	8	4.9981×10^{-5}	2	7.704×10^{-13}	1.2596×10^{-3}	
332	QuaternionAll	8	4.9981×10^{-5}	2	8.940×10^{-13}	1.0487×10^{-3}	0.833
pdb1du1	ClassicAll	8	6.6600×10^{-13}	1	8.225×10^{-13}	4.3915×10^{-4}	
122	QuaternionAll	8	1.6577×10^{-12}	1	1.258×10^{-12}	3.6638×10^{-4}	0.834
pdb1eii	ClassicAll	8	1.9451×10^{-10}	1	1.393×10^{-11}	3.2821×10^{-3}	
806	QuaternionAll	8	1.8740×10^{-10}	1	1.365×10^{-11}	2.7601×10^{-3}	0.841
pdb1fcl	ClassicAll	8	1.5447×10^{-11}	2	4.542×10^{-12}	1.3239×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	1.5223×10^{-11}	2	4.515×10^{-12}	1.1251×10^{-3}	0.850
pdb1fd6	ClassicAll	8	2.0242×10^{-5}	2	3.182×10^{-12}	1.3557×10^{-3}	
344	QuaternionAll	8	2.0242×10^{-5}	2	3.193×10^{-12}	1.1437×10^{-3}	0.844
pdb1i2u	ClassicAll	8	1.3842×10^{-3}	2	5.562×10^{-13}	1.0550×10^{-3}	
266	QuaternionAll	8	1.3842×10^{-3}	2	5.609×10^{-13}	9.0800×10^{-4}	0.861
pdb1i2v	ClassicAll	8	8.9125×10^{-13}	5	2.422×10^{-13}	1.0442×10^{-3}	
266	QuaternionAll	8	8.8206×10^{-13}	5	2.525×10^{-13}	8.9061×10^{-4}	0.853
pdb1ijc	ClassicAll	8	9.1858×10^{-11}	2	1.408×10^{-11}	1.6215×10^{-3}	
380	QuaternionAll	8	9.4110×10^{-11}	2	1.426×10^{-11}	1.3517×10^{-3}	0.834
pdb1jlz	ClassicAll	8	1.2304×10^{-4}	1	5.594×10^{-13}	5.2092×10^{-4}	
140	QuaternionAll	8	1.2304×10^{-4}	1	5.965×10^{-13}	4.4118×10^{-4}	0.847
pdb1jw3	ClassicAll	8	1.9618×10^{-12}	2	5.936×10^{-13}	3.4027×10^{-3}	
842	QuaternionAll	8	1.8088×10^{-12}	2	5.897×10^{-13}	2.8534×10^{-3}	0.839
pdb1k0v	ClassicAll	8	8.3940×10^{-5}	2	1.893×10^{-13}	1.8110×10^{-3}	
440	QuaternionAll	8	8.3940×10^{-5}	2	1.894×10^{-13}	1.5550×10^{-3}	0.859
pdb1k2h	ClassicAll	8	1.9788×10^{-4}	2	5.490×10^{-13}	1.3499×10^{-2}	
1120	QuaternionAll	8	1.9788×10^{-4}	2	5.198×10^{-13}	8.6254×10^{-3}	0.639
pdb1k36	ClassicAll	8	1.6100×10^{-10}	1	8.820×10^{-12}	1.0638×10^{-3}	
278	QuaternionAll	8	1.8077×10^{-10}	1	1.081×10^{-11}	8.9554×10^{-4}	0.842
pdb1k37	ClassicAll	8	2.1407×10^{-12}	2	4.711×10^{-13}	1.0580×10^{-3}	
278	QuaternionAll	8	2.0318×10^{-12}	2	4.988×10^{-13}	8.9104×10^{-4}	0.842
pdb1kuw	ClassicAll	8	1.8706×10^{-4}	1	9.229×10^{-14}	2.1978×10^{-4}	
62	QuaternionAll	8	1.8706×10^{-4}	1	1.130×10^{-13}	1.8539×10^{-4}	0.844
pdb1kz0	ClassicAll	8	6.7512×10^{-13}	1	4.404×10^{-14}	3.6097×10^{-4}	
98	QuaternionAll	8	6.2568×10^{-13}	1	5.880×10^{-14}	3.0833×10^{-4}	0.854
pdb1kz2	ClassicAll	8	3.1076×10^{-6}	1	2.119×10^{-14}	3.6609×10^{-4}	
98	QuaternionAll	8	3.1076×10^{-6}	1	2.886×10^{-14}	3.1502×10^{-4}	0.861
pdb1kz5	ClassicAll	8	4.8094×10^{-13}	1	4.081×10^{-14}	2.6746×10^{-4}	
74	QuaternionAll	8	5.2716×10^{-13}	1	4.738×10^{-14}	2.2357×10^{-4}	0.836
pdb1lvz	ClassicAll	8	1.4708×10^{-3}	1	6.336×10^{-14}	2.4405×10^{-4}	
68	QuaternionAll	8	1.4708×10^{-3}	1	7.315×10^{-14}	2.0412×10^{-4}	0.836
pdb1m4e	ClassicAll	8	5.4966×10^{-12}	1	5.949×10^{-13}	4.5239×10^{-4}	
122	QuaternionAll	8	5.5048×10^{-12}	1	5.972×10^{-13}	3.8808×10^{-4}	0.858
pdb1ma2	ClassicAll	8	1.7458×10^{-10}	2	8.695×10^{-12}	3.8223×10^{-4}	
104	QuaternionAll	8	1.7467×10^{-10}	2	8.757×10^{-12}	3.2459×10^{-4}	0.849
pdb1ma4	ClassicAll	8	5.4569×10^{-4}	2	7.247×10^{-14}	8.4468×10^{-4}	
104	QuaternionAll	8	5.4569×10^{-4}	2	7.977×10^{-14}	6.1590×10^{-4}	0.729

Problem Size	Method	$|\mathcal{X}|$	$\min_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}}$ RMSD$(\mathbf{x}, \mathbf{x}_o)$	$i : \mathbf{x_i} \sim \mathbf{x}_o$	MDE$(\mathbf{x}_i)$	Time	Improv time
pdb1ma5	ClassicAll	8	9.6358×10^{-5}	1	8.169×10^{-13}	3.8213×10^{-4}	
104	QuaternionAll	8	9.6358×10^{-5}	1	9.044×10^{-13}	3.2888×10^{-4}	0.861
pdb1ma6	ClassicAll	8	1.2440×10^{-11}	2	6.283×10^{-13}	3.8743×10^{-4}	
104	QuaternionAll	8	1.4288×10^{-11}	2	8.487×10^{-13}	3.2877×10^{-4}	0.849
pdb1mpe	ClassicAll	8	5.1722×10^{-10}	2	2.617×10^{-11}	6.2315×10^{-3}	
1352	QuaternionAll	8	5.1751×10^{-10}	2	2.624×10^{-11}	4.9641×10^{-3}	0.797
pdb1nd9	ClassicAll	8	1.0508×10^{-12}	2	3.026×10^{-13}	1.1832×10^{-3}	
296	QuaternionAll	8	8.9082×10^{-13}	2	3.845×10^{-13}	1.0109×10^{-3}	0.854
pdb1ne5	ClassicAll	128	1.4845×10^{-11}	33	1.214×10^{-12}	1.7300×10^{-2}	
254	QuaternionAll	128	1.5105×10^{-11}	33	1.384×10^{-12}	1.2553×10^{-2}	0.726
pdb1nmj	ClassicAll	8	2.3883×10^{-13}	7	1.236×10^{-14}	6.3754×10^{-4}	
170	QuaternionAll	8	2.3832×10^{-13}	7	1.422×10^{-14}	5.4076×10^{-4}	0.848
pdb1o53	ClassicAll	8	1.0887×10^{-11}	2	3.999×10^{-13}	3.3240×10^{-4}	
92	QuaternionAll	8	1.1252×10^{-11}	2	4.527×10^{-13}	2.8384×10^{-4}	0.854
pdb1oqp	ClassicAll	8	2.9348×10^{-3}	2	7.045×10^{-14}	1.3065×10^{-2}	
580	QuaternionAll	8	2.9348×10^{-3}	2	8.314×10^{-14}	8.3320×10^{-3}	0.638
pdb1plw	ClassicAll	8	3.0310×10^{-13}	2	2.830×10^{-14}	1.0674×10^{-4}	
32	QuaternionAll	8	3.2973×10^{-13}	2	3.112×10^{-14}	8.9316×10^{-5}	0.837
pdb1plx	ClassicAll	8	2.8525×10^{-4}	1	1.574×10^{-13}	1.0578×10^{-4}	
32	QuaternionAll	8	2.8525×10^{-4}	1	2.060×10^{-13}	8.7475×10^{-5}	0.827
pdb1pv0	ClassicAll	16	1.3024×10^{-11}	1	2.409×10^{-13}	2.0570×10^{-3}	
278	QuaternionAll	16	1.3017×10^{-11}	1	2.723×10^{-13}	1.7342×10^{-3}	0.843
pdb1qlk	ClassicAll	8	3.1378×10^{-5}	5	2.634×10^{-13}	1.7024×10^{-2}	
1108	QuaternionAll	8	3.1378×10^{-5}	5	2.870×10^{-13}	1.1102×10^{-2}	0.652
pdb1r57	ClassicAll	8	4.3330×10^{-3}	2	1.847×10^{-13}	2.4096×10^{-3}	
614	QuaternionAll	8	4.3330×10^{-3}	2	2.054×10^{-13}	2.0315×10^{-3}	0.843
pdb1ry3	ClassicAll	8	9.1924×10^{-12}	2	4.938×10^{-13}	1.4750×10^{-3}	
386	QuaternionAll	8	9.4285×10^{-12}	2	5.913×10^{-13}	1.2437×10^{-3}	0.843
pdb1s4h	ClassicAll	8	1.4643×10^{-4}	2	4.696×10^{-13}	2.8387×10^{-4}	
80	QuaternionAll	8	1.4643×10^{-4}	2	6.351×10^{-13}	2.3661×10^{-4}	0.834
pdb1s4j	ClassicAll	8	5.8507×10^{-12}	2	1.520×10^{-13}	2.9100×10^{-4}	
80	QuaternionAll	8	5.8479×10^{-12}	2	2.083×10^{-13}	2.4847×10^{-4}	0.854
pdb1s6j	ClassicAll	8	6.0202×10^{-5}	1	6.073×10^{-13}	2.0402×10^{-3}	
524	QuaternionAll	8	6.0202×10^{-5}	1	7.660×10^{-13}	1.7324×10^{-3}	0.849
pdb1sa8	ClassicAll	8	1.7170×10^{-3}	1	9.340×10^{-13}	2.5428×10^{-3}	
638	QuaternionAll	8	1.7170×10^{-3}	1	1.034×10^{-12}	2.1763×10^{-3}	0.856
pdb1t2y	ClassicAll	8	2.5460×10^{-4}	1	1.887×10^{-13}	5.8265×10^{-4}	
152	QuaternionAll	8	2.5460×10^{-4}	1	2.396×10^{-13}	5.0004×10^{-4}	0.858
pdb1t5q	ClassicAll	2	1.0265×10^{-12}	1	3.877×10^{-14}	4.8571×10^{-4}	
180	QuaternionAll	2	1.0480×10^{-12}	1	5.093×10^{-14}	3.5356×10^{-4}	0.728
pdb1tot	ClassicAll	8	3.4218×10^{-3}	5	6.151×10^{-14}	1.2434×10^{-3}	
314	QuaternionAll	8	3.4218×10^{-3}	5	6.855×10^{-14}	1.0616×10^{-3}	0.854
pdb1v6r	ClassicAll	8	1.3650×10^{-4}	2	6.835×10^{-13}	4.6433×10^{-4}	
128	QuaternionAll	8	1.3650×10^{-4}	2	6.971×10^{-13}	3.9778×10^{-4}	0.857
pdb1v92	ClassicAll	8	3.1327×10^{-5}	1	1.463×10^{-13}	1.0851×10^{-3}	
278	QuaternionAll	8	3.1327×10^{-5}	1	1.630×10^{-13}	9.2523×10^{-4}	0.853
pdb1vd7	ClassicAll	8	7.8801×10^{-12}	1	6.342×10^{-13}	5.1025×10^{-4}	
140	QuaternionAll	8	7.9022×10^{-12}	1	7.439×10^{-13}	4.2899×10^{-4}	0.841
pdb1vd9	ClassicAll	8	1.5514×10^{-11}	1	1.290×10^{-12}	5.1829×10^{-4}	
140	QuaternionAll	8	1.5541×10^{-11}	1	1.554×10^{-12}	4.4015×10^{-4}	0.849
pdb1vdb	ClassicAll	8	8.5740×10^{-12}	2	9.108×10^{-13}	5.1249×10^{-4}	
140	QuaternionAll	8	8.5291×10^{-12}	2	1.082×10^{-12}	4.2939×10^{-4}	0.838
pdb1vpc	ClassicAll	8	4.3482×10^{-4}	6	8.510×10^{-15}	1.0684×10^{-3}	
272	QuaternionAll	8	4.3482×10^{-4}	6	1.002×10^{-14}	8.8942×10^{-4}	0.832

Problem Size	Method	$\lvert \mathcal{X} \rvert$	$\min\limits_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \mathrm{RMSD}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_o)$	$i : \mathbf{x_i} \sim \mathbf{x}_o$	$\mathrm{MDE}(\mathbf{x}_i)$	Time	Improv time
pdb1wnk	ClassicAll	8	2.2292×10^{-10}	1	4.112×10^{-12}	5.1993×10^{-4}	
140	QuaternionAll	8	2.2177×10^{-10}	1	4.632×10^{-12}	4.3235×10^{-4}	0.832
pdb1wo4	ClassicAll	8	4.6193×10^{-5}	2	9.957×10^{-13}	5.5877×10^{-4}	
152	QuaternionAll	8	4.6193×10^{-5}	2	9.634×10^{-13}	4.7161×10^{-4}	0.844
pdb1wo5	ClassicAll	8	2.7147×10^{-10}	1	2.372×10^{-12}	5.6296×10^{-4}	
152	QuaternionAll	8	2.7625×10^{-10}	1	2.514×10^{-12}	4.7630×10^{-4}	0.846
pdb1x60	ClassicAll	8	6.7449×10^{-12}	1	1.076×10^{-12}	1.8824×10^{-3}	
476	QuaternionAll	8	6.9447×10^{-12}	1	1.179×10^{-12}	1.6151×10^{-3}	0.858
pdb1y5c	ClassicAll	8	8.7435×10^{-13}	1	7.693×10^{-14}	2.3392×10^{-4}	
68	QuaternionAll	8	8.2242×10^{-13}	1	9.383×10^{-14}	1.9470×10^{-4}	0.832
pdb1yx7	ClassicAll	8	1.3647×10^{-10}	5	3.509×10^{-12}	1.9625×10^{-3}	
500	QuaternionAll	8	1.4245×10^{-10}	5	4.348×10^{-12}	1.6712×10^{-3}	0.852
pdb1yx8	ClassicAll	8	2.5841×10^{-10}	6	7.284×10^{-12}	2.1905×10^{-3}	
500	QuaternionAll	8	2.6921×10^{-10}	6	8.217×10^{-12}	1.8202×10^{-3}	0.831
pdb1yxr	ClassicAll	8	9.3459×10^{-4}	1	6.979×10^{-13}	1.7944×10^{-3}	
464	QuaternionAll	8	9.3459×10^{-4}	1	7.989×10^{-13}	1.5091×10^{-3}	0.841
pdb2a4j	ClassicAll	8	1.0516×10^{-4}	2	2.085×10^{-14}	2.5605×10^{-3}	
580	QuaternionAll	8	1.0516×10^{-4}	2	2.727×10^{-14}	2.0942×10^{-3}	0.818
pdb2adn	ClassicAll	8	2.3364×10^{-10}	1	6.693×10^{-12}	5.5305×10^{-3}	
868	QuaternionAll	8	2.3188×10^{-10}	1	6.465×10^{-12}	4.1888×10^{-3}	0.757
pdb2ajj	ClassicAll	8	2.9810×10^{-4}	1	5.641×10^{-14}	6.2947×10^{-4}	
170	QuaternionAll	8	2.9810×10^{-4}	1	6.584×10^{-14}	5.2547×10^{-4}	0.835
pdb2ajm	ClassicAll	8	2.4063×10^{-12}	2	1.183×10^{-13}	6.3281×10^{-4}	
170	QuaternionAll	8	2.7001×10^{-12}	2	1.555×10^{-13}	5.3606×10^{-4}	0.847
pdb2ajn	ClassicAll	8	4.3268×10^{-4}	1	1.076×10^{-13}	6.2547×10^{-4}	
170	QuaternionAll	8	4.3268×10^{-4}	1	1.217×10^{-13}	5.2149×10^{-4}	0.834
pdb2ajo	ClassicAll	8	2.4063×10^{-12}	2	1.183×10^{-13}	6.3214×10^{-4}	
170	QuaternionAll	8	2.7001×10^{-12}	2	1.555×10^{-13}	5.3750×10^{-4}	0.850
pdb2akk	ClassicAll	8	3.0416×10^{-3}	2	1.289×10^{-13}	1.7725×10^{-3}	
446	QuaternionAll	8	3.0416×10^{-3}	2	1.279×10^{-13}	1.5298×10^{-3}	0.863
pdb2bzb	ClassicAll	8	4.6498×10^{-13}	5	9.361×10^{-14}	2.0879×10^{-2}	
748	QuaternionAll	8	6.0113×10^{-13}	5	1.224×10^{-13}	1.3608×10^{-2}	0.652
pdb2c0s	ClassicAll	8	1.0793×10^{-2}	6	3.028×10^{-13}	1.5209×10^{-3}	
386	QuaternionAll	8	1.0793×10^{-2}	6	3.380×10^{-13}	1.2500×10^{-3}	0.822
pdb2dci	ClassicAll	2	2.0907×10^{-13}	1	2.366×10^{-14}	3.3281×10^{-4}	
120	QuaternionAll	2	3.3732×10^{-13}	1	2.950×10^{-14}	2.4895×10^{-4}	0.748
pdb2eem	ClassicAll	8	9.5324×10^{-12}	1	5.190×10^{-13}	7.7216×10^{-4}	
206	QuaternionAll	8	9.5866×10^{-12}	1	5.461×10^{-13}	6.5367×10^{-4}	0.847
pdb2fva	ClassicAll	8	1.2680×10^{-11}	2	1.047×10^{-12}	1.9189×10^{-3}	
494	QuaternionAll	8	1.2689×10^{-11}	2	1.195×10^{-12}	1.6080×10^{-3}	0.838
pdb2fvf	ClassicAll	8	3.5796×10^{-12}	1	3.106×10^{-13}	1.9126×10^{-3}	
494	QuaternionAll	8	3.3286×10^{-12}	1	3.445×10^{-13}	1.6204×10^{-3}	0.847
pdb2fxz	ClassicAll	8	4.2293×10^{-12}	1	1.489×10^{-12}	2.9810×10^{-4}	
80	QuaternionAll	8	5.3169×10^{-12}	1	1.749×10^{-12}	2.5266×10^{-4}	0.848
pdb2g9l	ClassicAll	8	1.0333×10^{-4}	2	6.365×10^{-14}	8.4774×10^{-4}	
224	QuaternionAll	8	1.0333×10^{-4}	2	8.666×10^{-14}	7.2563×10^{-4}	0.856
pdb2h5m	ClassicAll	8	1.2267×10^{-3}	1	9.692×10^{-13}	2.4098×10^{-3}	
614	QuaternionAll	8	1.2267×10^{-3}	1	1.032×10^{-12}	2.0340×10^{-3}	0.844
pdb2hep	ClassicAll	2	2.1758×10^{-11}	1	1.191×10^{-12}	6.9652×10^{-4}	
252	QuaternionAll	2	2.2038×10^{-11}	1	1.268×10^{-12}	5.1109×10^{-4}	0.734
pdb2jmy	ClassicAll	8	7.0432×10^{-5}	1	9.834×10^{-13}	3.4485×10^{-4}	
92	QuaternionAll	8	7.0432×10^{-5}	1	9.967×10^{-13}	2.9309×10^{-4}	0.850
pdb2jn5	ClassicAll	8	6.6339×10^{-12}	1	1.104×10^{-11}	2.5907×10^{-4}	
74	QuaternionAll	8	2.0459×10^{-11}	1	2.456×10^{-11}	2.1594×10^{-4}	0.834

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
pdb2jnk	ClassicAll	8	3.4995×10^{-11}	1	2.246×10^{-12}	3.4046×10^{-3}	
842	QuaternionAll	8	3.4653×10^{-11}	1	2.319×10^{-12}	2.8579×10^{-3}	0.839
pdb2jpn	ClassicAll	8	6.4192×10^{-12}	2	6.730×10^{-14}	2.3805×10^{-3}	
476	QuaternionAll	8	6.5904×10^{-12}	2	6.984×10^{-14}	1.9077×10^{-3}	0.801
pdb2jua	ClassicAll	8	1.8734×10^{-4}	2	1.740×10^{-11}	2.4657×10^{-3}	
614	QuaternionAll	8	1.8734×10^{-4}	2	1.882×10^{-11}	2.0362×10^{-3}	0.826
pdb2jvd	ClassicAll	2	9.4244×10^{-13}	1	3.339×10^{-14}	8.0214×10^{-4}	
288	QuaternionAll	2	9.4967×10^{-13}	1	3.898×10^{-14}	5.8665×10^{-4}	0.731
pdb2jwe	ClassicAll	2	9.2597×10^{-11}	1	2.695×10^{-11}	2.9579×10^{-3}	
984	QuaternionAll	2	9.2052×10^{-11}	1	2.734×10^{-11}	2.2597×10^{-3}	0.764
pdb2jws	ClassicAll	8	4.5612×10^{-4}	2	1.251×10^{-13}	1.3479×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	4.5612×10^{-4}	2	1.543×10^{-13}	1.1246×10^{-3}	0.834
pdb2jwu	ClassicAll	8	3.0876×10^{-4}	1	4.421×10^{-12}	1.3171×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	3.0876×10^{-4}	1	4.373×10^{-12}	1.1127×10^{-3}	0.845
pdb2jxf	ClassicAll	8	2.4000×10^{-4}	1	1.399×10^{-13}	6.6977×10^{-4}	
182	QuaternionAll	8	2.4000×10^{-4}	1	1.734×10^{-13}	5.5569×10^{-4}	0.830
pdb2jz5	ClassicAll	8	1.7460×10^{-3}	1	2.860×10^{-13}	2.1161×10^{-3}	
548	QuaternionAll	8	1.7460×10^{-3}	1	2.854×10^{-13}	1.7755×10^{-3}	0.839
pdb2k2a	ClassicAll	8	4.7195×10^{-3}	5	3.810×10^{-14}	1.6369×10^{-3}	
422	QuaternionAll	8	4.7195×10^{-3}	5	5.148×10^{-14}	1.3742×10^{-3}	0.839
pdb2k36	ClassicAll	8	1.6972×10^{-12}	1	1.922×10^{-13}	3.5800×10^{-3}	
896	QuaternionAll	8	1.6007×10^{-12}	1	2.045×10^{-13}	2.9607×10^{-3}	0.827
pdb2k37	ClassicAll	8	3.7147×10^{-12}	1	1.921×10^{-13}	1.3935×10^{-3}	
356	QuaternionAll	8	3.6185×10^{-12}	1	2.525×10^{-13}	1.1781×10^{-3}	0.845
pdb2k3i	ClassicAll	8	4.6225×10^{-3}	2	3.810×10^{-13}	3.1944×10^{-3}	
656	QuaternionAll	8	4.6225×10^{-3}	2	4.009×10^{-13}	2.5603×10^{-3}	0.801
pdb2k6s	ClassicAll	8	8.2998×10^{-12}	2	2.100×10^{-13}	3.7623×10^{-3}	
494	QuaternionAll	8	8.4519×10^{-12}	2	2.651×10^{-13}	2.8028×10^{-3}	0.745
pdb2k7o	ClassicAll	8	1.8663×10^{-4}	1	1.279×10^{-13}	2.4604×10^{-2}	
1096	QuaternionAll	8	1.8663×10^{-4}	1	1.416×10^{-13}	1.6224×10^{-2}	0.659
pdb2kdh	ClassicAll	8	7.2209×10^{-5}	2	1.947×10^{-11}	1.7165×10^{-3}	
434	QuaternionAll	8	7.2209×10^{-5}	2	2.228×10^{-11}	1.4424×10^{-3}	0.840
pdb2kdl	ClassicAll	8	4.4591×10^{-12}	2	2.301×10^{-13}	1.2929×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	4.4513×10^{-12}	2	2.919×10^{-13}	1.0822×10^{-3}	0.837
pdb2kdm	ClassicAll	8	2.1896×10^{-11}	1	3.191×10^{-12}	1.3285×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	2.1643×10^{-11}	1	3.284×10^{-12}	1.1203×10^{-3}	0.843
pdb2kdp	ClassicAll	8	3.0283×10^{-12}	1	2.621×10^{-13}	1.6703×10^{-3}	
428	QuaternionAll	8	3.0741×10^{-12}	1	2.865×10^{-13}	1.4010×10^{-3}	0.839
pdb2kdr	ClassicAll	8	6.3024×10^{-5}	2	6.618×10^{-14}	6.2375×10^{-4}	
170	QuaternionAll	8	6.3024×10^{-5}	2	8.490×10^{-14}	5.1064×10^{-4}	0.819
pdb2kes	ClassicAll	8	1.8528×10^{-4}	7	4.467×10^{-14}	1.0859×10^{-3}	
290	QuaternionAll	8	1.8528×10^{-4}	7	5.425×10^{-14}	8.9171×10^{-4}	0.821
pdb2kib	ClassicAll	8	2.9706×10^{-5}	1	2.533×10^{-12}	1.6764×10^{-2}	
352	QuaternionAll	8	2.9706×10^{-5}	1	2.539×10^{-12}	1.0720×10^{-2}	0.639
pdb2kjn	ClassicAll	8	1.9764×10^{-12}	2	9.827×10^{-14}	5.8117×10^{-4}	
158	QuaternionAll	8	1.9265×10^{-12}	2	1.174×10^{-13}	4.8764×10^{-4}	0.839
pdb2kjo	ClassicAll	8	1.2876×10^{-11}	1	2.284×10^{-13}	5.8129×10^{-4}	
158	QuaternionAll	8	1.2921×10^{-11}	1	2.421×10^{-13}	4.8652×10^{-4}	0.837
pdb2kjr	ClassicAll	8	5.1341×10^{-11}	2	3.247×10^{-12}	2.2125×10^{-3}	
572	QuaternionAll	8	5.1082×10^{-11}	2	3.252×10^{-12}	1.8689×10^{-3}	0.845
pdb2kko	ClassicAll	8	6.9643×10^{-4}	2	1.191×10^{-13}	2.7542×10^{-2}	
1300	QuaternionAll	8	6.9643×10^{-4}	2	1.284×10^{-13}	1.8252×10^{-2}	0.663
pdb2kl5	ClassicAll	8	2.4505×10^{-12}	1	1.820×10^{-13}	2.5879×10^{-3}	
662	QuaternionAll	8	2.5206×10^{-12}	1	2.020×10^{-13}	2.1747×10^{-3}	0.840

Problem Size	Method	$\lvert\mathcal{X}\rvert$	$\min_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}} \mathrm{RMSD}(\mathbf{x},\mathbf{x}_o)$	$i : \mathbf{x_i} \sim \mathbf{x}_o$	$\mathrm{MDE}(\mathbf{x}_i)$	Time	Improv time
pdb2klz	ClassicAll	2	3.9786×10^{-13}	1	3.439×10^{-14}	7.7529×10^{-4}	
276	QuaternionAll	2	3.7834×10^{-13}	1	4.443×10^{-14}	5.6489×10^{-4}	0.729
pdb2koz	ClassicAll	8	4.7204×10^{-5}	2	1.067×10^{-12}	7.6838×10^{-4}	
200	QuaternionAll	8	4.7204×10^{-5}	2	1.151×10^{-12}	6.5712×10^{-4}	0.855
pdb2kp0	ClassicAll	8	7.8392×10^{-11}	2	4.894×10^{-12}	7.5225×10^{-4}	
200	QuaternionAll	8	8.2404×10^{-11}	2	5.595×10^{-12}	6.3851×10^{-4}	0.849
pdb2ksg	ClassicAll	8	9.2027×10^{-13}	1	3.215×10^{-14}	1.1068×10^{-3}	
290	QuaternionAll	8	9.2208×10^{-13}	1	3.967×10^{-14}	9.3448×10^{-4}	0.844
pdb2kt8	ClassicAll	8	4.1573×10^{-4}	1	3.314×10^{-12}	1.7671×10^{-3}	
458	QuaternionAll	8	4.1573×10^{-4}	1	3.535×10^{-12}	1.5006×10^{-3}	0.849
pdb2kuh	ClassicAll	8	1.1667×10^{-3}	6	2.015×10^{-14}	1.5882×10^{-3}	
404	QuaternionAll	8	1.1667×10^{-3}	6	2.491×10^{-14}	1.3470×10^{-3}	0.848
pdb2kwh	ClassicAll	8	2.0587×10^{-3}	2	1.408×10^{-13}	1.2962×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	2.0587×10^{-3}	2	1.825×10^{-13}	1.0811×10^{-3}	0.834
pdb2kxa	ClassicAll	2	3.9712×10^{-12}	1	1.325×10^{-12}	4.0854×10^{-4}	
144	QuaternionAll	2	3.7392×10^{-12}	1	1.351×10^{-12}	3.1275×10^{-4}	0.766
pdb2kyb	ClassicAll	8	3.1200×10^{-6}	2	1.321×10^{-11}	1.8390×10^{-3}	
362	QuaternionAll	8	3.1200×10^{-6}	2	1.373×10^{-11}	1.4801×10^{-3}	0.805
pdb2l3m	ClassicAll	8	1.5178×10^{-3}	1	1.028×10^{-12}	1.6830×10^{-3}	
428	QuaternionAll	8	1.5178×10^{-3}	1	9.340×10^{-13}	1.4266×10^{-3}	0.848
pdb2l3n	ClassicAll	8	3.9987×10^{-4}	5	3.024×10^{-14}	8.4304×10^{-3}	
626	QuaternionAll	8	3.9987×10^{-4}	5	3.632×10^{-14}	6.0881×10^{-3}	0.722
pdb2l45	ClassicAll	8	5.9466×10^{-13}	1	2.236×10^{-14}	4.3100×10^{-4}	
116	QuaternionAll	8	6.7808×10^{-13}	1	3.033×10^{-14}	3.6853×10^{-4}	0.855
pdb2l5r	ClassicAll	2	3.0491×10^{-13}	2	3.535×10^{-14}	3.7258×10^{-4}	
138	QuaternionAll	2	3.0031×10^{-13}	2	4.436×10^{-14}	2.7236×10^{-4}	0.731
pdb2l6q	ClassicAll	4	1.6115×10^{-9}	1	4.435×10^{-11}	1.0503×10^{-3}	
374	QuaternionAll	4	1.6752×10^{-9}	1	5.413×10^{-11}	8.3213×10^{-4}	0.792
pdb2l6r	ClassicAll	8	1.0970×10^{-10}	2	2.060×10^{-12}	1.4580×10^{-3}	
374	QuaternionAll	8	9.8250×10^{-11}	2	2.174×10^{-12}	1.2105×10^{-3}	0.830
pdb2l98	ClassicAll	8	5.6413×10^{-12}	2	3.273×10^{-13}	1.6730×10^{-3}	
434	QuaternionAll	8	6.2089×10^{-12}	2	3.637×10^{-13}	1.4197×10^{-3}	0.849
pdb2lci	ClassicAll	8	1.2015×10^{-12}	1	2.579×10^{-13}	3.1674×10^{-3}	
806	QuaternionAll	8	1.1830×10^{-12}	1	2.404×10^{-13}	2.6221×10^{-3}	0.828
pdb2lde	ClassicAll	8	6.0406×10^{-3}	2	3.154×10^{-14}	5.5670×10^{-4}	
152	QuaternionAll	8	6.0406×10^{-3}	2	3.766×10^{-14}	4.6551×10^{-4}	0.836
pdb2le7	ClassicAll	8	8.8940×10^{-14}	2	2.111×10^{-14}	4.4383×10^{-4}	
122	QuaternionAll	8	1.1008×10^{-13}	2	2.749×10^{-14}	3.7371×10^{-4}	0.842
pdb2ler	ClassicAll	8	5.1096×10^{-14}	2	1.314×10^{-14}	2.3841×10^{-4}	
68	QuaternionAll	8	6.2001×10^{-14}	2	1.532×10^{-14}	1.9906×10^{-4}	0.835
pdb2lgi	ClassicAll	8	9.7255×10^{-12}	2	1.068×10^{-12}	1.3304×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	9.6518×10^{-12}	2	1.052×10^{-12}	1.1234×10^{-3}	0.844
pdb2lhc	ClassicAll	8	3.8367×10^{-10}	1	2.902×10^{-12}	1.3470×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	3.8166×10^{-10}	1	2.997×10^{-12}	1.1146×10^{-3}	0.828
pdb2lhd	ClassicAll	8	1.3048×10^{-11}	2	1.930×10^{-12}	1.3235×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	1.4592×10^{-11}	2	2.033×10^{-12}	1.1166×10^{-3}	0.844
pdb2lhe	ClassicAll	8	9.7862×10^{-10}	2	4.963×10^{-11}	1.4461×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	9.7867×10^{-10}	2	4.967×10^{-11}	1.1977×10^{-3}	0.828
pdb2lhg	ClassicAll	8	5.0995×10^{-13}	6	6.485×10^{-14}	1.3270×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	5.4683×10^{-13}	6	7.343×10^{-14}	1.1193×10^{-3}	0.843
pdb2lix	ClassicAll	2	4.9988×10^{-13}	1	4.842×10^{-14}	4.4755×10^{-4}	
162	QuaternionAll	2	5.1517×10^{-13}	1	5.614×10^{-14}	3.4473×10^{-4}	0.770
pdb2lld	ClassicAll	8	3.3972×10^{-3}	5	1.938×10^{-13}	9.3708×10^{-4}	
242	QuaternionAll	8	3.3972×10^{-3}	5	2.216×10^{-13}	7.9797×10^{-4}	0.852

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
pdb2lm9	ClassicAll	8	2.2967×10^{-3}	2	6.254×10^{-14}	2.2302×10^{-3}	
578	QuaternionAll	8	2.2967×10^{-3}	2	7.713×10^{-14}	1.8521×10^{-3}	0.830
pdb2lmf	ClassicAll	8	1.0942×10^{-4}	1	1.282×10^{-13}	5.1406×10^{-4}	
140	QuaternionAll	8	1.0942×10^{-4}	1	1.462×10^{-13}	4.2642×10^{-4}	0.829
pdb2ln3	ClassicAll	8	2.5821×10^{-13}	1	1.292×10^{-13}	1.9425×10^{-3}	
500	QuaternionAll	8	2.9987×10^{-13}	1	1.359×10^{-13}	1.6517×10^{-3}	0.850
pdb2lo2	ClassicAll	8	1.4423×10^{-2}	2	2.068×10^{-14}	8.7008×10^{-4}	
230	QuaternionAll	8	1.4423×10^{-2}	2	2.571×10^{-14}	7.3340×10^{-4}	0.843
pdb2lqp	ClassicAll	8	5.7815×10^{-4}	2	2.950×10^{-13}	1.6621×10^{-3}	
428	QuaternionAll	8	5.7815×10^{-4}	2	3.085×10^{-13}	1.3941×10^{-3}	0.839
pdb2lr0	ClassicAll	8	1.2202×10^{-11}	1	3.549×10^{-12}	3.1919×10^{-3}	
806	QuaternionAll	8	1.1747×10^{-11}	1	3.440×10^{-12}	2.6561×10^{-3}	0.832
pdb2lrh	ClassicAll	8	2.9721×10^{-12}	1	5.631×10^{-13}	3.1614×10^{-3}	
806	QuaternionAll	8	2.9099×10^{-12}	1	6.564×10^{-13}	2.5993×10^{-3}	0.822
pdb2ls9	ClassicAll	8	2.7045×10^{-12}	1	1.122×10^{-13}	5.6596×10^{-4}	
152	QuaternionAll	8	3.0425×10^{-12}	1	1.471×10^{-13}	4.7795×10^{-4}	0.844
pdb2lsa	ClassicAll	8	2.5535×10^{-3}	2	5.235×10^{-14}	5.3541×10^{-4}	
140	QuaternionAll	8	2.5535×10^{-3}	2	6.998×10^{-14}	4.5340×10^{-4}	0.847
pdb2lss	ClassicAll	8	1.2372×10^{-3}	1	1.230×10^{-13}	1.6857×10^{-3}	
422	QuaternionAll	8	1.2372×10^{-3}	1	1.455×10^{-13}	1.4477×10^{-3}	0.859
pdb2lt3	ClassicAll	8	9.6961×10^{-13}	6	7.245×10^{-14}	2.6784×10^{-3}	
680	QuaternionAll	8	1.0253×10^{-12}	6	7.760×10^{-14}	2.2363×10^{-3}	0.835
pdb2lu6	ClassicAll	8	7.7550×10^{-3}	1	5.356×10^{-15}	2.9827×10^{-4}	
86	QuaternionAll	8	7.7550×10^{-3}	1	6.922×10^{-15}	2.4725×10^{-4}	0.829
pdb2lx0	ClassicAll	8	7.4851×10^{-12}	1	3.569×10^{-13}	7.4119×10^{-4}	
194	QuaternionAll	8	7.5304×10^{-12}	1	4.035×10^{-13}	6.2838×10^{-4}	0.848
pdb2lxb	ClassicAll	8	9.0172×10^{-13}	1	1.542×10^{-13}	7.5665×10^{-3}	
892	QuaternionAll	8	8.6577×10^{-13}	1	1.585×10^{-13}	5.5068×10^{-3}	0.728
pdb2lxy	ClassicAll	8	1.1155×10^{-10}	2	9.313×10^{-13}	1.5476×10^{-3}	
404	QuaternionAll	8	1.1215×10^{-10}	2	1.025×10^{-12}	1.2882×10^{-3}	0.832
pdb2lxz	ClassicAll	8	1.1003×10^{-4}	2	2.371×10^{-12}	7.3806×10^{-4}	
194	QuaternionAll	8	1.1003×10^{-4}	2	2.792×10^{-12}	6.2722×10^{-4}	0.850
pdb2m1a	ClassicAll	8	9.1771×10^{-14}	1	6.346×10^{-15}	5.8736×10^{-4}	
158	QuaternionAll	8	9.0451×10^{-14}	1	7.612×10^{-15}	4.9317×10^{-4}	0.840
pdb2m1j	ClassicAll	8	1.5890×10^{-13}	2	1.865×10^{-14}	6.9896×10^{-4}	
182	QuaternionAll	8	1.6894×10^{-13}	2	2.212×10^{-14}	5.8122×10^{-4}	0.832
pdb2m2y	ClassicAll	8	1.8177×10^{-3}	1	2.699×10^{-13}	4.0431×10^{-4}	
110	QuaternionAll	8	1.8177×10^{-3}	1	2.808×10^{-13}	3.4517×10^{-4}	0.854
pdb2m3f	ClassicAll	8	9.5240×10^{-14}	1	3.629×10^{-14}	4.9469×10^{-4}	
134	QuaternionAll	8	5.7597×10^{-14}	1	4.641×10^{-14}	4.1447×10^{-4}	0.838
pdb2m8m	ClassicAll	8	6.9769×10^{-3}	5	2.424×10^{-14}	6.2808×10^{-4}	
170	QuaternionAll	8	6.9769×10^{-3}	5	3.058×10^{-14}	5.2328×10^{-4}	0.833
pdb2m8o	ClassicAll	8	4.7097×10^{-3}	5	1.798×10^{-14}	6.2951×10^{-4}	
170	QuaternionAll	8	4.7097×10^{-3}	5	2.301×10^{-14}	5.2768×10^{-4}	0.838
pdb2m97	ClassicAll	8	2.4560×10^{-12}	6	4.654×10^{-14}	1.6020×10^{-3}	
416	QuaternionAll	8	2.4592×10^{-12}	6	5.847×10^{-14}	1.3398×10^{-3}	0.836
pdb2m9g	ClassicAll	8	4.9692×10^{-12}	1	2.939×10^{-13}	4.5639×10^{-3}	
1108	QuaternionAll	8	4.9567×10^{-12}	1	3.170×10^{-13}	3.7324×10^{-3}	0.818
pdb2m9r	ClassicAll	8	3.7505×10^{-12}	1	3.537×10^{-14}	8.6573×10^{-4}	
242	QuaternionAll	8	3.6480×10^{-12}	1	4.406×10^{-14}	6.9560×10^{-4}	0.803
pdb2mdv	ClassicAll	8	4.7210×10^{-4}	2	3.178×10^{-12}	1.8237×10^{-3}	
460	QuaternionAll	8	4.7210×10^{-4}	2	3.178×10^{-12}	1.5843×10^{-3}	0.869
pdb2me1	ClassicAll	8	1.4934×10^{-4}	2	1.886×10^{-13}	6.0675×10^{-4}	
164	QuaternionAll	8	1.4934×10^{-4}	2	2.202×10^{-13}	5.0964×10^{-4}	0.840

Problem Size	Method	$|\mathcal{X}|$	$\min_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}}\mathrm{RMSD}(\mathbf{x},\mathbf{x}_o)$	$i:\mathbf{x_i}\sim\mathbf{x}_o$	$\mathrm{MDE}(\mathbf{x}_i)$	Time	Improv time
pdb2me2	ClassicAll	8	1.3863×10^{-4}	1	3.667×10^{-13}	6.3154×10^{-4}	
164	QuaternionAll	8	1.3863×10^{-4}	1	5.098×10^{-13}	5.2472×10^{-4}	0.831
pdb2me3	ClassicAll	8	3.4823×10^{-5}	2	1.425×10^{-13}	6.0510×10^{-4}	
164	QuaternionAll	8	3.4823×10^{-5}	2	1.590×10^{-13}	5.0923×10^{-4}	0.842
pdb2me4	ClassicAll	8	2.9945×10^{-5}	2	5.547×10^{-13}	6.3064×10^{-4}	
164	QuaternionAll	8	2.9945×10^{-5}	2	6.221×10^{-13}	5.2613×10^{-4}	0.834
pdb2mg1	ClassicAll	8	4.4954×10^{-13}	6	4.400×10^{-14}	6.0826×10^{-4}	
164	QuaternionAll	8	5.4976×10^{-13}	6	5.374×10^{-14}	5.0481×10^{-4}	0.830
pdb2mg2	ClassicAll	8	1.0745×10^{-3}	6	1.831×10^{-14}	6.2908×10^{-4}	
170	QuaternionAll	8	1.0745×10^{-3}	6	2.481×10^{-14}	5.2727×10^{-4}	0.838
pdb2mg3	ClassicAll	8	6.2977×10^{-13}	6	3.542×10^{-14}	6.3373×10^{-4}	
170	QuaternionAll	8	6.7812×10^{-13}	6	4.459×10^{-14}	5.3292×10^{-4}	0.841
pdb2mh8	ClassicAll	8	4.2246×10^{-12}	6	1.547×10^{-13}	1.3028×10^{-3}	
338	QuaternionAll	8	4.0208×10^{-12}	6	1.883×10^{-13}	1.0945×10^{-3}	0.840
pdb2mhw	ClassicAll	8	3.6932×10^{-3}	2	6.229×10^{-14}	6.2718×10^{-4}	
164	QuaternionAll	8	3.6932×10^{-3}	2	7.130×10^{-14}	5.4278×10^{-4}	0.865
pdb2mi1	ClassicAll	4	2.1485×10^{-11}	4	1.828×10^{-12}	4.1151×10^{-4}	
84	QuaternionAll	4	2.2963×10^{-11}	4	2.053×10^{-12}	3.1129×10^{-4}	0.756
pdb2mi7	ClassicAll	8	8.0637×10^{-12}	2	6.022×10^{-13}	1.5388×10^{-3}	
404	QuaternionAll	8	8.8714×10^{-12}	2	6.815×10^{-13}	1.2825×10^{-3}	0.833
pdb2mij	ClassicAll	8	1.2077×10^{-12}	1	1.244×10^{-13}	8.4790×10^{-4}	
224	QuaternionAll	8	1.2294×10^{-12}	1	1.522×10^{-13}	7.1736×10^{-4}	0.846
pdb2mix	ClassicAll	8	3.7545×10^{-13}	1	4.816×10^{-14}	4.8126×10^{-4}	
128	QuaternionAll	8	3.4098×10^{-13}	1	4.684×10^{-14}	4.1297×10^{-4}	0.858
pdb2mj1	ClassicAll	8	2.0809×10^{-3}	1	1.309×10^{-13}	4.0562×10^{-4}	
110	QuaternionAll	8	2.0809×10^{-3}	1	1.646×10^{-13}	3.4807×10^{-4}	0.858
pdb2mj2	ClassicAll	8	3.9018×10^{-3}	2	9.775×10^{-14}	7.9935×10^{-4}	
218	QuaternionAll	8	3.9018×10^{-3}	2	1.192×10^{-13}	6.6638×10^{-4}	0.834
pdb2mjg	ClassicAll	8	1.4497×10^{-3}	2	5.503×10^{-14}	9.8496×10^{-3}	
556	QuaternionAll	8	1.4497×10^{-3}	2	6.579×10^{-14}	6.9305×10^{-3}	0.704
pdb2mji	ClassicAll	8	1.3090×10^{-11}	1	3.207×10^{-12}	3.1748×10^{-3}	
788	QuaternionAll	8	1.2949×10^{-11}	1	3.247×10^{-12}	2.6796×10^{-3}	0.844
pdb2mle	ClassicAll	8	1.6719×10^{-3}	2	1.491×10^{-13}	1.6953×10^{-3}	
434	QuaternionAll	8	1.6719×10^{-3}	2	1.535×10^{-13}	1.4160×10^{-3}	0.835
pdb2mlf	ClassicAll	8	8.3036×10^{-13}	2	9.918×10^{-14}	1.6903×10^{-3}	
434	QuaternionAll	8	8.8493×10^{-13}	2	1.127×10^{-13}	1.4173×10^{-3}	0.839
pdb2mo5	ClassicAll	8	1.9007×10^{-11}	1	1.394×10^{-12}	3.3915×10^{-3}	
854	QuaternionAll	8	1.8458×10^{-11}	1	1.403×10^{-12}	2.8453×10^{-3}	0.839
pdb2mpu	ClassicAll	8	2.5305×10^{-12}	1	9.785×10^{-14}	2.1776×10^{-3}	
554	QuaternionAll	8	2.5592×10^{-12}	1	1.016×10^{-13}	1.8563×10^{-3}	0.852
pdb2mra	ClassicAll	8	4.3616×10^{-12}	1	2.632×10^{-13}	3.1919×10^{-3}	
704	QuaternionAll	8	4.3117×10^{-12}	1	2.768×10^{-13}	2.5928×10^{-3}	0.812
pdb2msu	ClassicAll	8	3.6237×10^{-12}	1	7.813×10^{-14}	4.5303×10^{-4}	
122	QuaternionAll	8	3.6441×10^{-12}	1	8.765×10^{-14}	3.8593×10^{-4}	0.852
pdb2mty	ClassicAll	2	5.1232×10^{-12}	2	1.848×10^{-14}	3.4243×10^{-4}	
120	QuaternionAll	2	5.2129×10^{-12}	2	2.363×10^{-14}	2.5241×10^{-4}	0.737
pdb2muh	ClassicAll	8	8.0615×10^{-5}	2	2.008×10^{-13}	3.4633×10^{-4}	
98	QuaternionAll	8	8.0615×10^{-5}	2	2.279×10^{-13}	2.9121×10^{-4}	0.841
pdb2mvj	ClassicAll	2	6.1752×10^{-12}	1	1.534×10^{-13}	4.1678×10^{-4}	
156	QuaternionAll	2	6.1858×10^{-12}	1	1.647×10^{-13}	3.0918×10^{-4}	0.742
pdb2mvt	ClassicAll	8	1.5441×10^{-4}	2	6.053×10^{-12}	1.1137×10^{-3}	
284	QuaternionAll	8	1.5441×10^{-4}	2	6.225×10^{-12}	9.4715×10^{-4}	0.850
pdb2n00	ClassicAll	8	1.2439×10^{-4}	2	2.703×10^{-13}	2.2232×10^{-3}	
572	QuaternionAll	8	1.2439×10^{-4}	2	3.466×10^{-13}	1.8588×10^{-3}	0.836

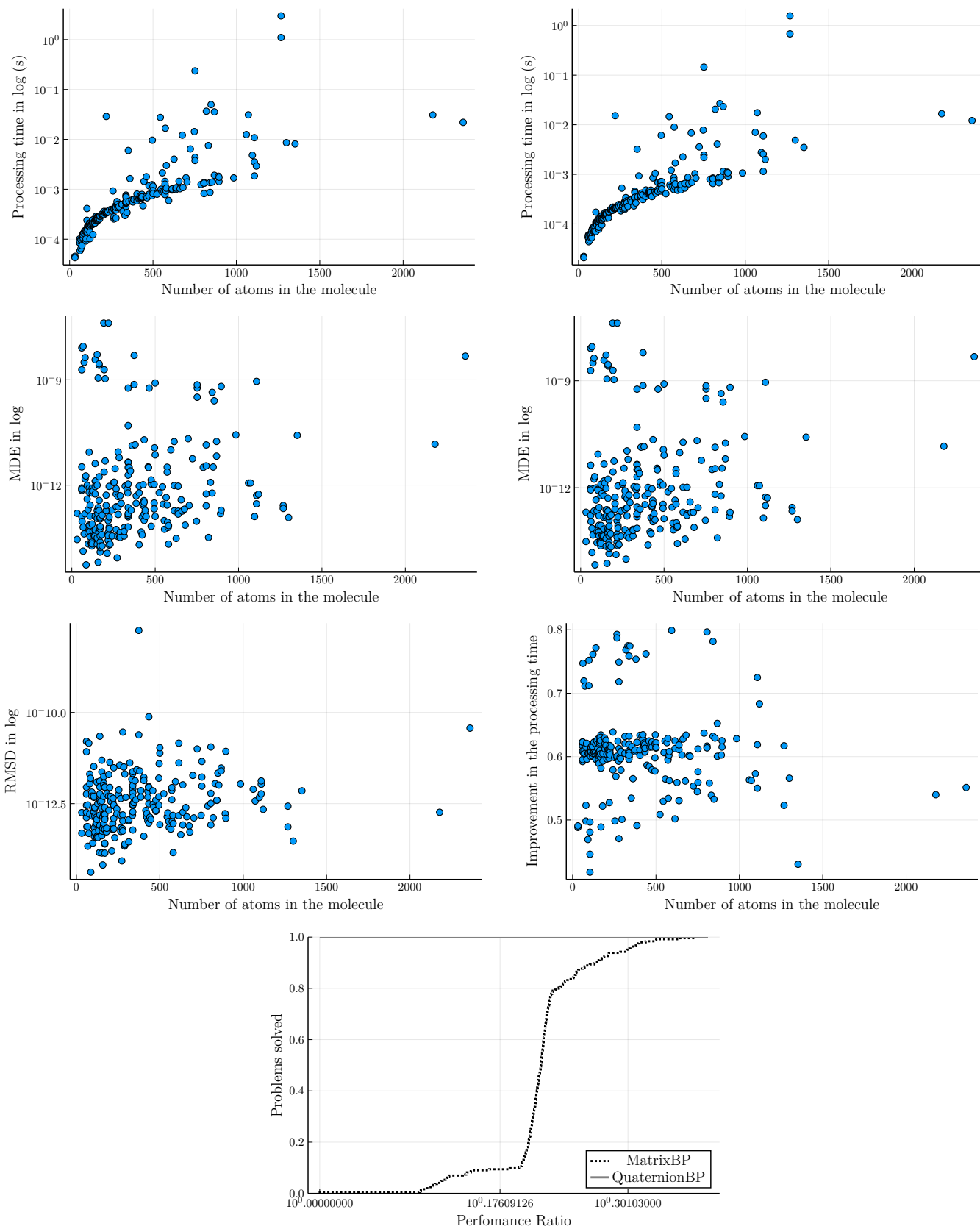| Problem Size	Method	$|\mathcal{X}|$	$\min_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}} \text{RMSD}(\mathbf{x},\mathbf{x}_o)$	$i : \mathbf{x_i} \sim \mathbf{x}_o$	$\text{MDE}(\mathbf{x}_i)$	Time	Improv time
pdb2n0b	ClassicAll	2	1.0219×10^{-11}	2	7.123×10^{-13}	1.4871×10^{-4}	
60	QuaternionAll	2	1.0781×10^{-11}	2	9.477×10^{-13}	1.0772×10^{-4}	0.724
pdb2n0c	ClassicAll	2	1.0471×10^{-12}	1	1.293×10^{-13}	1.6022×10^{-4}	
60	QuaternionAll	2	9.1394×10^{-13}	1	1.682×10^{-13}	1.0615×10^{-4}	0.663
pdb2n0d	ClassicAll	2	5.2061×10^{-11}	2	3.639×10^{-12}	1.5071×10^{-4}	
60	QuaternionAll	2	5.7645×10^{-11}	2	4.540×10^{-12}	1.1035×10^{-4}	0.732
pdb2n0e	ClassicAll	2	1.1503×10^{-11}	2	3.314×10^{-12}	1.5451×10^{-4}	
60	QuaternionAll	2	1.8786×10^{-11}	2	4.286×10^{-12}	1.1311×10^{-4}	0.732
pdb2n0f	ClassicAll	2	2.2697×10^{-12}	1	3.185×10^{-13}	1.5359×10^{-4}	
60	QuaternionAll	2	2.7490×10^{-12}	1	4.023×10^{-13}	1.1102×10^{-4}	0.723
pdb2n0g	ClassicAll	2	1.4896×10^{-11}	1	8.315×10^{-13}	1.5243×10^{-4}	
60	QuaternionAll	2	1.4974×10^{-11}	1	9.618×10^{-13}	1.1061×10^{-4}	0.726
pdb2n0h	ClassicAll	2	4.1935×10^{-12}	2	7.716×10^{-13}	1.5238×10^{-4}	
60	QuaternionAll	2	4.1379×10^{-12}	2	8.755×10^{-13}	1.1151×10^{-4}	0.732
pdb2n35	ClassicAll	8	1.4478×10^{-4}	6	3.658×10^{-14}	1.2073×10^{-3}	
314	QuaternionAll	8	1.4478×10^{-4}	6	4.617×10^{-14}	1.0074×10^{-3}	0.834
pdb2n41	ClassicAll	8	5.9366×10^{-3}	2	1.812×10^{-13}	2.4828×10^{-3}	
638	QuaternionAll	8	5.9366×10^{-3}	2	1.836×10^{-13}	2.0828×10^{-3}	0.839
pdb2n4e	ClassicAll	8	5.1960×10^{-3}	2	1.494×10^{-13}	2.4771×10^{-3}	
638	QuaternionAll	8	5.1960×10^{-3}	2	1.687×10^{-13}	2.0948×10^{-3}	0.846
pdb2n5q	ClassicAll	8	1.1051×10^{-11}	1	1.732×10^{-12}	6.3728×10^{-4}	
164	QuaternionAll	8	9.3428×10^{-12}	1	1.745×10^{-12}	5.4182×10^{-4}	0.850
pdb2n67	ClassicAll	8	2.0736×10^{-12}	1	4.443×10^{-13}	2.2113×10^{-3}	
566	QuaternionAll	8	2.0936×10^{-12}	1	4.465×10^{-13}	1.8823×10^{-3}	0.851
pdb2n6n	ClassicAll	2	1.6681×10^{-12}	2	6.557×10^{-13}	6.0621×10^{-4}	
192	QuaternionAll	2	1.2630×10^{-12}	2	7.492×10^{-13}	4.5330×10^{-4}	0.748
pdb2n7i	ClassicAll	8	1.3998×10^{-4}	1	9.212×10^{-13}	8.3429×10^{-4}	
224	QuaternionAll	8	1.3998×10^{-4}	1	1.126×10^{-12}	7.0047×10^{-4}	0.840
pdb2n7j	ClassicAll	2	2.5110×10^{-12}	1	5.969×10^{-13}	9.5660×10^{-4}	
336	QuaternionAll	2	2.6436×10^{-12}	1	6.094×10^{-13}	7.1828×10^{-4}	0.751
pdb2na9	ClassicAll	8	2.3390×10^{-12}	1	5.440×10^{-14}	1.0107×10^{-3}	
266	QuaternionAll	8	2.3721×10^{-12}	1	6.690×10^{-14}	8.4029×10^{-4}	0.831
pdb2ndc	ClassicAll	8	3.1313×10^{-3}	2	3.365×10^{-14}	4.0235×10^{-4}	
110	QuaternionAll	8	3.1313×10^{-3}	2	4.481×10^{-14}	3.4737×10^{-4}	0.863
pdb2nde	ClassicAll	8	8.5286×10^{-5}	2	7.022×10^{-14}	3.9925×10^{-4}	
110	QuaternionAll	8	8.5286×10^{-5}	2	8.855×10^{-14}	3.3781×10^{-4}	0.846
pdb2ndk	ClassicAll	8	9.0150×10^{-5}	1	5.022×10^{-13}	1.1182×10^{-3}	
290	QuaternionAll	8	9.0150×10^{-5}	1	6.279×10^{-13}	9.4276×10^{-4}	0.843
pdb2nvj	ClassicAll	8	6.7520×10^{-3}	7	2.082×10^{-14}	5.8433×10^{-4}	
152	QuaternionAll	8	6.7520×10^{-3}	7	2.293×10^{-14}	5.0024×10^{-4}	0.856
pdb2p6j	ClassicAll	8	3.2640×10^{-13}	1	4.795×10^{-14}	1.2092×10^{-3}	
314	QuaternionAll	8	3.5480×10^{-13}	1	6.389×10^{-14}	1.0133×10^{-3}	0.838
pdb2p81	ClassicAll	8	6.8538×10^{-11}	2	7.881×10^{-13}	1.0138×10^{-3}	
266	QuaternionAll	8	6.8914×10^{-11}	2	8.226×10^{-13}	8.4022×10^{-4}	0.829
pdb2pqe	ClassicAll	8	4.1258×10^{-5}	2	1.127×10^{-11}	3.5834×10^{-3}	
896	QuaternionAll	8	4.1258×10^{-5}	2	1.248×10^{-11}	3.0203×10^{-3}	0.843
pdb2rlg	ClassicAll	2	4.8140×10^{-13}	1	5.501×10^{-14}	2.8959×10^{-4}	
108	QuaternionAll	2	5.3066×10^{-13}	1	6.973×10^{-14}	2.1489×10^{-4}	0.742
pdb2rlh	ClassicAll	2	1.0750×10^{-12}	1	4.772×10^{-14}	2.9106×10^{-4}	
108	QuaternionAll	2	1.0423×10^{-12}	1	5.801×10^{-14}	2.1763×10^{-4}	0.748
pdb2rmy	ClassicAll	8	1.2240×10^{-4}	1	1.872×10^{-13}	7.6127×10^{-4}	
206	QuaternionAll	8	1.2240×10^{-4}	1	2.498×10^{-13}	6.3412×10^{-4}	0.833
pdb2rnd	ClassicAll	128	3.4031×10^{-12}	33	2.626×10^{-13}	1.2905×10^{-2}	
206	QuaternionAll	128	3.8842×10^{-12}	33	3.569×10^{-13}	9.0111×10^{-3}	0.698

Problem Size	Method	$|\mathcal{X}|$	$\min_{\mathbf{x}\in\mathcal{X}} \mathrm{RMSD}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_o)$	$i : \mathbf{x_i} \sim \mathbf{x}_o$	$\mathrm{MDE}(\mathbf{x}_i)$	Time	Improv time
pdb2roo	ClassicAll	8	3.3639×10^{-4}	6	2.933×10^{-12}	1.7042×10^{-3}	
260	QuaternionAll	8	3.3639×10^{-4}	6	3.525×10^{-12}	1.2776×10^{-3}	0.750
pdb2rql	ClassicAll	8	9.9510×10^{-11}	1	2.345×10^{-12}	2.2341×10^{-3}	
572	QuaternionAll	8	1.0013×10^{-10}	1	2.496×10^{-12}	1.8932×10^{-3}	0.847
pdb2rut	ClassicAll	8	2.0579×10^{-13}	2	4.389×10^{-14}	8.1026×10^{-4}	
218	QuaternionAll	8	4.0527×10^{-13}	2	5.013×10^{-14}	6.8185×10^{-4}	0.842
pdb2ruv	ClassicAll	8	5.4278×10^{-13}	2	5.775×10^{-14}	8.2582×10^{-4}	
224	QuaternionAll	8	6.5510×10^{-13}	2	7.404×10^{-14}	6.9366×10^{-4}	0.840
pdb2rux	ClassicAll	8	3.6084×10^{-3}	1	2.671×10^{-14}	8.1189×10^{-4}	
218	QuaternionAll	8	3.6084×10^{-3}	1	3.016×10^{-14}	6.8616×10^{-4}	0.845
pdb2ruy	ClassicAll	8	4.1535×10^{-13}	1	1.968×10^{-14}	8.1713×10^{-4}	
224	QuaternionAll	8	3.5981×10^{-13}	1	2.387×10^{-14}	6.8694×10^{-4}	0.841
pdb2rv3	ClassicAll	8	3.0630×10^{-4}	1	3.656×10^{-14}	8.0680×10^{-4}	
218	QuaternionAll	8	3.0630×10^{-4}	1	4.118×10^{-14}	6.8179×10^{-4}	0.845
pdb2rv5	ClassicAll	8	8.6519×10^{-4}	1	1.145×10^{-14}	7.9030×10^{-4}	
212	QuaternionAll	8	8.6519×10^{-4}	1	1.338×10^{-14}	6.7668×10^{-4}	0.856
pdb2y4q	ClassicAll	8	4.6451×10^{-11}	2	1.410×10^{-12}	1.8369×10^{-3}	
476	QuaternionAll	8	4.6324×10^{-11}	2	1.451×10^{-12}	1.5601×10^{-3}	0.849
pdb2k2f	ClassicAll	8	1.2926×10^{-11}	1	2.639×10^{-13}	1.5687×10^{1}	
1268	QuaternionAll	8	1.2956×10^{-11}	1	2.818×10^{-13}	9.5350	0.608
pdb2kbm	ClassicAll	8	1.5487×10^{-12}	2	2.165×10^{-13}	1.2158×10^{1}	
1268	QuaternionAll	8	1.6865×10^{-12}	2	2.226×10^{-13}	7.7655	0.639
pdb2j10	ClassicAll	1024	2.9952×10^{-5}	574	9.196×10^{-12}	5.6669×10^{-1}	
752	QuaternionAll	1024	2.9952×10^{-5}	574	9.529×10^{-12}	4.7902×10^{-1}	0.845
pdb2j11	ClassicAll	1024	2.7803×10^{-11}	549	5.256×10^{-12}	5.6835×10^{-1}	
752	QuaternionAll	1024	2.7661×10^{-11}	549	5.631×10^{-12}	4.8137×10^{-1}	0.847
pdb2lwa	ClassicAll	2048	4.9078×10^{-12}	449	3.616×10^{-13}	1.0042	
432	QuaternionAll	2048	4.0818×10^{-12}	449	4.436×10^{-13}	7.4914×10^{-1}	0.746
pdb2j0z	ClassicAll	8	1.3100×10^{-10}	6	4.392×10^{-12}	7.5375×10^{-2}	
752	QuaternionAll	8	1.3116×10^{-10}	6	4.954×10^{-12}	4.9065×10^{-2}	0.651
pdb2adl	ClassicAll	8	3.1161×10^{-11}	1	1.752×10^{-11}	7.5891×10^{-3}	
868	QuaternionAll	8	3.3255×10^{-11}	1	1.787×10^{-11}	5.4662×10^{-3}	0.720
pdb1pzr	ClassicAll	8	3.9940×10^{-10}	1	5.644×10^{-12}	6.0477×10^{-2}	
724	QuaternionAll	8	3.9046×10^{-10}	1	5.871×10^{-12}	4.2970×10^{-2}	0.711
pdb2lzf	ClassicAll	8	5.9653×10^{-4}	2	3.217×10^{-14}	1.3270×10^{-1}	
820	QuaternionAll	8	5.9653×10^{-4}	2	3.959×10^{-14}	8.6061×10^{-2}	0.649
pdb2g9j	ClassicAll	8	5.8011×10^{-4}	2	3.282×10^{-12}	1.2568×10^{-1}	
848	QuaternionAll	8	5.8011×10^{-4}	2	3.535×10^{-12}	7.9801×10^{-2}	0.635
pdb2le2	ClassicAll	8	1.5317×10^{-12}	2	2.064×10^{-13}	1.0604×10^{-1}	
676	QuaternionAll	8	1.4989×10^{-12}	2	2.042×10^{-13}	7.1920×10^{-2}	0.678
pdb2mvx	ClassicAll	8	5.8655×10^{-5}	6	1.968×10^{-10}	1.6123×10^{-2}	
2360	QuaternionAll	8	5.8655×10^{-5}	6	1.971×10^{-10}	1.1023×10^{-2}	0.684
pdb2mz6	ClassicAll	8	2.3371×10^{-10}	1	2.141×10^{-11}	2.2867×10^{-2}	
220	QuaternionAll	8	2.3374×10^{-10}	1	2.153×10^{-11}	1.4784×10^{-2}	0.647
pdb2a2y	ClassicAll	8	8.1076×10^{-5}	2	1.150×10^{-12}	1.0587×10^{-1}	
1072	QuaternionAll	8	8.1076×10^{-5}	2	1.151×10^{-12}	6.5937×10^{-2}	0.623
pdb2n9b	ClassicAll	8	4.0200×10^{-10}	1	1.196×10^{-12}	4.9956×10^{-2}	
832	QuaternionAll	8	4.0126×10^{-10}	1	1.238×10^{-12}	3.4607×10^{-2}	0.693
pdb1hf9	ClassicAll	8	9.0139×10^{-10}	6	1.156×10^{-11}	1.9801×10^{-2}	
496	QuaternionAll	8	9.0282×10^{-10}	6	1.180×10^{-11}	1.3024×10^{-2}	0.658
pdb2m4j	ClassicAll	8	5.2912×10^{-4}	1	1.463×10^{-11}	3.2721×10^{-2}	
2178	QuaternionAll	8	5.2912×10^{-4}	1	1.455×10^{-11}	2.4835×10^{-2}	0.759
pdb1x9v	ClassicAll	8	1.1547×10^{-4}	6	8.968×10^{-13}	1.9875×10^{-2}	
544	QuaternionAll	8	1.1547×10^{-4}	6	9.611×10^{-13}	1.2848×10^{-2}	0.646

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
pdb2ko1	ClassicAll	8	9.3273×10^{-4}	2	1.150×10^{-12}	3.7152×10^{-2}	
1060	QuaternionAll	8	9.3273×10^{-4}	2	1.151×10^{-12}	2.7479×10^{-2}	0.740
pdb2n3a	ClassicAll	8	2.1457×10^{-3}	5	8.770×10^{-14}	3.4809×10^{-2}	
574	QuaternionAll	8	2.1457×10^{-3}	5	1.049×10^{-13}	2.2580×10^{-2}	0.649

```
log.txt
```

```
time_limit=120 seconds
function_of_central_tendency_meansure=median
function_of_improvement=#18
precision=1.0e-6
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=2023-05-03T16:03:05.590
end_time=2023-05-04T08:13:40.377
###########
time_limit=120 seconds
function_of_central_tendency_meansure=median
function_of_improvement=#20
precision=1.0e-6
precision_virtual=1.0e-8
benchmark_seconds=4000
benchmark_samples_limit=100000
all_solutions=False
list_of_problems=["pdb2k2f", "pdb2kbm", "pdb2j10", "pdb2j11", "pdb2lwa", "pdb2j0z", "pdb2adl", "pdb1pzr", "pdb2lzf", "pdb
start_time=2023-05-08T08:11:55.060
end_time=2023-05-09T19:45:47.272
```

2 Visual analysis

2.1 BP-One

2.2 BP-All