

1.1										
	T=300K									
	Potential Lev	N parameter	Energy RMSE	Force RMSE	N configurations		alpha scalar	num of speci	radial funcs	radial basis s
	4	11	0.00666911	0.0195122	53		2	1	1	8
	6	22	0.00289089	0.010343	106		5	1	2	8
	8	26	0.00266946	0.00968246	109		9	1	2	8
	10	41	0.00236636	0.00751334	136		16	1	3	8
	12	54	0.0010805	0.00545386	224		29	1	3	8

1.2

RMSE versus Parameters number

Parameters number	Energy RMSE	Force RMSE
11	0.00666911	0.0195122
22	0.00289089	0.010343
26	0.00266946	0.00968246
41	0.00236636	0.00751334
54	0.0010805	0.00545386

Ошибка обучения уменьшается с увеличением количества параметров, что, в общем-то, предсказуемо - при усложнении модели она должна обучаться точнее.

1.3

N configurations versus Parameters number

Parameters number	N configurations
11	53
22	106
26	109
41	136
54	224

С ростом числа параметров увеличивается и число отобранных конфигураций.

1.4										
	Potential level 12									
	T	N configurat	Energy RMSE	Force RMSE						
	300	224	0.0010805	0.00545386						
	800	314	0.00400712	0.0118576						
	1300	358	0.00578619	0.0159414						
	1800	380	0.00670017	0.0179319						

С ростом температуры увеличиваются и число отобранных конфигураций, и ошибки обучения. Это может быть связано с тем, что в обучающую выборку входят в большей степени структуры с низкой температурой, что играет важную роль, так как низкотемпературные свойства могут значительно отличаться от высокотемпературных.

