

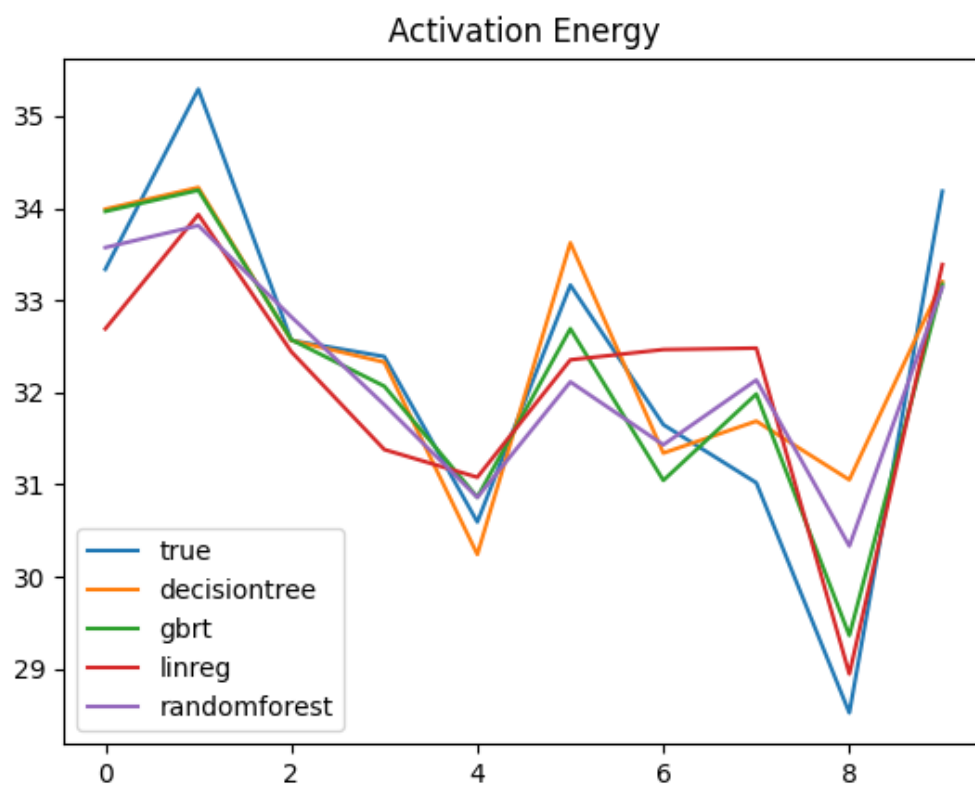
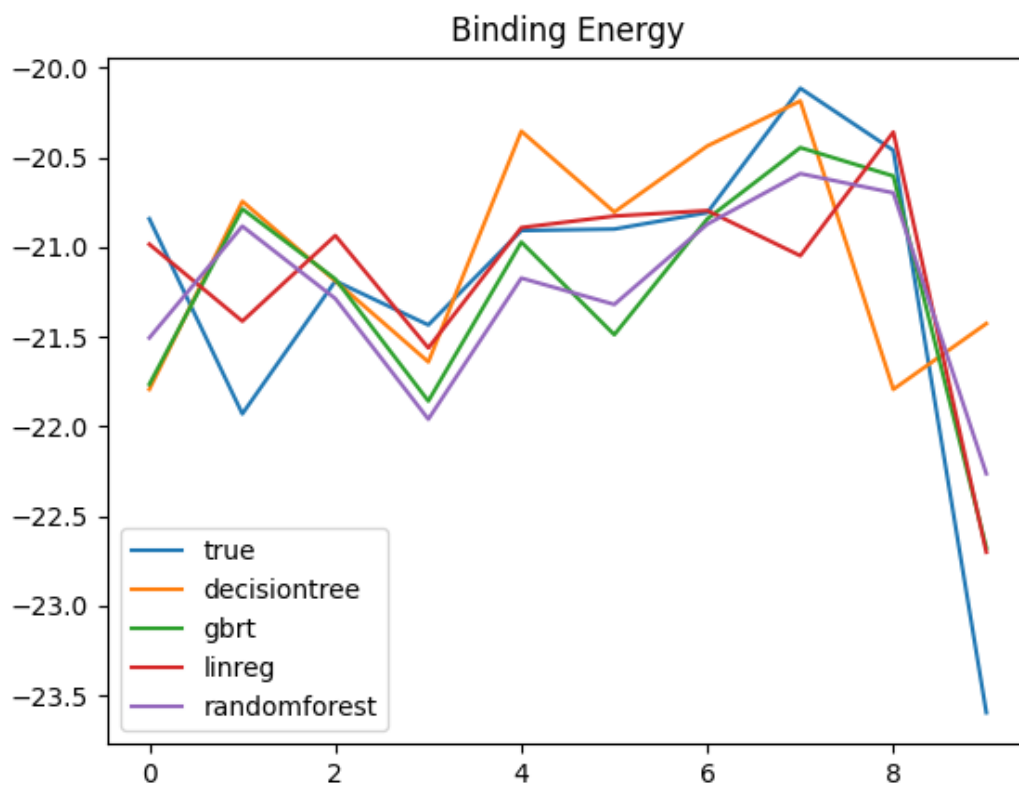
CV = 10, frac = 0.8

| 算法模型 | 结合能:训练集/验证集 (rmse) | 测试集 (mae) | 测试集 (mse) | 测试集 (rmse) |
|----------------------|-----------------------|--------------|--------------|---------------|
| 决策树 | 0.972 | 0.694 | 0.930 | 0.964 |
| GBRT | 0.801 | 0.439 | 0.355 | 0.596 |
| Linear Regression | 0.581 | 0.311 | 0.201 | 0.448 |
| Random Forest | 0.319 | 0.514 | 0.433 | 0.659 |

| 算法模型 | 活化能:训练集/验证集 (rmse) | 测试集 (mae) | 测试集 (mse) | 测试集 (rmse) |
|----------------------|-----------------------|--------------|--------------|---------------|
| 决策树 | 2.35 | 0.708 | 0.981 | 0.991 |
| GBRT | 1.438 | 0.622 | 0.502 | 0.708 |
| Linear Regression | 1.351 | 0.793 | 0.781 | 0.884 |
| Random Forest | 1.393 | 0.800 | 0.943 | 0.971 |

| 算法模型 | 反应热:训练集/验证集 (rmse) | 测试集 (mae) | 测试集 (mse) | 测试集 (rmse) |
|----------------------|-----------------------|--------------|--------------|---------------|
| 决策树 | 2.818 | 1.388 | 3.738 | 1.933 |
| GBRT | 1.777 | 0.486 | 1.827 | 1.351 |
| Linear Regression | 1.549 | 0.793 | 0.613 | 0.783 |
| Random Forest | 1.872 | 1.156 | 2.720 | 1.649 |

数据拟合程度:



Heat of Reaction

