





		coordinates			bonds			3 distances			3 angles			3 (3 dihedrals		
Training set	ρ_1	1.00	0.99	0.96	1.00	0.99	0.98	0.94	0.92	0.82	0.96	0.94	0.83	0.98	0.96	0.89	88
	ρ2	0.99	0.99	0.97	1.00	1.00	0.99	0.93	0.94	0.87	0.95	0.95	0.90	0.97	0.97	0.93	Length 128
	ρ_3	0.90	0.98	0.99	0.98	0.99	0.99	0.87	0.92	0.91	0.92	0.95	0.93	0.97	0.97	0.95	Le
		ρ_1	ρ_2	ρ_3	ρ_1	ρ_2	ρ_3	ρ ₁ Te:	ρ ₂ st set	ρ_3	ρ_1	ρ_2	ρ_3	$\dot{\rho}_1$	ρ_2	ρ_3	
		coordinates			bonds			3 distances			3 angles			3 dihedrals			
	ρ_1	0.58		0.51	0.75	0.74	0.73	0.30	0.30	0.30	0.32	0.34	0.36	0.42	0.39	0.33	64
	ρ2-			0.58	0.75	0.75	0.74	0.28	0.29	0.31	0.34	0.36	0.38	0.43	0.42	0.38	Length
	ρ3	0.72	0.68	0.62	0.78	0.78	0.78	0.29	0.30	0.30	0.30	0.31	0.33	0.42	0.41	0.40	2
	ρ_1	0.20	0.20	0.20	0.22	0.22	0.24	0.21	0.22	0.22	0.36	0.27	0.23	0.30	0.30	0.28	99
Training set	ρ2	0.20	0.20	0.20	0.21	0.21	0.22	0.21	0.21	0.21	0.37	0.31	0.26	0.29	0.28	0.27	Length 256
Train	ρ3.	0.20	0.20	0.20	0.21	0.21	0.21	0.22	0.22	0.22	0.35	0.32	0.28	0.28	0.27	0.26	Ler
	ρ_1	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.21	0.20	0.20	0.25	0.22	0.20	0.21	0.21	0.20	12
	ρ_2	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.26	0.22	0.20	0.21	0.21	0.20	Length 512
	ρ3 ·	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.21	0.20	0.20	0.28	0.24	0.21	0.21	0.21	0.20	Ler
		ρ_1	ρ_2	ρ_3	ρ_1	ρ ₂	ρ_3	ρ ₁ Te	ρ_2 st set	ρ_3	ρ_1	ρ_2	ρ_3	ρ_1	$\dot{\rho}_2$	ρ_3	23

	coordinates			bonds			3 distances			3 angles			3 dihedrals				
ρ	1	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.98	0.98	0.98	1.00	1.00	0.99	1.00	1.00	1.00	64
ρ	2 -	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.95	0.96	0.97	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	
ρ	3 -	0.97	0.99	1.00	0.96	0.97	0.99	0.84	0.87	0.92	0.98	0.99	1.00	1.00	0.99	0.99	Le
م ر	1	0.95	0.89	0.76	0.95	0.90	0.78	0.74	0.61	0.44	0.78	0.64	0.45	0.85	0.73	0.53	256
ing set	2 -	0.93	0.90	0.78	0.95	0.92	0.85	0.75	0.64	0.46	0.79	0.70	0.54	0.85	0.78	0.62	
Lain P	3 -	0.86	0.93	0.87	0.93	0.93	0.87	0.75	0.70	0.54	0.78	0.74	0.59	0.84	0.80	0.67	Lei
			D.														1
ρ	1	0.80	0.65	0.45	0.79	0.66	0.48	0.48	0.33	0.16	0.52	0.36	0.28	0.60	0.41	0.29	12
ρ	2 -	0.80	0.66	0.46	0.78	0.66	0.47	0.48	0.33	0.19	0.56	0.40	0.31	0.64	0.47	0.34	Lenght 51
ρ	3 -	0.80	0.74	0.55	0.76	0.64	0.40	0.53	0.37	0.23	0.57	0.42	0.33	0.64	0.49	0.37	Le
	665	ρ_1	ρ_2	ρ_3	ρ_1	ρ_2	ρ_3	ρ ₁ Tes	ρ ₂ st set	ρ_3	ρ_1	ρ_2	ρ_3	ρ_1	ρ_2	ρ_3	10



