Tests 1:

Interfaz de usuario gráfica, Texto, Aplicación

Descripción generada automáticamente

Trial 11 finished with value: 0.1197391003370285 and parameters: {'cutoff': 4.808687204474796}. Best is trial 11 with value: 0.1197391003370285.

Interfaz de usuario gráfica, Texto, Aplicación

Descripción generada automáticamente

Trial 5 finished with value: 0.10610318928956985 and parameters: {'n\_atom\_basis': 26.361504575055747}. Best is trial 5 with value: 0.10610318928956985.

Interfaz de usuario gráfica, Texto, Aplicación

Descripción generada automáticamente

Trial 19 finished with value: 0.11147601157426834 and parameters: {'lr': 0.0009246828110953161}. Best is trial 19 with value: 0.11147601157426834.

Testos 2:

Interfaz de usuario gráfica, Texto, Aplicación

Descripción generada automáticamente

Trial 3 finished with value: 0.0583282932639122 and parameters: {'cutoff': 3.318326274250602}. Best is trial 3 with value: 0.0583282932639122.

Interfaz de usuario gráfica, Texto, Aplicación

Descripción generada automáticamente

Trial 8 finished with value: 0.05289793759584427 and parameters: {'lr': 0.0009189005135006211, 'cutoff': 4.197938067361334, 'n\_atom\_basis': 42.326339074025256}. Best is trial 8 with value: 0.05289793759584427.

Tests 3:

Interfaz de usuario gráfica, Texto, Aplicación

Descripción generada automáticamente

Best is trial 6 with value: 0.13981103897094727.

Best parameters: {'lr': 0.0007978641320814685}

Best is trial 14 with value: 0.13328783214092255.

Best parameters: {'lr': 0.00031431171236279414}

Interfaz de usuario gráfica, Texto

Descripción generada automáticamente

Best is trial 14 with value: 0.15108531713485718.

Best parameters: {'cutoff': 4.685880254325838, 'n\_atom\_basis': 43.15587038230621}

Best is trial 11 with value: 0.15339474380016327.

Best parameters: {'cutoff': 3.0696254878437057, 'n\_atom\_basis': 49.122239725354966}

Interfaz de usuario gráfica, Texto, Aplicación

Descripción generada automáticamente

Best is trial 11 with value: 0.12849801778793335.

Best parameters: {'n\_atom\_basis': 37.754708763261334}

Interfaz de usuario gráfica, Texto, Aplicación

Descripción generada automáticamente

Best is trial 1 with value: 0.1819438338279724.

Best parameters: {'cutoff': 4.877849762823089}

Testos 4:

Interfaz de usuario gráfica, Texto

Descripción generada automáticamente

SWEEPS

Imagen que contiene Texto

Descripción generada automáticamente