**All-varied**

Цей набір даних дає змогу оцінити моделі на міцність, перевіряючи їх здатність до узагальнення, коли змінюються всі наявні параметри одночасно. Це корисно для розуміння того, як модель працюватиме в умовах, де безліч чинників (температура, концентрації бору і заліза) можуть варіюватися разом, що відображає складність реальних умов роботи СЕ.

*AM 1.5*

DNN стабільно демонструє найнижчі показники MSE серед усіх моделей: мінімальне значення MSE = 60.5 для набору з 6 дескрипторів вказую на високу прогностичну здатність в складних умовах тестування, причому тільки для цього набору метод PCA виправдовую свою застосовність, для усіх інших наборів дескрипторів спостерігається погіршення MSE на ~ (11 – 44) % після використання PCA. Для XGB і GB ситуація дещо інша: використання PCA для моделей GB та XGB для набору з 4 дескрипторів зменшує MSE більше ніж в 2.5 рази, для наборів з 5 та 7 дескрипторів спостерігається зменшення MSE більше ніж в 1.5 рази, тільки для набору з 6 дескрипторів метрика зменшується на невеликі значення. RF демонструє схожу тенденцію після використання PCA: в ~ 1.5 - 2 рази зменшуються MSE для наборів з 5 та 7 дескрипторів та майже в 3 рази для набору з 4 дескрипторів. SVR має найбільше значення MSE = 272.7, що свідчить про складнощі з можливим перенавчанням. Метод PCA для SVR не покращує загальної ситуації, а лише збільшу помилку MSE.

З іншого боку DNN також показує найнижчі MRE в передбаченнях серед усіх моделей. MRE складає (7 - 11) % для наборів даних з 6 та 7 дескрипторами та (13-57)% для наборів з 4 та 5 дескрипторами. Використання PCA майже не впливає на MRE, а для набору з 5 дескрипторів збільшує MRE більше ніж в 4 рази. GB і RF поступаються до DNN з MRE = (24 - 49) % для наборів даних з 6 та 7 дескрипторами та з MRE = (60 - 115) % для наборів з 4 та 5 дескрипторами. Використання PCA для моделей GB та RF покращує MRE тільки для набору з 4 дескрипторів, для інших же наборів таке впровадження є неефективним і в більшості випадків погіршує прогностичність моделей. SVR моделі, як і у випадку з MSE, демонструють найбільші MRE серед усіх моделей МН. Проте тенденція стабільно високих MRE спостерігається тільки для наборів з 4 та 5 дескрипторами, при подальшому збільшенні числа дескрипторів MRE в середньому зменшується більше ніж в 3 рази. Використання PCA для моделей SVR тільки збільшує MRE. З іншого боку XGB демонструє велику потребу в PCA: так для наборів з 4,5,6 дескрипторами після використання PCA середня відносна помилка зменшується в ~2 рази і тільки для набору з 7 дескрипторів використання PCA не доцільно і призводить до збільшення помилки на ~9%.

DNN також досягає найвищих R2 (до R2=0.944), що підтверджує те, що модель найкращим чином пояснює дисперсію даних. RF, GB та XGB мають схожі значення R2: спостерігається тенденція до дуже малих R2 для наборів з 4 та 5 дескрипторів, використання PCA для таких наборів значно покращує ситуацію збільшуючи R2 в 2.5 - 6 разів. SVR знову відстає з стабільними R2 в межах 0.405 - 0.529 для усіх наборів даних в не залежності від використання методу PCA.

*940 нм*

DNN знову демонструє низькі показники MSE з мінімальною MSE = 35.2 серед усіх моделей МН. Проте в порівнянні зі спектром АМ 1.5 для набору з 6 дескрипторів DNN має тепер найгірші MSE серед усіх інших наборів дескрипторів. Використання PCA доцільно тільки для набору з 7 дескрипторів для інших наборів як і для спектру АМ 1.5 PCA тільки погіршує прогностичну можливість моделі. RF та GB демонструють схожі MSE: для всіх наборів дескрипторів MSE = 72 – 106. Прослідковується незначне зменшення MSE зі збільшенням кількості дескрипторів на 22% для випадків коли метод PCA не використовується, для випадків коли PCA використовується спостерігається протилежна тенденція до збільшення MSE при збільшенні кількості дескрипторів. SVR знову має великі значення MSE для усіх наборів даних в порівнянні з DNN, GB та RF (180 – 250) як це було і для освітлення АМ 1.5, а метод PCA тільки зменшує прогностичну можливість моделей SVR. Проте SVR не є найгіршою в цей раз, модель XGB демонструє гірші показники особливо для наборів з 4 та 5 дескрипторів, проте метод PCA зменшує показники MSE в ~3-7 разів для наборів з 4 та 5 дескрипторів, та в ~2.5 рази для наборів з 6 та 7 дескрипторів.

Схожа ситуація спостерігається і для метрики MRE: модель DNN має найнижчі показники MRE (11.3 – 19.5)%, що підтверджує її стабільність та стійкість до складних умов тестування, однак використання PCA не є доцільним і в більшості випадків тільки погіршує прогностичні можливості моделі. XGB демонструє великі значення MRE (440 – 600) для наборів з 4 та 5 дескрипторів, що нівелюється використанням PCA до цих наборів, а для випадку з 6 та 7 дескрипторами MRE значно зменшується ~(60-70) без PCA та ~(25-36) після використання PCA. RF та GB мають еквівалентні MRE демонструючи тенденцію до зменшення метрики зі збільшенням кількості дескрипторів, причому метод PCA сильно покращує прогностичні можливості таких моделей зменшуючи MRE в 3-8 разів для обох моделей. SVR зберігає свою тенденцію до не доцільності використання методу PCA до всіх наборів дескрипторів, проте демонструє зменшення MRE зі збільшенням кількості дескрипторів в наборах, чого не було раніше.

DNN також залишається найкращою моделлю з коефіцієнтом детермінації R2 в околі 0.9 для більшості з наборів дескрипторів. RF, GB та XGB демонструють помірні результати R2=0,65−0,79. Спостерігається тенденція яка була і для освітлення АМ 1.5: використання PCA значно збільшує коефіцієнти R2 для всіх наборів дескрипторів, роблячи з коефіцієнтів які до використання PCA можна було вважати промахами такі, які можуть конкурувати з коефіцієнтами R2 для моделі DNN. Щодо SVR, то для цієї моделі збільшення кількості дескрипторів майже не впливає на коефіцієнт R2, який стабільно знаходиться в околі 0.48-0.59, а використання чи не використання PCA як і для спектру АМ 1.5 не має великої різниці.

Як висновок, можна з впевненістю говорити що модель DNN перевершила інші моделі для обох варіантів освітлення, демонструючи найменші помилки MSE та MRE та найбільші значення R2. RF та GB мають схожі результати для всіх метрик, однак їх прогностична можливість менша ніж в DNN. XGB демонструє велику варіативність результатів, особливо для освітлення 940 нм, а SVR поступається усім іншим моделям та демонструє стабільність своїх прогностичних можливостей в незалежності від кількості дескрипторів в наборі чи від використання або не використання PCA. Використання PCA доцільно тільки для моделей RF, GB та XGB.

**B-varied**

Цей набір корисний для перевірки, наскільки модель чутлива до зміни концентрації бору в СЕ. По суті такий тестовий набір містить невідомі СЕ. Концентрація бору також може змінюватися в процесі виробництва СЕ, тому здатність моделі адаптуватися до таких змін робить її більш застосовною до реальних виробничих умов.

*АМ 1.5*

Модель DNN демонструє значно менші значення MSE порівняно з іншими моделями: певні складнощі в прогнозуванні модель очікувано має на наборі з 4 дескрипторів MSE ~ 53.6, при збільшенні кількості дескрипторів до 5 модель демонструє найкращу прогностичну здатність з найменшим MSE ~ 29.8 серед усіх тестових наборів, при подальшому збільшенні кількості дескрипторів MSE не зменшується і знаходиться в околі ~ (34 – 43). Використання PCA не покращує прогностичні можливості моделі: для набору з 6 дескрипторів MSE залишається сталим, а для інших наборів наявність PCA тільки погіршує точність моделі. Моделі RF, GB, XGB та SVR мають значно більші MSE. Однакова тенденція спостерігається для моделей RF, GB та XGB: для наборів з 4 дескрипторів використання PCA зменшує похибку MSE в ~3-4 рази, для наборів з 5 дескрипторів в ~2-2.5 рази; при подальшому збільшенні кількості дескрипторів до 6ти вплив PCA послаблюється, однак для набору з 7ми дескрипторів вплив посилюється, а точність моделей зростає в ~1.5-2.4 рази. Для моделі SVR спостерігається збільшення прогностичної можливості зі збільшенням кількості дескрипторів, проте точність сильно відстає від інших моделей, а метод PCA тільки погіршує передбачення.

Модель DNN також демонструє найменші середні відносні помилки серед усіх моделей, MRE монотонно зменшується зі збільшенням кількості дескрипторів. Для тестових наборів з 4 та 5 дескрипторів спостерігається погіршення результатів після використання PCA в 2-3 рази, для набору з 6 дескрипторів після використання PCA спостерігається найменша MRE ~ 7% серед усіх інших моделей. Для RF та GB спостерігається однакова тенденція: для набору з 4 дескрипторів метод PCA зменшує MRE в ~5 разів до 55%, для набору з 5 та 6 дескрипторів в ~1.5-2.3 рази до ~ (75 – 87)% та ~(40 – 50)% відповідно. Модель XGB має дещо гірші прогностичні здатності на цьому тестовому наборі: без використання PCA модель демонструє меншу точність ніж модель SVR, однак на відмінну від SVR модель XGB після використання PCA демонструє менші MRE для наборів даних з 4, 5 та 6 дескрипторів в порівнянні з моделями RF та GB. Модель SVR має складнощі в прогнозуванні для випадків використання 4 та 5 дескрипторів, однак для випадків з 6 та 7 дескрипторами спостерігається помітне зменшення MRE в ~4 рази до показників в 50% в порівнянні з іншими наборами дескрипторів.

Щодо коефіцієнта детермінації, то він корелює з іншими метриками і в черговий раз доводить високу прогностичну спроможність моделі DNN в порівнянні з іншими моделями МН. Однак, використання методу PCA для моделей DNN негативно позначається на R2 майже для всіх наборів дескрипторів, а для мереж RF, GB та XGB навпаки: використання PCA значно підвищує коефіцієнт детермінації для всіх наборів дескрипторів. Щодо моделі SVR, то зі збільшенням кількості дескрипторів до 6,7 коефіцієнт R2 тільки зменшується, а вплив наявності PCA не спостерігається.

*940 нм*

Схожа тенденція спостерігається для освітлення на довжині хвилі в 940 нм: модель DNN демонструє високу прогностичну здатність та має найменші значення MSE серед усіх моделей МН. Відмінність від освітлення АМ 1.5 полягає в тому, що після використання PCA значення MSE для всіх наборів дескрипторів зменшується в порівнянні з випадками не використання PCA. Однак, модель DNN має певні труднощі в прогнозуванні концентрацій заліза для випадку використання 6 дескрипторів. Моделі RF та GB мають схожі значення MSE для всіх наборів дескрипторів як і з використанням PCA так і без. Використання методу PCA для цих моделей зменшує MSE в ~3-4 рази для випадків використання 4 та 5 дескрипторів, та в ~2-2.5 рази для випадків використання 6 та 7 дескрипторів. Модель XGB, в порівнянні з моделями RF та GB, має схожі значення MSE для випадків використання 6 та 7 дескрипторів, однак трохи відстає від RF та GB для випадків використання 4 та 5 дескрипторів. Щодо моделі SVR то збільшення кількості дескрипторів зменшує помилку MSE, однак використання PCA або не впливає на прогностичні можливості мережі, або і зовсім зменшує їх.

Модель DNN також є лідером з ефективності в метриці MRE серед усіх моделей МН. Як і для освітлення АМ 1.5 для неї спостерігаються найменші значення MRE, проте зі збільшенням кількості дескрипторів точність моделі зменшується, якщо розглядати випадок відсутності PCA. При використанні PCA як і для освітлення AM 1.5 спостерігається значне погіршення результатів для випадків використання 4 та 5 дескрипторів, та покращення результатів для випадків використання 6 та 7 дескрипторів. Якщо при освітленні АМ 1.5 показники MRE для RF та GB було схожі, то для випадку освітлення на довжині хвилі 940 нм так не можна сказати: для випадку використання 4 та 5 дескрипторів модель RF має гірші показники MRE ніж GB на ~35% та ~80% відповідно, при подальшому збільшенні кількості дескрипторів ця різниця зменшується. Використання PCA значно покращує прогностичні можливості як RF та GB для усіх варіацій наборів дескрипторів крім випадку використання 7 дескрипторів, де для обох мереж спостерігається збільшення помилки в ~2 рази. Результати для моделі XGB також відрізняються від тих, що були отримані для освітлення AM 1.5: якщо розглядати випадки без використання PCA то для усіх наборів дескрипторів спостерігаються значно гірші результати. При використанні PCA значення метрик MRE схожі до тих що були для освітлення АМ 1.5, однак для випадку використання 7 дескрипторів наявність PCA ніяк не повпливало на результат. Результати для моделі SVR відрізняються від тих, що були для освітлення AM 1.5: тепер для випадків використання 6 та 7 дескрипторів не спостерігається зменшення MRE в 4 рази, відносно наборів з 4 та 5 дескрипторами, в той самий час спостерігається монотонне зменшення похибки MRE при збільшенні кількості дескрипторів на вході мережі.

Коефіцієнти детермінації R2 для освітлення 940 нм сильно відрізняються від тих, що були отримані для освітлення АМ 1.5. Модель DNN все ще демонструє найбільшу ефективність в передбачення серед усіх моделей МН і досягає значень R2 = 0.965, однак з іншої сторони модель XGB демонструє найгірші серед усіх моделей коефіцієнти детермінації, особливо для випадків використання 4, 5 та 6 дескрипторів. Використання PCA як і для освітлення АМ 1.5 значно покращує показники R2 для усіх моделей МН крім SVR.

Як висновок, моделі DNN показали найкращі результати серед усіх досліджених підходів. Метод PCA мав позитивний вплив на продуктивність моделей RF, GB і XGB, але був менш ефективним для DNN, а у випадку SVR його застосування часто погіршувало результати. Для спектра AM 1.5 і 940 нм спостерігаються загальні тенденції, хоча вплив PCA на точність залежить від конкретної моделі та кількості дескрипторів. DNN залишається найнадійнішою та найефективнішою моделлю для прогнозування.

**Fe-varied**

Цей набір має вирішальне значення для практичного застосування. Він максимально наближений до реальної ситуації, оскільки концентрація заліза - один з основних чинників, що впливають на продуктивність СЕ. Результати прогностичної можливості на цьому наборі демонструють наскільки добре модель розпізнає негативний вплив заліза й адаптується до різних рівнів домішки, що має безпосереднє значення для промислового застосування.

*AM 1.5*

Модель DNN демонструє найменші помилки MSE серед усіх моделей МН, особливо для випадків використання 6 та 7 дескрипторів. Використання PCA значно погіршує прогностичні можливості моделі для всіх наборів вхідних параметрів крім випадку з 6 дескрипторами, де MSE зменшується в ~3.5 рази після використання PCA. На другому місці за ефективністю на цьому тестовому наборі даних знаходиться модель XGB, яка демонструє схожі показники MSE, що і модель DNN, проте для цієї моделі вибір PCA для випадку використання 6 дескрипторів не може бути виправданим, наявність PCA як і для моделі DNN погіршує прогностичні можливості мережі для більшості наборів дескрипторів. RF і GB, в свою чергу, демонструють співставні результати MSE на наборах з 4, 6 та 7 дескрипторів. Використання PCA для цих моделей є виправданим тільки для випадків використання наборів з 4 та 7 дескрипторів, для наборів з 5 та 6 дескрипторів після використання PCA спостерігається помітне зменшення ефективності моделей на 30% та 40% для RF та на 70% та 50% для GB. Майже на порядок гірші результати отримала модель SVR в порівнянні з іншими моделями на всіх вибірках даних, в черговий раз продемонструвавши свою неспроможність знаходити кореляції в даних.

Схожа ситуація спостерігається для метрики MRE. Модель DNN демонструє мінімальні помилки для випадків використання 5, 6 та 7 дескрипторів на вході мережі без використання PCA; значення MRE знаходяться в околі 12% для наборів з 5 та 6 дескрипторів та досягають мінімуму в ~3% для набору з 7 дескрипторів. Використання PCA для DNN як в випадку метрики MSE тільки погіршує прогностичну спроможність мережі на більшості наборів дескрипторів. Модель XGB має схожі результати помилок MRE, однак на відміну від DNN має стабільне значення MRE в 7% для наборів з 6 та 7 дескрипторів. Використання PCA для моделі XGB також не покращує ефективність мережі, а навпаки в більшості випадків погіршує прогностичну здатність. Щодо моделей RF та GB після використання PCA вони мають схожі MRE для всіх наборів дескрипторів, максимальна відмінність в ~30% спостерігається для набору з 5 дескрипторів. Щодо випадків без використання PCA, то їх MRE сильно відрізняються для наборів з 4 та 5 дескрипторами, та співставні для наборів з 6 та 7 дескрипторами. На відміну від RF модель GB має тенденцію до зменшення MRE при збільшенні кількості дескрипторів. Модель SVR для наборів з 4 та 5 дескрипторами демонструє великі помилки MRE, які зменшуються на ~70% зі збільшенням кількості дескрипторів до 6, 7.

Результати тестування представленні через коефіцієнт детермінації демонструють схожі показники R2 для моделей RF, GB та DNN. Для наборів з 4 та 5 дескрипторами найефективніше показала себе модель GB, а для наборів з 6 та 7 дескрипторами – модель DNN, досягаючи значень R2 ~ 0.998, в свою чергу модель RF займає проміжне місце. Модель XGB випереджає моделі RF та GB на наборах з 4 та 5 дескрипторами, проте дещо відстає в порівнянні з DNN на великих наборах даних. SVR демонструє стабільно низькі показники R2 в околі ~0.5.

*940 нм*

Для освітлення довжиною хвилі в 940 нм вперше моделі DNN не є найбільш ефективними серед усіх моделей МН. Найменші помилки MSE спостерігаються тепер для моделей RF та GB. Для випадків використання 4, 5 та 6 дескрипторів помилки MRSE становлять ~(1.2 – 3), коли для моделей DNN на цих наборах MSE >3. Використання PCA для моделей RF та GB на цих наборах майже не впливає на прогностичну здатність моделей, а для випадку використання 7 дескрипторів так і зовсім збільшує помилку в ~2 рази. Схожа тенденція з використанням PCA спостерігається для DNN: для наборів з 4 та 6 дескрипторів результати MSE погіршуються на ~(30-35)%, а для наборів з 5 та 7 дескрипторів покращуються на ~20% після використання PCA. Модель XGB має схожі до моделі DNN помилки MSE після використання PCA, але при цьому набагато менші MSE для випадків коли PCA не використовується. Моделі SVR очікувано демонструють високі показники MSE, що може свідчити про можливо перенавчання моделей на тренувальному наборі даних.

Щодо оцінки MRE на тестовому наборі, то тут DNN також втрачає перші позиції. Найменші показники MRE спостерігаються для моделей GB і відносяться до наборів з 4 та 5 дескрипторами; для випадків використання PCA мова йде про ~6%, для випадків без використання PCA ~(7-7.5)%, при збільшенні кількості дескрипторів помилка MRE починає зростати. Моделі RF та XGB мають схожі значення MRE, однак у випадках, коли використовується метод PCA моделі XGB демонструють гірші результати ніж моделі RF. Якщо ж порівнювати показники MRE без використання PCA, то для всіх наборів дескрипторів XGB спостерігається зворотна ситуація: моделі XGB краще пройшли тести ніж моделі RF. Моделі DNN схожі на моделі XGB тим, що використання методу PCA збільшує помилку MRE для всіх наборів дескрипторів. Моделі SVR очікувано мають найгірші показники MRE, проте для них спостерігається тенденція до зменшення величини помилки при збільшенні кількості дескрипторів.

Щодо оцінки коефіцієнтів детермінації, то для всіх наборів дескрипторів найбільші показники R2 спостерігаються для моделей RF, GB та XGB, причому в більшості з випадків, враховуючи як наявність так і відсутність впливу PCA, ці показники приблизно однакові. Дещо гірші показники R2 спостерігаються для моделей DNN, проте вони все ще співставні з тими, що були отримані для RF, GB та XGB. Коефіцієнти детермінації для моделей SVR систематично знаходяться в околі ~0.5 і тим самим підтверджують в черговий раз неспроможність натренованих моделей прогнозувати концентрацію заліза в СЕ.

Підкреслюючи загальні тенденції, можна зробити наступні висновки: на великих наборах дескрипторів та для освітлення AM 1.5 моделі DNN демонструють найбільші ефективність в передбаченнях концентрацій заліза в СЕ. Моделі RF та GB є оптимальними для прогнозування у випадку освітлення з довжиною хвилі в 940 нм, особливо для випадків використання малої кількості дескрипторів на вході мереж. Використання PCA часто погіршує прогностичні властивості моделей. Модель SVR виявилася неспроможною ефективно прогнозувати концентрацію заліза у всіх сценаріях. Такі висновки підкреслюють важливість вибору оптимальної моделі та попередньої обробки даних для точного прогнозування концентрацій заліза в кремнієвих СЕ.

**T-varied**

Цей набір даних корисний тим, що оцінює стійкість моделей до варіацій у температурі, що особливо важливо для СЕ, оскільки їхня ефективність може значно залежати від температури та впливати на швидкість деградації матеріалу. Тестування на таких даних допомагає зрозуміти, чи зможе модель правильно передбачати результати в різних температурних умовах на практиці.

*AM 1.5*

Моделі DNN мають найменші показники MSE серед усіх моделей МН; особливо це помітно для сценарію з використанням 7 дескрипторів, де значення помилки становить ~(1-1.7). З іншої сторони моделі DNN зустрічаються з певними труднощами в прогнозуванні концентрацій заліза для сценаріїв з використанням 4 та 5 дескрипторів. Вплив PCA для таких випадків призводить до збільшення помилки MSE на 30% та 150%, відповідно. В той самий час моделі RF, GB та XGB демонструють схожі помилки MSE для сценаріїв з використанням 4, 6 та 7 дескрипторів. Серед особливостей треба також підкреслити те, що для моделей RF, GB та XGB спостерігається погіршення показників MSE після використання PCA для сценаріїв з 5 та 6 дескрипторами, при цьому для випадку використання 7 дескрипторів спостерігається зворотна тенденція до зменшення MSE після використання методу PCA в ~(3-4) рази. Моделі SVR знову демонструють свою неспроможність до передбачень, хоча і зберігають тенденцію до зменшення помилки при збільшенні кількості дескрипторів, якщо говорити про сценарії де не використовується метод PCA.

Розглядаючи результати оцінки MRE на тестовому наборі T-varied можна прийти до висновку, що моделі DNN зустрічаються з труднощами в прогнозуванні на наборах з 4 та 5 дескрипторами, особливо якщо мова йде про сценарії з використанням методу PCA, хоча у випадку з 4 дескрипторами збільшення помилки більше ніж на порядок можна вважати звичайним промахом. Більше того, використання PCA для більшості сценаріїв призводить до значного збільшення показників MRE. Аналогічно до тенденції яка спостерігалася для MSE, моделі RF, GB та XGB мають майже однакові показники MRE для всіх варіацій кількостей дескрипторів за відсутності впливу методу PCA. Наявність PCA для цих моделей суттєво збільшує показники MRE, особливо для сценаріїв з 5 дескрипторами на вході моделей.

Щодо результатів по коефіцієнтам детермінації треба підкреслити переважання моделей DNN над усіма іншими моделями, особливо для випадків використання 6 та 7 дескрипторів, де значення коефіцієнта R2 сягає ~0.977. Моделі RF, GB та XGB демонструють дуже схожі показники для усіх варіацій набору дескрипторів та для обох сценаріїв з використанням або не використанням PCA. Щодо PCA, то явного впливу на результати метод не має. За відсутності PCA, тенденцію до збільшення R2 при збільшенні кількості дескрипторів зберігають тільки GB та XGB, модель RF має прогалину в тенденції на сценарії з використанням 5 дескрипторів.

*940 нм*

Для освітлення на довжині хвилі в 940 нм тенденція до лідерства DNN по всім сценаріям зникає: моделі DNN все ще мають найнижчі показники MSE, однак це спостерігається тільки для набору з 7 дескрипторів. Для наборів з 4 та 5 дескрипторами показники MSE майже не відрізняються від помилок для моделей RF, GB та XGB, а для набору з 6 дескрипторами так і зовсім DNN відстає від цих моделей. Для всіх 4 моделей МН використання PCA загалом зменшує прогностичну спроможність та збільшує помилку MSE, особливо для моделей RF, GB та XGB для сценарії з використанням 6 дескрипторів, де вплив PCA збільшує MSE в ~(2.5-3) рази. Модель SVR систематично продовжує демонструвати неспроможність до знаходження кореляцій в даних, хоча і зберігається певна тенденція до зменшення помилки при збільшенні кількості дескрипторів.

Показники MRE для моделей DNN значно кращі ніж в інших моделях МН, якщо ми говоримо про сценарії з використанням PCA. Якщо ж ми говоримо про сценарії без використання PCA, то моделі RF, GB та XGB демонструють менші помилки MRE ніж моделі DNN, в особливості модель XGB, яка для наборів з 4, 5 та 6 дескрипторів перевершує не тільки показники для моделей DNN, а й для моделей RF та GB, маючи найнижчу помилку серед усього тестового масиву результатів в ~10.8%. Використання PCA для моделей RF, GB та XGB значно збільшує помилку в прогнозуваннях, для деяких сценаріїв помилка може збільшитися на порядки. Моделі SVR зберігають тенденцію до зменшення помилки при збільшенні кількості дескрипторів, як у випадках з використанням PCA так і у випадках без використання PCA, при цьому сильно відстаючи від інших моделей в прогностичних можливостях.

Моделі DNN водночас мають високі показники коефіцієнтів R2 для більшості сценаріїв, в той час як моделі RF, GB та XGB мають схожі показники R2. Тенденцію до монотонного збільшення показника R2 при збільшенні кількості дескрипторів має тільки моделі XGB, хоча в межах похибки така тенденція притаманна усім моделям МН, крім SVR.

Підкреслюючи загальні тенденції, можна зробити наступні висновки: моделі DNN мають найкращі результати для великих наборів дескрипторів, але зазнають труднощів із малими наборами (4-5 дескрипторів), особливо при використанні PCA. PCA у більшості випадків знижує продуктивність моделей, особливо для малих наборів дескрипторів, за винятком сценаріїв із 7 дескрипторами для деяких моделей (наприклад, RF, GB, XGB). Моделі XGB показують стабільну продуктивність, особливо за метриками MRE і R², навіть у порівнянні з DNN у сценаріях без PCA. SVR демонструє найгірші результати в усіх сценаріях.