

Nomad2018 Predicting Transparent Conductors

Pranjal Vijay

January 17, 2018

```
library(caret)
```

```
## Loading required package: lattice
```

```
## Loading required package: ggplot2
```

```
library(ggplot2)  
library(dplyr)
```

```
##  
## Attaching package: 'dplyr'
```

```
## The following objects are masked from 'package:stats':  
##  
##   filter, lag
```

```
## The following objects are masked from 'package:base':  
##  
##   intersect, setdiff, setequal, union
```

```
library(randomForest)
```

```
## randomForest 4.6-12
```

```
## Type rfNews() to see new features/changes/bug fixes.
```

```
##  
## Attaching package: 'randomForest'
```

```
## The following object is masked from 'package:dplyr':  
##  
##   combine
```

```
## The following object is masked from 'package:ggplot2':
##
##     margin
```

```
getwd()
```

```
## [1] "C:/Users/ddddd/Comptitions/Kaggle/Nomad2018 Predicting"
```

```
Training_Data<-read.csv("C:/Users/ddddd/Comptitions/Kaggle/Nomad2018 Predicting/train.csv", stringsAsFactors = F)
Test_Data<-read.csv("C:/Users/ddddd/Comptitions/Kaggle/Nomad2018 Predicting/test.csv", stringsAsFactors = F)
```

```
sapply(Training_Data, function(x) {sum(is.na(x))})
```

```
##              id              spacegroup
##              0              0
## number_of_total_atoms percent_atom_al
##              0              0
##      percent_atom_ga      percent_atom_in
##              0              0
## lattice_vector_1_ang lattice_vector_2_ang
##              0              0
## lattice_vector_3_ang lattice_angle_alpha_degree
##              0              0
## lattice_angle_beta_degree lattice_angle_gamma_degree
##              0              0
## formation_energy_ev_natom      bandgap_energy_ev
##              0              0
```

```
sapply(Test_Data, function(x) {sum(is.na(x))})
```

```
##              id              spacegroup
##              0              0
## number_of_total_atoms percent_atom_al
##              0              0
##      percent_atom_ga      percent_atom_in
##              0              0
## lattice_vector_1_ang lattice_vector_2_ang
##              0              0
## lattice_vector_3_ang lattice_angle_alpha_degree
##              0              0
## lattice_angle_beta_degree lattice_angle_gamma_degree
##              0              0
```

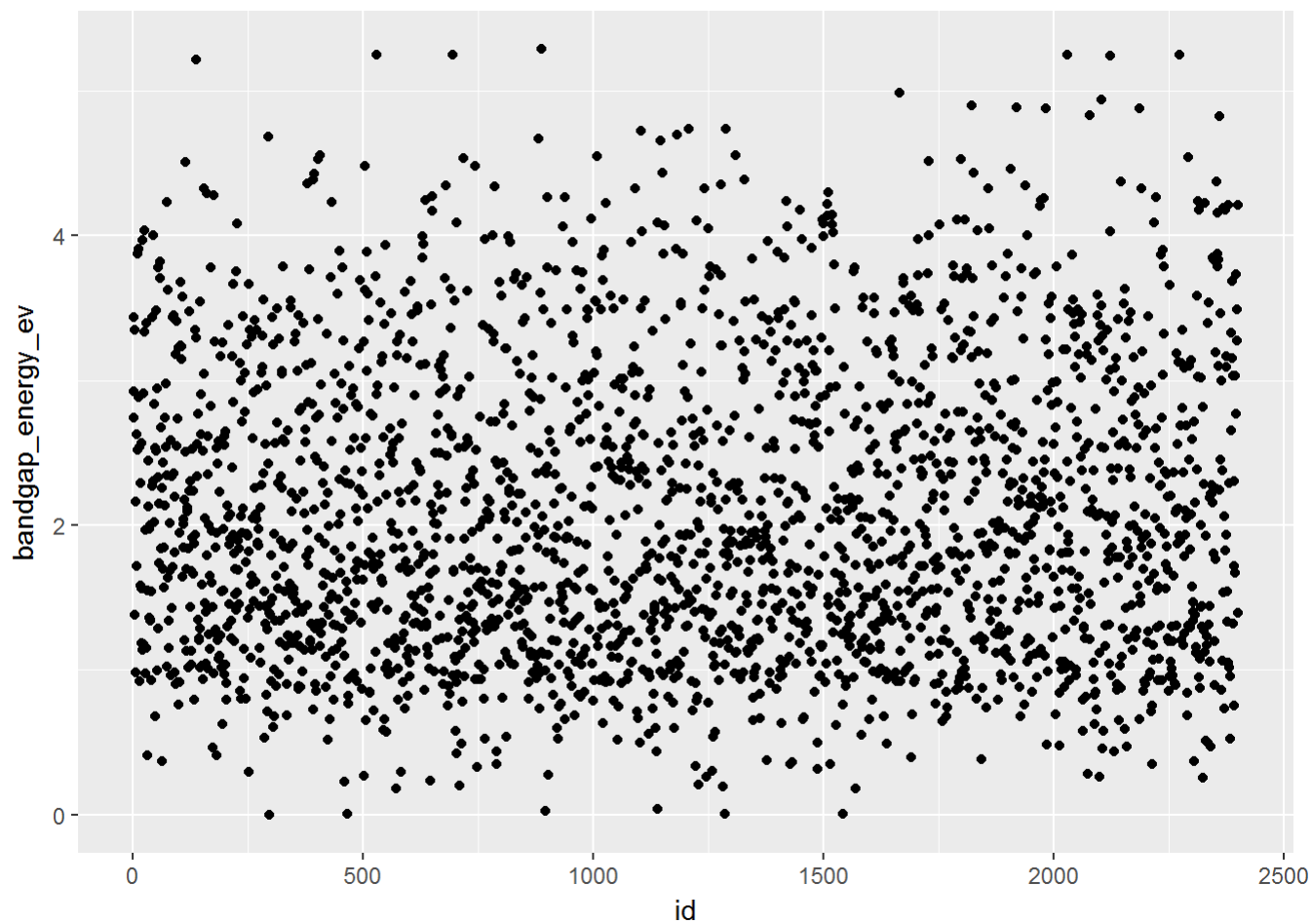
```
dim(Training_Data)
```

```
## [1] 2400 14
```

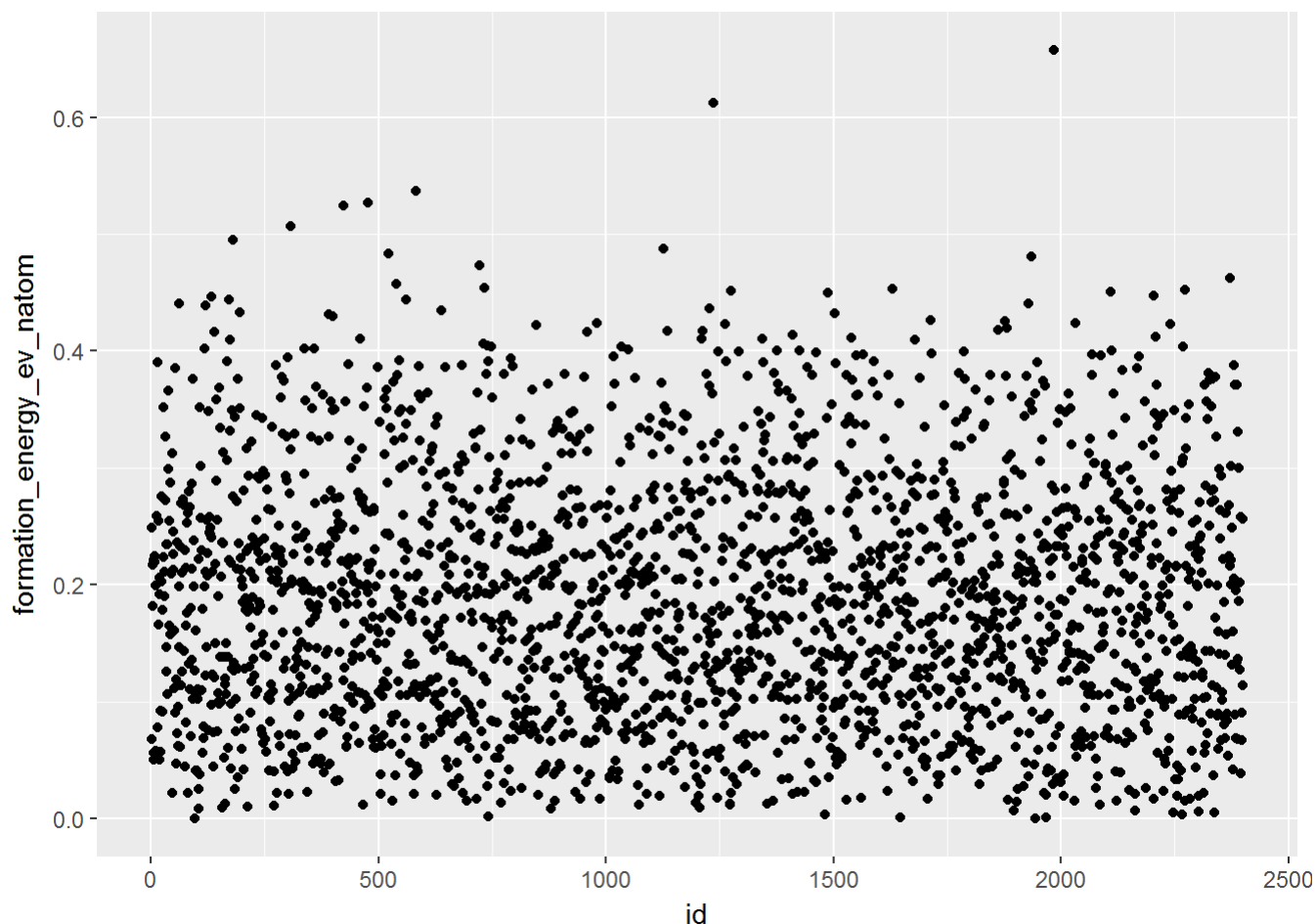
```
dim(Test_Data)
```

```
## [1] 600 12
```

```
qplot(id, bandgap_energy_ev, data=Training_Data)
```



```
qplot(id, formation_energy_ev_natom, data=Training_Data)
```

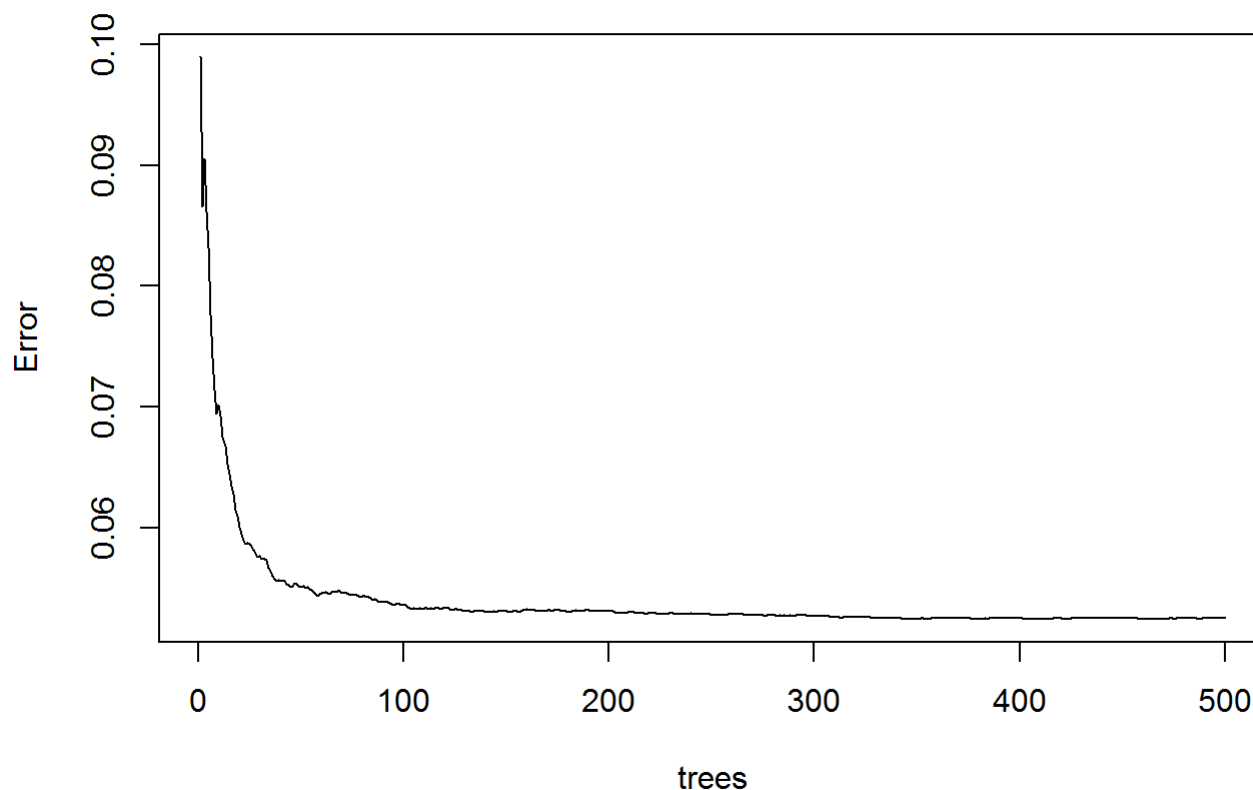


```
bandgap_energy_Model <- randomForest(
  bandgap_energy_ev ~ id + spacegroup + number_of_total_atoms + percent_atom_al + percent_
  atom_ga + percent_atom_in + lattice_vector_1_ang + lattice_vector_2_ang + lattice_vector_3_ang + la
  ttice_angle_alpha_degree + lattice_angle_beta_degree + lattice_angle_gamma_degree , data=Traini
  ng_Data, method="rf")
bandgap_energy_Model
```

```
##
## Call:
## randomForest(formula = bandgap_energy_ev ~ id + spacegroup + number_of_total_atoms + pe
  rcent_atom_al + percent_atom_ga + percent_atom_in + lattice_vector_1_ang + lattice_vector_2
  _ang + lattice_vector_3_ang + lattice_angle_alpha_degree + lattice_angle_beta_degree +
  lattice_angle_gamma_degree, data = Training_Data, method = "rf")
##           Type of random forest: regression
##           Number of trees: 500
## No. of variables tried at each split: 4
##
##           Mean of squared residuals: 0.05254201
##           % Var explained: 94.81
```

```
plot(bandgap_energy_Model)
```

bandgap_energy_Model

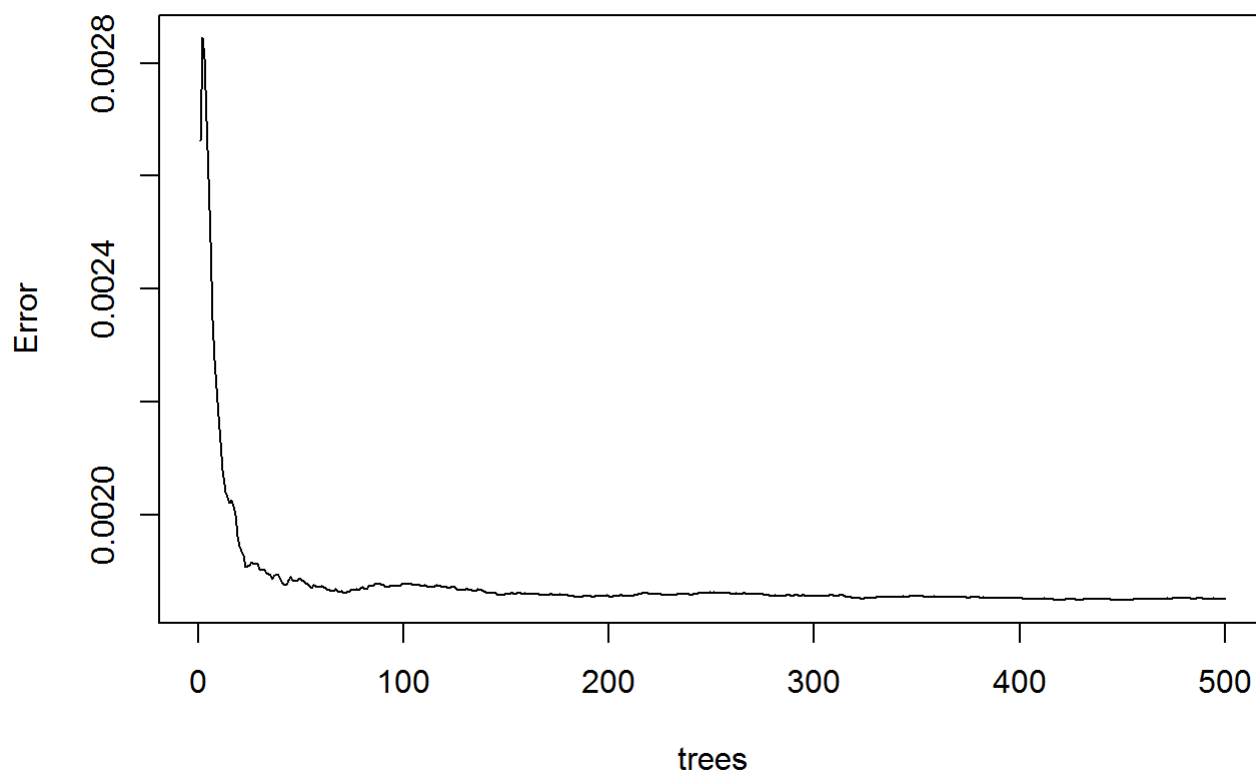


```
formation_energy_Model <- randomForest(
  formation_energy_ev_natom ~ id +spacegroup+number_of_total_atoms+percent_atom_al +
  percent_atom_ga+percent_atom_in+lattice_vector_1_ang+lattice_vector_2_ang +      lattice_vector_
  3_ang+lattice_angle_alpha_degree + lattice_angle_beta_degree+ lattice_angle_gamma_degree      ,dat
  a=Training_Data,method="rf")
formation_energy_Model
```

```
##
## Call:
## randomForest(formula = formation_energy_ev_natom ~ id + spacegroup +      number_of_total_at
oms + percent_atom_al + percent_atom_ga +      percent_atom_in + lattice_vector_1_ang + lattice_
vector_2_ang +      lattice_vector_3_ang + lattice_angle_alpha_degree + lattice_angle_beta_degre
e +      lattice_angle_gamma_degree, data = Training_Data, method = "rf")
##
##           Type of random forest: regression
##           Number of trees: 500
## No. of variables tried at each split: 4
##
##           Mean of squared residuals: 0.001851263
##           % Var explained: 82.91
```

```
plot(formation_energy_Model)
```

formation_energy_Model



```
formation_Prediction <- predict(formation_energy_Model,Test_Data)
formation_Prediction
```

##	1	2	3	4	5	6
##	0.20686944	0.06692681	0.14878993	0.02896000	0.13886937	0.07974698
##	7	8	9	10	11	12
##	0.06891861	0.12736372	0.06593607	0.24718274	0.17888300	0.11102272
##	13	14	15	16	17	18
##	0.35287595	0.16535027	0.06088598	0.26178204	0.20206378	0.20754770
##	19	20	21	22	23	24
##	0.36665548	0.20924179	0.08723339	0.15609129	0.17967583	0.17565985
##	25	26	27	28	29	30
##	0.02964940	0.15118089	0.25988831	0.21713677	0.11885526	0.22154436
##	31	32	33	34	35	36
##	0.25681132	0.16596002	0.11690264	0.16431705	0.03987980	0.21879816
##	37	38	39	40	41	42
##	0.15103763	0.15563004	0.25974419	0.10539073	0.05705959	0.15604781
##	43	44	45	46	47	48
##	0.05703799	0.19637730	0.31439174	0.03216273	0.19248868	0.25376322
##	49	50	51	52	53	54
##	0.21662997	0.12182043	0.18451504	0.09372564	0.23927854	0.25515224
##	55	56	57	58	59	60
##	0.13501133	0.29291804	0.20715000	0.27817720	0.21878272	0.13023771
##	61	62	63	64	65	66
##	0.27331910	0.17791402	0.32621003	0.22591017	0.38128229	0.07356228
##	67	68	69	70	71	72
##	0.06925336	0.21311438	0.22647863	0.27296772	0.06339188	0.10632080
##	73	74	75	76	77	78
##	0.05462874	0.12581318	0.29083088	0.26822528	0.34131346	0.24582170
##	79	80	81	82	83	84
##	0.17674544	0.26448439	0.10520944	0.06949266	0.25825485	0.07906469
##	85	86	87	88	89	90
##	0.10520944	0.18479477	0.04576179	0.04604945	0.09844441	0.35409316
##	91	92	93	94	95	96
##	0.11334817	0.26663577	0.21883108	0.01421162	0.06939275	0.33996392
##	97	98	99	100	101	102
##	0.25716820	0.01590302	0.07834164	0.32989273	0.18040105	0.03249796
##	103	104	105	106	107	108
##	0.23127853	0.35866373	0.24074416	0.09845061	0.10517590	0.22030907
##	109	110	111	112	113	114
##	0.19536368	0.16256827	0.31074160	0.07252741	0.20541810	0.37451385
##	115	116	117	118	119	120
##	0.36314704	0.22720843	0.20120299	0.26545676	0.21883475	0.16713064
##	121	122	123	124	125	126
##	0.25679881	0.16146792	0.04012386	0.30469978	0.16234367	0.11304912
##	127	128	129	130	131	132
##	0.08403390	0.33906052	0.36707026	0.25939418	0.11237399	0.31373121
##	133	134	135	136	137	138
##	0.06947438	0.16508135	0.15805444	0.19410922	0.19111725	0.26570485
##	139	140	141	142	143	144
##	0.15480770	0.19304160	0.15499444	0.19482332	0.23253768	0.06124034
##	145	146	147	148	149	150
##	0.40646535	0.05743800	0.17575943	0.17713070	0.25282628	0.16626977
##	151	152	153	154	155	156
##	0.20060628	0.06308624	0.09907640	0.22295590	0.11883213	0.03531207
##	157	158	159	160	161	162

##	0.13129480	0.03124345	0.11325767	0.14332887	0.19682203	0.40783208
##	163	164	165	166	167	168
##	0.04390699	0.31811289	0.31422714	0.33832481	0.29111377	0.11557909
##	169	170	171	172	173	174
##	0.25243941	0.22722036	0.15864600	0.22507840	0.14387036	0.24995619
##	175	176	177	178	179	180
##	0.10474627	0.16298689	0.39917350	0.36876433	0.23414733	0.15238197
##	181	182	183	184	185	186
##	0.27883537	0.05789804	0.23276989	0.27457376	0.16746907	0.36024288
##	187	188	189	190	191	192
##	0.20948729	0.14345714	0.27387597	0.17875941	0.21859078	0.03261646
##	193	194	195	196	197	198
##	0.19876692	0.17441297	0.33679330	0.06112553	0.13119809	0.24056817
##	199	200	201	202	203	204
##	0.24583840	0.15153070	0.16847358	0.02238028	0.33819099	0.18467525
##	205	206	207	208	209	210
##	0.16342165	0.13701295	0.10852215	0.32623223	0.33478001	0.21563046
##	211	212	213	214	215	216
##	0.20592829	0.30689801	0.25501095	0.21262804	0.13550658	0.08210538
##	217	218	219	220	221	222
##	0.16428530	0.26548471	0.26161985	0.04919700	0.16736133	0.21430785
##	223	224	225	226	227	228
##	0.28125260	0.06951829	0.02912494	0.39328871	0.27586216	0.37856677
##	229	230	231	232	233	234
##	0.22527618	0.22500730	0.20527131	0.03408828	0.07473460	0.23833113
##	235	236	237	238	239	240
##	0.09878647	0.29966215	0.02000969	0.19322739	0.33018100	0.08685383
##	241	242	243	244	245	246
##	0.25353601	0.17528683	0.12472643	0.01631861	0.16283395	0.18695441
##	247	248	249	250	251	252
##	0.32937800	0.31179993	0.17280147	0.19087186	0.05540219	0.10777629
##	253	254	255	256	257	258
##	0.26205261	0.33951768	0.35137098	0.04417893	0.10024435	0.16891300
##	259	260	261	262	263	264
##	0.31962821	0.22184986	0.10703927	0.02253662	0.07171840	0.34178567
##	265	266	267	268	269	270
##	0.14503559	0.18846886	0.37444926	0.01873709	0.06766943	0.20374352
##	271	272	273	274	275	276
##	0.19975372	0.35020437	0.28652879	0.31753470	0.26431721	0.16134186
##	277	278	279	280	281	282
##	0.10388140	0.15479311	0.14609911	0.10674276	0.03174539	0.07543261
##	283	284	285	286	287	288
##	0.05001425	0.35199147	0.17836290	0.22601602	0.13606699	0.03956909
##	289	290	291	292	293	294
##	0.22087166	0.14602477	0.21874558	0.20307445	0.21671677	0.39156295
##	295	296	297	298	299	300
##	0.25870373	0.18056734	0.20920223	0.18270721	0.11437164	0.15523751
##	301	302	303	304	305	306
##	0.11273634	0.13013687	0.10662588	0.13821654	0.30369520	0.04031292
##	307	308	309	310	311	312
##	0.15280821	0.19560478	0.20930034	0.36897466	0.22503258	0.38294464
##	313	314	315	316	317	318
##	0.17263634	0.17849040	0.28134615	0.29080730	0.23969180	0.03185667
##	319	320	321	322	323	324

##	0.24328038	0.06879457	0.12709881	0.22063378	0.09921037	0.34887592
##	325	326	327	328	329	330
##	0.04694006	0.06755107	0.23326385	0.02899689	0.10858096	0.16620306
##	331	332	333	334	335	336
##	0.21557196	0.24132883	0.10625556	0.39194955	0.20148649	0.22507158
##	337	338	339	340	341	342
##	0.33408476	0.03609828	0.08681832	0.23436755	0.21839246	0.10230257
##	343	344	345	346	347	348
##	0.09691341	0.23007119	0.10698707	0.29357195	0.17471578	0.10956017
##	349	350	351	352	353	354
##	0.32318496	0.36896170	0.13976049	0.23853904	0.19990560	0.08221164
##	355	356	357	358	359	360
##	0.10914056	0.08663792	0.25020198	0.20730292	0.13346185	0.05813438
##	361	362	363	364	365	366
##	0.37241620	0.11018568	0.22974000	0.10814872	0.22963963	0.27545060
##	367	368	369	370	371	372
##	0.30125315	0.11020460	0.01432217	0.13744044	0.33965781	0.14442604
##	373	374	375	376	377	378
##	0.16706011	0.10355505	0.18175044	0.19273511	0.01867690	0.27434021
##	379	380	381	382	383	384
##	0.13235204	0.06366774	0.23424232	0.20220114	0.07270545	0.34526159
##	385	386	387	388	389	390
##	0.17144763	0.29946769	0.17398781	0.04935532	0.10585091	0.20118309
##	391	392	393	394	395	396
##	0.21075990	0.33853492	0.29298221	0.02294726	0.32062786	0.25957981
##	397	398	399	400	401	402
##	0.18404550	0.31425707	0.26296389	0.22073596	0.08663792	0.01554929
##	403	404	405	406	407	408
##	0.20277661	0.17323272	0.20055427	0.07910082	0.22278301	0.15148704
##	409	410	411	412	413	414
##	0.15755546	0.06425447	0.20171979	0.02021952	0.17826767	0.06129965
##	415	416	417	418	419	420
##	0.16178293	0.32441980	0.08825496	0.32016309	0.09350517	0.14364394
##	421	422	423	424	425	426
##	0.18194592	0.20013316	0.19283380	0.10553117	0.42836164	0.16071482
##	427	428	429	430	431	432
##	0.02407240	0.13865223	0.24829115	0.17410023	0.16115224	0.18562720
##	433	434	435	436	437	438
##	0.02407240	0.32500897	0.20023577	0.18258643	0.15360582	0.32765233
##	439	440	441	442	443	444
##	0.33039626	0.18169280	0.33388289	0.30997389	0.22801406	0.13443045
##	445	446	447	448	449	450
##	0.09780546	0.23710877	0.02864804	0.23916107	0.31213501	0.15947926
##	451	452	453	454	455	456
##	0.32912415	0.13748193	0.09893432	0.13188886	0.33436946	0.22496824
##	457	458	459	460	461	462
##	0.05936620	0.17042168	0.19133404	0.03329119	0.28238635	0.12059389
##	463	464	465	466	467	468
##	0.13554425	0.09205495	0.16557130	0.04966738	0.36189099	0.29433919
##	469	470	471	472	473	474
##	0.28440788	0.15980078	0.09611647	0.29625712	0.02153575	0.09288572
##	475	476	477	478	479	480
##	0.21532035	0.18625023	0.08093522	0.15035560	0.31092315	0.16638192
##	481	482	483	484	485	486

```
## 0.11116909 0.12728218 0.39900324 0.18875069 0.23886857 0.06405690
##          487          488          489          490          491          492
## 0.18953991 0.16724704 0.17428797 0.23865580 0.39078922 0.20303416
##          493          494          495          496          497          498
## 0.17983680 0.34346039 0.35563161 0.28307677 0.03718241 0.19040813
##          499          500          501          502          503          504
## 0.20108043 0.18565493 0.07300192 0.37606918 0.22572887 0.19992319
##          505          506          507          508          509          510
## 0.35098388 0.23120032 0.33650731 0.32515157 0.14621624 0.05257589
##          511          512          513          514          515          516
## 0.26187493 0.08430019 0.17575751 0.02271346 0.46098757 0.05435310
##          517          518          519          520          521          522
## 0.12168533 0.26609123 0.18971467 0.10315177 0.25012255 0.06433462
##          523          524          525          526          527          528
## 0.18176732 0.08219035 0.24113391 0.15497277 0.19507692 0.03760285
##          529          530          531          532          533          534
## 0.38879519 0.27509658 0.12062044 0.21123052 0.01975654 0.15878149
##          535          536          537          538          539          540
## 0.11807409 0.10781646 0.23542108 0.09193710 0.04959698 0.08284697
##          541          542          543          544          545          546
## 0.30339032 0.26163047 0.13026389 0.38528136 0.40156249 0.25288318
##          547          548          549          550          551          552
## 0.15270199 0.33724220 0.19800757 0.03760285 0.30645449 0.11332149
##          553          554          555          556          557          558
## 0.20269024 0.33929232 0.32808559 0.20305954 0.18286127 0.11068129
##          559          560          561          562          563          564
## 0.23989532 0.23618564 0.10657501 0.23340811 0.24895131 0.10420003
##          565          566          567          568          569          570
## 0.33304240 0.10415243 0.46055830 0.29720884 0.21468858 0.35260935
##          571          572          573          574          575          576
## 0.25458748 0.13732527 0.23583478 0.11200643 0.03958516 0.22344374
##          577          578          579          580          581          582
## 0.31971329 0.24613792 0.18193630 0.16219467 0.06811110 0.09965279
##          583          584          585          586          587          588
## 0.27546719 0.13047546 0.24918749 0.01546620 0.01546620 0.15308685
##          589          590          591          592          593          594
## 0.36377681 0.13473525 0.03591748 0.20924581 0.11881673 0.06425373
##          595          596          597          598          599          600
## 0.14631557 0.03238347 0.23559655 0.17841129 0.23588896 0.21084779
```

```
bandgap_energy_Model <- predict(bandgap_energy_Model,Test_Data)
bandgap_energy_Model
```

##	1	2	3	4	5	6	7
##	1.5650275	3.7155388	3.4980240	3.0548456	1.6066341	4.4703789	3.2333053
##	8	9	10	11	12	13	14
##	2.0921239	2.6251933	2.9586015	1.9764811	2.6885531	0.9491785	1.9840692
##	15	16	17	18	19	20	21
##	0.9763987	3.4045566	1.7711410	2.3285786	1.2887064	1.4014652	1.8596471
##	22	23	24	25	26	27	28
##	2.8733187	1.7019367	3.0604055	2.5559418	0.9442794	1.3848994	1.8679729
##	29	30	31	32	33	34	35
##	1.1750724	1.9267928	1.1028779	1.9274535	1.5601585	1.7561826	0.9155923
##	36	37	38	39	40	41	42
##	0.7858618	3.6141677	1.4309899	1.9900485	3.4031631	3.9259993	3.2063652
##	43	44	45	46	47	48	49
##	3.9259993	1.4598160	0.6945021	3.8059457	1.7853943	1.9092456	3.4136801
##	50	51	52	53	54	55	56
##	1.1950982	2.0852758	1.6121556	1.5156089	2.8722756	2.6977293	0.4360046
##	57	58	59	60	61	62	63
##	2.3027154	2.2301291	0.9526279	2.7875061	0.5036870	1.6439884	1.8149689
##	64	65	66	67	68	69	70
##	3.3330467	1.0159988	2.7793683	3.2351990	2.2051915	3.4067277	1.7296603
##	71	72	73	74	75	76	77
##	2.5227409	3.1053477	2.3357108	1.9844394	1.5768984	2.5627006	1.0679602
##	78	79	80	81	82	83	84
##	2.2942010	2.4037853	1.2563628	3.4051761	3.4421749	1.0570574	1.0158295
##	85	86	87	88	89	90	91
##	3.4051761	3.0328301	3.2619106	2.7141946	4.2816813	1.5187531	4.3922916
##	92	93	94	95	96	97	98
##	0.7626201	2.3291298	2.0851953	3.2351990	1.0352887	2.2482081	1.4545102
##	99	100	101	102	103	104	105
##	2.0212484	0.9536484	1.5073600	3.8094662	2.1908063	1.4183962	1.4491236
##	106	107	108	109	110	111	112
##	4.2816813	4.0361404	2.5766042	2.2485714	0.8167495	0.8621019	3.0068202
##	113	114	115	116	117	118	119
##	2.4062909	2.8449778	2.0342343	2.6407701	1.9623802	2.1327321	2.3293863
##	120	121	122	123	124	125	126
##	2.2353910	2.2212571	1.7637912	0.9154791	0.2030487	1.1982617	3.4448717
##	127	128	129	130	131	132	133
##	2.3730599	2.4527717	1.3057907	1.6268075	3.3743426	0.2840084	3.2351990
##	134	135	136	137	138	139	140
##	1.2936866	2.7310522	0.8309639	0.8406391	2.1323843	1.9368704	2.0986838
##	141	142	143	144	145	146	147
##	2.0269585	3.0909004	3.3415228	0.9884046	1.7219346	4.2805107	1.5532098
##	148	149	150	151	152	153	154
##	2.3356709	2.0550790	1.1368891	1.5616984	3.7079320	4.5367250	3.8194917
##	155	156	157	158	159	160	161
##	1.1749210	2.6475000	2.1252844	5.2001046	4.3967259	1.5082847	2.1159070
##	162	163	164	165	166	167	168
##	1.3921825	3.2692957	0.4714554	0.3161875	0.6914561	1.2925099	2.2599749
##	169	170	171	172	173	174	175
##	1.5002101	1.6571613	1.9111293	3.0775239	1.5859340	0.8560928	3.4057035
##	176	177	178	179	180	181	182
##	1.9342684	1.2616115	0.9237060	2.6389776	1.6334826	1.3727437	3.9259993
##	183	184	185	186	187	188	189

```

## 3.3397065 1.0467959 1.6374801 1.4632734 3.6246395 1.5082847 0.5143498
##      190      191      192      193      194      195      196
## 1.2217496 1.7610500 3.8094662 2.8574957 2.1535211 1.1736535 0.9847329
##      197      198      199      200      201      202      203
## 1.3001611 2.2898408 2.2950205 1.3668638 1.4406030 1.2972610 0.9735678
##      204      205      206      207      208      209      210
## 2.2103755 1.4917874 1.1186110 0.9561993 0.9787607 2.3507452 2.5115080
##      211      212      213      214      215      216      217
## 2.4884631 1.1654500 1.4085566 0.6687013 3.2205420 1.0362802 1.9566738
##      218      219      220      221      222      223      224
## 1.1122335 3.6183813 2.8311241 1.7326188 1.5986403 2.6404207 3.4439422
##      225      226      227      228      229      230      231
## 4.8019408 1.2728331 1.7496499 1.2065647 1.9377520 2.3502281 1.2663985
##      232      233      234      235      236      237      238
## 2.9689540 4.2235189 3.1400820 4.2788918 2.1708564 2.3198354 2.5299290
##      239      240      241      242      243      244      245
## 0.9267580 3.8987374 1.9359854 0.8602648 4.2014577 5.2363683 1.8337293
##      246      247      248      249      250      251      252
## 2.8950597 0.7728509 1.4076279 1.2754903 2.8078105 2.3356852 1.1169397
##      253      254      255      256      257      258      259
## 1.6829904 1.0863864 0.8858886 3.2697071 1.0789898 1.7592762 0.3488506
##      260      261      262      263      264      265      266
## 2.4564642 3.1040008 1.7387463 2.7503066 0.9343403 1.5324275 2.8728106
##      267      268      269      270      271      272      273
## 2.8469463 3.2517674 3.4557461 3.1150249 2.1994935 1.1839018 2.7074734
##      274      275      276      277      278      279      280
## 0.8749333 1.8352041 1.3938355 1.0345150 1.6263124 3.5096547 2.0270614
##      281      282      283      284      285      286      287
## 3.0578801 2.5466571 4.5857964 0.8874851 1.5491743 0.8404038 2.8112378
##      288      289      290      291      292      293      294
## 4.4656511 2.5645769 2.9898174 3.9626791 2.0482517 3.7236573 1.1560232
##      295      296      297      298      299      300      301
## 2.3328355 1.4463585 1.7052562 2.7436704 3.1097726 2.3134204 3.1600376
##      302      303      304      305      306      307      308
## 1.2625378 1.6624588 2.1900186 0.8936382 0.9137841 1.6342767 1.7042326
##      309      310      311      312      313      314      315
## 3.2253029 1.2035552 2.3479525 0.9863982 1.2251240 1.6806989 1.9067090
##      316      317      318      319      320      321      322
## 1.2921738 0.9165586 4.7386995 0.8822360 3.2367503 1.7780003 1.8621595
##      323      324      325      326      327      328      329
## 3.0790777 1.1204208 2.7125323 1.0036786 2.7453077 4.8019408 3.8410816
##      330      331      332      333      334      335      336
## 1.1370485 2.4005220 2.2900456 3.1033830 2.2285551 1.2823725 1.4565910
##      337      338      339      340      341      342      343
## 1.5989239 2.8941170 1.8522650 1.5173527 2.2050385 1.2969039 2.1527906
##      344      345      346      347      348      349      350
## 0.9199589 3.2514616 3.3035175 2.1861770 1.6792576 1.4113650 1.3394480
##      351      352      353      354      355      356      357
## 1.9227555 1.9559025 0.7335972 1.0363068 2.1760406 2.7959259 1.0697508
##      358      359      360      361      362      363      364
## 2.5705314 2.7841110 3.9265894 1.9971798 2.2890745 1.6170677 3.8441569
##      365      366      367      368      369      370      371
## 1.0052759 2.3632964 1.6077318 2.1464733 1.9654359 1.2359160 1.3826720
##      372      373      374      375      376      377      378

```

```

## 1.5083900 1.6356851 3.4094818 3.2139152 3.7382636 0.9441114 1.3058504
##      379      380      381      382      383      384      385
## 1.3005899 3.6936196 3.4165533 1.8496036 3.0136116 0.8705346 1.2179673
##      386      387      388      389      390      391      392
## 2.1631914 0.6890657 3.9808804 4.0375881 2.2962108 1.4703502 2.6004690
##      393      394      395      396      397      398      399
## 0.8876892 1.2959681 0.5868859 2.3005487 2.3825327 0.3144895 1.3229362
##      400      401      402      403      404      405      406
## 2.4503271 2.7958697 2.2035539 0.8815561 2.1346906 2.4251718 1.0137866
##      407      408      409      410      411      412      413
## 1.9792725 1.1499820 1.4660074 0.9507005 1.0951557 1.8319210 1.2296992
##      414      415      416      417      418      419      420
## 0.9642391 1.4760098 0.4280371 1.0015343 0.4484362 4.2683204 0.9726781
##      421      422      423      424      425      426      427
## 2.1207004 1.4468091 3.3341696 4.0373995 1.2577275 2.5073491 0.9331148
##      428      429      430      431      432      433      434
## 2.3076008 1.5020205 2.8443045 1.8527845 2.7163372 0.9331148 1.4080846
##      435      436      437      438      439      440      441
## 2.3551865 3.0328260 1.6915266 1.9012081 0.2483895 2.6684626 0.6913539
##      442      443      444      445      446      447      448
## 0.5515511 3.3239952 1.6104816 2.0689195 2.3686867 4.8019408 2.7302236
##      449      450      451      452      453      454      455
## 0.5692702 2.4588895 1.3313120 1.5775562 1.9033851 1.2122867 0.6410461
##      456      457      458      459      460      461      462
## 2.3539992 1.3587948 2.4437713 1.8543657 2.8714128 0.3688483 1.8268009
##      463      464      465      466      467      468      469
## 2.1656814 1.0395527 3.2903503 0.9428243 0.8558739 1.1586378 1.8520537
##      470      471      472      473      474      475      476
## 1.1957317 2.9781311 1.5061026 3.8261433 1.4640162 2.4997960 1.9170130
##      477      478      479      480      481      482      483
## 3.7356255 0.9228395 2.2011940 1.1364900 2.1245155 1.1406604 1.9873733
##      484      485      486      487      488      489      490
## 1.5422701 1.1498340 1.1226978 1.1765797 2.1109836 1.6108958 2.2996791
##      491      492      493      494      495      496      497
## 1.1749532 2.5591764 1.5701376 0.8732702 1.5601431 0.6596937 1.2598078
##      498      499      500      501      502      503      504
## 2.3214312 2.2970486 1.9185097 0.9744363 1.1584492 2.6430164 0.7325983
##      505      506      507      508      509      510      511
## 1.1942682 1.3278720 1.2462495 0.3495552 1.9448389 0.9644535 1.6346405
##      512      513      514      515      516      517      518
## 2.3812617 2.3366787 1.7388706 1.6833706 2.3338650 1.7029651 2.7354836
##      519      520      521      522      523      524      525
## 0.8404043 3.4236293 2.2551419 0.9509432 2.6680309 1.0375639 1.9197456
##      526      527      528      529      530      531      532
## 3.8630223 2.8585610 4.4787630 1.4767663 1.3022916 1.8265997 1.2994254
##      533      534      535      536      537      538      539
## 2.4419229 1.4683542 2.2184478 1.1170498 0.9405506 0.9987504 4.2471534
##      540      541      542      543      544      545      546
## 2.5101307 2.6138791 1.7037371 3.0290370 1.4332715 1.4377225 2.6508685
##      547      548      549      550      551      552      553
## 3.6291564 1.1861773 2.6194930 4.4787630 1.7846126 1.0498518 2.7695427
##      554      555      556      557      558      559      560
## 0.9345382 1.6671677 2.3423222 2.0135308 2.9606956 0.9406860 2.7309070
##      561      562      563      564      565      566      567

```

```
## 1.0123882 2.3362589 1.9228726 3.4861593 0.5725986 3.3558925 1.6828841
##          568          569          570          571          572          573          574
## 1.5280936 1.5186389 1.5161807 1.3715312 1.1201710 2.7309070 1.7795426
##          575          576          577          578          579          580          581
## 3.2419478 2.3770508 0.4143739 1.1006901 1.3723305 1.3971643 3.4565642
##          582          583          584          585          586          587          588
## 1.0807146 1.4549939 1.2649793 1.0524506 5.2378313 5.2378313 3.5986128
##          589          590          591          592          593          594          595
## 0.7141787 2.1070103 2.8954631 1.4755930 1.0471044 3.6911088 1.7863233
##          596          597          598          599          600
## 1.3440824 0.9478212 0.8115449 2.3101622 2.1868579
```

```
# Data for submission
```

```
Predicted_Outcome <- data.frame(id = 1:600, formation_energy_ev_natom = formation_Prediction, ba
ndgap_energy_ev = bandgap_energy_Model)
colnames(Predicted_Outcome) <- c("id", "formation_energy_ev_natom", "bandgap_energy_ev")
write.csv(Predicted_Outcome, "Predicted_Outcome.csv", row.names = FALSE)
```