

Scenario	UQ Method	$R^2 \uparrow$	$\rho \uparrow$	UER-AUC _{mean} \uparrow	UER-AUC _{max} \uparrow	RLL \uparrow
None	ens	1.00 ± 0.00	0.57 ± 0.12	0.25 ± 0.05	0.69 ± 0.21	0.76 ± 0.04
None	ens mve	0.98 ± 0.01	0.64 ± 0.19	0.30 ± 0.09	0.66 ± 0.11	0.76 ± 0.06
None	mve	0.98 ± 0.01	0.40 ± 0.10	0.19 ± 0.09	0.61 ± 0.21	0.67 ± 0.04
logp ood struct	ens	1.00 ± 0.00	0.48 ± 0.14	0.22 ± 0.04	0.69 ± 0.07	0.48 ± 0.15
logp ood struct	ens mve	0.98 ± 0.02	0.66 ± 0.17	0.30 ± 0.07	0.64 ± 0.08	0.69 ± 0.02
logp ood struct	mve	0.95 ± 0.06	0.53 ± 0.27	0.20 ± 0.13	0.51 ± 0.28	0.44 ± 0.04
logp ood value	ens	0.98 ± 0.01	0.57 ± 0.06	0.69 ± 0.15	0.78 ± 0.10	-2.82 ± 1.74
logp ood value	ens mve	0.98 ± 0.01	0.65 ± 0.05	0.62 ± 0.10	0.71 ± 0.07	-1.22 ± 0.94
logp ood value	mve	0.91 ± 0.12	0.69 ± 0.20	0.64 ± 0.06	0.76 ± 0.08	-3.14 ± 2.71