

Table A. Predictions of neutral diatomic molecule ground-state internuclear separations, continued

Molecules, coordinates					Predicted internuclear separations, continued and absolute errors (Angstroms)							
					Neural networks				Least squares			
					AB		BA		Fixed		Fixed	Weighted
	R_1	C_1	R_2	C_2	order	Error	order	Error	rows	Error	groups	average
VB	4	5	2	13	1.732	0.072	1.675	0.061				1.699
VBa	4	5	6	2	3.507	0.057	3.793	0.254				3.521
VBi	4	5	6	15	2.583	0.114	2.494	0.129				2.544
VBr	4	5	4	17	2.428	0.129	2.478	0.129				2.453
VC	4	5	2	14	1.707	0.072	1.678	0.061				1.690
VCa	4	5	4	2	2.813	0.082	2.726	0.082				2.769
VCd	4	5	5	12	2.279	0.096	2.326	0.129				2.296
VCo	4	5	4	9	2.305	0.129	2.210	0.096				2.244
VCr	4	5	4	6	2.321	0.129	2.421	0.129				2.371
VF	4	5	2	17	1.725	0.072	1.693	0.061				1.706
VGa	4	5	4	13	2.270	0.096	2.359	0.129				2.302
VGe	4	5	4	14	2.424	0.129	2.398	0.129				2.411
VHf	4	5	6	4	3.165	0.062	3.314	0.144				3.189
VHg	4	5	6	12	2.636	0.114	2.519	0.114				2.577
VI	4	5	5	17	2.547	0.114	2.601	0.114				2.574
VIn	4	5	5	13	2.286	0.096	2.369	0.129				2.315
VK	4	5	4	1	3.027	0.082	2.957	0.082				2.992
VLa	4	5	6	3	3.330	0.144	3.510	0.057				3.486
VMn	4	5	4	7	2.579	0.114	2.629	0.114				2.604
VN	4	5	2	15	1.648	0.061	1.670	0.061				1.659
VNb	4	5	5	5	2.573	0.114	2.692	0.114				2.632
VPb	4	5	6	14	2.587	0.114	2.496	0.129				2.547
VRe	4	5	6	7	3.183	0.062	3.158	0.062				3.171
VRh	4	5	5	9	2.228	0.096	2.394	0.129				2.287
VRu	4	5	5	8	2.281	0.096	2.318	0.129				2.294
VSb	4	5	5	15	2.237	0.096	2.457	0.129				2.315
VSc	4	5	4	3	2.618	0.114	2.550	0.114				2.584
VSe	4	5	4	16	2.173	0.096	2.359	0.129				2.239
VSn	4	5	5	14	2.277	0.096	2.400	0.129				2.320
VTi	4	5	4	4	2.421	0.129	2.415	0.129				2.418
VTl	4	5	6	13	2.616	0.114	2.504	0.114				2.560
VV	4	5	4	5	2.275	0.096	2.275	0.096				2.275
VZn	4	5	4	12	2.240	0.096	2.305	0.129				2.263
VZr	4	5	5	4	2.834	0.082	2.706	0.082				2.770
WAu	6	6	6	11	5.051	0.167	5.053	0.167				5.052
WBa	6	6	6	2	3.763	0.254	3.750	0.254				3.757
WBi	6	6	6	15	2.894	0.082	2.773	0.082				2.833
WBr	6	6	4	17	2.648	0.114	2.568	0.114				2.608
WCo	6	6	4	9	2.607	0.114	2.498	0.129				2.559
WCs	6	6	6	1	3.858	0.254	4.112	0.096				4.080
WCu	6	6	4	11	2.557	0.114	2.456	0.129				2.513
WF	6	6	2	17	1.820	0.072	1.838	0.072				1.829
WFe	6	6	4	8	2.787	0.082	2.776	0.082				2.782
WGa	6	6	4	13	2.564	0.114	2.471	0.129				2.524
WHf	6	6	6	4	3.567	0.057	3.600	0.057				3.583

Table A. Predictions of neutral diatomic molecule ground-state internuclear separations, continued

Molecules, coordinates					Predicted internuclear separations, continued and absolute errors (Angstroms)									
					Neural networks				Least squares				Weighted average Error	
					AB order	Error	BA order	Error	Fixed rows	Error	Fixed groups	Error		
R_1	C_1	R_2	C_2											
WI	6	6	5	17	2.522	0.114	2.662	0.114				2.592	0.081	
WIn	6	6	5	13	2.497	0.129	2.597	0.114				2.553	0.085	
WK	6	6	4	1	3.761	0.254	3.421	0.144				3.504	0.125	
WLa	6	6	6	3	3.671	0.057	3.568	0.057				3.619	0.040	
WMo	6	6	5	6	2.934	0.082	3.014	0.082				2.974	0.058	
WNb	6	6	5	5	3.176	0.062	3.159	0.062				3.167	0.044	
WNi	6	6	4	10	2.543	0.114	2.466	0.129				2.509	0.085	
WO	6	6	2	16	1.831	0.072	1.746	0.072				1.788	0.051	
WOs	6	6	6	8	3.485	0.144	3.876	0.254				3.580	0.125	
WPd	6	6	5	10	2.545	0.114	2.654	0.114				2.599	0.081	
WPo	6	6	6	16	2.792	0.082	2.633	0.114				2.738	0.067	
WRe	6	6	6	7	3.901	0.096	4.034	0.096				3.967	0.068	
WRh	6	6	5	9	2.523	0.114	2.713	0.082				2.648	0.067	
WSb	6	6	5	15	2.371	0.129	2.545	0.114				2.468	0.085	
WSe	6	6	4	16	2.543	0.114	2.414	0.129				2.486	0.085	
WSn	6	6	5	14	2.468	0.129	2.583	0.114				2.532	0.085	
WTa	6	6	6	5	3.589	0.057	3.710	0.254				3.594	0.056	
WW	6	6	6	6	3.876	0.254	3.876	0.254				3.876	0.180	
YBa	5	3	6	2	4.592	0.284	4.549	0.284				4.571	0.201	
YBr	5	3	4	17	2.654	0.114	2.686	0.114				2.670	0.081	
YC	5	3	2	14	1.888	0.072	1.801	0.072				1.844	0.051	
YCa	5	3	4	2	3.394	0.144	3.258	0.062				3.280	0.057	
YCl	5	3	3	17	2.549	0.114	2.448	0.129				2.504	0.085	
YCr	5	3	4	6	2.727	0.082	2.686	0.114				2.713	0.067	
YCu	5	3	4	11	2.440	0.129	2.626	0.114				2.544	0.085	
YFe	5	3	4	8	2.613	0.114	2.412	0.129				2.524	0.085	
YGa	5	3	4	13	2.677	0.114	2.482	0.129				2.591	0.085	
YHg	5	3	6	12	3.926	0.096	3.748	0.254				3.903	0.090	
YI	5	3	5	17	2.956	0.082	2.797	0.082				2.876	0.058	
YIn	5	3	5	13	2.551	0.114	2.505	0.114				2.528	0.081	
YK	5	3	4	1	3.627	0.057	3.494	0.144				3.609	0.053	
YLa	5	3	6	3	4.657	0.284	4.413	0.096				4.438	0.091	
YMg	5	3	3	2	3.332	0.144	3.361	0.144				3.346	0.102	
YMn	5	3	4	7	2.623	0.114	2.466	0.129				2.554	0.085	
YN	5	3	2	15	1.843	0.072	1.796	0.072				1.820	0.051	
YNa	5	3	3	1	3.566	0.057	3.549	0.057				3.558	0.040	
YNb	5	3	5	5	3.467	0.144	3.271	0.062				3.301	0.057	
YNi	5	3	4	10	2.423	0.129	2.413	0.129				2.418	0.091	
YO	5	3	2	16	1.798	0.072	1.780	0.072				1.789	0.051	
YPd	5	3	5	10	2.596	0.114	2.468	0.129				2.539	0.085	
YRh	5	3	5	9	2.707	0.082	2.523	0.114				2.644	0.067	
YSb	5	3	5	15	2.536	0.114	2.609	0.114				2.572	0.081	
YSc	5	3	4	3	3.184	0.062	3.090	0.082				3.150	0.050	
YSe	5	3	4	16	2.454	0.129	2.528	0.114				2.495	0.085	
YSi	5	3	3	14	2.574	0.114	2.350	0.129				2.475	0.085	

Table A. Predictions of neutral diatomic molecule ground-state internuclear separations, continued

Molecules, coordinates					Predicted internuclear separations, continued and absolute errors (Angstroms)									
					Neural networks				Least squares				Weighted average Error	
					AB order	Error	BA order	Error	Fixed rows	Fixed Error	Fixed groups	Fixed Error		
R_1	C_1	R_2	C_2											
YSn	5	3	5	14	2.509	0.114	2.534	0.114					2.521	0.081
YSr	5	3	5	2	3.856	0.254	3.940	0.096					3.930	0.090
YY	5	3	5	3	3.697	0.057	3.697	0.057					3.697	0.040
YZr	5	3	5	4	3.589	0.057	3.652	0.057					3.621	0.040
ZnAg	4	12	5	11	2.325	0.129	2.401	0.129					2.363	0.091
ZnAl	4	12	3	13	2.312	0.129	2.171	0.096					2.221	0.077
ZnAs	4	12	4	15	2.322	0.129	2.379	0.129					2.350	0.091
ZnAt	4	12	6	17	2.725	0.082	2.735	0.082					2.730	0.058
ZnAu	4	12	6	11	2.470	0.129	2.510	0.114					2.492	0.085
ZnB	4	12	2	13	1.719	0.072	1.654	0.061					1.681	0.047
ZnBe	4	12	2	2	2.293	0.096	2.321	0.129					2.303	0.077
ZnBi	4	12	6	15	2.535	0.114	2.578	0.114					2.556	0.081
ZnBr	4	12	4	17	2.389	0.129	2.448	0.129					2.419	0.091
ZnC	4	12	2	14	1.645	0.061	1.665	0.061					1.655	0.043
ZnCa	4	12	4	2	2.683	0.114	2.865	0.082					2.803	0.067
ZnCd	4	12	5	12	2.361	0.129	2.454	0.129					2.408	0.091
ZnCl	4	12	3	17	2.324	0.129	2.187	0.096					2.235	0.077
ZnCr	4	12	4	6	2.270	0.096	2.177	0.096					2.224	0.068
ZnCu	4	12	4	11	2.348	0.129	2.330	0.129					2.339	0.091
ZnF	4	12	2	17	1.797	0.072	1.673	0.061					1.725	0.047
ZnFe	4	12	4	8	2.262	0.096	2.359	0.129					2.296	0.077
ZnGa	4	12	4	13	2.391	0.129	2.407	0.129					2.399	0.091
ZnGe	4	12	4	14	2.334	0.129	2.385	0.129					2.360	0.091
ZnHg	4	12	6	12	2.487	0.129	2.554	0.114					2.524	0.085
ZnI	4	12	5	17	2.508	0.114	2.597	0.114					2.552	0.081
ZnIn	4	12	5	13	2.387	0.129	2.495	0.129					2.441	0.091
ZnMg	4	12	3	2	2.615	0.114	2.774	0.082					2.719	0.067
ZnN	4	12	2	15	1.589	0.061	1.646	0.061					1.618	0.043
ZnO	4	12	2	16	1.671	0.061	1.608	0.061					1.640	0.043
ZnOs	4	12	6	8	5.037	0.167	5.059	0.167					5.048	0.118
ZnP	4	12	3	15	2.202	0.096	2.158	0.096					2.180	0.068
ZnPb	4	12	6	14	2.427	0.129	2.611	0.114					2.530	0.085
ZnPd	4	12	5	10	2.288	0.096	2.347	0.129					2.309	0.077
ZnPo	4	12	6	16	2.537	0.114	2.571	0.114					2.554	0.081
ZnPt	4	12	6	10	2.619	0.114	2.472	0.129					2.555	0.085
ZnS	4	12	3	16	2.185	0.096	2.100	0.096					2.142	0.068
ZnSb	4	12	5	15	2.370	0.129	2.467	0.129					2.419	0.091
ZnSc	4	12	4	3	2.476	0.129	2.537	0.114					2.511	0.085
ZnSe	4	12	4	16	2.289	0.096	2.329	0.129					2.303	0.077
ZnSi	4	12	3	14	2.273	0.096	2.174	0.096					2.224	0.068
ZnTe	4	12	5	16	2.342	0.129	2.453	0.129					2.398	0.091
ZnTi	4	12	4	4	2.367	0.129	2.333	0.129					2.350	0.091
ZnTl	4	12	6	13	2.502	0.114	2.592	0.114					2.547	0.081
ZnV	4	12	4	5	2.305	0.129	2.240	0.096					2.263	0.077
ZnZn	4	12	4	12	2.377	0.129	2.377	0.129					2.377	0.091

Table A. Predictions of neutral diatomic molecule ground-state internuclear separations, concluded

Molecules, coordinates					Predicted internuclear separations, continued and absolute errors (Angstroms)									
					Neural networks				Least squares				Weighted average Error	
					AB order	Error	BA order	Error	Fixed rows	Error	Fixed groups	Error		
R_1	C_1	R_2	C_2											
ZrAu	5	4	6	11	4.955	0.167	5.056	0.167					5.005	0.118
ZrBa	5	4	6	2	4.550	0.284	4.292	0.096					4.319	0.091
ZrBi	5	4	6	15	2.780	0.082	2.629	0.114					2.729	0.067
ZrBr	5	4	4	17	2.621	0.114	2.574	0.114					2.597	0.081
ZrC	5	4	2	14	1.840	0.072	1.734	0.072					1.787	0.051
ZrCa	5	4	4	2	3.204	0.062	3.126	0.062					3.165	0.044
ZrCr	5	4	4	6	2.610	0.114	2.478	0.129					2.552	0.085
ZrCs	5	4	6	1	4.348	0.096	4.482	0.096					4.415	0.068
ZrF	5	4	2	17	1.807	0.072	1.788	0.072					1.798	0.051
ZrGa	5	4	4	13	2.440	0.129	2.383	0.129					2.412	0.091
ZrGe	5	4	4	14	2.576	0.114	2.435	0.129					2.514	0.085
ZrIn	5	4	5	13	2.285	0.096	2.445	0.129					2.342	0.077
ZrK	5	4	4	1	3.439	0.144	3.358	0.144					3.398	0.102
ZrLa	5	4	6	3	4.223	0.096	4.408	0.096					4.316	0.068
ZrMn	5	4	4	7	2.537	0.114	2.354	0.129					2.456	0.085
ZrN	5	4	2	15	1.784	0.072	1.732	0.072					1.758	0.051
ZrNa	5	4	3	1	3.386	0.144	3.532	0.057					3.512	0.053
ZrNi	5	4	4	10	2.322	0.129	2.324	0.129					2.323	0.091
ZrPd	5	4	5	10	2.416	0.129	2.339	0.129					2.377	0.091
ZrRb	5	4	5	1	3.947	0.096	4.061	0.096					4.004	0.068
ZrRh	5	4	5	9	2.407	0.129	2.369	0.129					2.388	0.091
ZrRu	5	4	5	8	2.427	0.129	2.434	0.129					2.430	0.091
ZrSc	5	4	4	3	2.999	0.082	3.041	0.082					3.020	0.058
ZrSe	5	4	4	16	2.424	0.129	2.424	0.129					2.424	0.091
ZrSn	5	4	5	14	2.252	0.096	2.464	0.129					2.327	0.077
ZrSr	5	4	5	2	3.802	0.254	3.662	0.057					3.669	0.056
ZrTc	5	4	5	7	2.594	0.114	2.533	0.114					2.564	0.081
ZrV	5	4	4	5	2.706	0.082	2.834	0.082					2.770	0.058
ZrY	5	4	5	3	3.652	0.057	3.589	0.057					3.621	0.040
ZrZr	5	4	5	4	3.463	0.144	3.463	0.144					3.463	0.102