GridAtomNN是在原子的区域内划格子，然后根据每个格子周围原子的种类和距离，得到向量，每个格子得到的向量用NN预测，然后得到能量分量，最终所有格子加和得到总的能量

扩展性：每个格子感受一定范围内的原子，如果没有原子就是0，所以可以很大程度上扩展。

也可以不使用加和，而是使用三维卷积：

或者格子划得更细一点儿，每个格子直接检测最近的三种原子的种类，是离散值

如1,1是CHO是123

2,2是CO是130

2，3是C是100

也可以采用通道的方法，每个格点，每个通道检测最近的某种原子，得到其距离与cutoff的差值，如cutoff是6

若

1,1是0.1,0.2和0.3（分别是到最近的C，O，H的距离，为5.9,5.8和5.7）

1,2是0,0,0（周围6个单位没有原子）

也可以不设置cutoff，直接使用这种原子的1/距离的和