ATSC0pe: centered ATS descriptor.

AATS8are: averaged ATS descriptor.

Xc-3d: chi descriptor.

ATS2s: Autocorrelation of Topological Structure descriptor.

SM1\_Dzse: barysz matrix descriptor.

SM1\_Dzare: barysz matrix descriptor.

ATS0s: Autocorrelation of Topological Structure descriptor.

ATSC0i: centered ATS descriptor.

SM1\_Dzpe: barysz matrix descriptor.

SM1\_Dzi: barysz matrix descriptor.

ATSC0pe (Centered ATS descriptor) y ATSC0i:

Estos son descriptores centrados de la serie ATS (Autocorrelation of Topological Structure), los cuales se basan en la autocorrelación topológica de ciertas propiedades de los átomos en una molécula. La autocorrelación mide cómo una propiedad varía o se correlaciona consigo misma a medida que se avanza a lo largo de la estructura molecular. El "centering" (centrado) se refiere a un ajuste para que el descriptor esté normalizado o centrado alrededor de un valor específico.

AATS8are (Averaged ATS descriptor):

Este es un descriptor ATS promediado. Similar a los descriptores ATS centrados, mide la autocorrelación de una propiedad topológica, pero el valor se obtiene promediando los resultados de la autocorrelación en toda la molécula, lo que proporciona una medida representativa de esta propiedad para la molécula completa.

Xc-3d (Chi descriptor):

Este es un descriptor Chi, una medida de conectividad molecular que se basa en el número de enlaces y la disposición de los átomos en la molécula. Los descriptores Chi (o números de conectividad) capturan información sobre la forma y ramificación de la molécula, lo cual puede estar relacionado con propiedades físico-químicas.

ATS2s y ATS0s (Autocorrelation of Topological Structure descriptors):

Estos son descriptores de autocorrelación topológica que evalúan la variabilidad o similitud de una propiedad molecular a una distancia específica. La notación como "2" o "0" generalmente se refiere a una distancia o nivel de correlación dentro de la molécula. Por ejemplo, ATS2s podría representar la correlación a una distancia de dos enlaces.

SM1\_Dzse, SM1\_Dzare, SM1\_Dzpe, SM1\_Dzi (Barysz matrix descriptors):

Estos descriptores se derivan de la matriz de Barysz, la cual cuantifica la estructura y disposición de los átomos en una molécula. Esta matriz incluye información sobre la conectividad atómica y se utiliza para calcular propiedades moleculares específicas. Los sufijos "se," "are," "pe," y "zi" indican variantes específicas de esta matriz, donde cada una captura aspectos distintos de la topología molecular o pondera la información en base a propiedades específicas (por ejemplo, masas atómicas, electronegatividades).