Start: Pre-trained SCAN E/Rho Losses 70 Deviation (kcal/mol) Energy Loss Value 60 Na 0 50 40 30 20 10 0 20 80 60 0 40 0.008 C2H2 СН 0.007 CHN CO Deviation (e)
Rho Loss Value
200.0
800.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
700.0
7 0.006 CO2 F2 FLi Н2 HLi НО 0.002 N2 NO 0.001 Na2 0.000 20 40 80 0 60 **Epoch**