Start: Pre-trained SCAN **Aggregate Losses**  $10^{4}$ 10<sup>3</sup>  $10^2$ Deviation (kcal/mol) 10<sup>1</sup> 10<sup>0</sup> 0 -10<sup>0</sup>  $-10^{1}$  $-10^{2}$ ae  $-10^{3}$ rho Total 50 100 150 200 250 300 350 400 0 **Epoch**