**Conceptes que necessiten contextualització:**

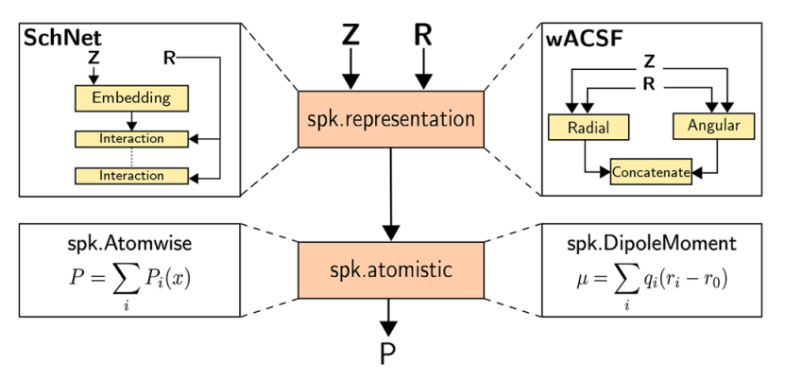
**Atomístic neural networks:**

Tipus de models usats en la química quàntica que es separen en 2 categories, *“description based”* en la qual li donem com a entrada una representació del sistema com ara ASCF i *“end-to-end”* que nomes usa el numero atòmic i la posició en l’espai.

Aplicació practica d’aquest tipus de NN

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jcim.9b00994>

**Estructura dels models:**



El treball separa la tasca en dos etapes, la representació i la predicció, la primera te la funció de a partir de la posició i el numero atòmic formular una representació per a constituir la entrada per la segona i aquesta te el rol de aplicar el model un atomístic.

La primera etapa consta de dos possibles una de cada un dels tipus mencionats anteriorment , wACSF (description based) i SchNet (end-to-end)

**wACSF:**

També referida com a “Behler−Parrinello network potentials” esta demostrat que es molt efectiva per representar varies molècules de petites dimensions i es molt usada en aquest camp. Es una representació que es calcula prèvia al entrenament/predicció del model així que es molt útil quan no es disposa de meses dades per entrenar el model ja que li dona part de la feina feta. Però alhora fa els models menys generalitzables ja que la funció es fixe i no deixa llibertat a la xarxa neuronal.

Sense entrar en massa detall del funcionament d’aquesta representació esta basada en que cada àtom comprova per els àtoms adjacents les posicions (radial symetry functions) i els angles entre ells (angular symetry functions) i convina aquesta informació així generant uns valors per a poder representar la seva situació en l’espai.

**SchNet:**