

Table S13: The performance of different methods on 10 kinase scan datasets with balanced scaffold split. SS represents the p-values (one-sided significance level) of the McNemar's test between ImageMol and other comparison methods. The numbers in green background indicate statistically different models, using a significance threshold of 0.05.

1. BTK								
	accuracy	auc	aupr	f1	precision	recall	kappa	SS
MoCLR _{GIN}	0.556±0.079	0.556±0.118	0.544±0.004	0.683±0.022	0.542±0.059	0.944±0.079	0.111±0.157	0.074
MoCLR _{RCS}	0.556±0.039	0.602±0.129	0.618±0.138	0.593±0.105	0.574±0.069	0.722±0.283	0.111±0.079	0.074
RNN LR	0.417±0.000	0.611±0.000	0.743±0.000	0.462±0.000	0.429±0.000	0.500±0.000	-0.167±0.000	0.077
TRFM LR	0.583±0.000	0.694±0.000	0.741±0.000	0.615±0.000	0.571±0.000	0.667±0.000	0.167±0.000	0.221
RNN MLP	0.444±0.039	0.556±0.023	0.608±0.022	0.498±0.052	0.452±0.034	0.556±0.079	-0.111±0.079	0.077
TRFM MLP	0.444±0.039	0.537±0.013	0.653±0.005	0.442±0.057	0.443±0.042	0.444±0.079	-0.111±0.079	0.041
RNN RF	0.472±0.079	0.546±0.013	0.641±0.032	0.578±0.063	0.481±0.052	0.722±0.079	-0.056±0.157	0.077
TRFM RF	0.667±0.068	0.639±0.039	0.678±0.053	0.739±0.055	0.607±0.046	0.944±0.079	0.333±0.136	0.134
CHEM-BERT	0.667±0.068	0.648±0.013	0.553±0.013	0.703±0.026	0.660±0.103	0.778±0.079	0.333±0.136	0.131
ImageMol	0.889±0.039	0.843±0.026	0.795±0.006	0.901±0.031	0.821±0.051	1.000±0.000	0.778±0.079	-
2. CDK4-cyclinD3								
	accuracy	auc	aupr	f1	precision	recall	kappa	SS
MoCLR _{GIN}	0.792±0.059	0.778±0.171	0.930±0.055	0.867±0.032	0.861±0.104	0.889±0.079	0.349±0.292	0.48
MoCLR _{RCS}	0.833±0.059	0.944±0.039	0.983±0.012	0.886±0.036	0.944±0.079	0.833±0.000	0.587±0.180	0.48
RNN LR	0.750±0.000	0.667±0.000	0.858±0.000	0.833±0.000	0.833±0.000	0.833±0.000	0.333±0.000	1
TRFM LR	0.750±0.000	0.750±0.000	0.906±0.000	0.833±0.000	0.833±0.000	0.833±0.000	0.333±0.000	1
RNN MLP	0.792±0.059	0.833±0.000	0.944±0.000	0.863±0.042	0.841±0.011	0.889±0.079	0.422±0.126	0.48
TRFM MLP	0.750±0.000	0.639±0.039	0.871±0.023	0.833±0.000	0.833±0.000	0.833±0.000	0.333±0.000	1
RNN RF	0.833±0.059	0.917±0.000	0.974±0.000	0.901±0.031	0.821±0.051	1.000±0.000	0.400±0.283	0.48
TRFM RF	0.750±0.000	0.639±0.039	0.880±0.010	0.857±0.000	0.750±0.000	1.000±0.000	0.000±0.000	1
CHEM-BERT	0.750±0.000	0.583±0.297	0.818±0.173	0.857±0.000	0.750±0.000	1.000±0.000	0.000±0.000	0.074
ImageMol	0.875±0.000	0.917±0.068	0.977±0.018	0.914±0.007	0.952±0.067	0.889±0.079	0.676±0.054	-
3. EGFR								
	accuracy	auc	aupr	f1	precision	recall	kappa	SS
MoCLR _{GIN}	0.758±0.043	0.583±0.067	0.667±0.069	0.799±0.041	0.841±0.011	0.762±0.067	0.496±0.078	0.48
MoCLR _{RCS}	0.788±0.113	0.750±0.051	0.802±0.040	0.819±0.112	0.844±0.032	0.810±0.178	0.563±0.207	0
RNN LR	0.545±0.000	0.536±0.000	0.775±0.000	0.706±0.000	0.600±0.000	0.857±0.000	-0.170±0.000	0.134
TRFM LR	0.818±0.000	0.821±0.000	0.859±0.000	0.875±0.000	0.778±0.000	1.000±0.000	0.560±0.000	1
RNN MLP	0.545±0.074	0.536±0.029	0.756±0.023	0.703±0.062	0.597±0.033	0.857±0.117	-0.163±0.131	0.074
TRFM MLP	0.727±0.074	0.667±0.061	0.707±0.089	0.780±0.059	0.802±0.062	0.762±0.067	0.421±0.161	0.248
RNN RF	0.636±0.000	0.548±0.017	0.753±0.020	0.750±0.000	0.667±0.000	0.857±0.000	0.120±0.000	0.371
TRFM RF	0.697±0.043	0.607±0.000	0.639±0.001	0.808±0.022	0.679±0.030	1.000±0.000	0.199±0.140	1
CHEM-BERT	0.727±0.074	0.845±0.094	0.930±0.044	0.779±0.043	0.879±0.171	0.762±0.178	0.379±0.275	0.077
ImageMol	0.909±0.000	0.857±0.000	0.920±0.000	0.933±0.000	0.875±0.000	1.000±0.000	0.792±0.000	-
4. FGFR1								
	accuracy	auc	aupr	f1	precision	recall	kappa	SS
MoCLR _{GIN}	0.667±0.068	0.695±0.249	0.815±0.168	0.762±0.027	0.667±0.068	0.905±0.067	0.248±0.193	0.134
MoCLR _{RCS}	0.639±0.079	0.619±0.378	0.748±0.258	0.758±0.030	0.639±0.079	0.952±0.067	0.157±0.222	0.134
RNN LR	0.583±0.000	0.771±0.000	0.863±0.000	0.737±0.000	0.583±0.000	1.000±0.000	0.000±0.000	0.134
TRFM LR	0.833±0.000	0.743±0.000	0.816±0.000	0.857±0.000	0.857±0.000	0.857±0.000	0.657±0.000	1
RNN MLP	0.694±0.079	0.848±0.059	0.910±0.039	0.697±0.179	0.800±0.141	0.762±0.337	0.375±0.088	0.221
TRFM MLP	0.583±0.068	0.643±0.031	0.782±0.026	0.694±0.052	0.607±0.046	0.810±0.067	0.081±0.149	0.074
RNN RF	0.583±0.000	0.476±0.027	0.541±0.017	0.737±0.000	0.583±0.000	1.000±0.000	0.000±0.000	0.134
TRFM RF	0.583±0.000	0.476±0.013	0.523±0.005	0.737±0.000	0.583±0.000	1.000±0.000	0.000±0.000	0.134
CHEM-BERT	0.583±0.000	0.429±0.117	0.542±0.100	0.737±0.000	0.583±0.000	1.000±0.000	0.000±0.000	0.077
ImageMol	0.889±0.039	0.857±0.023	0.853±0.042	0.914±0.027	0.843±0.046	1.000±0.000	0.761±0.088	-
5. FGFR2								
	accuracy	auc	aupr	f1	precision	recall	kappa	SS
MoCLR _{GIN}	0.778±0.104	0.667±0.132	0.867±0.058	0.861±0.069	0.809±0.065	0.926±0.105	0.287±0.330	0.683
MoCLR _{RCS}	0.778±0.039	0.667±0.052	0.829±0.079	0.871±0.020	0.773±0.032	1.000±0.000	0.143±0.202	0.617
RNN LR	0.583±0.000	0.741±0.000	0.912±0.000	0.706±0.000	0.750±0.000	0.667±0.000	0.000±0.000	0.45
TRFM LR	0.667±0.000	0.704±0.000	0.856±0.000	0.750±0.000	0.857±0.000	0.667±0.000	0.273±0.000	0.683
RNN MLP	0.667±0.000	0.716±0.046	0.882±0.012	0.750±0.000	0.857±0.000	0.667±0.000	0.273±0.000	0.683
TRFM MLP	0.750±0.000	0.741±0.000	0.888±0.000	0.824±0.000	0.875±0.000	0.778±0.000	0.400±0.000	1
RNN RF	0.611±0.039	0.685±0.055	0.897±0.019	0.730±0.034	0.759±0.013	0.704±0.052	0.037±0.052	0.45
TRFM RF	0.639±0.039	0.556±0.030	0.708±0.009	0.722±0.039	0.849±0.011	0.630±0.052	0.237±0.050	0.45
CHEM-BERT	0.806±0.039	0.765±0.106	0.910±0.055	0.886±0.020	0.795±0.032	1.000±0.000	0.286±0.202	0.023
ImageMol	0.833±0.000	0.852±0.052	0.957±0.013	0.880±0.007	0.963±0.052	0.815±0.052	0.609±0.038	-
6. FGFR3								
	accuracy	auc	aupr	f1	precision	recall	kappa	SS
MoCLR _{GIN}	0.639±0.239	0.760±0.039	0.824±0.086	0.580±0.414	0.519±0.378	0.667±0.471	0.267±0.377	0.077
MoCLR _{RCS}	0.778±0.079	0.792±0.106	0.822±0.110	0.843±0.065	0.783±0.024	0.917±0.118	0.464±0.152	0.48
RNN LR	0.500±0.000	0.646±0.015	0.814±0.017	0.500±0.000	0.750±0.000	0.375±0.000	0.100±0.000	0.134
TRFM LR	0.583±0.000	0.812±0.000	0.915±0.000	0.545±0.000	1.000±0.000	0.375±0.000	0.286±0.000	0.371
RNN MLP	0.444±0.039	0.469±0.026	0.709±0.039	0.522±0.016	0.631±0.084	0.458±0.059	-0.124±0.158	0.074
TRFM MLP	0.694±0.039	0.802±0.015	0.924±0.005	0.701±0.048	1.000±0.000	0.542±0.059	0.442±0.060	0.683
RNN RF	0.333±0.000	0.312±0.000	0.619±0.000	0.429±0.000	0.500±0.000	0.375±0.000	-0.333±0.000	0.041
TRFM RF	0.722±0.039	0.646±0.078	0.833±0.072	0.751±0.026	0.944±0.079	0.625±0.000	0.462±0.091	0.617
CHEM-BERT	0.667±0.000	0.438±0.077	0.623±0.055	0.793±0.010	0.678±0.016	0.958±0.059	0.048±0.067	0.077
ImageMol	0.806±0.039	0.854±0.064	0.935±0.029	0.855±0.039	0.844±0.032	0.875±0.102	0.556±0.064	-
7. FGFR4								
	accuracy	auc	aupr	f1	precision	recall	kappa	SS
MoCLR _{GIN}	0.667±0.136	0.773±0.121	0.756±0.168	0.758±0.078	0.617±0.103	1.000±0.000	0.333±0.272	0.371
MoCLR _{RCS}	0.556±0.079	0.537±0.013	0.606±0.037	0.663±0.073	0.533±0.047	0.889±0.157	0.111±0.157	0.248
RNN LR	0.583±0.000	0.528±0.000	0.462±0.000	0.615±0.000	0.571±0.000	0.667±0.000	0.167±0.000	0.617
TRFM LR	0.583±0.000	0.639±0.000	0.532±0.000	0.615±0.000	0.571±0.000	0.667±0.000	0.167±0.000	0.683
RNN MLP	0.500±0.068	0.269±0.035	0.362±0.010	0.621±0.070	0.497±0.041	0.833±0.136	-0.000±0.136	0.134
TRFM MLP	0.667±0.000	0.676±0.035	0.551±0.017	0.667±0.000	0.667±0.000	0.667±0.000	0.333±0.000	1
RNN RF	0.389±0.039	0.389±0.000	0.518±0.000	0.419±0.060	0.397±0.045	0.444±0.079	-0.222±0.079	0.074
TRFM RF	0.694±0.039	0.602±0.013	0.504±0.006	0.733±0.026	0.655±0.042	0.833±0.000	0.389±0.079	0.617
CHEM-BERT	0.556±0.079	0.528±0.060	0.470±0.043	0.500±0.204	0.533±0.047	0.556±0.342	0.111±0.157	0.45
ImageMol	0.750±0.000	0.833±0.045	0.860±0.039	0.790±0.015	0.683±0.022	0.944±0.079	0.500±0.000	-
8. FLT3								
	accuracy	auc	aupr	f1	precision	recall	kappa	SS
MoCLR _{GIN}	0.879±0.043	0.722±0.091	0.916±0.039	0.932±0.022	0.873±0.039	1.000±0.000	0.414±0.293	1
MoCLR _{RCS}	0.848±0.113	0.722±0.208	0.927±0.055	0.908±0.072	0.898±0.076	0.926±0.105	0.411±0.427	0.48
RNN LR	0.727±0.000	0.778±0.000	0.943±0.000	0.824±0.000	0.875±0.000	0.778±0.000	0.233±0.000	0.48
TRFM LR	0.818±0.000	0.611±0.000	0.865±0.000	0.889±0.000	0.889±0.000	0.889±0.000	0.389±0.000	1
RNN MLP	0.727±0.000	0.630±0.105	0.860±0.058	0.824±0.000	0.875±0.000	0.778±0.000	0.233±0.000	0.48
TRFM MLP	0.697±0.043	0.667±0.136	0.865±0.095	0.799±0.035	0.869±0.008	0.741±0.052	0.195±0.053	0.248
RNN RF	0.758±0.086	0.519±0.026	0.757±0.045	0.843±0.065	0.878±0.015	0.815±0.105	0.299±0.127	0.248
TRFM RF	0.848±0.043	0.546±0.035	0.800±0.047					