

Table S21: The performance of different methods on 13 SARS-CoV-2 datasets with balanced scaffold split.

1. 3CL enzymatic activity							
	accuracy	auc	aupr	f1	precision	recall	kappa
MoCLR <sub>GIN</sub>	0.810±0.013	0.641±0.207	0.467±0.194	0.222±0.314	0.182±0.257	0.286±0.404	0.186±0.263
MoCLR <sub>GCN</sub>	0.810±0.013	0.777±0.060	0.496±0.087	0.133±0.189	0.222±0.314	0.095±0.135	0.106±0.150
RNN LR	<b>0.886±0.000</b>	0.760±0.000	0.653±0.000	0.600±0.000	<b>1.000±0.000</b>	0.429±0.000	0.545±0.000
TRFM LR	0.800±0.000	0.724±0.000	0.368±0.000	0.462±0.000	0.500±0.000	0.429±0.000	0.340±0.000
RNN MLP	0.876±0.049	0.852±0.019	0.662±0.032	0.601±0.191	0.758±0.078	0.524±0.243	0.536±0.211
TRFM MLP	0.829±0.000	0.784±0.028	0.555±0.055	0.500±0.000	0.600±0.000	0.429±0.000	0.400±0.000
RNN RF	0.848±0.027	0.837±0.008	0.792±0.023	0.367±0.165	<b>1.000±0.000</b>	0.238±0.135	0.322±0.158
TRFM RF	0.829±0.000	0.831±0.003	0.767±0.012	0.250±0.000	<b>1.000±0.000</b>	0.143±0.000	0.211±0.000
CHEM-BERT	0.800±0.040	0.842±0.040	0.607±0.066	0.457±0.081	0.587±0.112	0.476±0.269	0.351±0.046
GROVER	<b>0.886±0.000</b>	0.947±0.006	0.821±0.019	0.660±0.047	0.838±0.120	0.571±0.117	0.596±0.040
ImageMol	<b>0.886±0.023</b>	<b>0.964±0.004</b>	<b>0.842±0.026</b>	<b>0.7±0.064</b>	0.738±0.07	<b>0.667±0.067</b>	<b>0.629±0.078</b>
2. ACE2 enzymatic activity							
	accuracy	auc	aupr	f1	precision	recall	kappa
MoCLR <sub>GIN</sub>	0.801±0.050	0.668±0.075	0.199±0.051	0.232±0.165	0.222±0.166	<b>0.286±0.233</b>	0.135±0.141
MoCLR <sub>GCN</sub>	<b>0.865±0.000</b>	0.662±0.082	0.202±0.068	0.204±0.116	0.147±0.066	0.333±0.471	0.115±0.006
RNN LR	0.750±0.000	0.486±0.003	0.129±0.000	0.235±0.000	0.200±0.000	0.286±0.000	0.091±0.000
TRFM LR	0.692±0.000	0.444±0.000	0.123±0.000	0.111±0.000	0.091±0.000	0.143±0.000	-0.064±0.000
RNN MLP	0.776±0.040	0.407±0.013	0.104±0.002	0.099±0.000	0.088±0.000	0.112±0.000	-0.115±0.038
TRFM MLP	0.737±0.024	0.519±0.045	0.133±0.012	0.087±0.062	0.081±0.060	0.095±0.067	-0.065±0.068
RNN RF	0.788±0.000	0.489±0.014	0.119±0.002	0.029±0.000	0.024±0.000	0.035±0.000	-0.109±0.000
TRFM RF	0.853±0.009	0.503±0.030	0.136±0.010	0.041±0.000	0.043±0.000	0.039±0.000	-0.023±0.016
CHEM-BERT	0.808±0.042	0.729±0.041	0.309±0.038	0.209±0.040	0.296±0.146	0.190±0.067	0.108±0.057
GROVER	0.814±0.018	0.528±0.020	0.138±0.011	0.121±0.086	0.167±0.118	0.095±0.067	0.026±0.095
ImageMol	0.859±0.009	<b>0.796±0.025</b>	<b>0.343±0.059</b>	<b>0.259±0.052</b>	<b>0.467±0.047</b>	0.19±0.067	<b>0.198±0.036</b>
3. HEK293 cell line toxicity							
	accuracy	auc	aupr	f1	precision	recall	kappa
MoCLR <sub>GIN</sub>	0.706±0.014	0.723±0.021	0.513±0.013	0.467±0.064	0.566±0.027	0.403±0.083	0.274±0.056
MoCLR <sub>GCN</sub>	0.692±0.035	0.727±0.033	0.549±0.059	0.552±0.025	0.537±0.054	0.590±0.107	0.323±0.035
RNN LR	0.673±0.000	0.619±0.000	0.467±0.002	0.374±0.000	0.494±0.000	0.301±0.000	0.170±0.000
TRFM LR	0.677±0.000	0.691±0.000	0.524±0.000	0.523±0.000	0.503±0.000	0.545±0.000	0.280±0.000
RNN MLP	0.642±0.017	0.585±0.007	0.383±0.004	0.236±0.136	0.366±0.057	0.198±0.132	0.057±0.047
TRFM MLP	0.655±0.010	0.688±0.005	0.518±0.017	0.492±0.002	0.472±0.013	0.515±0.014	0.231±0.011
RNN RF	0.680±0.005	0.699±0.007	0.555±0.007	0.441±0.017	0.509±0.010	0.389±0.023	0.222±0.017
TRFM RF	0.715±0.003	0.750±0.001	<b>0.634±0.005</b>	0.501±0.008	0.582±0.005	0.441±0.011	0.307±0.009
CHEM-BERT	0.703±0.010	0.730±0.010	0.590±0.046	0.441±0.169	0.584±0.051	0.422±0.215	0.266±0.108
GROVER	0.721±0.001	0.763±0.011	0.631±0.013	0.546±0.037	<b>0.678±0.036</b>	0.457±0.072	0.383±0.024
ImageMol	<b>0.735±0.023</b>	<b>0.775±0.005</b>	0.632±0.012	<b>0.608±0.018</b>	0.589±0.039	<b>0.632±0.029</b>	<b>0.409±0.038</b>
4. Human fibroblast toxicity							
	accuracy	auc	aupr	f1	precision	recall	kappa
MoCLR <sub>GIN</sub>	0.686±0.006	0.700±0.010	0.523±0.019	0.447±0.025	0.553±0.017	0.378±0.039	0.239±0.018
MoCLR <sub>GCN</sub>	0.708±0.003	0.721±0.013	0.563±0.015	0.506±0.070	0.592±0.023	0.458±0.111	0.307±0.048
RNN LR	0.654±0.000	0.644±0.000	0.483±0.000	0.418±0.000	0.484±0.000	0.367±0.000	0.179±0.000
TRFM LR	0.689±0.000	0.719±0.000	0.587±0.000	0.526±0.000	0.541±0.000	0.512±0.000	0.295±0.000
RNN MLP	0.663±0.011	0.602±0.009	0.420±0.011	0.185±0.045	0.500±0.082	0.114±0.031	0.070±0.035
TRFM MLP	0.650±0.019	0.683±0.010	0.531±0.020	0.506±0.011	0.487±0.026	0.532±0.044	0.237±0.019
RNN RF	0.690±0.009	0.687±0.005	0.563±0.008	0.448±0.031	0.561±0.017	0.373±0.038	0.245±0.031
TRFM RF	0.720±0.004	0.742±0.003	0.632±0.011	0.521±0.009	0.615±0.008	0.452±0.009	0.329±0.011
CHEM-BERT	0.709±0.004	0.731±0.002	0.577±0.024	0.517±0.052	0.587±0.012	0.472±0.091	0.314±0.038
GROVER	0.726±0.013	0.757±0.010	<b>0.655±0.012</b>	0.539±0.038	0.625±0.035	0.480±0.064	0.350±0.033
ImageMol	<b>0.733±0.012</b>	<b>0.760±0.002</b>	0.614±0.018	<b>0.571±0.022</b>	<b>0.632±0.05</b>	<b>0.532±0.071</b>	<b>0.381±0.002</b>
5. MERS Pseudotyped particle entry (Huh7 tox counterscreen)							
	accuracy	auc	aupr	f1	precision	recall	kappa
MoCLR <sub>GIN</sub>	0.710±0.010	0.718±0.002	0.498±0.012	0.436±0.080	0.554±0.011	0.373±0.118	0.256±0.067
MoCLR <sub>GCN</sub>	0.726±0.003	0.752±0.018	0.572±0.030	0.466±0.080	0.610±0.051	0.400±0.119	0.297±0.050
RNN LR	0.673±0.003	0.633±0.000	0.451±0.000	0.458±0.003	0.476±0.005	0.441±0.003	0.224±0.005
TRFM LR	0.682±0.001	0.725±0.000	0.561±0.000	0.473±0.002	0.492±0.001	0.456±0.003	0.246±0.003
RNN MLP	0.691±0.004	0.631±0.004	0.414±0.009	0.311±0.122	0.522±0.016	0.246±0.133	0.157±0.068
TRFM MLP	0.681±0.010	0.698±0.012	0.513±0.017	0.514±0.016	0.491±0.014	<b>0.540±0.020</b>	0.278±0.023
RNN RF	0.707±0.013	0.695±0.005	0.557±0.003	0.448±0.014	0.548±0.031	0.379±0.010	0.257±0.025
TRFM RF	0.727±0.006	0.737±0.003	0.591±0.009	0.484±0.012	0.592±0.015	0.409±0.012	0.306±0.015
CHEM-BERT	0.697±0.014	0.702±0.012	0.508±0.045	0.335±0.123	0.530±0.036	0.263±0.118	0.178±0.080
GROVER	<b>0.743±0.007</b>	0.753±0.006	<b>0.615±0.015</b>	0.455±0.008	<b>0.681±0.038</b>	0.343±0.012	0.310±0.013
ImageMol	0.730±0.003	<b>0.754±0.003</b>	0.593±0.007	<b>0.524±0.028</b>	0.584±0.005	0.477±0.05	<b>0.338±0.023</b>
6. MERS Pseudotyped particle entry							
	accuracy	auc	aupr	f1	precision	recall	kappa
MoCLR <sub>GIN</sub>	0.691±0.033	0.718±0.016	0.505±0.018	<b>0.552±0.025</b>	0.512±0.046	<b>0.602±0.027</b>	0.319±0.051
MoCLR <sub>GCN</sub>	0.702±0.028	0.724±0.015	0.516±0.041	0.508±0.021	0.544±0.050	0.493±0.088	0.298±0.016
RNN LR	0.677±0.004	0.632±0.001	0.495±0.001	0.434±0.005	0.484±0.008	0.394±0.003	0.212±0.009
TRFM LR	0.683±0.000	0.721±0.000	0.567±0.000	0.482±0.000	0.497±0.000	0.468±0.000	0.254±0.000
RNN MLP	0.686±0.001	0.624±0.003	0.415±0.006	0.221±0.078	0.502±0.003	0.148±0.069	0.098±0.042
TRFM MLP	0.682±0.009	0.700±0.011	0.550±0.004	0.506±0.022	0.495±0.013	0.519±0.034	0.272±0.027
RNN RF	0.696±0.003	0.700±0.002	0.550±0.004	0.426±0.010	0.526±0.005	0.359±0.011	0.230±0.010
TRFM RF	0.722±0.003	0.740±0.000	0.606±0.005	0.487±0.015	0.582±0.010	0.419±0.026	0.303±0.010
CHEM-BERT	0.715±0.019	0.712±0.014	0.531±0.034	0.450±0.027	0.582±0.062	0.372±0.043	0.270±0.032
GROVER	0.739±0.005	0.757±0.006	0.625±0.021	0.519±0.046	<b>0.647±0.017</b>	0.439±0.068	0.357±0.038
ImageMol	<b>0.742±0.006</b>	<b>0.764±0.009</b>	<b>0.633±0.002</b>	0.542±0.05	0.622±0.041	0.499±0.119	<b>0.368±0.031</b>
7. SARS-CoV Pseudotyped particle entry (VeroE6 tox counterscreen)							
	accuracy	auc	aupr	f1	precision	recall	kappa
MoCLR <sub>GIN</sub>	0.708±0.010	0.711±0.014	0.499±0.011	<b>0.480±0.036</b>	0.539±0.019	0.434±0.051	0.281±0.035
MoCLR <sub>GCN</sub>	0.718±0.005	0.712±0.006	0.506±0.012	0.375±0.069	0.613±0.021	0.277±0.071	0.228±0.045

RNN LR	0.686±0.000	0.621±0.000	0.434±0.000	0.319±0.000	0.495±0.000	0.236±0.000	0.148±0.000
TRFM LR	0.686±0.001	0.701±0.000	0.516±0.000	0.472±0.002	0.497±0.002	<b>0.449±0.002</b>	0.249±0.003
RNN MLP	0.681±0.004	0.595±0.008	0.385±0.012	0.142±0.011	0.445±0.030	0.085±0.008	0.046±0.006
TRFM MLP	0.696±0.007	0.649±0.017	0.455±0.005	0.425±0.021	0.486±0.016	0.379±0.023	0.223±0.024
RNN RF	0.680±0.007	0.644±0.004	0.498±0.003	0.355±0.016	0.479±0.018	0.282±0.015	0.161±0.019
TRFM RF	0.720±0.004	0.706±0.001	0.546±0.001	0.417±0.002	0.596±0.017	0.321±0.005	0.254±0.007
CHEM-BERT	0.702±0.014	0.686±0.010	0.510±0.021	0.449±0.028	0.538±0.033	0.393±0.061	0.253±0.012
GROVER	0.726±0.021	0.714±0.010	<b>0.596±0.019</b>	0.334±0.172	<b>0.746±0.131</b>	0.250±0.145	0.223±0.114
ImageMoI	<b>0.733±0.008</b>	<b>0.732±0.005</b>	0.572±0.024	0.475±0.016	0.618±0.031	0.388±0.030	<b>0.308±0.014</b>
8. SARS-CoV Pseudotyped particle entry							
	accuracy	auc	aupr	f1	precision	recall	kappa
MoCLR <sub>GIN</sub>	0.702±0.001	0.713±0.007	0.490±0.022	0.426±0.036	0.522±0.001	0.363±0.053	0.235±0.026
MoCLR <sub>GCN</sub>	0.731±0.013	0.722±0.012	0.562±0.022	0.457±0.054	0.596±0.021	0.373±0.062	0.292±0.052
RNN LR	0.702±0.000	0.636±0.000	0.444±0.000	0.336±0.000	0.533±0.000	0.245±0.000	0.176±0.000
TRFM LR	0.696±0.001	0.709±0.000	0.521±0.000	0.485±0.001	0.506±0.001	0.465±0.000	0.270±0.001
RNN MLP	0.695±0.004	0.611±0.006	0.397±0.011	0.225±0.083	0.518±0.025	0.152±0.073	0.107±0.044
TRFM MLP	0.663±0.012	0.642±0.019	0.448±0.012	0.449±0.013	0.452±0.019	0.447±0.018	0.206±0.021
RNN RF	0.686±0.006	0.652±0.005	0.485±0.011	0.382±0.017	0.483±0.015	0.317±0.021	0.184±0.017
TRFM RF	0.726±0.008	0.721±0.003	0.571±0.003	0.433±0.016	0.593±0.024	0.342±0.014	0.269±0.021
CHEM-BERT	0.710±0.005	0.691±0.010	0.510±0.043	0.297±0.168	<b>0.703±0.176</b>	0.252±0.209	0.181±0.093
GROVER	0.735±0.007	0.726±0.001	<b>0.605±0.013</b>	0.415±0.082	0.661±0.057	0.320±0.108	0.275±0.053
ImageMoI	<b>0.736±0.003</b>	<b>0.739±0.001</b>	0.572±0.017	<b>0.528±0.035</b>	0.587±0.018	<b>0.487±0.070</b>	<b>0.348±0.027</b>
9. SARS-CoV-2 cytopathic effect (CPE)							
	accuracy	auc	aupr	f1	precision	recall	kappa
MoCLR <sub>GIN</sub>	0.713±0.011	0.702±0.014	0.484±0.022	0.376±0.067	0.544±0.032	0.292±0.072	0.214±0.055
MoCLR <sub>GCN</sub>	0.717±0.013	0.704±0.015	0.517±0.023	0.393±0.090	0.558±0.046	0.318±0.115	0.233±0.071
RNN LR	0.707±0.000	0.612±0.000	0.458±0.001	0.328±0.000	0.535±0.000	0.237±0.000	0.175±0.000
TRFM LR	0.695±0.000	0.698±0.000	0.495±0.000	0.474±0.000	0.495±0.000	0.455±0.000	0.260±0.000
RNN MLP	0.698±0.004	0.609±0.013	0.404±0.011	0.218±0.037	0.509±0.023	0.141±0.033	0.101±0.013
TRFM MLP	0.673±0.006	0.658±0.007	0.458±0.012	0.488±0.010	0.464±0.008	<b>0.515±0.011</b>	0.249±0.013
RNN RF	0.688±0.007	0.640±0.007	0.462±0.007	0.357±0.006	0.474±0.017	0.287±0.013	0.167±0.008
TRFM RF	<b>0.726±0.008</b>	0.709±0.004	<b>0.559±0.004</b>	0.424±0.015	0.582±0.023	0.333±0.011	0.261±0.020
CHEM-BERT	0.705±0.012	0.707±0.007	0.533±0.008	0.419±0.055	0.525±0.029	0.362±0.093	0.234±0.032
GROVER	0.718±0.013	0.715±0.008	<b>0.559±0.046</b>	0.358±0.149	<b>0.560±0.031</b>	0.293±0.164	0.217±0.107
ImageMoI	0.709±0.006	<b>0.723±0.003</b>	0.539±0.009	<b>0.5±0.024</b>	0.521±0.011	0.482±0.043	<b>0.296±0.024</b>
10. SARS-CoV-2 cytopathic effect (host tox counterscreen)							
	accuracy	auc	aupr	f1	precision	recall	kappa
MoCLR <sub>GIN</sub>	0.654±0.049	0.699±0.023	0.534±0.017	0.536±0.030	0.527±0.063	<b>0.587±0.153</b>	0.269±0.030
MoCLR <sub>GCN</sub>	0.693±0.014	0.715±0.006	0.564±0.015	0.472±0.075	0.599±0.050	0.409±0.127	0.272±0.056
RNN LR	0.627±0.000	0.610±0.000	0.488±0.000	0.412±0.000	0.458±0.000	0.374±0.000	0.143±0.000
TRFM LR	0.671±0.000	0.712±0.000	0.574±0.000	<b>0.544±0.000</b>	0.527±0.000	0.561±0.000	0.287±0.000
RNN MLP	0.604±0.017	0.607±0.002	0.460±0.009	0.426±0.007	0.433±0.022	0.420±0.005	0.125±0.025
TRFM MLP	0.641±0.004	0.641±0.011	0.469±0.012	0.503±0.010	0.487±0.005	0.520±0.015	0.223±0.011
RNN RF	0.668±0.005	0.673±0.003	0.535±0.003	0.426±0.011	0.539±0.012	0.353±0.011	0.207±0.013
TRFM RF	0.692±0.006	0.721±0.004	0.607±0.006	0.493±0.010	0.580±0.012	0.428±0.008	0.278±0.014
CHEM-BERT	0.677±0.019	0.708±0.013	0.537±0.030	0.465±0.075	0.558±0.041	0.417±0.120	0.245±0.053
GROVER	<b>0.698±0.005</b>	0.729±0.000	0.612±0.001	0.399±0.011	<b>0.660±0.033</b>	0.287±0.017	0.237±0.003
ImageMoI	0.665±0.059	<b>0.747±0.006</b>	<b>0.615±0.009</b>	0.533±0.068	0.574±0.103	0.586±0.232	<b>0.288±0.034</b>
11. Spike-ACE2 protein-protein interaction (AlphaLISA)							
	accuracy	auc	aupr	f1	precision	recall	kappa
MoCLR <sub>GIN</sub>	0.686±0.006	0.718±0.010	0.628±0.015	0.532±0.021	0.663±0.024	0.447±0.039	0.309±0.013
MoCLR <sub>GCN</sub>	0.676±0.004	0.721±0.006	0.628±0.006	0.470±0.043	<b>0.687±0.029</b>	0.362±0.055	0.269±0.022
RNN LR	0.615±0.000	0.603±0.000	0.524±0.000	0.421±0.000	0.531±0.000	0.348±0.000	0.151±0.000
TRFM LR	0.671±0.000	0.683±0.000	0.622±0.000	0.518±0.000	0.629±0.000	0.441±0.000	0.280±0.000
RNN MLP	0.606±0.016	0.569±0.019	0.484±0.025	0.289±0.107	0.558±0.058	0.220±0.124	0.093±0.023
TRFM MLP	0.607±0.006	0.641±0.009	0.563±0.009	0.535±0.017	0.510±0.007	<b>0.564±0.047</b>	0.196±0.003
RNN RF	0.653±0.004	0.645±0.005	0.581±0.007	0.457±0.002	0.614±0.012	0.363±0.004	0.225±0.007
TRFM RF	0.671±0.008	0.689±0.014	0.622±0.014	0.463±0.021	0.673±0.023	0.354±0.025	0.258±0.020
CHEM-BERT	0.619±0.016	0.616±0.072	0.530±0.064	0.222±0.208	0.423±0.305	0.181±0.194	0.101±0.093
GROVER	0.688±0.005	0.728±0.004	<b>0.662±0.007</b>	0.512±0.023	0.694±0.040	0.410±0.043	0.305±0.006
ImageMoI	<b>0.694±0.005</b>	<b>0.739±0.001</b>	0.642±0.012	<b>0.553±0.014</b>	0.666±0.007	0.473±0.02	<b>0.330±0.013</b>
12. Spike-ACE2 protein-protein interaction (TruHit Counterscreen)							
	accuracy	auc	aupr	f1	precision	recall	kappa
MoCLR <sub>GIN</sub>	0.676±0.003	0.717±0.004	0.643±0.011	0.511±0.014	0.668±0.009	0.415±0.020	0.289±0.009
MoCLR <sub>GCN</sub>	0.664±0.022	0.701±0.006	0.602±0.012	0.455±0.070	0.669±0.030	0.349±0.072	0.249±0.061
RNN LR	0.613±0.001	0.603±0.000	0.525±0.000	0.415±0.001	0.544±0.002	0.335±0.001	0.150±0.002
TRFM LR	0.650±0.000	0.668±0.000	0.605±0.000	0.497±0.001	0.602±0.001	0.423±0.001	0.241±0.001
RNN MLP	0.620±0.012	0.605±0.009	0.459±0.007	0.318±0.065	0.460±0.019	0.253±0.074	0.089±0.018
TRFM MLP	0.609±0.005	0.593±0.001	0.459±0.009	0.440±0.022	0.458±0.009	0.425±0.034	0.141±0.018
RNN RF	0.633±0.009	0.621±0.009	0.559±0.010	0.426±0.019	0.592±0.018	0.333±0.017	0.187±0.022
TRFM RF	0.652±0.005	0.680±0.003	0.610±0.005	0.437±0.009	0.645±0.013	0.331±0.007	0.221±0.012
CHEM-BERT	0.634±0.012	0.661±0.008	0.556±0.024	0.385±0.084	0.620±0.044	0.293±0.104	0.176±0.045
GROVER	0.673±0.002	0.699±0.004	<b>0.649±0.003</b>	0.521±0.009	<b>0.650±0.011</b>	0.436±0.017	0.288±0.004
ImageMoI	<b>0.691±0.008</b>	<b>0.734±0.001</b>	0.646±0.001	<b>0.601±0.004</b>	0.639±0.020	<b>0.570±0.020</b>	<b>0.351±0.011</b>
13. TMPRSS2 enzymatic activity							
	accuracy	auc	aupr	f1	precision	recall	kappa
MoCLR <sub>GIN</sub>	0.681±0.004	0.691±0.000	0.547±0.017	0.478±0.022	0.575±0.011	0.410±0.034	0.257±0.015
MoCLR <sub>GCN</sub>	0.664±0.010	0.683±0.003	0.511±0.006	0.476±0.041	0.538±0.014	0.430±0.063	0.235±0.035
RNN LR	0.623±0.000	0.591±0.000	0.455±0.000	0.368±0.000	0.459±0.000	0.307±0.000	0.114±0.000
TRFM LR	0.647±0.000	0.678±0.000	0.533±0.000	0.490±0.000	0.506±0.000	<b>0.475±0.000</b>	0.220±0.000
RNN MLP	0.623±0.011	0.578±0.007	0.414±0.015	0.207±0.139	0.361±0.125	0.160±0.122	0.044±0.049
TRFM MLP	0.617±0.009	0.617±0.007	0.453±0.002	0.459±0.031	0.464±0.007	0.459±0.068	0.164±0.011
RNN RF	0.652±0.003	0.652±0.002	0.524±0.002	0.381±0.004	0.522±0.007	0.300±0.003	0.163±0.007
TRFM RF	0.680±0.008	0.689±0.004	0.571±0.010	0.449±0.015	0.583±0.016	0.366±0.013	0.240±0.019
CHEM-BERT	0.649±0.006	0.671±0.016	0.531±0.029	0.284±0.223	0.343±0.243	0.264±0.236	0.130±0.110

GROVER	<b>0.695±0.008</b>	0.705±0.002	<b>0.619±0.009</b>	0.501±0.038	<b>0.602±0.007</b>	0.431±0.053	0.291±0.033
ImageMo1	0.692±0.001	<b>0.714±0.002</b>	0.582±0.015	<b>0.515±0.017</b>	0.589±0.008	0.459±0.032	<b>0.295±0.010</b>