	$RMSE(E_{int}^{\mathit{EMLE}}, E_{int}^{\mathit{QM/MM}})$	$RMSE(E_{static}^{\mathit{EMLE}}, E_{static}^{\mathit{QM/MM}})$	$RMSE(E_{ind}^{EMLE}, E_{ind}^{QM/MM})$
et ter1	2.18 2.19 1.34 1.37 1.32 1.36 0.99 0.96 0.99 0.96	2.21 2.21 1.42 1.42 1.40 1.40 0.94 0.94 0.93 0.93	0.50 0.42 0.38 0.30 0.38 0.29 0.28 0.19 0.29 0.19
ng Datase Iter2	2.52 2.52 1.60 1.62 1.58 1.60 1.17 1.13 1.09 1.02	2.56	- 2.0 년 원 - 1.5 명 - 1.5 명
Testing Iter3 Ite	2.52 2.48 1.62 1.62 1.60 1.59 1.11 1.06 1.07 1.01	2.53 2.53 1.65 1.65 1.62 1.62 1.01 1.01 0.99 0.99	0.71 0.58 0.42 0.31 0.42 0.31 0.35 0.25 0.33 0.20 - 0.5 紀
	$MSE(E_{int}^{\mathit{EMLE}}, E_{int}^{\mathit{QM/MM}})$	$MSE(E^{\mathit{EMLE}}_{\mathit{static}}, E^{\mathit{QM/MM}}_{\mathit{static}})$	$MSE(E_{ind}^{EMLE}, E_{ind}^{QM/MM})$
set Iter1	-0.02 -0.07 -0.34 -0.43 -0.33 -0.42 -0.03 -0.06 0.10 0.06	-0.14 -0.14 -0.55 -0.55 -0.54 -0.54 -0.10 -0.10 -0.01 -0.01	0.11 0.07 0.21 0.12 0.21 0.12 0.06 0.04 0.12 0.07
ta	-0.15 -0.17 -0.59 -0.66 -0.56 -0.65 -0.34 -0.36 -0.11 -0.13	-0.10 -0.10 -0.75 -0.75 -0.72 -0.72 -0.30 -0.30 -0.15 -0.15	-0.05-0.080.16 0.09 0.16 0.07-0.04-0.060.04 0.02 -0.05-0.080.16 0.09 0.16 0.07-0.04-0.060.04 0.02
Testing Da Iter3 Iter2	-0.12 -0.12 -0.60 -0.66 -0.60 -0.66 -0.27 -0.28 -0.17 -0.18	-0.08 -0.08 -0.76 -0.76 -0.76 -0.76 -0.24 -0.24 -0.21	-0.04·0.040.17 0.10 0.16 0.10-0.03·0.050.04 0.030.6 \(\frac{\text{0.05}}0.04} 0.03}}}}} -0.6 \(\frac{\text{\text{\text{\text{\text{\text{\text{\text{\text{\text{\text{\text{0.05}}0.04} 0.03}}}}} \\ \end{\text{0.05}}\text{0.05}}\text{\texi{\text{\text{\texi}\text{\text{\text{\text{\text{\t
	$MUE(E_{int}^{\mathit{EMLE}}, E_{int}^{\mathit{QM/MM}})$	$MUE(E_{static}^{\mathit{EMLE}}, E_{static}^{\mathit{QM/MM}})$	$MUE(E_{ind}^{\mathit{EMLE}}, E_{ind}^{\mathit{QM/MM}})$
aset Iter1	1.59 1.60 1.01 1.06 1.00 1.05 0.75 0.73 0.75 0.73	1.60 1.60 1.10 1.10 1.09 1.09 0.72 0.72 0.71 0.71	0.37 0.31 0.28 0.22 0.28 0.21 0.20 0.13 0.21 0.13
ting Dat	1.82 1.79 1.19 1.23 1.16 1.21 0.87 0.84 0.83 0.78	1.77 1.77 1.24 1.24 1.22 1.22 0.80 0.80 0.77 0.77	0.51 0.43 0.32 0.23 0.32 0.23 0.25 0.18 0.24 0.15 -1.0 S S S S S S S S S
Testing Iter3 Ite	1.81 1.77 1.18 1.21 1.16 1.19 0.84 0.81 0.81 0.77	1.75 1.75 1.24 1.24 1.21 1.21 0.77 0.77 0.76 0.76	0.50 0.39 0.30 0.23 0.30 0.22 0.25 0.17 0.23 0.15
	$R^2(E_{int}^{EMLE}, E_{int}^{QM/MM})$	$R^2(E_{static}^{EMLE},E_{static}^{QM/MM})$	$R^2(E_{ind}^{EMLE}, E_{ind}^{QM/MM})$ - 1.00
aset Iter1	0.94 0.94 0.98 0.98 0.98 0.98 0.99 0.99 0.99 0.99	0.92 0.92 0.97 0.97 0.97 0.97 0.99 0.99 0.99	0.91 0.94 0.95 0.97 0.95 0.97 0.99 0.97 0.99 - 0.98
ssting Dat	0.95 0.95 0.98 0.98 0.98 0.98 0.99 0.99 0.99 0.99	0.93 0.93 0.97 0.97 0.97 0.97 0.99 0.99 0.99	0.89 0.92 0.96 0.98 0.96 0.98 0.97 0.98 0.99 0.99
Tes Iter3	0.96 0.96 0.98 0.98 0.98 0.98 0.99 0.99 0.99 0.99	0.94 0.94 0.97 0.97 0.97 0.99 0.99 0.99 0.99	0.90 0.94 0.97 0.98 0.97 0.98 0.99 0.98 0.99 - 0.90
	$ ho({\it E_{int}^{\it EMLE}}, {\it E_{int}^{\it QM/MM}})$	$ ho(E_{static}^{\it EMLE}, E_{static}^{\it QM/MM})$	$ ho(E_{ind}^{\it EMLE}, E_{ind}^{\it QM/MM})$ - 1.00
aset Iter1	0.97 0.97 0.99 0.99 0.99 0.99 0.99 0.99	0.96 0.96 0.99 0.99 0.99 0.99 0.99 0.99	0.96 0.97 0.98 0.99 0.98 0.99 0.99 0.99 0.99 0.99
sting Dat Iter2	0.98 0.98 0.99 0.99 0.99 0.99 1.00 1.00 1.00	0.97 0.97 0.99 0.99 0.99 0.99 0.99 0.99	0.96 0.97 0.98 0.99 0.98 0.99 0.99 0.99 0.99 1.00
Test Iter3	0.98 0.98 0.99 0.99 0.99 0.99 1.00 1.00 1.00	0.97 0.97 0.99 0.99 0.99 1.00 1.00 1.00 1.00	0.97 0.98 0.99 0.99 0.99 0.99 1.00 0.99 1.00 - 0.96 - 0.96
	$ au(E_{int}^{\mathit{EMLE}},E_{int}^{\mathit{QM/MM}})$	$ au(E_{static}^{\it EMLE},E_{static}^{\it QM/MM})$	$\tau(E_{ind}^{EMLE}, E_{ind}^{QM/MM})$ - 1.00
aset Iter1	0.87 0.87 0.91 0.91 0.91 0.91 0.93 0.93 0.93 0.93	0.85 0.85 0.90 0.90 0.90 0.90 0.92 0.92 0.92 0.92	0.82 0.86 0.89 0.91 0.89 0.91 0.91 0.94 0.91 0.94 - 0.95
esting Data Iter2	0.88 0.88 0.93 0.92 0.93 0.93 0.94 0.94 0.94 0.94	0.86 0.86 0.91 0.91 0.91 0.91 0.93 0.93 0.93 0.93	0.84 0.87 0.90 0.92 0.90 0.92 0.92 0.94 0.92 0.95
Test Iter3	0.89 0.89 0.93 0.93 0.93 0.93 0.94 0.94 0.94 0.94	0.86 0.86 0.92 0.92 0.92 0.92 0.93 0.93 0.93 0.93	0.85 0.88 0.91 0.92 0.91 0.92 0.92 0.95 0.92 0.95 - 0.85
	QM7-Reference Bespoke-Species-Iter1 Bespoke-Reference-Iter2 Bespoke-Reference-Iter2 Bespoke-Reference-Iter2 Patched-Species-Iter1 Patched-Reference-Iter1 Patched-Reference-Iter2	QM7-Species QM7-Reference Bespoke-Species-Iter1 Bespoke-Reference-Iter2 Bespoke-Reference-Iter2 Patched-Species-Iter1 Patched-Species-Iter1 Patched-Reference-Iter2 Patched-Reference-Iter2	QM7-Species QM7-Reference Bespoke-Species-Iter1 Bespoke-Reference-Iter2 Bespoke-Reference-Iter2 Patched-Species-Iter1 Patched-Reference-Iter2 Patched-Reference-Iter2 Patched-Reference-Iter2 Patched-Reference-Iter2