RMSE performance of the cliff test set (RMSE _{cliff})																																	
	AFP-	1.37	0.90	1.24	0.99	1.23	0.86	1.06	1.04	0.87	1.16	1.31	0.97	1.11	1.10	1.41	1.13	1.16	1.22	1.08	1.42	1.57	1.59	0.95	1.23	1.18	1.30	1.27	1.74	1.16	1.13	1.192	1.2
Algorithm	MPNN-	0.93	0.95	1.11	1.15	1.21	0.92	1.01	1.06	0.86	0.89	1.19	0.92	1.07	0.94	1.11	1.24	1.01	0.97	1.02	1.45	1.48	1.56	0.93	1.14	1.04	1.33	1.15	1.58	1.22	1.15	1.120	
	GAT-	0.92	0.79	1.01	0.91	0.95	0.91	0.94	0.98	0.84	1.00	1.01	0.98	0.92	0.97	1.10	1.14	1.03	0.99	0.90	1.10	1.01	1.12	0.94	1.10	1.03	1.06	1.04	1.28	0.97	1.21	1.005	-1.1
	GCN-	0.83	0.78	0.93	0.80	0.92	0.92	0.91	0.95	0.83	0.94	1.04	1.06	0.93	0.92	1.15	1.08	1.00	0.90	0.91	1.00	1.02	1.06	0.93	1.11	1.00	1.09	1.01	1.20	0.80	1.21	0.974	
	Transf	0.89	0.73	0.91	0.88	0.85	0.85	0.88	0.90	0.82	0.96	0.91	0.94	0.77	0.95	1.06	0.95	0.98	0.93	0.94	1.10	1.03	1.07	0.94	1.12	1.05	1.18	1.07	1.25	1.03	1.14	0.970	-1.0
	CNN-	0.93	0.77	0.97	0.86	0.90	0.88	0.92	0.93	0.82	0.90	0.96	0.97	0.87	0.86	1.04	1.01	0.94	0.92	0.93	1.07	0.99	1.07	0.93	1.08	0.95	1.02	1.04	1.23	1.04	1.23	0.968	
	LSTM-	0.72	0.79	0.75	0.79	0.79	0.80	0.77	0.82	0.83	0.79	0.85	0.85	0.84	0.89	0.86	0.85	0.88	0.89	0.90	0.91	0.91	0.91	0.94	0.94	0.78	0.90	0.85	0.93	1.07	1.32	0.871	-0.9
	KNN-	0.68	0.74	0.72	0.74	0.73	0.70	0.81	0.78	0.83	0.82	0.79	0.82	0.86	0.78	0.85	0.87	0.81	0.96	0.75	0.86	0.86	0.87	0.91	0.91	0.90	0.88	0.82	1.00	1.02	1.07	0.839	
	MLP-	0.70	0.73	0.68	0.72	0.73	0.68	0.73	0.81	0.78	0.78	0.82	0.83	0.88	0.76	0.77	0.78	0.76	0.85	0.77	0.81	0.90	0.85	0.85	0.92	0.95	0.95	0.96	0.96	1.27	1.03	0.833	-0.8
	RF-	0.68	0.66	0.72	0.71	0.66	0.68	0.74	0.76	0.77	0.69	0.76	0.77	0.80	0.64	0.80	0.80	0.77	0.89	0.73	0.79	0.82	0.82	0.85	0.88	0.77	0.79	0.91	0.90	0.91	1.08	0.786	
	GBM-	0.62	0.64	0.69	0.72	0.64	0.65	0.72	0.75	0.77	0.75	0.81	0.76	0.79	0.67	0.79	0.76	0.72	0.85	0.75	0.79	0.82	0.82	0.86	0.89	0.73	0.88	0.92	0.93	0.95	1.08	0.783	-0.7
	SVM-	0.58	0.69	0.64	0.67	0.68	0.63	0.67	0.76	0.69	0.67	0.77	0.79	0.74	0.66	0.74	0.72	0.68	0.81	0.74	0.80	0.82	0.80	0.81	0.86	0.66	0.78	0.87	0.86	0.93	1.00	0.751	
P	CANet-	0.54	0.67	0.60	0.68	0.70	0.61	0.64	0.75	0.71	0.66	0.74	0.69	0.69	0.72	0.80	0.70	0.66	0.75	0.70	0.78	0.78	0.71	0.82	0.88	0.64	0.79	0.87	0.80	0.88	1.01	0.732	0.6
	-	PIM1-	FXR-	OX2R-	PPARy-	DAT-	D3R-	HRH3-	CB1-	GHSR-	ABL1-	PPARd-	D4R-	JAK1-	JAK2-	KOR (i)-	5-HT1A-	SERT-	SOR-	PIK3CA-	DOR-	PPARa-	Α̈́	GR-	MOR-	GSK3-	KOR (a)-	AR-	-hrombin-	HRH1-	CLK4-	Avg.	-0.6
																Data	aset																