

表S1 有机物对月牙藻的毒性数据

Tab. S1 Toxicity value of organic chemicals to *Pseudokirchneriella subcapitata*

序号	物质数字 识别号码	pEC <sub>10</sub>	pEC <sub>10</sub>	pEC <sub>50</sub>	pEC <sub>50</sub>	数据类型
		实验值	计算值	实验值	计算值	
1	55335-06-3	0.5765	1.6189	0.1058	1.3141	训练集
2	112-13-0	1.3510	2.8681	1.0763	1.7568	训练集
3	57052-04-7	3.5161	5.0992	3.0268	3.1740	训练集
4	118-00-3	-0.2494	0.3348	-0.9561	-0.4804	训练集
5	102-82-9	0.8701	2.3940	0.4687	1.4705	训练集
6	67-64-1	-1.7196	-2.1485	-2.0432	-2.6498	训练集
7	607-00-1	1.0162	1.3398	0.7765	1.7174	训练集
8	15118-60-2	-0.0254	1.1376	-0.4341	0.1313	训练集
9	761-65-9	0.3515	1.1954	-0.1378	1.0533	训练集
10	55-56-1	4.2396	3.8010	4.0463	4.1496	训练集
11	653-63-4	0.5856	1.1038	0.1345	0.5292	训练集
12	609-54-1	-1.4443	-0.3729	-1.9604	-1.2566	训练集
13	112-56-1	2.0294	2.6772	1.2290	1.9711	训练集
14	56-75-7	3.2306	4.6692	1.8966	2.2892	训练集
15	119-90-4	1.8694	1.6108	1.2740	1.6458	训练集
16	67306-00-7	3.0056	4.4109	2.3577	2.9898	训练集
17	1930-72-9	2.8256	2.0805	2.4820	2.3186	训练集
18	1122-62-9	-0.5284	0.3561	-0.8342	0.0752	训练集
19	1443-80-7	0.4991	0.5139	0.1841	0.7295	训练集
20	2687-12-9	1.4659	2.0174	0.9653	1.4019	训练集
21	88-74-4	0.6632	1.8362	0.3078	1.2233	训练集
22	28554-00-9	-0.3607	1.0012	-1.5183	-0.2043	训练集
23	98-86-2	0.0797	0.3216	-0.2191	0.1652	训练集
24	55-81-2	0.6481	1.5578	0.3943	0.7400	训练集
25	2446-83-5	0.6068	1.4721	-0.0287	1.0023	训练集
26	13360-45-7	4.3537	4.5814	3.8242	3.7778	训练集
27	103-84-4	0.1266	0.4119	-0.3448	-0.1932	训练集
28	87-89-8	-1.4118	-0.2422	-1.4886	-0.2588	训练集
29	591-54-8	-0.6482	-0.5611	-1.0389	-0.5852	训练集
30	56-06-4	-0.3479	-0.7720	-0.6119	-0.6957	训练集
31	375-01-9	0.0345	0.4161	-0.2875	-0.7851	训练集
32	103-54-8	1.3166	1.9758	1.1321	1.5666	训练集
33	50-71-5	-0.7468	0.4945	-1.1331	-0.9577	训练集
34	111-47-7	0.4272	1.0221	0.3224	0.8942	训练集
35	58-08-2	0.3060	0.8596	-0.2546	1.3447	训练集
36	127-18-4	1.4970	2.5406	1.2240	1.2493	训练集
37	1155328	0.3777	0.2375	0.1165	0.3455	训练集
38	61-80-3	1.3237	1.3848	0.8651	0.6812	训练集
39	2008-58-4	0.8475	1.7714	0.6161	0.9891	训练集

40	4200-95-7	3.7172	4.4469	3.6080	4.4510	训练集
41	60-32-2	-0.6508	1.0017	-1.8296	-0.0237	训练集
42	143-16-8	2.4300	3.2027	2.2706	2.6699	训练集
43	104-75-6	1.0740	1.6155	0.6505	1.0635	训练集
44	66215-27-8	0.9196	0.9036	0.5485	0.4370	训练集
45	434-64-0	1.3560	1.0328	0.9209	1.4902	训练集
46	1119-46-6	0.6150	1.2772	-0.2148	0.9649	训练集
47	86-30-6	2.2972	2.4052	0.9152	1.9133	训练集
48	56-53-1	2.8096	2.7820	2.0476	1.4305	训练集
49	121-69-7	0.5783	0.9266	0.2981	0.2982	训练集
50	81-04-9	-1.4963	-1.8167	-1.7333	-2.2575	训练集
51	836-30-6	3.3815	3.2111	2.0013	2.0732	训练集
52	139-40-2	3.2820	3.4619	2.7814	3.2953	训练集
53	37529-27-4	3.0095	2.6302	2.7365	1.9358	训练集
54	123-82-0	0.9824	1.2467	0.4281	1.0033	训练集
55	614-00-6	0.9036	1.1075	0.5320	1.1089	训练集
56	73250-68-7	4.1323	4.1606	3.0768	2.8190	训练集
57	96-05-9	0.4382	0.8953	0.1187	0.2503	训练集
58	107-11-9	-0.5010	-0.3964	-0.9052	-0.7328	训练集
59	22936-75-0	4.8494	5.0021	4.5191	4.5331	训练集
60	93-99-2	2.2558	2.2882	1.7408	2.5003	训练集
61	123-05-7	0.7796	0.8596	0.5409	0.7235	训练集
62	634-91-3	2.1793	2.5441	1.7370	1.9438	训练集
63	2626-52-0	2.6681	2.0711	2.5642	3.0295	训练集
64	123-11-5	0.6025	0.6986	0.1428	0.4194	训练集
65	36082-50-5	2.9598	2.6368	2.8014	2.6068	训练集
66	39905-57-2	2.5761	2.4986	1.9340	2.4633	训练集
67	39634-42-9	2.3614	2.2951	2.1651	1.8259	训练集
68	67-66-3	0.1556	-0.2743	-0.0727	0.0033	训练集
69	94-25-7	1.9244	1.9258	1.5379	2.1024	训练集
70	95-47-6	0.9161	1.0245	0.7950	0.5326	训练集
71	116-16-5	1.7696	1.6421	0.4272	2.0491	训练集
72	372-75-8	-0.4332	0.1134	-1.5966	-0.8319	训练集
73	462-18-0	2.6458	2.6738	2.2405	1.7356	训练集
74	2050-47-7	3.3398	3.1991	3.1357	3.0556	训练集
75	24544-04-5	1.9290	2.0685	0.9870	2.0936	训练集
76	117-80-6	3.5637	3.4396	3.0339	3.1511	训练集
77	586-11-8	2.4589	1.8700	2.2966	1.2273	训练集
78	62-23-7	1.0769	1.4987	0.7606	0.7732	训练集
79	93-02-7	1.0445	0.7256	0.5973	0.8378	训练集
80	66-25-1	0.6785	0.6198	0.4325	0.4915	训练集
81	3060-89-7	3.2094	3.1254	2.6211	2.5202	训练集
82	22134-07-2	3.6318	3.2973	3.3131	2.0886	训练集
83	37529-30-9	4.1209	3.9279	3.5980	3.0305	训练集

84	144-83-2	2.4020	2.8163	0.1157	0.2177	训练集
85	110-96-3	1.2030	2.0423	0.9073	0.9991	训练集
86	3481-20-7	2.6011	2.5260	2.3171	2.0466	训练集
87	5407-98-7	1.6131	2.1741	1.1627	0.9751	训练集
88	118-75-2	2.5042	2.9416	2.0483	2.8937	训练集
89	65-45-2	0.9330	0.2429	0.1976	-0.0951	训练集
90	19044-88-3	4.2843	3.4315	3.0210	3.5598	训练集
91	4441-63-8	1.1727	1.5460	0.5307	0.6092	训练集
92	111-86-4	2.0700	1.8512	1.8562	1.5991	训练集
93	69-93-2	0.1725	0.0454	0.0134	-0.7390	训练集
94	111-71-7	1.0533	1.0509	0.7976	0.6988	训练集
95	771-97-1	2.1200	1.8516	1.5460	1.1021	训练集
96	31704-80-0	1.0684	1.0270	0.8814	0.9261	训练集
97	59-00-7	1.4548	1.9246	0.9319	0.2451	训练集
98	1867-73-8	2.4491	1.2456	2.1067	0.3321	训练集
99	1610-18-0	3.1433	2.1481	2.8303	2.2677	训练集
100	97-17-6	3.2078	3.5241	2.8930	1.9187	训练集
101	10353-53-4	0.7033	1.2709	0.3675	0.4352	训练集
102	101-55-3	3.2916	2.7543	2.9269	2.2380	训练集
103	2869-34-3	3.8550	3.5813	3.5678	3.2647	训练集
104	124-22-1	3.6887	3.2719	3.5182	2.8701	训练集
105	1122-82-3	2.6714	2.7630	2.4161	2.6544	训练集
106	51218-45-2	4.3069	4.4827	3.1308	3.8795	训练集
107	112-38-9	2.3156	2.1012	1.7442	1.6918	训练集
108	143-10-2	3.2703	2.9807	2.6867	2.8206	训练集
109	103-72-0	2.9120	2.0798	2.6375	2.2774	训练集
110	619-80-7	2.2076	1.6307	2.0030	0.7190	训练集
111	74261-65-7	3.4519	3.2497	3.1228	3.3517	训练集
112	1746-81-2	3.4929	2.3553	2.7635	2.0662	训练集
113	71-44-3	2.6249	2.2471	1.6829	1.8033	训练集
114	330-12-1	0.9524	0.8534	0.4690	1.0361	训练集
115	23184-66-9	5.5227	5.1246	4.7501	4.9010	训练集
116	2570-26-5	4.6087	4.4988	4.4124	3.7645	训练集
117	112-18-5	4.4261	4.0063	3.8979	2.7423	训练集
118	4559-79-9	2.1117	0.8163	1.5096	0.7655	训练集
119	592-82-5	2.7190	2.5223	2.5051	2.3704	训练集
120	2016-57-1	3.6725	2.6006	3.2791	2.4122	训练集
121	73-40-5	1.4085	0.2698	0.4634	-0.3571	训练集
122	2253-73-8	2.5525	1.7477	2.1375	1.2641	训练集
123	51218-49-6	5.6669	6.3616	4.6837	4.4640	训练集
124	21087-64-9	4.3310	3.5852	3.7869	2.4222	训练集
125	1674-38-0	4.8313	4.1515	4.1604	3.2975	训练集
126	2855-13-2	2.1898	1.6843	1.9759	1.5385	训练集
127	557-31-3	1.3596	0.2138	1.1108	-0.0252	训练集

128	4410-99-5	2.5174	2.2985	2.0992	1.8488	训练集
129	116-54-1	2.1139	1.1396	0.9792	0.1902	训练集
130	2916-14-5	3.0251	2.0342	2.5974	1.2525	训练集
131	56-55-3	4.8602	4.6036	2.8961	3.7438	训练集
132	51235-04-2	4.2880	1.7916	3.8834	3.1569	训练集
133	57-06-7	3.0825	1.6256	2.8502	1.6191	训练集
134	94-26-8	3.4828	2.1287	3.2927	1.9745	训练集
135	422-64-0	2.0688	1.1042	0.7836	-0.7439	训练集
136	709-98-8	4.7704	3.3932	3.4410	2.5223	训练集
137	107-95-9	1.1574	-0.1419	-0.0233	-1.2719	训练集
138	34256-82-1	6.0331	4.3548	4.4768	4.0049	训练集
139	67-68-5	-2.4624	-2.0723	-2.6902	-2.8627	训练集
140	133-67-5	0.5198	0.2768	-0.2041	0.0132	训练集
141	60-01-5	0.9620	2.5157	0.4313	1.4005	训练集
142	62-44-2	0.6406	1.1071	0.0520	0.3173	训练集
143	2439-35-2	2.7088	1.1667	1.9518	0.5269	训练集
144	50-32-8	5.4242	5.3734	5.1652	4.3461	训练集
145	120-47-8	2.8589	1.3821	2.6185	0.9198	训练集
146	90982-32-4	6.2956	5.6140	5.3626	4.6304	训练集
147	52-66-4	1.4836	0.7412	0.7936	1.0429	训练集
148	762-75-4	-1.1868	-0.5728	-1.3601	-1.2800	训练集
149	685-91-6	-0.9639	-0.6620	-1.3134	-0.5890	测试集
150	997-55-7	-1.3576	-0.5795	-1.5878	-1.3241	测试集
151	447-31-4	2.2839	3.7446	1.6555	2.5818	测试集
152	43121-43-3	2.1256	3.6612	1.4266	2.9254	测试集
153	107-87-9	-1.0103	-0.3179	-1.3413	-0.7889	测试集
154	80-73-9	-1.2668	-0.3547	-1.5036	-0.4619	测试集
155	60-82-2	1.0580	1.1033	0.9067	1.0560	测试集
156	66-22-8	-1.3818	-0.4936	-1.6986	-1.2994	测试集
157	627-00-9	-0.7027	1.1505	-1.1694	0.4670	测试集
158	101-05-3	2.4908	3.5961	2.1898	3.8115	测试集
159	700-58-3	0.1160	0.9443	-0.1476	-0.0317	测试集
160	102-81-8	0.7337	1.0170	0.2894	0.5863	测试集
161	2688-84-8	1.7236	2.1669	1.3539	2.0686	测试集
162	591-78-6	-0.3831	0.0509	-0.7846	-0.4940	测试集
163	1121-37-5	-0.3645	0.6596	-0.7332	-0.1617	测试集
164	109-74-0	-0.9110	0.4538	-1.2777	-0.1954	测试集
165	115-20-8	-0.1520	0.1643	-0.5051	-1.2264	测试集
166	108-60-1	0.1504	1.5873	-0.1112	1.5515	测试集
167	53-96-3	2.3075	1.9169	1.9175	1.6922	测试集
168	123-19-3	-0.0143	0.8361	-0.2728	0.1607	测试集
169	121-05-1	0.0452	0.2208	-0.4286	-0.2375	测试集
170	83-88-5	1.8353	2.7437	1.4964	0.9529	测试集
171	305-84-0	0.8361	0.9101	0.6222	0.2902	测试集

172	2623-87-2	-0.0468	0.6717	-0.3985	0.3664	测试集
173	104-20-1	1.1370	1.1042	0.6425	0.9189	测试集
174	4392-24-9	1.1560	2.4335	1.0177	1.7448	测试集
175	119-52-8	1.8016	2.0903	1.1340	1.6075	测试集
176	40487-42-1	4.3021	4.0165	3.3851	3.3842	测试集
177	106-68-3	0.3970	1.2904	0.1760	0.8038	测试集
178	59-31-4	0.4060	1.2404	-0.4292	0.1213	测试集
179	64-10-8	0.5006	0.3365	-0.0333	-0.3313	测试集
180	104-54-1	0.3873	1.4027	0.0983	0.4943	测试集
181	505-23-7	0.0506	0.1348	-0.6021	0.2104	测试集
182	3399-73-3	0.7211	1.2001	0.3373	1.0313	测试集
183	117-18-0	2.9639	3.4929	2.4666	2.8632	测试集
184	91-65-6	0.7762	1.4750	0.3523	0.6856	测试集
185	3352-87-2	3.4526	3.2414	3.3213	3.0568	测试集
186	121-87-9	1.7055	2.6209	1.0609	1.8166	测试集
187	100-01-6	0.9942	1.6816	0.5068	1.0330	测试集
188	2550-26-7	0.8092	0.9032	0.6146	0.4316	测试集
189	36157-40-1	1.6566	0.6316	1.4640	1.7856	测试集
190	4455-26-9	3.7946	5.0840	3.5043	3.4573	测试集
191	97-59-6	-0.9502	-0.3829	-1.4031	-1.7871	测试集
192	100-47-0	0.2425	0.7927	-0.0973	0.1292	测试集
193	3453-83-6	-0.9106	-0.9831	-1.2156	-0.3710	测试集
194	29530	2.2517	2.8765	1.8258	0.8809	测试集
195	18240-68-1	0.3818	0.9529	-0.2959	-0.8140	测试集
196	7287-19-6	4.5195	4.4481	3.9562	3.8930	测试集
197	80-11-5	0.7708	1.1805	0.3919	1.0653	测试集
198	121-75-5	1.5896	2.0283	1.1388	1.4658	测试集
199	495-48-7	2.4107	3.3986	2.1701	2.1051	测试集
200	543-82-8	1.2030	1.5107	0.7690	1.2371	测试集
201	1226-42-2	2.2783	2.4186	1.4587	1.7357	测试集
202	619-45-4	0.6610	0.9676	0.2350	0.3297	测试集
203	33228-45-4	2.5789	2.5925	2.4162	1.7916	测试集
204	124-20-9	0.6850	1.3554	0.3913	0.9722	测试集
205	104-42-7	4.1048	4.5060	3.4784	3.7543	测试集
206	101-79-1	2.8013	2.8206	2.5473	2.4786	测试集
207	107-85-7	0.0947	0.4461	-0.6451	0.0141	测试集
208	375-22-4	0.5402	0.8526	-0.9320	-0.5278	测试集
209	67-36-7	2.1432	2.1345	1.6752	2.4303	测试集
210	91-20-3	1.2505	1.7202	1.1078	1.0236	测试集
211	140-49-8	3.2464	2.3557	2.7941	2.3041	测试集
212	534-52-1	2.4976	2.3615	2.1830	1.6152	测试集
213	75-09-2	-0.1372	0.2072	-0.3595	0.0331	测试集
214	544-40-1	1.8488	1.9621	1.3031	1.8184	测试集
215	534-52-1	-0.3497	-0.7795	-0.6588	-1.7152	测试集

216	103-33-3	2.2072	3.4418	2.0424	2.5892	测试集
217	111-26-2	0.9637	0.9553	0.6072	0.8017	测试集
218	621-77-2	2.9551	3.4110	1.7378	2.1622	测试集
219	66-99-9	1.4777	1.4938	1.0176	1.1420	测试集
220	118-44-5	1.7022	2.5260	1.3703	1.4530	测试集
221	16182-04-0	1.6264	2.4221	0.5157	1.3715	测试集
222	95-80-7	0.6556	0.5764	0.0042	-0.1913	测试集
223	5959-52-4	1.4031	1.7358	0.8252	1.1130	测试集
224	111-18-2	1.8384	1.9542	1.5288	1.6862	测试集
225	13287-49-5	3.6351	3.4809	3.4018	2.9282	测试集
226	95-63-6	1.2617	1.5371	1.0856	0.9741	测试集
227	634-67-3	2.3156	2.5152	1.9316	1.9455	测试集
228	290-87-9	-0.0867	-1.2041	-0.4695	-0.9401	测试集
229	122-39-4	2.3593	2.2971	1.9497	1.9023	测试集
230	64902-72-3	4.1065	4.8696	3.0912	4.0259	测试集
231	462-94-2	0.2312	0.4216	-0.3271	0.6062	测试集
232	122-34-9	3.3046	3.2775	2.6814	2.7549	测试集
233	1866-31-5	2.3016	2.2160	2.1608	1.6141	测试集
234	101-84-8	2.3981	2.1052	2.1358	1.8957	测试集
235	150-13-0	-0.2431	0.3147	-0.7793	0.1013	测试集
236	4316-93-2	1.7964	2.5641	1.4427	2.2065	测试集
237	58-64-0	1.9585	1.5809	0.6961	1.3649	测试集
238	938-55-6	1.0086	1.1728	0.5999	0.7316	测试集
239	62-53-3	0.7138	0.2339	0.1240	-0.5762	测试集
240	99-40-1	2.1917	2.1920	1.8085	1.9965	测试集
241	111-68-2	1.4933	1.4121	1.3133	1.3893	测试集
242	112-29-8	3.1339	2.5947	2.6681	1.7199	测试集
243	33904-03-9	3.1145	2.6411	2.7108	2.6379	测试集
244	1912-24-9	3.6617	3.3779	3.1297	3.1739	测试集
245	538-62-5	3.2668	3.7371	2.7896	2.3922	测试集
246	683-72-7	0.8518	0.6657	-0.5461	-0.4267	测试集
247	112-20-9	2.8137	2.2415	2.5127	1.9062	测试集
248	95-93-2	1.6973	2.1442	1.1622	1.6553	测试集
249	14309-41-2	3.4568	3.3180	2.9580	3.1319	测试集
250	98-69-1	0.3724	0.0397	-0.2458	-1.3654	测试集
251	110-95-2	0.9686	0.5887	0.5833	0.7061	测试集
252	107-10-8	0.1919	-0.3981	-0.1148	-0.4281	测试集
253	87-17-2	2.8237	2.3887	2.2875	1.4770	测试集
254	443-72-1	0.9976	0.7159	0.5109	0.3360	测试集
255	79277-27-3	3.3329	3.6235	2.2871	2.8886	测试集
256	2179-57-9	1.6255	1.2609	1.3596	0.1481	测试集
257	91-66-7	1.8729	1.3750	1.6057	0.7317	测试集
258	50-78-2	0.7785	0.1679	-0.1264	0.3140	测试集
259	109-73-9	0.5631	-0.0688	0.0381	-0.0675	测试集

260	110-60-1	0.3889	0.1687	-0.7700	-0.2351	测试集
261	101-83-7	2.7065	2.8622	1.5239	1.9882	测试集
262	123-72-8	0.5792	-0.1533	0.1395	-0.3422	测试集
263	102-97-6	1.8122	1.7154	1.5304	0.6800	测试集
264	822-87-7	1.5315	1.3975	1.1402	1.0186	测试集
265	142459-58-3	6.0689	5.9421	4.3562	4.4963	测试集
266	95-03-4	1.6294	1.4354	0.9423	1.1415	测试集
267	456-22-4	0.7847	0.7610	0.2274	0.2331	测试集
268	110-17-8	0.4737	-0.6049	-1.0108	-1.3287	测试集
269	629-03-8	2.2932	1.5889	1.5708	0.5438	测试集
270	71-00-1	0.1822	0.2102	-0.8699	-0.1034	测试集
271	2050-76-2	3.7053	3.1466	3.1824	2.0450	测试集
272	4549-32-0	2.8613	2.3281	1.8681	0.7106	测试集
273	3218-02-8	1.4411	0.9999	0.9399	0.4899	测试集
274	42576-02-3	6.2246	5.0356	6.1134	5.0263	测试集
275	73-24-5	1.2117	0.7265	0.6394	0.5052	测试集
276	106-49-0	1.6498	0.6800	1.4390	0.0324	测试集
277	4224-70-8	1.5826	1.3491	0.5193	0.8996	测试集
278	59-89-2	1.1254	0.4115	0.1406	-0.4489	测试集
279	451-13-8	1.2526	0.5069	1.0496	-0.6133	测试集
280	107-59-5	2.9226	1.6543	2.5058	2.0749	测试集
281	135-67-1	2.5470	2.3399	2.1168	1.9237	测试集
282	34123-59-6	3.8673	2.2303	3.2731	1.5327	测试集
283	2016-42-2	4.7627	4.1586	4.4441	3.5768	测试集
284	551-06-4	4.3287	3.3736	3.9899	3.4278	测试集
285	56-12-2	0.4451	0.1499	-0.1935	-1.2078	测试集
286	81-50-5	5.0590	6.0991	4.4850	4.7163	测试集
287	4091-39-8	2.1191	0.5247	1.7723	0.1358	测试集
288	7307-55-3	4.3654	2.9408	3.8676	2.6065	测试集
289	94125-34-5	4.9608	4.6839	4.1912	4.2366	测试集
290	94-13-3	3.2144	1.8575	3.0253	1.3798	测试集
291	143-27-1	3.9205	4.8280	3.8146	4.1607	测试集
292	75-65-0	-0.0891	-0.2838	-0.2824	-1.6934	测试集
293	91-52-1	0.1021	0.6322	-0.2735	0.9104	测试集
294	95-76-1	1.9085	2.4350	1.2505	1.6620	测试集
295	99-76-3	0.8021	0.7735	0.2902	0.4141	测试集
296	66-77-3	1.5124	0.8538	1.1523	1.1232	测试集
297	4549-44-4	1.0006	1.0452	0.3986	0.7726	测试集
298	91-40-7	1.7056	2.1736	1.3844	1.6087	测试集

表 S2 pEC<sub>10</sub> 模型的范数描述符和回归参数

Tab. S2 The norm descriptors and the regression parameters of pEC<sub>10</sub> model

$I_a$	$M$	$K_a$
$I_1 = \ M_1\ _3$	$M_1 = D_{AB} \times  P_{ene\_val} - P_{ene\_val}^T $	$-7.601 \times 10^{-2}$
$I_2 = \ M_2\ _3$	$M_2 = D_A \times (P_{mul\_cha} \times P_{mul\_cha}^T)$	$-6.594 \times 10^{-3}$
$I_3 = \ M_3\ _3$	$M_3 = D \times (P_{aw\_mw} \times P_{aw\_mw}^T)$	$-11.7559$
$I_4 = \ M_4\ _3$	$M_4 = S \times P_{one}$	$7.325 \times 10^{-3}$
$I_5 = \ M_5\ _1$	$M_5 = S_{AB} \times (P_{ele\_aw} \times P_{ele\_aw}^T)$	$-3.6 \times 10^{-4}$
$I_6 = \ M_6\ _2$	$M_6 = S_A \times (P_{one} \times P_{one}^T)$	$0.1132$
$I_7 = \ M_7\ _1$	$M_7 = D_{AB} \times  P_{npa\_val} - P_{npa\_val}^T $	$0.3274$
$I_{10} = \ M_{10}\ _1$	$M_{10} = D_A \times  P_{npa\_val} - P_{npa\_val}^T $	$-0.2614$
$I_{11} = \ M_{11}\ _1$	$M_{11} = D \times (P_{gop\_tot} \times P_{gop\_tot}^T)$	$1.2401 \times 10^{-2}$
$I_{12} = \ M_{12}\ _2$	$M_{12} = S_B \times P_{ea}$	$8.297 \times 10^{-3}$
$I_{13} = \ M_{13}\ _2$	$M_{13} = D \times P_{npa\_ryd}$	$-27.3605$
$I_{14} = \ M_{14}\ _1$	$M_{14} = S_B \times P_{e\_ion}$	$0.1295$
$I_{15} = \ M_{15}\ _1$	$M_{15} = D_C \times  P_{gop\_ryd} - P_{gop\_ryd}^T $	$-0.21997$
$I_{16} = \ M_{16}\ _F$	$M_{16} = D_B \times P_{ele\_aw}$	$-17.0962$
$I_{17} = \ M_{17}\ _1$	$M_{17} = D_A \times (P_{npa\_val} \times P_{npa\_val}^T)$	$-3.279 \times 10^{-3}$
$I_{18} = \ M_{18}\ _2$	$M_{18} = D \times (P_{elp} \times P_{elp}^T)$	$-6.2785 \times 10^{-4}$



表 S3 pEC<sub>50</sub> 模型的范数描述符和回归参数

Tab. S3 The norm descriptors and the regression parameters of pEC<sub>50</sub> model

$I_b$	$M$	$K_b$
$I_1 = \ M_1\ _3$	$M_1 = S_{AB} \cdot P_{esn}$	$3.5015 \times 10^{-2}$
$I_2 = \ M_2\ _1$	$M_2 = D_A \cdot (P_{npa\_tot} \times P_{npa\_tot}^T)$	$-2.382 \times 10^{-2}$
$I_3 = \ M_3\ _F$	$M_3 = D \times (P_{npa\_cha} \times P_{npa\_cha}^T)$	$-0.6365$
$I_4 = \ M_4\ _1$	$M_4 = D_{AB} \times (P_{npa\_cha} \times P_{npa\_cha}^T)$	$0.2087$
$I_5 = \ M_5\ _1$	$M_5 = D_C \times (P_{aw\_mw} \times P_{aw\_mw}^T)$	$29.422$
$I_6 = \ M_6\ _1$	$M_6 = S_C \cdot  P_{e\_rad} - P_{e\_rad}^T $	$1.515$
$I_7 = \ M_7\ _1$	$M_7 = D \cdot (P_{elp} \times P_{elp}^T)$	$4.3879 \times 10^{-4}$
$I_8 = \ M_8\ _1$	$M_8 = D_{ABC} \times (P_{npa\_val} \times P_{npa\_val}^T)$	$-4.556 \times 10^{-3}$
$I_9 = \ M_9\ _2$	$M_9 = D_C \cdot P_{npa\_cor}$	$-0.7708$
$I_{10} = \ M_{10}\ _3$	$M_{10} = MD \cdot (MP_{ele\_aw} \times MP_{ele\_aw}^T)$	$-20.963$
$I_{11} = \ M_{11}\ _3$	$M_{11} = S_B \cdot  P_{ele\_aw} - P_{ele\_aw}^T $	$-2.205 \times 10^{-3}$
$I_{12} = \ M_{12}\ _1$	$M_{12} = S \times (P_{one} \times P_{one}^T)$	$7.8141 \times 10^{-4}$
$I_{13} = \ M_{13}\ _3$	$M_{13} = D_B \cdot P_{esp\_cha}$	$-0.3175$
$I_{14} = \ M_{14}\ _1$	$M_{14} = D_C \cdot  P_{aw\_mw} - P_{aw\_mw}^T $	$-14.1663$
$I_{15} = \ M_{15}\ _2$	$M_{15} = D_A \cdot (P_{npa\_val} \times P_{npa\_val}^T)$	$0.1183$
$I_{16} = \ M_{16}\ _2$	$M_{16} = D_C \cdot (P_{esp\_cha} \times P_{esp\_cha}^T)$	$7.883$
$I_{17} = \ M_{17}\ _1$	$M_{17} = D_C \times (P_{esp\_cha} \times P_{esp\_cha}^T)$	$0.3988$
$I_{18} = \ M_{18}\ _3$	$M_{18} = D_C \times (P_{mul\_cha} \times P_{mul\_cha}^T)$	$-1.257 \times 10^{-2}$