

PDB ID	Ag Size	DiscoTope-2.0			EpiPred			Our model		
		Precision	Recall	MCC	Precision	Recall	MCC	Precision	Recall	MCC
4hj0	92	0	0	0	0.32	0.9	0.27	0.61	0.621	0.231
1tzh	94	0.73	0.87	0.72	0.01	0.06	0.04	0.692	0.683	0.376
4am0	96	0.33	0.2	0.19	0.13	0.7	0.09	0.547	0.569	0.114
2ih3	97	0	0	0	0.16	0.64	0.08	0.755	0.765	0.519
4i77	97	0	0	0	0.23	0.55	0	0.807	0.777	0.584
3q1s	113	0	0	0	0.19	0.81	0.15	0.673	0.754	0.419
1p2c	129	1	0.05	0	0	0	0	0.68	0.806	0.469
4ht1	131	0	0	0	0.05	0.14	0.05	0.622	0.59	0.21
3ab0	136	0	0	0	0.33	0.73	0.34	0.399	0.491	-0.068
1v7m	145	0	0	0	0.26	0.77	0.29	0.902	0.792	0.685
4g3y	148	1	0.17	0.33	0.03	0.08	0.04	0.705	0.778	0.478
2vxt	156	0.47	0.36	0.3	0.04	0.09	0.04	0.648	0.692	0.337
3u9p	169	0.06	0.05	0	0.31	1	0.47	0.688	0.695	0.382
3o2d	178	0	0	0	0.32	0.64	0.28	0.85	0.857	0.707
1fns	196	1	0.07	0	0	0	0	0.839	0.727	0.555
3ma9	197	0	0	0	0	0	0	0.47	0.462	-0.068
3rvv	223	0.15	0.17	0.07	0.25	0.93	0.39	0.548	0.544	0.093
3raj	230	0	0	0	0	0	0	0.519	0.521	0.04
1nfd	239	0.92	0.7	0.75	0.07	0.23	0.04	0.565	0.639	0.19
3i50	273	0	0	0	0	0	0	0.893	0.819	0.708
3gjf	276	0.05	0.11	0.05	0.15	0.66	0.2	0.64	0.759	0.381
3liz	329	0	0	0	0.26	0.68	0.34	0.555	0.51	0.047
3pgf	358	0	0	0	0.02	0.04	0	0.507	0.508	0.015
3zkm	375	0	0	0	0.32	0.88	0.46	0.802	0.684	0.472
3r1g	381	0	0	0	0.37	1	0.57	0.714	0.546	0.198
4jr9	409	0.46	0.5	0.46	0.19	0.85	0.34	0.657	0.901	0.502
4ene	442	0	0	0	0	0	0	0.649	0.554	0.18
3o0r	449	0	0	0	0.08	0.7	0.19	0.653	0.775	0.41
3t3p	453	0.25	0.04	0	0	0	0	0.599	0.696	0.278
1n8z	581	0	0	0	0	0	0	0.525	0.628	0.113

Table S1 The summarizing results on testing set.