

Table s1. Basic information of drugs, excipients and APIs

Class	Name	Specifications	Galenic forms	Manufacture
Drug	glimepiride tablets	2mg	Tablets	Guizhou Tian'an Pharmaceutical Co., Ltd
	rosiglitazone tablets	4mg	Tablets	Taiji Group Chongqing Fuling Pharmaceutical Factory Co., Ltd
	finasteride tablets	5mg	Tablets	Merck & Co., Inc, Hangzhou, China
	omeprazole magnesium enteric coated tablets	10mg	Coated tablets	Xuchang high-tech Pharmaceutical Co., Ltd
	levothyroxine sodium tablets	50ug	Tablets	Merck KGaA Darmstadt
	deammopressin acetate tablets	0.1mg	Tablets	Ferring GmbH(Switzerland)
	huperzine A tablets	50ug	Tablets	Shanghai Fudan Fuhua Pharmaceutical Co., Ltd
	enalapril maleate tablets	10mg	Tablets	Yangtze River Pharmaceutical Group(Jiangsu)
	glipizide tablets	5mg	Tablets	Ruiyang Pharmaceutical Co., Ltd
excipient	dextrin	25kg/bag	powder	Shanghai Zhongxi Pharmaceutical Co., Ltd
	crospovidone(PVPP)	25kg/bag	powder	
	hydroxypropyl methylcellulose (HPMC)	25kg/bag	powder	
	microcrystalline cellulose(MCC)	25kg/bag	powder	
	polyethylene Glycol 2000(PEG2000)	50kg/bag	powder	
	pregelatinized starch	25kg/bag	powder	
	magnesium stearate	25kg/bag	powder	
	lactose	50kg/bag	powder	
	corn starch	25kg/bag	powder	
	TiO ₂	25kg/bag	powder	
ethyl cellulose	25kg/bag	powder		
API	Omeprazole	100mg/bottle	powder	National Institute for the Control of Pharmaceutical and Biological Products
	glipizide	100mg/bottle	powder	

	glimepiride	100mg/bottle	powder	
	rosiglitazone	100mg/bottle	powder	
	enalapril	100mg/bottle	powder	
	Huperzine A	100mg/bottle	powder	

Table s2. HQI values of drugs, excipients and APIs

HQI	drugs									excipients										APIs						
drugs	1.00	0.95	1.00	0.95	0.99	0.98	0.92	0.98	0.97	0.78	0.15	0.54	0.73	0.39	0.73	0.56	0.19	0.01	0.92	0.74	0.06	0.23	0.23	0.09	0.10	0.02
	0.95	1.00	0.96	0.93	0.94	0.92	0.89	0.93	0.90	0.73	0.16	0.55	0.76	0.41	0.68	0.59	0.22	0.09	0.87	0.68	0.11	0.18	0.15	0.13	0.06	0.09
	1.00	0.96	1.00	0.95	0.99	0.98	0.94	0.98	0.97	0.81	0.18	0.58	0.77	0.41	0.75	0.60	0.22	0.00	0.91	0.76	0.06	0.22	0.21	0.09	0.09	0.01
	0.95	0.93	0.95	1.00	0.94	0.92	0.83	0.93	0.93	0.71	0.32	0.52	0.64	0.42	0.66	0.57	0.23	0.06	0.86	0.65	0.29	0.25	0.24	0.25	0.02	0.02
	0.99	0.94	0.99	0.94	1.00	0.99	0.94	1.00	0.98	0.84	0.18	0.56	0.73	0.41	0.78	0.58	0.20	0.02	0.90	0.80	0.06	0.24	0.22	0.09	0.09	0.02
	0.98	0.92	0.98	0.92	0.99	1.00	0.96	1.00	0.98	0.88	0.20	0.60	0.75	0.43	0.82	0.60	0.21	0.04	0.90	0.84	0.03	0.25	0.23	0.06	0.10	0.04

	0.92	0.89	0.94	0.83	0.94	0.96	1.00	0.95	0.92	0.94	0.21	0.71	0.88	0.48	0.89	0.68	0.28	0.05	0.86	0.89	0.00	0.26	0.26	0.03	0.13	0.05
	0.98	0.93	0.98	0.93	1.00	1.00	0.95	1.00	0.98	0.87	0.19	0.58	0.73	0.42	0.81	0.58	0.20	0.04	0.89	0.82	0.04	0.24	0.22	0.07	0.09	0.03
	0.97	0.90	0.97	0.93	0.98	0.98	0.92	0.98	1.00	0.82	0.21	0.56	0.70	0.43	0.78	0.57	0.21	0.03	0.88	0.78	0.06	0.25	0.22	0.06	0.07	0.19
excipients	0.78	0.73	0.81	0.71	0.84	0.88	0.94	0.87	0.82	1.00	0.30	0.75	0.80	0.52	0.96	0.69	0.33	0.09	0.75	0.97	0.01	0.22	0.27	0.02	0.09	0.13
	0.15	0.16	0.18	0.32	0.18	0.20	0.21	0.19	0.21	0.30	1.00	0.45	0.19	0.64	0.35	0.44	0.59	0.05	0.15	0.26	0.12	0.19	0.27	0.22	0.12	0.26
	0.54	0.55	0.58	0.52	0.56	0.60	0.71	0.58	0.56	0.75	0.45	1.00	0.77	0.69	0.77	0.88	0.58	0.06	0.54	0.73	0.06	0.23	0.40	0.11	0.10	0.15
	0.73	0.76	0.77	0.64	0.73	0.75	0.88	0.73	0.70	0.80	0.19	0.77	1.00	0.48	0.76	0.75	0.34	0.00	0.73	0.72	0.01	0.14	0.23	0.00	0.14	0.04
	0.39	0.41	0.41	0.42	0.41	0.43	0.48	0.42	0.43	0.52	0.64	0.69	0.48	1.00	0.57	0.69	0.71	0.01	0.40	0.48	0.02	0.40	0.42	0.18	0.03	0.18
	0.73	0.68	0.75	0.66	0.78	0.82	0.89	0.81	0.78	0.96	0.35	0.77	0.76	0.57	1.00	0.68	0.37	0.13	0.71	0.94	0.02	0.23	0.28	0.06	0.01	0.18
	0.56	0.59	0.60	0.57	0.58	0.60	0.68	0.58	0.57	0.69	0.44	0.88	0.75	0.69	0.68	1.00	0.61	0.06	0.57	0.64	0.14	0.36	0.38	0.25	0.04	0.12
	0.19	0.22	0.22	0.23	0.20	0.21	0.28	0.20	0.21	0.33	0.59	0.58	0.34	0.71	0.37	0.61	1.00	0.05	0.26	0.33	0.03	0.28	0.22	0.20	0.15	0.11
	0.01	0.09	0.00	0.06	0.02	0.04	0.05	0.04	0.03	0.09	0.05	0.06	0.00	0.01	0.13	0.06	0.05	1.00	0.02	0.09	0.24	0.06	0.02	0.05	0.06	0.06
	0.92	0.87	0.91	0.86	0.90	0.90	0.86	0.89	0.88	0.75	0.15	0.54	0.73	0.40	0.71	0.57	0.26	0.02	1.00	0.74	0.05	0.27	0.28	0.10	0.09	0.02
	0.74	0.68	0.76	0.65	0.80	0.84	0.89	0.82	0.78	0.97	0.26	0.73	0.72	0.48	0.94	0.64	0.33	0.09	0.74	1.00	0.05	0.22	0.28	0.00	0.13	0.11
APIs	0.06	0.11	0.06	0.29	0.06	0.03	0.00	0.04	0.06	0.01	0.12	0.06	0.01	0.02	0.02	0.14	0.03	0.24	0.05	0.05	1.00	0.12	0.18	0.61	0.34	0.10
	0.23	0.18	0.22	0.25	0.24	0.25	0.26	0.24	0.25	0.22	0.19	0.23	0.14	0.40	0.23	0.36	0.28	0.06	0.27	0.22	0.12	1.00	0.62	0.06	0.04	0.15
	0.23	0.15	0.21	0.24	0.22	0.23	0.26	0.22	0.22	0.27	0.27	0.40	0.23	0.42	0.28	0.38	0.22	0.02	0.28	0.28	0.18	0.62	1.00	0.09	0.06	0.15
	0.09	0.13	0.09	0.25	0.09	0.06	0.03	0.07	0.06	0.02	0.22	0.11	0.00	0.18	0.06	0.25	0.20	0.05	0.10	0.00	0.61	0.06	0.09	1.00	0.26	0.07
	0.10	0.06	0.09	0.02	0.09	0.10	0.13	0.09	0.07	0.09	0.12	0.10	0.14	0.03	0.01	0.04	0.15	0.06	0.09	0.13	0.34	0.04	0.06	0.26	1.00	0.16
	0.02	0.09	0.01	0.02	0.02	0.04	0.05	0.03	0.19	0.13	0.26	0.15	0.04	0.18	0.18	0.12	0.11	0.06	0.02	0.11	0.10	0.15	0.15	0.07	0.16	1.00

Table s3. Excipients identified in drugs by Deep learning (represent by '√') and quantitation by NNLS (value in brackets)

compositon	dextrin	PVPP	HPMC	MCC	PEG2000	pregelatinized starch	magnesium stearate	lactose	ethyl cellulose
glimepiride tablets	□	□	√(5%)	√(3%)	□	□	□	√(89%)	□
rosiglitazone tablets	□	√(9%)	√(12%)	□	□	□	□	√(76%)	□
finasteride tablets		□	□	√(6%)	□	□	√(2%)	√(82%)	□
omeprazole magnesium enteric coated tablets	√(4%)	□	□	□	□	□	□	√(85%)	√(6%)
levothyroxine sodium tablets	□	□	√(6%)	√(5%)	□	□	□	√(88%)	□
deammopressin acetate tablets	□	√(3%)	√(12%)	□	□	□	□	√(79%)	□
huperzine A tablets	□	□	√(8%)	□	√(3%)	□	□	√(80%)	□
enalapril maleate tablets	□	√(6%)	□	□	□	√(7%)	□	√(81%)	□
glipizide tablets	√(8%)	□	□	□	□	□	√(2%)	√(83%)	□