



Supplementary Information

A Fragment-Based Approach for the *in Silico* Prediction of Blood-Brain Barrier Permeation

Tiago L. Moda, Alexandre E. Carrara and Adriano D. Andricopulo*

Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 13560-970 São Carlos-SP, Brazil

Table S1. Experimental, predicted and residual values of BBB permeation for both training and test set compounds for the final HQSAR models

N.	Compound	Exp ^a	Pred1 ^b	Pred2 ^c	Pred3 ^d	Pred4 ^e	Cons ^f	Res ^g
Training set								
001	03 ⁴⁰	-2.00	-1.55	-1.66	-1.80	-1.96	-1.74	-0.20
002	04 ⁴⁰	-1.30	-0.89	-1.19	-0.78	-1.46	-1.08	-0.52
003	06 ⁴⁰	0.11	0.15	-0.20	-0.26	0.39	0.02	0.37
004	14 ⁴⁰	-0.66	-0.63	-0.51	-0.77	-0.62	-0.63	0.11
005	15 ⁴⁰	-0.12	-0.26	-0.66	-0.61	-0.22	-0.44	0.49
006	19 ⁴⁰	-1.54	-1.67	-1.52	-1.42	-1.28	-1.47	-0.12
007	21 ⁴⁰	-0.73	-0.32	-0.81	-0.64	-0.51	-0.57	-0.09
008	22 ⁴⁰	-0.67	-0.71	-0.11	-0.48	-0.74	-0.51	-0.19
009	22 ⁴⁰	-0.27	-0.27	-0.51	-0.61	-0.34	-0.44	0.34
010	23 ⁴⁰	-0.28	-0.58	-0.20	-0.49	-0.18	-0.36	0.21
011	27 ⁴⁰	0.69	0.51	0.36	0.56	0.37	0.45	0.13
012	28 ⁴⁰	-0.42	-0.40	-0.41	-0.59	-0.59	-0.50	0.17
013	28-1 ⁴⁰	0.44	0.29	0.32	0.28	0.41	0.33	0.16
014	31 ⁴⁰	-1.88	-1.64	-1.77	-1.61	-1.84	-1.72	-0.27
015	54 ⁴⁰	0.00	-0.24	-0.01	0.25	0.19	0.05	-0.25
016	54-1 ⁴⁰	1.04	1.10	0.96	0.94	1.00	1.00	0.10
017	56 ⁴⁰	0.40	0.01	0.09	0.18	0.06	0.09	0.22
018	60 ⁴⁰	0.13	0.26	0.04	0.19	0.13	0.16	-0.06
019	69 ⁴⁰	-0.16	-0.13	-0.18	-0.10	-0.07	-0.12	-0.06
020	78 ⁴⁰	0.39	0.28	0.32	0.36	0.22	0.29	0.03
021	80 ⁴⁰	0.42	0.32	0.03	0.22	0.16	0.18	0.20
022	95 ⁴⁰	1.00	0.70	0.96	0.86	1.09	0.90	0.14
023	100 ⁴⁰	1.20	0.90	1.10	1.11	1.15	1.07	0.09
024	102 ⁴⁰	1.44	1.68	1.66	1.53	1.53	1.60	-0.09
025	1,1,1-Trifluoro-2-chloroethane ²⁸	0.08	0.20	0.05	0.34	0.04	0.16	-0.26
026	11-1 ⁴⁰	-1.17	-0.80	-0.81	-1.23	-1.42	-1.06	0.06
027	1-Propanol ²⁸	-0.16	-0.13	-0.18	-0.10	-0.07	-0.12	-0.06
028	2,2-Dimethylbutane ²⁸	1.04	1.10	0.96	0.94	1.00	1.00	0.10
029	2-Methylpentane ²⁸	0.97	0.66	0.64	0.64	0.68	0.66	0.33
030	2-Methylpropanol ²⁸	-0.17	-0.22	-0.25	0.01	-0.05	-0.13	-0.18
031	2-Propanol ²⁸	-0.15	-0.23	-0.11	-0.28	-0.29	-0.23	0.13
032	3-Methylhexane (R) ²⁸	0.90	0.89	0.48	0.52	0.80	0.67	0.38
033	3-Methylhexane (S) ²⁸	0.90	0.89	0.47	0.52	0.80	0.67	0.38
034	3-Methylpentane ²⁸	1.01	1.10	0.88	0.60	0.99	0.89	0.41
035	4-Hydroxymidazolam (R) ⁴⁴	-0.30	0.05	-0.13	0.08	-0.02	0.00	-0.38

*e-mail: aandrico@ifsc.usp.br

Table S1. continuation

N.	Compound	Exp ^a	Pred1 ^b	Pred2 ^c	Pred3 ^d	Pred4 ^e	Cons ^f	Res ^g
Training set								
036	4-Hydroxymidazolam (S) ⁴⁴	-0.30	0.06	-0.07	0.02	-0.21	-0.05	-0.32
037	9-Hydroxyrisperidone (S) ³⁴	-0.67	-0.84	-0.72	-0.90	-0.72	-0.79	0.23
038	9-Hydroxyrisperidone (R) ³⁴	-0.67	-0.78	-0.71	-0.85	-0.64	-0.74	0.18
039	Acetylsalicylic acid ³³	-0.50	0.07	0.25	-0.26	0.07	0.03	-0.24
040	Alprazolam ³³	0.04	0.28	0.30	0.20	0.20	0.24	-0.16
041	Amitriptylline ³²	0.89	0.93	0.57	0.66	1.02	0.80	0.22
042	Amobarbital ⁴³	0.04	-0.08	0.33	0.18	-0.04	0.10	-0.14
043	Antipyrine ³³	-0.10	-0.36	-0.24	-0.08	-0.10	-0.20	-0.01
044	Atenolol (R) ²⁹	-1.42	-1.25	-1.30	-1.56	-1.39	-1.37	0.14
045	Atenolol (S) ²⁹	-1.42	-1.18	-1.23	-1.43	-1.41	-1.31	0.01
046	BBcpd10 ³⁸	-1.17	-0.80	-0.65	-1.22	-1.43	-1.02	0.05
047	BCNU ³⁶	-0.52	-0.28	-0.12	-0.46	-0.27	-0.28	-0.06
048	Benzene ²⁸	0.37	0.44	0.23	0.38	0.39	0.36	-0.01
049	Bis hydroxylate L663581 ³⁸	-1.82	-1.76	-2.34	-2.10	-1.75	-1.99	0.28
050	Bretazenil ²⁵	-0.09	0.02	-0.06	0.07	0.02	0.01	-0.16
051	Butanone ²⁸	-0.08	-0.04	0.05	0.17	-0.09	0.02	-0.25
052	Caffeine ³³	-0.06	-0.26	-0.07	-0.09	0.05	-0.09	0.04
053	Carbamazepine ³²	-0.14	-0.17	0.01	-0.16	-0.17	-0.12	0.02
054	Carbon disulfide ²⁸	0.60	0.24	0.08	0.23	0.14	0.17	0.37
055	Cimetidine ⁴⁵	-1.42	-1.17	-1.33	-1.07	-1.26	-1.21	-0.35
056	Cimetidine analogue-12 ³⁸	-0.67	-0.73	-0.46	-0.77	-0.67	-0.66	0.10
057	Clobazam ⁴⁴	0.35	-0.03	0.11	-0.37	0.42	0.03	0.72
058	Codeine ⁴⁵	0.55	0.48	0.48	0.05	0.37	0.34	0.50
059	Compound-05 ⁴⁵	-1.06	-1.72	-1.56	-1.86	-1.78	-1.73	0.80
060	Compound-15 ⁴⁵	-0.12	-0.26	-0.66	-0.61	-0.22	-0.44	0.49
061	Compound-16 ⁴⁵	-0.18	-0.83	-0.33	-0.42	-0.45	-0.51	0.24
062	Compound-18 ⁴⁵	-1.57	-1.48	-1.00	-1.09	-1.44	-1.25	-0.48
063	Compound-19 ⁴⁵	-1.54	-1.78	-1.65	-1.11	-1.72	-1.56	-0.43
064	Compound-02 ⁴⁵	-0.04	-0.48	-0.34	-0.51	-0.18	-0.38	0.47
065	Compound-21 ⁴⁵	-0.73	-0.55	-0.62	-0.43	-0.63	-0.56	-0.30
066	Compound-24 ⁴⁵	-0.46	-0.10	-0.13	-0.31	-0.33	-0.22	-0.15
067	Compound-27 ⁴⁵	0.69	0.51	0.35	0.56	0.32	0.43	0.13
068	Compound-28 ⁴⁵	0.44	0.03	0.32	0.22	0.30	0.22	0.22
069	Compound-29 ³²	0.14	0.31	0.11	0.45	0.61	0.37	-0.31
070	Compound-30 ⁴⁵	0.22	0.34	-0.03	0.32	0.20	0.21	-0.10
071	Compound-31 ⁴⁵	0.00	0.12	0.07	0.19	-0.47	-0.02	-0.19
072	Compound-32 ⁴⁵	-0.34	0.16	-0.10	0.00	-0.30	-0.06	-0.34
073	Compound-33 ⁴⁵	-0.30	-0.80	-0.64	-0.29	-0.37	-0.52	-0.01
074	Compound-34 ⁴⁵	-1.34	-1.43	-1.44	-1.04	-1.29	-1.30	-0.30
075	Compound-35 (R) ³²	-1.82	-1.61	-1.68	-1.70	-1.68	-1.67	-0.12
076	Cyclohexane ²⁸	0.92	0.75	1.32	0.73	0.84	0.91	0.19
077	Cyclopropane ²⁸	0.00	0.11	0.23	0.34	0.31	0.25	-0.34
078	Desipramine ³³	1.20	0.90	1.11	1.11	0.92	1.01	0.09
079	Desmethyldesipramine ³⁰	1.06	0.93	0.99	0.93	0.82	0.91	0.13
080	Desmethyldiazepam ⁴⁴	0.50	0.37	0.48	0.29	0.36	0.37	0.21
081	Diazepam ⁴⁴	0.52	0.42	0.65	0.64	0.47	0.54	-0.12
082	Dichloromethane ²⁸	-0.11	0.23	0.09	0.24	0.16	0.18	-0.35
083	Didanosine ³⁴	-1.30	-1.12	-1.23	-1.02	-1.08	-1.11	-0.28
084	Diethyl Ether ²⁸	0.00	-0.20	-0.16	0.15	-0.23	-0.11	-0.15
085	Divinyl Ether ²⁸	0.11	0.28	0.07	0.23	0.19	0.19	-0.12
086	Domperidone ³⁹	-0.78	-0.77	-0.64	-0.82	-0.92	-0.79	0.04

Table S1. continuation

N.	Compound	Exp ^a	Pred1 ^b	Pred2 ^c	Pred3 ^d	Pred4 ^e	Cons ^f	Res ^g
Training set								
087	Enflurane (R) ²⁸	0.24	0.27	0.03	0.25	0.19	0.19	-0.01
088	Enflurane (S) ²⁸	0.24	0.24	0.05	0.19	0.17	0.16	0.05
089	Epoxide of carbamazepine ³⁶	-0.34	-0.08	-0.04	-0.30	-0.27	-0.17	-0.04
090	Ethanol ²⁸	-0.16	0.05	-0.08	-0.15	0.03	-0.04	-0.01
091	Ethylbenzene ²⁸	0.20	0.30	0.13	0.43	0.26	0.28	-0.23
092	FCHCHOCHCHF ⁴⁰	0.13	0.26	0.04	0.19	0.09	0.15	-0.06
093	Flumazenil ²⁵	-0.29	-0.40	-0.20	-0.07	-0.35	-0.25	-0.22
094	Guanidinothiazol analogue-15 ³⁸	-0.18	-0.83	-0.37	-0.41	-0.36	-0.49	0.23
095	Guanidinothiazol analogue-16 ³⁸	-1.57	-1.39	-0.82	-1.29	-0.96	-1.12	-0.28
096	Guanidinothiazol analogue-17 ⁴¹	-1.54	-1.17	-0.77	-0.92	-1.13	-1.00	-0.62
097	Guanidinothiazol analogue-57 ³⁸	-1.15	-1.01	-0.66	-0.77	-0.73	-0.79	-0.38
098	Halothane (R) ²⁸	0.35	0.35	0.09	0.40	0.17	0.25	-0.05
099	Halothane (S) ²⁸	0.35	0.29	0.11	0.34	0.12	0.21	0.01
100	Heptane ²⁸	0.81	0.70	1.09	0.69	0.79	0.82	0.12
101	Hexane ²⁸	0.80	0.61	0.88	0.61	0.68	0.70	0.19
102	Hexobarbital (R) ⁴³	0.10	0.19	0.04	-0.02	0.17	0.10	0.12
103	Hexobarbital (S) ⁴³	0.10	0.19	0.04	-0.02	0.21	0.11	0.12
104	Hydroxyzine (R) ³³	0.39	0.28	0.42	0.34	0.53	0.39	0.05
105	Hydroxyzine (S) ³³	0.39	0.28	0.42	0.34	0.50	0.38	0.05
106	Ibuprofen (R) ³³	-0.18	-0.25	-0.10	0.18	-0.17	-0.09	-0.36
107	Ibuprofen (S) ³³	-0.18	-0.23	-0.08	0.18	-0.26	-0.10	-0.36
108	ICI-17148 ³⁸	-0.04	-0.48	-0.31	-0.52	-0.24	-0.38	0.48
109	Imipramine ⁴⁵	1.07	1.17	1.20	1.35	1.42	1.28	-0.28
110	Indinavir (R) ³⁴	-0.75	-1.18	-1.00	-1.05	-1.04	-1.07	0.30
111	Isoflurane (R) ²⁸	0.42	0.32	0.03	0.22	0.20	0.19	0.20
112	Isoflurane (S) ²⁸	0.42	0.43	-0.04	0.32	0.35	0.26	0.10
113	L663,581 ³²	-0.30	-0.82	-0.53	-0.70	-0.79	-0.71	0.40
114	Lupitidine ³⁸	-1.06	-1.72	-1.61	-1.72	-1.14	-1.55	0.66
115	Mesoridazine (R) ²⁶	-0.36	-0.03	0.07	0.29	0.02	0.09	-0.65
116	Mesoridazine (S) ²⁶	-0.36	0.02	0.18	0.29	-0.13	0.09	-0.65
117	m-Xylene ²⁸	0.29	0.40	-0.10	0.10	0.29	0.17	0.19
118	Methoxyflurane ²⁸	0.25	0.03	0.08	0.01	0.19	0.08	0.24
119	Methyl cyclopentane ²⁸	0.93	0.96	0.98	0.75	0.97	0.92	0.18
120	Midazolam ³³	0.36	0.20	0.19	0.35	0.23	0.24	0.01
121	Mirtazapine ³⁷	0.53	0.72	0.75	0.80	0.62	0.72	-0.27
122	Molecule-62 ³⁶	-1.30	-1.01	-0.63	-0.75	-1.14	-0.88	-0.55
123	Molecule-63 ³⁶	-1.40	-0.66	-0.52	-0.88	-0.82	-0.72	-0.52
124	Molecule-65 ³⁶	0.25	-0.17	0.03	0.02	0.20	0.02	0.23
125	Molecule-66 ³⁶	-0.30	-0.40	-0.34	-0.46	-0.49	-0.42	0.16
126	Molecule-67 ³⁶	-0.06	-0.01	-0.20	-0.22	0.01	-0.10	0.16
127	Monomethylpromazine ²⁶	0.59	0.63	0.77	0.51	0.53	0.61	0.08
128	Mono-hydroxylated L663,581 ³⁸	-1.34	-1.18	-1.29	-1.28	-1.02	-1.19	-0.06
129	Morphine ²⁷	-0.16	0.55	0.49	0.19	0.36	0.40	-0.35
130	Nevirapine ³⁴	0.00	0.02	0.31	0.29	0.28	0.22	-0.29
131	Nitrogen ²⁸	0.03	0.23	0.08	0.23	0.14	0.17	-0.20
132	Nitrous oxide ²⁸	0.03	0.21	0.08	0.25	0.11	0.16	-0.22
133	Nor-1-chlorpromazine ²⁶	1.37	0.87	1.07	0.68	1.02	0.91	0.69
134	Northioridazine (R) ²⁶	0.75	0.96	0.80	0.78	1.00	0.88	-0.03
135	Northioridazine (S) ²⁶	0.75	0.96	0.82	0.78	1.11	0.92	-0.03
136	Org32104 ³⁴	0.52	0.54	0.65	0.27	0.32	0.44	0.25
137	Org34167 (R) ³⁴	0.00	0.06	0.06	-0.27	0.14	0.00	0.27

Table S1. continuation

N.	Compound	Exp ^a	Pred1 ^b	Pred2 ^c	Pred3 ^d	Pred4 ^e	Cons ^f	Res ^g
		Training set						
138	Org34167 (S) ³⁴	0.00	0.00	0.26	-0.20	0.01	0.02	0.20
139	Org4428 ³⁴	0.82	0.67	1.03	0.59	0.50	0.70	0.23
140	Org5222 ³⁴	1.03	1.02	1.51	1.22	0.65	1.10	-0.19
141	o-Xylene ²⁸	0.37	0.43	0.10	0.13	0.36	0.26	0.24
142	Oxazepam (R) ³³	0.61	0.48	0.43	0.45	0.36	0.43	0.16
143	p-Acetamidophenol ³⁶	-0.31	-0.32	-0.18	-0.52	-0.24	-0.31	0.21
144	Pentane ²⁸	0.76	0.53	0.67	0.53	0.56	0.57	0.23
145	Phenserine ³⁶	1.00	0.77	0.28	0.98	0.58	0.65	0.02
146	Phenylbutazone ²⁴	-0.52	-0.37	-0.50	-0.65	-0.81	-0.58	0.13
147	Phenytoin ³⁵	-0.04	-0.19	-0.15	-0.15	-0.25	-0.19	0.11
148	Physostigmine ³⁶	0.08	0.59	0.24	0.67	0.20	0.43	-0.59
149	Promazine ³³	1.23	0.90	1.14	0.90	1.36	1.07	0.33
150	Propranolol (S) ⁴⁷	0.64	-0.08	-0.33	-0.09	0.23	-0.07	0.73
151	Quinidine ⁴⁷	-0.46	-0.14	-0.50	-0.25	-0.28	-0.29	-0.21
152	Ranitidine ⁴⁵	-1.23	-1.22	-1.06	-1.24	-1.23	-1.19	0.01
153	Ranitidine analogue-17 ⁴⁵	-1.12	-0.69	-0.66	-0.80	-0.90	-0.76	-0.32
154	Ranitidine analogue-18 ³⁸	-0.27	-0.27	-0.51	-0.61	-0.34	-0.44	0.34
155	Ranitidine analogue-19 ³⁸	-0.28	-0.58	-0.20	-0.49	-0.52	-0.45	0.21
156	Ranitidine analogue-20 ³⁸	-0.46	-0.10	-0.12	-0.31	-0.28	-0.20	-0.15
157	Ranitidine analogue-21 ³⁸	-0.24	0.29	0.28	0.29	0.11	0.24	-0.53
158	Ranitidine analogue-22 ³⁸	-0.02	0.21	0.08	0.20	0.19	0.17	-0.22
159	Ranitidine analogue-23 ³⁸	0.69	0.51	0.36	0.56	0.44	0.46	0.13
160	Ranitidine analogue-24 ³⁸	0.44	0.29	0.32	0.28	0.41	0.33	0.16
161	Ranitidine analogue-26 ³⁸	0.22	0.34	-0.02	0.32	0.34	0.24	-0.10
162	Ranitidine analogue-60 ³⁸	-0.73	-0.32	-0.81	-0.64	-0.51	-0.57	-0.09
163	Salicylic acid ³⁰	-0.44	-0.04	-0.21	-0.48	-0.35	-0.27	0.04
164	SB222200 (S) ³⁶	0.30	-0.11	0.45	0.09	0.05	0.12	0.21
165	Sulforidazine (R) ²⁶	0.18	0.18	0.03	0.04	0.44	0.17	0.14
166	Sulforidazine (S) ²⁶	0.18	0.23	0.14	0.04	0.27	0.17	0.14
167	Teflurane (S) ²⁸	0.27	0.39	0.06	0.36	0.21	0.26	-0.09
168	Temelastine ³⁶	-1.88	-1.68	-1.81	-1.43	-1.74	-1.67	-0.45
169	Tertbutyl chlorambucil ³⁶	1.00	0.70	0.96	0.86	1.10	0.91	0.14
170	Test-01 ⁴⁰	-1.30	-1.01	-0.62	-0.74	-1.07	-0.86	-0.56
171	Test-03 ⁴⁰	-0.43	-0.43	-0.32	-0.23	-0.18	-0.29	-0.20
172	Test-04 ⁴⁰	0.25	-0.30	-0.17	0.00	-0.01	-0.12	0.25
173	Test-05 ⁴⁰	-0.30	-0.40	-0.34	-0.46	-0.38	-0.39	0.16
174	Test-06 ⁴⁰	-0.06	-0.01	-0.20	-0.22	0.12	-0.08	0.16
175	Test-08 ⁴⁰	-0.16	-0.12	-0.05	0.02	-0.17	-0.08	-0.18
176	Test-09 ⁴⁰	0.00	-0.07	-0.09	-0.06	0.05	-0.04	0.06
177	Test-11 ⁴⁰	-0.30	-0.82	-0.53	-0.70	-0.79	-0.71	0.40
178	Test-12 ⁴⁰	-1.34	-1.18	-1.29	-1.28	-1.32	-1.27	-0.06
179	Test-13 ⁴⁰	-1.82	-1.37	-1.54	-1.80	-1.29	-1.50	-0.02
180	Test2-03 ⁴⁰	-0.29	-0.39	-0.28	-0.34	-0.15	-0.29	0.05
181	Test2-09 ⁴⁰	-0.18	-0.25	-0.10	0.18	-0.15	-0.08	-0.36
182	Test2-10 ⁴⁰	0.11	-0.07	0.04	0.17	-0.22	-0.02	-0.06
183	Test2-11 ⁴⁰	0.55	0.56	0.34	-0.01	0.32	0.30	0.56
184	Test2-13 ⁴⁰	0.12	-0.03	-0.04	-0.08	-0.09	-0.06	0.20
185	Test2-14 ⁴⁰	-1.42	-0.98	-1.57	-1.32	-1.75	-1.41	-0.10
186	Test2-17 ⁴⁰	0.50	0.15	0.29	0.55	0.52	0.38	-0.05
187	Test2-18 ⁴⁰	-1.26	-0.55	-0.92	-0.42	-0.81	-0.68	-0.84
188	Test2-20 ⁴⁰	0.39	0.14	0.11	-0.02	0.27	0.12	0.41

Table S1. continuation

N.	Compound	Exp ^a	Pred1 ^b	Pred2 ^c	Pred3 ^d	Pred4 ^e	Cons ^f	Res ^g
Training set								
189	Test2-22 ⁴⁰	1.30	1.17	1.21	1.35	1.20	1.23	-0.05
190	Test2-24 ⁴⁰	0.36	0.20	0.24	0.34	0.39	0.29	0.02
191	Test2-25 ⁴⁰	-0.70	-0.67	-0.56	-0.56	-0.86	-0.66	-0.14
192	Test2-27 ⁴⁰	1.06	0.86	1.13	0.99	1.17	1.04	0.07
193	Test2-29 ⁴⁰	0.24	0.24	0.02	0.47	0.13	0.21	-0.23
194	Theobromine ⁴⁶	-0.28	-0.24	-0.38	-0.10	0.00	-0.18	-0.18
195	Thiopental (R) ⁴³	-0.14	-0.08	-0.01	0.04	-0.13	-0.05	-0.18
196	Thiopental (S) ⁴³	-0.14	-0.10	0.01	0.04	-0.12	-0.04	-0.18
197	Thioridazine (S) ²⁶	0.24	0.29	0.15	0.47	0.14	0.26	-0.23
198	Tibolone ³⁴	0.40	0.52	0.11	0.28	0.44	0.34	0.12
199	Tiotidine ⁴⁵	-0.82	-1.41	-1.25	-0.90	-0.54	-1.03	0.08
200	Trichloroethene ²⁸	0.34	0.26	0.09	0.25	0.17	0.19	0.09
201	Trichloromethane ²⁸	0.29	0.22	0.10	0.27	0.16	0.19	0.02
202	Valproic Acid ³³	-0.22	-0.02	0.32	0.23	0.28	0.20	-0.45
203	Verapamil (R) ³⁶	-0.70	-0.67	-0.67	-0.57	-0.91	-0.70	-0.13
204	Verapamil (S) ³⁶	-0.70	-0.68	-0.68	-0.57	-0.91	-0.71	-0.13
205	Y-G14 ³¹	-0.42	0.10	-0.13	-0.05	-0.10	-0.05	-0.37
206	Zidovudine ³⁴	-0.72	-1.21	-0.91	-1.28	-1.01	-1.10	0.56
207	Zolantidine ⁴⁵	0.14	0.31	0.21	0.50	0.19	0.30	-0.36
Test set								
208	05 ⁴⁰	-1.06	-1.72	-1.61	-1.84	-2.08	-1.81	0.78
209	10 ⁴⁰	-0.82	-1.61	-1.22	-1.47	-1.51	-1.45	0.65
210	20 ⁴⁰	-1.12	-0.69	-0.66	-0.80	-0.90	-0.76	-0.32
211	20_1 ⁴⁰	-0.72	-1.36	-0.95	-1.38	-0.99	-1.17	0.66
212	29 ⁴⁰	0.14	0.32	0.16	0.44	0.64	0.39	-0.30
213	32 ⁴⁰	-0.50	0.07	0.25	-0.26	0.09	0.04	-0.24
214	56-1 ⁴⁰	0.03	0.23	0.08	0.26	0.14	0.18	-0.23
215	94 ⁴⁰	1.00	0.77	0.43	0.97	0.37	0.63	0.03
216	1,1,1-Trichloroethane ²⁸	0.40	0.01	0.09	0.18	0.06	0.09	0.22
217	1-Hydroxymidazolam ²⁸	-0.07	0.20	0.01	0.42	0.07	0.18	-0.49
218	Aminopyrine ⁴²	0.00	-0.38	-0.03	-0.15	-0.77	-0.33	0.15
219	Chlorpromazine ³³	1.06	0.86	1.12	0.95	0.43	0.84	0.11
220	Cimetidine analogue-13 ³⁸	-0.66	-0.63	-0.51	-0.77	-0.62	-0.63	0.11
221	Clonidine ⁴⁵	0.11	-0.30	-1.17	-0.10	-0.91	-0.62	0.21
222	Compound-25 ⁴⁵	-0.24	0.29	0.28	0.29	0.06	0.23	-0.53
223	Compound-35 (S) ⁴⁵	-1.82	-1.62	-1.76	-1.70	-1.34	-1.61	-0.12
224	Flunitrazepam ⁴⁴	0.06	0.27	0.54	0.40	0.48	0.42	-0.34
225	Fluroxene ²⁸	0.13	0.24	-0.04	0.43	0.04	0.17	-0.30
226	Guanidinothiazol analogue-58 ³⁸	-1.54	-1.64	-1.17	-1.17	-0.99	-1.24	-0.37
227	Icotidine ³²	-2.00	-1.55	-1.62	-1.82	-1.58	-1.65	-0.18
228	Indinavir (S) ³⁴	-0.75	-1.22	-1.03	-1.05	-1.04	-1.08	0.30
229	Indomethacin ³³	-1.26	-0.42	-0.49	-0.59	0.14	-0.34	-0.67
230	Mepyramine ⁴⁵	0.49	0.15	0.23	0.47	0.45	0.32	0.02
231	Mianserin ³⁷	0.99	1.02	1.12	0.91	1.27	1.08	0.08
232	Molecule-64 ³⁶	0.43	-0.35	-0.11	-0.23	-0.05	-0.18	0.66
233	Molecule-68 ³⁶	-0.42	-0.59	-0.61	-0.67	-1.05	-0.73	0.25
234	Molecule-69 ³⁶	-0.16	-0.12	-0.02	-0.07	-0.15	-0.09	-0.09
235	Nor-2-chlorpromazine ²⁶	0.97	0.60	0.95	0.59	0.55	0.67	0.38
236	Oxazepam (S) ³³	0.61	0.50	0.36	0.25	0.33	0.36	0.36
237	p-Xylene ²⁸	0.31	0.38	-0.01	0.10	0.31	0.19	0.21
238	Paraxanthine ⁴⁶	0.06	-0.19	-0.21	-0.39	0.13	-0.17	0.45

Table S1. continuation

N.	Compound	Exp ^a	Pred1 ^b	Pred2 ^c	Pred3 ^d	Pred4 ^e	Cons ^f	Res ^g
		Test set						
239	Propanone ²⁸	-0.15	-0.05	0.00	0.09	-0.11	-0.02	-0.24
240	Propranolol (R) ⁴⁷	0.64	-0.15	-0.40	-0.21	0.29	-0.12	0.85
241	R019-4603 ²⁵	-0.25	0.10	0.03	-0.12	0.17	0.04	-0.13
242	Risperidone ³⁴	-0.02	-0.56	-0.15	-0.16	-0.40	-0.32	0.14
243	SB-222200 (R) ³⁶	0.30	-0.32	0.32	0.02	0.08	0.03	0.28
244	Teflurane (R) ²⁸	0.27	0.34	0.08	0.29	0.17	0.22	-0.02
245	Test-2 ⁴⁰	-1.40	-0.66	-0.52	-0.88	-0.87	-0.73	-0.52
246	Test-10 ⁴⁰	-0.34	-0.03	0.34	-0.25	0.32	0.09	-0.09
247	Test2-4 ⁴⁰	-0.06	-0.26	-0.06	-0.10	-0.53	-0.24	0.04
248	Test2-5 ⁴⁰	-0.10	-0.36	-0.24	-0.08	-0.25	-0.23	-0.02
249	Test2-8 ⁴⁰	-0.31	-0.32	-0.22	-0.61	-0.16	-0.33	0.30
250	Theophylline ³³	-0.29	-0.31	-0.71	-0.43	-1.00	-0.61	0.14
251	Thioperamide ³²	-0.16	0.05	-0.10	-0.11	0.04	-0.03	-0.05
252	Thioridazine (R) ³³	0.24	0.24	0.06	0.47	0.31	0.27	-0.23
253	Toluene ²⁸	0.37	0.41	0.10	0.24	0.34	0.27	0.13
254	Triazolam ²⁸	0.74	0.27	0.38	0.18	0.27	0.28	0.56
255	Trifluoroperazine ³³	1.44	0.98	1.39	1.47	1.46	1.32	-0.03
$r^2_{\text{pred}}^{\text{h}}$			0.72	0.69	0.79	0.62	0.75	

^aExperimental; ^bpredicted by model 3; ^cpredicted by model 5; ^dpredicted by model 7; ^epredicted by model 8; ^fconsensus prediction ((Pred1 + Pred2 + Pred3 + Pred4)/4); ^gresidual, the difference between experimental and predicted value by model 7; ^hcorrelation coefficient.