

Supporting information

Manuscript title

Evaluation of Machine Learning Based QSAR Models for the Classification of Lung Surfactant Inhibitors

Authors

James Y. Liu¹, Joshua Peeples², Christie M. Sayes^{1*}

Affiliations

¹ Department of Environmental Science, Baylor University, Waco, TX 76798-7266, USA

² Department of Electrical & Computer Engineering, Texas A&M University, College Station, TX 77845, USA

Corresponding Author's Email Address

Christie Sayes; Department of Environmental Science, Baylor University, One Bear Place #97266, Waco, TX 76798-7266, USA. Email: Christie_sayes@baylor.edu

Table S1. Full results for all models.

Model	Par1	Par2	Par3	acc	sd	pre	sd	rec	sd	f1s	sd	Time	Data
LR	lbfgs	0.10	0.00	0.72	0.17	0.74	0.22	0.82	0.18	0.75	0.18	0.4	S
LR	lbfgs	1.00	0.00	0.72	0.17	0.73	0.22	0.81	0.20	0.75	0.19	0.6	S
LR	lbfgs	10.00	0.00	0.66	0.18	0.68	0.23	0.77	0.21	0.70	0.20	0.8	S
LR	liblinear	0.10	0.00	0.71	0.16	0.72	0.21	0.82	0.18	0.74	0.17	0.3	S
LR	liblinear	1.00	0.00	0.72	0.17	0.73	0.23	0.81	0.20	0.74	0.19	0.3	S
LR	liblinear	10.00	0.00	0.67	0.17	0.68	0.22	0.78	0.20	0.70	0.19	0.3	S
LR	newton-cg	0.10	0.00	0.72	0.17	0.73	0.22	0.82	0.18	0.75	0.18	0.4	S
LR	newton-cg	1.00	0.00	0.72	0.17	0.73	0.22	0.81	0.20	0.75	0.19	0.5	S
LR	newton-cg	10.00	0.00	0.66	0.18	0.68	0.23	0.77	0.21	0.70	0.20	0.6	S
LR	newton-cholesky	0.10	0.00	0.72	0.17	0.73	0.22	0.82	0.18	0.75	0.18	1.9	S
LR	newton-cholesky	1.00	0.00	0.72	0.17	0.73	0.22	0.81	0.20	0.75	0.19	2.2	S
LR	newton-cholesky	10.00	0.00	0.66	0.17	0.68	0.23	0.77	0.21	0.70	0.19	2.7	S
LR	lbfgs	0.10	0.00	0.75	0.15	0.77	0.21	0.77	0.20	0.75	0.18	1.7	SO
LR	lbfgs	1.00	0.00	0.74	0.15	0.75	0.23	0.78	0.21	0.75	0.19	1.8	SO
LR	lbfgs	10.00	0.00	0.67	0.17	0.69	0.22	0.77	0.21	0.70	0.19	2.0	SO
LR	liblinear	0.10	0.00	0.75	0.15	0.78	0.20	0.78	0.19	0.76	0.17	1.6	SO
LR	liblinear	1.00	0.00	0.73	0.14	0.74	0.22	0.78	0.21	0.74	0.19	1.7	SO

LR	liblinear	10.00	0.00	0.68	0.16	0.69	0.22	0.78	0.20	0.71	0.18	1.6	SO
LR	newton-cg	0.10	0.00	0.75	0.15	0.77	0.21	0.77	0.20	0.75	0.18	1.6	SO
LR	newton-cg	1.00	0.00	0.74	0.15	0.75	0.23	0.78	0.21	0.75	0.19	1.6	SO
LR	newton-cg	10.00	0.00	0.67	0.17	0.68	0.23	0.77	0.21	0.70	0.19	1.7	SO
LR	newton-cholesky	0.10	0.00	0.75	0.15	0.77	0.21	0.77	0.20	0.75	0.18	3.3	SO
LR	newton-cholesky	1.00	0.00	0.74	0.15	0.75	0.23	0.78	0.21	0.75	0.19	3.7	SO
LR	newton-cholesky	10.00	0.00	0.67	0.17	0.69	0.22	0.77	0.21	0.70	0.19	4.7	SO
LR	lbfgs	0.10	0.00	0.72	0.18	0.74	0.22	0.81	0.18	0.75	0.18	0.6	IS
LR	lbfgs	1.00	0.00	0.72	0.16	0.75	0.22	0.80	0.17	0.74	0.17	0.6	IS
LR	lbfgs	10.00	0.00	0.70	0.16	0.73	0.22	0.75	0.19	0.71	0.18	0.8	IS
LR	liblinear	0.10	0.00	0.72	0.18	0.74	0.22	0.81	0.18	0.75	0.18	0.3	IS
LR	liblinear	1.00	0.00	0.72	0.16	0.75	0.22	0.80	0.17	0.74	0.17	0.4	IS
LR	liblinear	10.00	0.00	0.70	0.16	0.73	0.22	0.75	0.19	0.71	0.18	0.5	IS
LR	newton-cg	0.10	0.00	0.72	0.18	0.74	0.22	0.81	0.18	0.75	0.18	0.5	IS
LR	newton-cg	1.00	0.00	0.72	0.16	0.75	0.22	0.80	0.17	0.74	0.17	0.5	IS
LR	newton-cg	10.00	0.00	0.70	0.16	0.73	0.22	0.75	0.19	0.71	0.18	0.5	IS
LR	newton-cholesky	0.10	0.00	0.72	0.18	0.74	0.22	0.81	0.18	0.75	0.18	9.3	IS
LR	newton-cholesky	1.00	0.00	0.72	0.16	0.75	0.22	0.80	0.17	0.74	0.17	10.7	IS
LR	newton-cholesky	10.00	0.00	0.70	0.16	0.73	0.22	0.75	0.19	0.71	0.18	13.9	IS
LR	lbfgs	0.10	0.00	0.75	0.15	0.77	0.20	0.81	0.18	0.77	0.16	1.9	ISO
LR	lbfgs	1.00	0.00	0.73	0.15	0.76	0.23	0.77	0.20	0.74	0.18	1.8	ISO
LR	lbfgs	10.00	0.00	0.70	0.15	0.74	0.23	0.74	0.19	0.72	0.18	1.9	ISO
LR	liblinear	0.10	0.00	0.76	0.15	0.77	0.20	0.81	0.18	0.77	0.16	1.6	ISO
LR	liblinear	1.00	0.00	0.72	0.16	0.75	0.23	0.77	0.20	0.73	0.18	1.7	ISO
LR	liblinear	10.00	0.00	0.70	0.15	0.74	0.23	0.74	0.19	0.72	0.18	2.0	ISO
LR	newton-cg	0.10	0.00	0.75	0.15	0.77	0.20	0.81	0.18	0.77	0.16	1.8	ISO
LR	newton-cg	1.00	0.00	0.73	0.15	0.76	0.23	0.77	0.20	0.74	0.18	1.7	ISO
LR	newton-cg	10.00	0.00	0.70	0.15	0.74	0.23	0.74	0.19	0.72	0.18	1.6	ISO
LR	newton-cholesky	0.10	0.00	0.75	0.15	0.77	0.20	0.81	0.18	0.77	0.16	10.5	ISO
LR	newton-cholesky	1.00	0.00	0.73	0.15	0.76	0.23	0.77	0.20	0.74	0.18	14.1	ISO
LR	newton-cholesky	10.00	0.00	0.70	0.15	0.74	0.23	0.74	0.19	0.72	0.18	16.3	ISO
LR	lbfgs	0.10	0.00	0.67	0.14	0.74	0.23	0.67	0.20	0.68	0.16	1.4	SR
LR	lbfgs	1.00	0.00	0.68	0.15	0.74	0.23	0.67	0.22	0.67	0.19	1.5	SR
LR	lbfgs	10.00	0.00	0.68	0.15	0.73	0.23	0.69	0.22	0.68	0.18	1.4	SR
LR	liblinear	0.10	0.00	0.48	0.17	0.48	0.29	0.72	0.39	0.52	0.28	0.3	SR
LR	liblinear	1.00	0.00	0.47	0.17	0.48	0.28	0.72	0.39	0.52	0.28	0.3	SR
LR	liblinear	10.00	0.00	0.48	0.17	0.48	0.29	0.72	0.39	0.52	0.28	0.3	SR
LR	newton-cg	0.10	0.00	0.63	0.17	0.68	0.23	0.68	0.24	0.65	0.20	7.5	SR
LR	newton-cg	1.00	0.00	0.63	0.17	0.68	0.23	0.68	0.23	0.65	0.20	7.5	SR

LR	newton-cg	10.00	0.00	0.62	0.17	0.67	0.23	0.66	0.23	0.63	0.19	7.2	SR
LR	newton-cholesky	0.10	0.00	0.67	0.14	0.74	0.23	0.67	0.20	0.68	0.16	1.5	SR
LR	newton-cholesky	1.00	0.00	0.68	0.15	0.74	0.23	0.67	0.22	0.67	0.19	1.6	SR
LR	newton-cholesky	10.00	0.00	0.68	0.15	0.73	0.23	0.69	0.22	0.68	0.18	1.5	SR
LR	lbfgs	0.10	0.00	0.67	0.14	0.74	0.23	0.65	0.22	0.66	0.18	2.6	SRO
LR	lbfgs	1.00	0.00	0.69	0.13	0.77	0.22	0.67	0.20	0.68	0.16	2.6	SRO
LR	lbfgs	10.00	0.00	0.68	0.14	0.75	0.23	0.64	0.22	0.66	0.19	2.6	SRO
LR	liblinear	0.10	0.00	0.52	0.18	0.42	0.46	0.20	0.29	0.23	0.28	1.4	SRO
LR	liblinear	1.00	0.00	0.52	0.18	0.42	0.46	0.20	0.29	0.23	0.28	1.4	SRO
LR	liblinear	10.00	0.00	0.52	0.18	0.42	0.46	0.20	0.29	0.23	0.28	1.4	SRO
LR	newton-cg	0.10	0.00	0.62	0.18	0.67	0.23	0.66	0.24	0.63	0.20	8.7	SRO
LR	newton-cg	1.00	0.00	0.63	0.16	0.68	0.23	0.67	0.23	0.64	0.19	8.7	SRO
LR	newton-cg	10.00	0.00	0.63	0.16	0.68	0.22	0.66	0.23	0.64	0.19	8.4	SRO
LR	newton-cholesky	0.10	0.00	0.67	0.14	0.74	0.23	0.65	0.22	0.66	0.18	3.0	SRO
LR	newton-cholesky	1.00	0.00	0.69	0.13	0.77	0.22	0.67	0.20	0.68	0.16	2.9	SRO
LR	newton-cholesky	10.00	0.00	0.68	0.14	0.75	0.23	0.64	0.22	0.66	0.19	3.0	SRO
LR	lbfgs	0.10	0.00	0.72	0.18	0.74	0.22	0.81	0.18	0.75	0.18	0.3	ISR
LR	lbfgs	1.00	0.00	0.72	0.16	0.75	0.22	0.80	0.17	0.74	0.17	0.3	ISR
LR	lbfgs	10.00	0.00	0.69	0.17	0.73	0.23	0.74	0.20	0.71	0.18	0.4	ISR
LR	liblinear	0.10	0.00	0.78	0.14	0.80	0.20	0.77	0.21	0.77	0.18	0.2	ISR
LR	liblinear	1.00	0.00	0.73	0.16	0.76	0.23	0.75	0.21	0.73	0.19	0.2	ISR
LR	liblinear	10.00	0.00	0.71	0.16	0.74	0.23	0.73	0.20	0.71	0.19	0.2	ISR
LR	newton-cg	0.10	0.00	0.72	0.18	0.74	0.22	0.81	0.18	0.75	0.18	0.3	ISR
LR	newton-cg	1.00	0.00	0.72	0.16	0.75	0.22	0.80	0.17	0.74	0.17	0.3	ISR
LR	newton-cg	10.00	0.00	0.69	0.17	0.73	0.23	0.74	0.20	0.71	0.19	0.4	ISR
LR	newton-cholesky	0.10	0.00	0.72	0.18	0.74	0.22	0.81	0.18	0.75	0.18	0.3	ISR
LR	newton-cholesky	1.00	0.00	0.72	0.16	0.75	0.22	0.80	0.17	0.74	0.17	0.3	ISR
LR	newton-cholesky	10.00	0.00	0.70	0.16	0.73	0.22	0.75	0.19	0.71	0.18	0.3	ISR
LR	lbfgs	0.10	0.00	0.75	0.15	0.77	0.20	0.81	0.18	0.77	0.16	1.5	ISRO
LR	lbfgs	1.00	0.00	0.73	0.15	0.76	0.23	0.77	0.20	0.74	0.18	1.5	ISRO
LR	lbfgs	10.00	0.00	0.70	0.16	0.74	0.23	0.74	0.20	0.71	0.18	1.5	ISRO
LR	liblinear	0.10	0.00	0.78	0.15	0.80	0.20	0.76	0.22	0.77	0.19	1.4	ISRO
LR	liblinear	1.00	0.00	0.73	0.16	0.76	0.23	0.73	0.20	0.73	0.18	1.4	ISRO
LR	liblinear	10.00	0.00	0.71	0.16	0.75	0.24	0.73	0.20	0.71	0.19	1.4	ISRO
LR	newton-cg	0.10	0.00	0.75	0.14	0.76	0.20	0.80	0.18	0.76	0.16	1.5	ISRO
LR	newton-cg	1.00	0.00	0.73	0.15	0.76	0.23	0.77	0.20	0.74	0.18	1.6	ISRO
LR	newton-cg	10.00	0.00	0.70	0.15	0.74	0.23	0.74	0.19	0.72	0.18	1.5	ISRO
LR	newton-cholesky	0.10	0.00	0.75	0.15	0.77	0.20	0.81	0.18	0.77	0.16	1.7	ISRO

LR	newton-cholesky	1.00	0.00	0.73	0.15	0.76	0.23	0.77	0.20	0.74	0.18	1.7	ISRO
LR	newton-cholesky	10.00	0.00	0.70	0.15	0.74	0.23	0.74	0.19	0.72	0.18	1.7	ISRO
SVM	linear	0.10	0.00	0.78	0.14	0.81	0.22	0.77	0.22	0.77	0.19	0.3	S
SVM	linear	1.00	0.00	0.65	0.16	0.67	0.23	0.76	0.21	0.68	0.19	0.3	S
SVM	linear	10.00	0.00	0.64	0.17	0.66	0.23	0.75	0.21	0.68	0.19	0.3	S
SVM	poly	0.10	0.00	0.52	0.20	0.63	0.28	0.71	0.32	0.57	0.22	0.3	S
SVM	poly	1.00	0.00	0.72	0.15	0.81	0.24	0.65	0.23	0.70	0.20	0.3	S
SVM	poly	10.00	0.00	0.67	0.16	0.73	0.25	0.70	0.20	0.68	0.19	0.3	S
SVM	rbf	0.10	0.00	0.53	0.18	0.53	0.20	0.94	0.21	0.66	0.20	0.4	S
SVM	rbf	1.00	0.00	0.70	0.19	0.73	0.23	0.79	0.20	0.72	0.19	0.4	S
SVM	rbf	10.00	0.00	0.72	0.15	0.75	0.23	0.77	0.21	0.73	0.19	0.4	S
SVM	sigmoid	0.10	0.00	0.51	0.17	0.54	0.21	0.93	0.24	0.64	0.20	0.3	S
SVM	sigmoid	1.00	0.00	0.51	0.16	0.56	0.19	0.93	0.21	0.65	0.17	0.3	S
SVM	sigmoid	10.00	0.00	0.69	0.15	0.69	0.20	0.82	0.18	0.72	0.16	0.3	S
SVM	linear	0.10	0.00	0.79	0.13	0.84	0.20	0.75	0.21	0.78	0.18	1.5	SO
SVM	linear	1.00	0.00	0.65	0.16	0.67	0.23	0.75	0.21	0.68	0.19	1.5	SO
SVM	linear	10.00	0.00	0.64	0.17	0.67	0.23	0.75	0.21	0.68	0.19	1.5	SO
SVM	poly	0.10	0.00	0.59	0.18	0.69	0.34	0.42	0.27	0.49	0.25	1.5	SO
SVM	poly	1.00	0.00	0.73	0.15	0.82	0.23	0.65	0.23	0.70	0.20	1.5	SO
SVM	poly	10.00	0.00	0.67	0.15	0.72	0.24	0.70	0.20	0.68	0.18	1.5	SO
SVM	rbf	0.10	0.00	0.67	0.18	0.75	0.24	0.62	0.26	0.64	0.22	1.6	SO
SVM	rbf	1.00	0.00	0.72	0.15	0.75	0.21	0.75	0.20	0.72	0.17	1.6	SO
SVM	rbf	10.00	0.00	0.72	0.15	0.75	0.23	0.77	0.21	0.73	0.19	1.6	SO
SVM	sigmoid	0.10	0.00	0.69	0.17	0.78	0.26	0.61	0.29	0.64	0.24	1.5	SO
SVM	sigmoid	1.00	0.00	0.69	0.16	0.81	0.21	0.64	0.26	0.66	0.20	1.5	SO
SVM	sigmoid	10.00	0.00	0.72	0.14	0.72	0.19	0.80	0.19	0.74	0.16	1.5	SO
SVM	linear	0.10	0.00	0.74	0.15	0.77	0.24	0.75	0.20	0.74	0.19	0.3	IS
SVM	linear	1.00	0.00	0.68	0.18	0.73	0.23	0.71	0.23	0.68	0.19	0.3	IS
SVM	linear	10.00	0.00	0.68	0.18	0.73	0.23	0.71	0.23	0.68	0.19	0.3	IS
SVM	poly	0.10	0.00	0.68	0.19	0.73	0.24	0.75	0.21	0.70	0.19	0.3	IS
SVM	poly	1.00	0.00	0.74	0.16	0.78	0.23	0.73	0.21	0.73	0.19	0.3	IS
SVM	poly	10.00	0.00	0.68	0.14	0.72	0.21	0.72	0.21	0.68	0.16	0.3	IS
SVM	rbf	0.10	0.00	0.53	0.18	0.53	0.20	0.95	0.21	0.66	0.20	0.4	IS
SVM	rbf	1.00	0.00	0.71	0.18	0.73	0.22	0.78	0.19	0.73	0.19	0.4	IS
SVM	rbf	10.00	0.00	0.72	0.16	0.75	0.24	0.73	0.21	0.71	0.20	0.4	IS
SVM	sigmoid	0.10	0.00	0.53	0.18	0.53	0.20	0.95	0.21	0.66	0.20	0.3	IS
SVM	sigmoid	1.00	0.00	0.53	0.18	0.53	0.20	0.95	0.21	0.66	0.20	0.3	IS
SVM	sigmoid	10.00	0.00	0.70	0.17	0.71	0.21	0.82	0.17	0.74	0.17	0.3	IS
SVM	linear	0.10	0.00	0.75	0.14	0.78	0.23	0.74	0.20	0.74	0.18	1.5	ISO
SVM	linear	1.00	0.00	0.68	0.18	0.73	0.23	0.71	0.23	0.68	0.19	1.5	ISO
SVM	linear	10.00	0.00	0.68	0.18	0.73	0.23	0.71	0.23	0.68	0.19	1.5	ISO

SVM	poly	0.10	0.00	0.73	0.17	0.78	0.23	0.68	0.23	0.71	0.20	1.5	ISO
SVM	poly	1.00	0.00	0.75	0.15	0.79	0.23	0.73	0.20	0.74	0.19	1.5	ISO
SVM	poly	10.00	0.00	0.67	0.15	0.71	0.22	0.70	0.23	0.68	0.19	1.5	ISO
SVM	rbf	0.10	0.00	0.72	0.16	0.75	0.20	0.74	0.21	0.72	0.18	1.5	ISO
SVM	rbf	1.00	0.00	0.74	0.16	0.76	0.20	0.77	0.20	0.74	0.18	1.5	ISO
SVM	rbf	10.00	0.00	0.72	0.16	0.75	0.24	0.74	0.21	0.72	0.20	1.5	ISO
SVM	sigmoid	0.10	0.00	0.72	0.14	0.73	0.21	0.74	0.24	0.71	0.20	1.6	ISO
SVM	sigmoid	1.00	0.00	0.72	0.14	0.73	0.21	0.74	0.24	0.71	0.20	1.5	ISO
SVM	sigmoid	10.00	0.00	0.74	0.15	0.74	0.20	0.81	0.18	0.76	0.17	1.5	ISO
SVM	linear	0.10	0.00	0.51	0.17	0.54	0.28	0.69	0.41	0.52	0.27	0.3	SR
SVM	linear	1.00	0.00	0.51	0.17	0.54	0.28	0.70	0.41	0.53	0.27	0.3	SR
SVM	linear	10.00	0.00	0.52	0.18	0.54	0.27	0.72	0.40	0.54	0.27	0.3	SR
SVM	poly	0.10	0.00	0.45	0.15	0.48	0.27	0.78	0.40	0.52	0.27	0.3	SR
SVM	poly	1.00	0.00	0.45	0.15	0.48	0.27	0.77	0.40	0.52	0.27	0.3	SR
SVM	poly	10.00	0.00	0.45	0.15	0.48	0.27	0.77	0.40	0.52	0.27	0.3	SR
SVM	rbf	0.10	0.00	0.50	0.17	0.54	0.21	0.91	0.27	0.63	0.21	0.3	SR
SVM	rbf	1.00	0.00	0.45	0.15	0.48	0.27	0.78	0.40	0.52	0.27	0.3	SR
SVM	rbf	10.00	0.00	0.45	0.15	0.48	0.27	0.78	0.40	0.52	0.27	0.3	SR
SVM	sigmoid	0.10	0.00	0.50	0.17	0.54	0.21	0.91	0.27	0.63	0.21	0.3	SR
SVM	sigmoid	1.00	0.00	0.45	0.15	0.48	0.27	0.78	0.40	0.52	0.27	0.3	SR
SVM	sigmoid	10.00	0.00	0.45	0.15	0.48	0.27	0.77	0.40	0.52	0.27	0.3	SR
SVM	linear	0.10	0.00	0.59	0.17	0.62	0.34	0.52	0.39	0.50	0.30	1.4	SRO
SVM	linear	1.00	0.00	0.60	0.16	0.64	0.33	0.54	0.38	0.51	0.29	1.4	SRO
SVM	linear	10.00	0.00	0.60	0.16	0.64	0.33	0.54	0.38	0.51	0.29	1.4	SRO
SVM	poly	0.10	0.00	0.51	0.16	0.46	0.50	0.11	0.14	0.18	0.21	1.4	SRO
SVM	poly	1.00	0.00	0.51	0.16	0.46	0.50	0.11	0.13	0.17	0.20	1.4	SRO
SVM	poly	10.00	0.00	0.51	0.16	0.44	0.49	0.13	0.19	0.18	0.22	1.4	SRO
SVM	rbf	0.10	0.00	0.51	0.16	0.44	0.49	0.14	0.22	0.19	0.23	1.5	SRO
SVM	rbf	1.00	0.00	0.51	0.16	0.44	0.49	0.14	0.22	0.19	0.23	1.5	SRO
SVM	rbf	10.00	0.00	0.50	0.16	0.45	0.48	0.16	0.25	0.20	0.23	1.4	SRO
SVM	sigmoid	0.10	0.00	0.51	0.16	0.46	0.50	0.11	0.14	0.18	0.21	1.4	SRO
SVM	sigmoid	1.00	0.00	0.51	0.16	0.46	0.50	0.11	0.14	0.18	0.21	1.5	SRO
SVM	sigmoid	10.00	0.00	0.50	0.16	0.45	0.48	0.16	0.25	0.20	0.23	1.4	SRO
SVM	linear	0.10	0.00	0.74	0.15	0.77	0.24	0.75	0.20	0.74	0.19	0.3	ISR
SVM	linear	1.00	0.00	0.68	0.18	0.73	0.23	0.71	0.23	0.68	0.19	0.3	ISR
SVM	linear	10.00	0.00	0.68	0.18	0.73	0.23	0.71	0.23	0.68	0.19	0.3	ISR
SVM	poly	0.10	0.00	0.44	0.14	0.52	0.30	0.73	0.41	0.50	0.26	0.3	ISR
SVM	poly	1.00	0.00	0.54	0.18	0.56	0.19	0.89	0.19	0.66	0.18	0.3	ISR
SVM	poly	10.00	0.00	0.61	0.17	0.61	0.18	0.91	0.13	0.71	0.16	0.3	ISR
SVM	rbf	0.10	0.00	0.53	0.18	0.53	0.20	0.95	0.21	0.66	0.20	0.3	ISR
SVM	rbf	1.00	0.00	0.70	0.17	0.73	0.23	0.75	0.20	0.71	0.19	0.3	ISR

SVM	rbf	10.00	0.00	0.70	0.15	0.72	0.21	0.75	0.19	0.71	0.17	0.3	ISR
SVM	sigmoid	0.10	0.00	0.53	0.18	0.54	0.19	0.95	0.19	0.66	0.19	0.3	ISR
SVM	sigmoid	1.00	0.00	0.73	0.16	0.75	0.21	0.79	0.19	0.75	0.18	0.3	ISR
SVM	sigmoid	10.00	0.00	0.73	0.15	0.77	0.24	0.76	0.20	0.74	0.19	0.3	ISR
SVM	linear	0.10	0.00	0.75	0.14	0.78	0.23	0.74	0.20	0.74	0.18	1.4	ISRO
SVM	linear	1.00	0.00	0.68	0.18	0.73	0.23	0.71	0.23	0.68	0.19	1.4	ISRO
SVM	linear	10.00	0.00	0.68	0.18	0.73	0.23	0.71	0.23	0.68	0.19	1.5	ISRO
SVM	poly	0.10	0.00	0.51	0.16	0.46	0.50	0.11	0.14	0.18	0.21	1.5	ISRO
SVM	poly	1.00	0.00	0.63	0.14	0.63	0.21	0.80	0.23	0.67	0.19	1.4	ISRO
SVM	poly	10.00	0.00	0.68	0.14	0.66	0.18	0.86	0.17	0.73	0.16	1.4	ISRO
SVM	rbf	0.10	0.00	0.71	0.16	0.73	0.20	0.77	0.20	0.72	0.17	1.4	ISRO
SVM	rbf	1.00	0.00	0.72	0.15	0.75	0.21	0.76	0.19	0.73	0.17	1.4	ISRO
SVM	rbf	10.00	0.00	0.69	0.16	0.71	0.22	0.77	0.19	0.71	0.18	1.4	ISRO
SVM	sigmoid	0.10	0.00	0.73	0.16	0.76	0.20	0.75	0.21	0.73	0.18	1.5	ISRO
SVM	sigmoid	1.00	0.00	0.76	0.15	0.77	0.20	0.79	0.19	0.77	0.17	1.4	ISRO
SVM	sigmoid	10.00	0.00	0.73	0.17	0.78	0.25	0.76	0.20	0.75	0.19	1.4	ISRO
RF	50.00	3.00	0.00	0.70	0.16	0.74	0.22	0.78	0.20	0.73	0.17	3.0	S
RF	50.00	6.00	0.00	0.70	0.17	0.73	0.21	0.78	0.20	0.72	0.17	3.0	S
RF	100.00	3.00	0.00	0.69	0.17	0.73	0.22	0.78	0.20	0.72	0.18	5.7	S
RF	100.00	6.00	0.00	0.70	0.17	0.73	0.22	0.78	0.19	0.72	0.17	5.7	S
RF	200.00	3.00	0.00	0.71	0.17	0.73	0.21	0.80	0.20	0.73	0.18	11.1	S
RF	200.00	6.00	0.00	0.70	0.17	0.72	0.21	0.80	0.20	0.73	0.18	11.1	S
RF	50.00	3.00	0.00	0.73	0.17	0.77	0.22	0.76	0.20	0.73	0.18	4.3	SO
RF	50.00	6.00	0.00	0.72	0.16	0.77	0.21	0.76	0.21	0.73	0.17	4.2	SO
RF	100.00	3.00	0.00	0.70	0.18	0.73	0.23	0.76	0.21	0.71	0.19	7.2	SO
RF	100.00	6.00	0.00	0.70	0.17	0.73	0.22	0.77	0.21	0.72	0.19	7.1	SO
RF	200.00	3.00	0.00	0.70	0.18	0.74	0.23	0.77	0.21	0.72	0.19	12.5	SO
RF	200.00	6.00	0.00	0.70	0.17	0.73	0.22	0.77	0.21	0.72	0.19	12.7	SO
RF	50.00	3.00	0.00	0.68	0.17	0.70	0.23	0.78	0.20	0.71	0.18	3.1	IS
RF	50.00	6.00	0.00	0.68	0.17	0.71	0.23	0.77	0.19	0.71	0.17	3.1	IS
RF	100.00	3.00	0.00	0.69	0.18	0.71	0.22	0.80	0.18	0.72	0.18	5.9	IS
RF	100.00	6.00	0.00	0.70	0.17	0.72	0.22	0.80	0.18	0.73	0.18	5.8	IS
RF	200.00	3.00	0.00	0.70	0.15	0.72	0.21	0.80	0.20	0.73	0.18	11.5	IS
RF	200.00	6.00	0.00	0.71	0.15	0.73	0.21	0.80	0.20	0.73	0.17	11.4	IS
RF	50.00	3.00	0.00	0.73	0.17	0.76	0.20	0.79	0.19	0.75	0.16	4.4	ISO
RF	50.00	6.00	0.00	0.74	0.17	0.77	0.21	0.79	0.19	0.75	0.17	4.3	ISO
RF	100.00	3.00	0.00	0.72	0.16	0.74	0.20	0.79	0.20	0.74	0.17	7.1	ISO
RF	100.00	6.00	0.00	0.72	0.15	0.75	0.21	0.78	0.19	0.74	0.17	7.2	ISO
RF	200.00	3.00	0.00	0.73	0.15	0.75	0.22	0.78	0.20	0.74	0.17	12.9	ISO
RF	200.00	6.00	0.00	0.72	0.16	0.75	0.23	0.77	0.20	0.73	0.18	12.9	ISO
RF	50.00	3.00	0.00	0.55	0.16	0.61	0.20	0.70	0.22	0.61	0.16	2.9	SR

RF	50.00	6.00	0.00	0.53	0.15	0.62	0.20	0.67	0.25	0.59	0.16	2.8	SR
RF	100.00	3.00	0.00	0.54	0.16	0.60	0.19	0.72	0.23	0.61	0.15	5.4	SR
RF	100.00	6.00	0.00	0.54	0.15	0.61	0.19	0.67	0.23	0.59	0.15	5.5	SR
RF	200.00	3.00	0.00	0.53	0.16	0.59	0.20	0.69	0.23	0.59	0.17	10.7	SR
RF	200.00	6.00	0.00	0.53	0.15	0.59	0.20	0.66	0.23	0.58	0.16	10.7	SR
RF	50.00	3.00	0.00	0.57	0.13	0.63	0.21	0.64	0.23	0.59	0.16	4.1	SRO
RF	50.00	6.00	0.00	0.55	0.14	0.63	0.21	0.62	0.25	0.57	0.16	4.1	SRO
RF	100.00	3.00	0.00	0.55	0.13	0.61	0.20	0.63	0.23	0.58	0.15	6.7	SRO
RF	100.00	6.00	0.00	0.52	0.11	0.59	0.20	0.61	0.23	0.56	0.14	6.7	SRO
RF	200.00	3.00	0.00	0.57	0.14	0.62	0.19	0.66	0.23	0.60	0.16	11.9	SRO
RF	200.00	6.00	0.00	0.54	0.14	0.59	0.19	0.64	0.23	0.58	0.16	12.0	SRO
RF	50.00	3.00	0.00	0.58	0.20	0.63	0.23	0.79	0.21	0.65	0.18	2.9	ISR
RF	50.00	6.00	0.00	0.56	0.17	0.63	0.23	0.71	0.21	0.62	0.16	2.9	ISR
RF	100.00	3.00	0.00	0.57	0.16	0.64	0.22	0.77	0.21	0.64	0.15	5.4	ISR
RF	100.00	6.00	0.00	0.58	0.15	0.66	0.24	0.74	0.23	0.64	0.16	5.5	ISR
RF	200.00	3.00	0.00	0.57	0.18	0.63	0.22	0.79	0.21	0.65	0.17	10.6	ISR
RF	200.00	6.00	0.00	0.59	0.18	0.64	0.23	0.78	0.21	0.66	0.17	10.7	ISR
RF	50.00	3.00	0.00	0.58	0.15	0.65	0.23	0.68	0.21	0.62	0.17	4.0	ISRO
RF	50.00	6.00	0.00	0.57	0.16	0.65	0.24	0.63	0.23	0.59	0.17	4.1	ISRO
RF	100.00	3.00	0.00	0.61	0.16	0.66	0.22	0.72	0.20	0.65	0.16	6.6	ISRO
RF	100.00	6.00	0.00	0.62	0.18	0.66	0.25	0.70	0.23	0.64	0.20	6.6	ISRO
RF	200.00	3.00	0.00	0.63	0.15	0.67	0.21	0.74	0.21	0.66	0.16	11.9	ISRO
RF	200.00	6.00	0.00	0.62	0.16	0.66	0.22	0.72	0.22	0.65	0.17	11.9	ISRO
GBT	3.00	0.10	0.00	0.74	0.14	0.76	0.21	0.83	0.19	0.76	0.16	3.5	S
GBT	3.00	1.00	0.00	0.73	0.16	0.75	0.22	0.80	0.22	0.74	0.19	1.8	S
GBT	3.00	10.00	0.00	0.49	0.18	0.48	0.21	0.90	0.30	0.61	0.25	1.4	S
GBT	6.00	0.10	0.00	0.75	0.15	0.77	0.21	0.83	0.18	0.77	0.16	3.9	S
GBT	6.00	1.00	0.00	0.73	0.16	0.75	0.22	0.80	0.22	0.74	0.19	1.9	S
GBT	6.00	10.00	0.00	0.49	0.18	0.48	0.21	0.90	0.30	0.61	0.25	1.3	S
GBT	3.00	0.10	0.00	0.75	0.16	0.76	0.21	0.84	0.19	0.77	0.17	5.1	SO
GBT	3.00	1.00	0.00	0.73	0.14	0.77	0.21	0.78	0.20	0.74	0.17	3.2	SO
GBT	3.00	10.00	0.00	0.44	0.17	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	2.6	SO
GBT	6.00	0.10	0.00	0.76	0.16	0.77	0.21	0.84	0.19	0.77	0.18	5.6	SO
GBT	6.00	1.00	0.00	0.73	0.14	0.77	0.21	0.78	0.20	0.74	0.17	3.3	SO
GBT	6.00	10.00	0.00	0.44	0.17	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	2.6	SO
GBT	3.00	0.10	0.00	0.75	0.14	0.75	0.21	0.85	0.16	0.77	0.15	6.0	IS
GBT	3.00	1.00	0.00	0.73	0.14	0.75	0.21	0.81	0.18	0.75	0.15	3.0	IS
GBT	3.00	10.00	0.00	0.49	0.18	0.48	0.21	0.90	0.30	0.61	0.25	1.8	IS
GBT	6.00	0.10	0.00	0.73	0.14	0.74	0.21	0.84	0.16	0.76	0.15	6.4	IS
GBT	6.00	1.00	0.00	0.73	0.14	0.75	0.21	0.81	0.18	0.75	0.15	3.0	IS
GBT	6.00	10.00	0.00	0.49	0.18	0.48	0.21	0.90	0.30	0.61	0.25	2.0	IS

GBT	3.00	0.10	0.00	0.73	0.14	0.75	0.20	0.81	0.18	0.74	0.15	7.8	ISO
GBT	3.00	1.00	0.00	0.71	0.15	0.74	0.22	0.77	0.19	0.73	0.17	4.3	ISO
GBT	3.00	10.00	0.00	0.44	0.17	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	3.4	ISO
GBT	6.00	0.10	0.00	0.73	0.14	0.75	0.21	0.81	0.18	0.75	0.16	8.7	ISO
GBT	6.00	1.00	0.00	0.71	0.15	0.74	0.22	0.77	0.19	0.73	0.17	4.8	ISO
GBT	6.00	10.00	0.00	0.44	0.17	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	3.3	ISO
GBT	3.00	0.10	0.00	0.49	0.14	0.55	0.23	0.56	0.25	0.51	0.19	1.2	SR
GBT	3.00	1.00	0.00	0.47	0.13	0.53	0.22	0.55	0.25	0.50	0.18	0.9	SR
GBT	3.00	10.00	0.00	0.49	0.18	0.48	0.21	0.90	0.30	0.61	0.25	0.8	SR
GBT	6.00	0.10	0.00	0.46	0.13	0.54	0.23	0.53	0.25	0.49	0.18	1.3	SR
GBT	6.00	1.00	0.00	0.46	0.14	0.53	0.22	0.55	0.25	0.49	0.17	0.9	SR
GBT	6.00	10.00	0.00	0.49	0.18	0.48	0.21	0.90	0.30	0.61	0.25	0.8	SR
GBT	3.00	0.10	0.00	0.48	0.17	0.54	0.24	0.54	0.23	0.50	0.20	2.4	SRO
GBT	3.00	1.00	0.00	0.49	0.16	0.55	0.23	0.53	0.26	0.50	0.19	2.1	SRO
GBT	3.00	10.00	0.00	0.44	0.17	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	2.1	SRO
GBT	6.00	0.10	0.00	0.46	0.15	0.54	0.23	0.52	0.23	0.49	0.17	2.5	SRO
GBT	6.00	1.00	0.00	0.50	0.15	0.55	0.23	0.52	0.26	0.49	0.20	2.1	SRO
GBT	6.00	10.00	0.00	0.44	0.17	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	2.0	SRO
GBT	3.00	0.10	0.00	0.58	0.17	0.64	0.22	0.69	0.22	0.62	0.17	1.2	ISR
GBT	3.00	1.00	0.00	0.58	0.18	0.63	0.22	0.69	0.23	0.62	0.18	0.9	ISR
GBT	3.00	10.00	0.00	0.49	0.18	0.48	0.21	0.90	0.30	0.61	0.25	0.8	ISR
GBT	6.00	0.10	0.00	0.56	0.16	0.63	0.21	0.67	0.22	0.61	0.16	1.3	ISR
GBT	6.00	1.00	0.00	0.58	0.18	0.63	0.21	0.70	0.23	0.62	0.18	0.9	ISR
GBT	6.00	10.00	0.00	0.49	0.18	0.48	0.21	0.90	0.30	0.61	0.25	0.8	ISR
GBT	3.00	0.10	0.00	0.58	0.17	0.65	0.23	0.67	0.21	0.62	0.16	2.5	ISRO
GBT	3.00	1.00	0.00	0.58	0.17	0.63	0.21	0.66	0.23	0.61	0.18	2.1	ISRO
GBT	3.00	10.00	0.00	0.44	0.17	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	2.0	ISRO
GBT	6.00	0.10	0.00	0.58	0.19	0.65	0.24	0.67	0.21	0.62	0.18	2.5	ISRO
GBT	6.00	1.00	0.00	0.57	0.17	0.62	0.22	0.66	0.23	0.60	0.18	2.1	ISRO
GBT	6.00	10.00	0.00	0.44	0.17	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	2.0	ISRO
PFN	0.00	0.00	0.00	0.51	0.13	0.56	0.18	0.93	0.16	0.66	0.14	22.1	SR
PFN	0.00	0.00	0.00	0.47	0.14	0.54	0.19	0.75	0.20	0.59	0.14	23.6	SRO
PFN	0.00	0.00	0.00	0.52	0.17	0.56	0.18	0.92	0.20	0.66	0.16	22.5	ISR
PFN	0.00	0.00	0.00	0.50	0.17	0.57	0.20	0.79	0.22	0.62	0.16	24.3	ISRO
MLP	FALSE	20.00	0.00	0.90	0.10	0.95	0.10	0.87	0.15	0.90	0.10	378.5	S
MLP	FALSE	40.00	0.00	0.91	0.11	0.96	0.10	0.89	0.17	0.91	0.13	373.1	S
MLP	TRUE	20.00	0.00	0.89	0.10	0.94	0.11	0.88	0.15	0.90	0.10	384.5	S
MLP	TRUE	40.00	0.00	0.92	0.10	0.97	0.08	0.91	0.13	0.93	0.09	383.9	S
MLP	FALSE	20.00	0.00	0.90	0.10	0.94	0.13	0.90	0.12	0.91	0.10	492.6	SO
MLP	FALSE	40.00	0.00	0.91	0.11	0.94	0.13	0.91	0.12	0.92	0.10	383.6	SO
MLP	TRUE	20.00	0.00	0.91	0.10	0.94	0.12	0.91	0.12	0.92	0.10	394.8	SO

MLP	TRUE	40.00	0.00	0.92	0.08	0.94	0.11	0.93	0.11	0.93	0.08	390.3	SO
MLP	FALSE	20.00	0.00	0.89	0.11	0.93	0.13	0.88	0.16	0.89	0.12	382.4	IS
MLP	FALSE	40.00	0.00	0.90	0.11	0.93	0.13	0.92	0.12	0.91	0.10	382.5	IS
MLP	TRUE	20.00	0.00	0.90	0.09	0.94	0.10	0.89	0.14	0.91	0.09	381.0	IS
MLP	TRUE	40.00	0.00	0.92	0.09	0.94	0.11	0.93	0.12	0.93	0.09	389.5	IS
MLP	FALSE	20.00	0.00	0.92	0.09	0.94	0.12	0.92	0.12	0.92	0.09	381.7	ISO
MLP	FALSE	40.00	0.00	0.93	0.10	0.94	0.12	0.94	0.13	0.93	0.11	386.3	ISO
MLP	TRUE	20.00	0.00	0.93	0.08	0.94	0.11	0.94	0.11	0.93	0.08	389.5	ISO
MLP	TRUE	40.00	0.00	0.93	0.10	0.93	0.13	0.95	0.10	0.93	0.10	397.7	ISO
MLP	FALSE	20.00	0.00	0.52	0.18	0.48	0.37	0.59	0.46	0.44	0.33	368.7	SR
MLP	FALSE	40.00	0.00	0.51	0.18	0.49	0.36	0.56	0.45	0.43	0.31	369.2	SR
MLP	TRUE	20.00	0.00	0.49	0.17	0.51	0.34	0.62	0.44	0.46	0.29	851.6	SR
MLP	TRUE	40.00	0.00	0.49	0.15	0.52	0.37	0.56	0.45	0.43	0.30	385.5	SR
MLP	FALSE	20.00	0.00	0.55	0.17	0.56	0.35	0.65	0.42	0.51	0.30	379.8	SRO
MLP	FALSE	40.00	0.00	0.56	0.15	0.52	0.35	0.62	0.45	0.49	0.32	376.8	SRO
MLP	TRUE	20.00	0.00	0.55	0.18	0.48	0.38	0.51	0.45	0.42	0.34	376.8	SRO
MLP	TRUE	40.00	0.00	0.55	0.18	0.51	0.36	0.59	0.46	0.46	0.33	377.8	SRO
MLP	FALSE	20.00	0.00	0.94	0.10	0.96	0.09	0.94	0.14	0.94	0.11	369.4	ISR
MLP	FALSE	40.00	0.00	0.96	0.09	0.98	0.06	0.96	0.11	0.96	0.08	370.2	ISR
MLP	TRUE	20.00	0.00	0.95	0.11	0.96	0.10	0.96	0.13	0.95	0.11	376.8	ISR
MLP	TRUE	40.00	0.00	0.95	0.12	0.95	0.12	0.96	0.09	0.95	0.10	378.2	ISR
MLP	FALSE	20.00	0.00	0.96	0.09	0.98	0.07	0.95	0.13	0.96	0.10	371.5	ISRO
MLP	FALSE	40.00	0.00	0.96	0.08	0.97	0.08	0.97	0.10	0.97	0.08	372.3	ISRO
MLP	TRUE	20.00	0.00	0.95	0.11	0.96	0.11	0.95	0.12	0.95	0.11	379.2	ISRO
MLP	TRUE	40.00	0.00	0.94	0.14	0.94	0.14	0.95	0.14	0.94	0.14	392.4	ISRO

Figure S1. Comparison of data processing treatments.

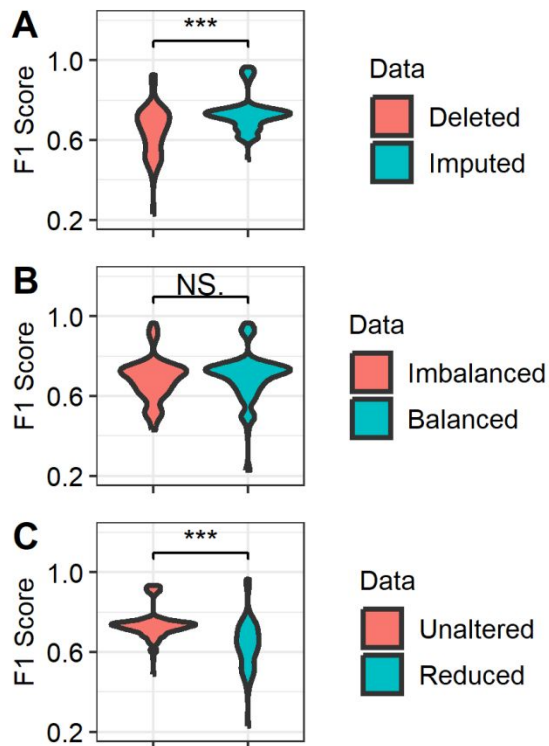
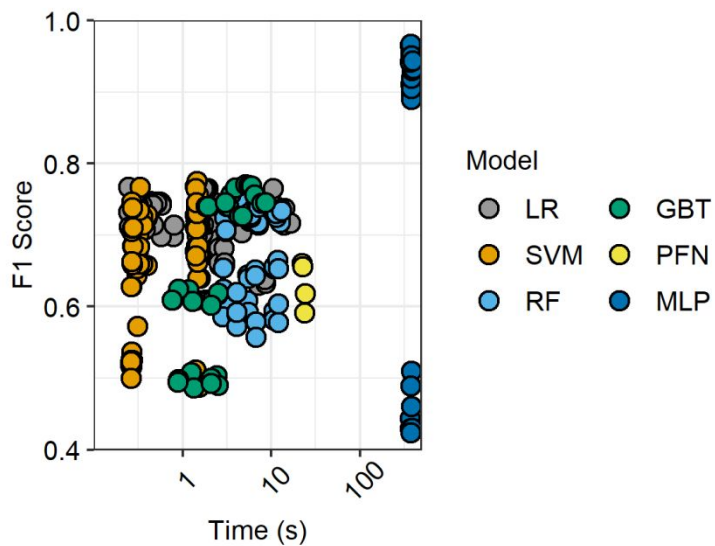


Figure S2. Comparison of models by F1 score over computation time.



Hardware:

GPU: MSI GeForce GTX 980TI

CPU: AMD Ryzen 5 3600 3.60 GHz

RAM: 16.0 GB