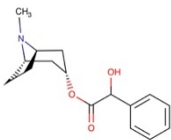
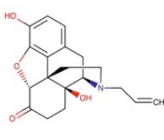
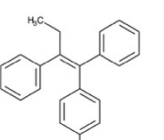
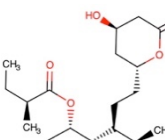
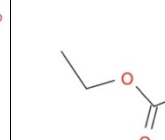


Supplementary information

Molecules repartition into the various groups

- 296 ligands with documented K_i from ChEMBL, from which:
 - 232 ligands assigned to the training group (80%)
 - 64 ligands assigned to the testing group (20 %)
- For all docked ligands:
 - 3 poses produced
- Drugbank: 6631 molecules downloaded
 - 148 could not be parsed by RDKit
 - 232 molecules that could not be docked by Vina (eg: all molecules with inorganic atoms)
 - 5078 non-FDA approved molecules, not used (eg: experimental drugs, illicit drugs)
 - 291 FDA approved nutraceuticals, not used (eg: vitamin C, tetrahydrofolate)
 - **1114 FDA approved drugs, used in the analysis.**

Redocking of the co-crystallised ligands of the PDB structures

CES1 structure	1MX5	1MX9	1YA4	1YA8	1YAH
Ligand	Homatropine	Naloxone	Tamoxifen	Mevastatin	Ethyl acetate
Ligand 2D structure					
Redocking applicable?	Yes	Yes	Yes	No, cleavage products	Yes
RMSD between crystalized ligands and the best docked pose (Angstrom range on the best poses)	1.5	4.5	7.2	N/A	4.7
Score of best pose (~estimated Gibbs energy of binding in kcal/mol)	-8.4	-7.9	-8.2	-8.0	-3.6

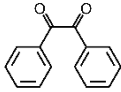
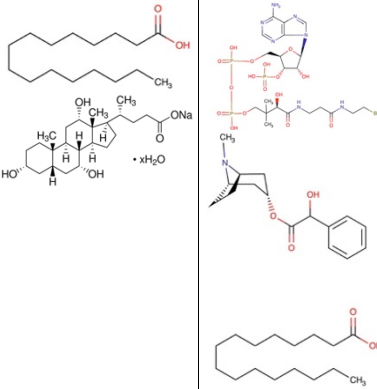
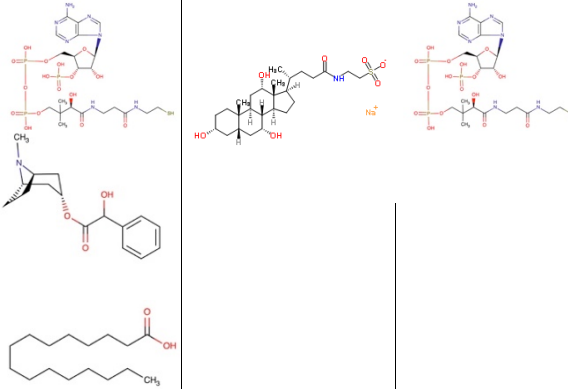
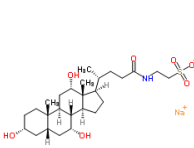
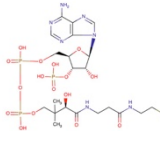
Structure	1YAJ	2DQY	2DQZ	2DR0	2H7C
Ligand	Benzil	Cholate Palmitate	Homatropine Coenzyme A Palmitate	Taurocholate	Coenzyme A
Ligand 2D structure					
Redocking applicable?	Yes	No (outside active site)	Yes (Palmitate)	Yes	Yes
RMSD between crystalized ligands and the best docked pose (Angstrom range on the best poses)	3.5	N/A	3.7	6.5	8.7
Vina score of best pose (~estimated Gibbs energy of binding in kcal/mol)	-5.2	-8.0	-5.3	-9.2	-7.2

Figure S1: Tabulated results of the redocking of the co-crystallised ligand of each PDB structure, done on Autodock Vina with the same settings as in the main matter.

Active site characterization according to fpocket 3.0

Default settings except for clustering distance (2.8 angstrom), leading to slightly overestimated volume and SASA, but yielding one and only one detected pocket covering the active site, allowing for structure-to-structure comparisons. (Addition of the value of multiple pocket is non-ideal for comparison purpose)

Structure	1YAH	1YAJ	1YA8	2DQZ	1YA4	2H7C	1MX5	2DR0	2DQY	1MX9
Volume (active site, Å ³)	701	795	950	958	984	1015	1071	1078	1157	1375
Total SASA	185	189	227	224	222	274	276	258	269	356
Polar SASA	43	34	59	60	72	98	85	71	71	103
Apolar SASA	142	155	168	164	150	176	191	187	198	253

Figure S2: Active site volume and SASA for each structure, according to fpocket

	Complete dataset except ligands with Ki between 5 and 15 μM	Complete dataset
Threshold	10 μM	10 μM
Number of active ligands	135 (50%)	140 (47%)
Vina score only (no statistical model) Ensemble AUC (complete set) Best AUC among all individual structures	0.55 0.60	0.57 0.62
Ensemble MLP model AUC (std. dev.) 5CV (training set)	0.83 (0.02)	0.81 (0.03)
Ensemble LDA model AUC (std. dev.) 5CV (training set)	0.77 (0.07)	0.77 (0.08)
Ensemble QDA model AUC (std. dev.) 5CV (training set)	0.77 (0.06)	0.77 (0.08)

Figure S3: Comparison of the MLP, QDA and LDA models removing ligands with an activity between 5 μM and 15 μM.

Table S1: 294 compounds with known activity on CEN1 gathered in ChEMBL database.

Set	Name	SMILES	Ki Nanomolar	Vina Score Best	Vina Comp. Gauss1	Vina Comp. Gauss2	Vina Comp. Repulsion	Vina Comp. Hydrophobic	Vina Comp. Hydrogen
Training	CHEMBL467451	CCCCCCCCC(=O)O=C(O)C(F)F	397.32	-7.4775	80.56594	1366.81469	2.08905	72.65263	3.40717
Training	CHEMBL465356	CCCCCCCCC(=O)O=C(O)C(F)F	652.93	-7.2284	86.86014	1410.26186	1.90733	76.4488	2.9057
Training	CHEMBL510988	CC(C)O=C(O)C(F)F	6904.93	-7.21091	59.2926	1062.61109	2.21091	82.21091	1.68499
Training	CHEMBL270375	CCCCCCCCC(=O)O=C(F)F	39.1	-6.5294	79.59238	1311.69721	0.93567	83.71262	0.96949
Training	BENZIL	O=C(O)C(=O)c1ccccc1	43.89	-8.14459	59.13861	1034.93222	0.59384	76.17376	0.52242
Training	CHEMBL192780	Cc1ccc(O)cc1	37.02	-8.2064	57.27003	1108.01636	1.24201	55.49481	2.29183
Training	CHEMBL235207	Cc1ccc(O)cc1	38.4	-8.2064	57.27003	1108.01636	1.24201	55.49481	2.29183
Training	CHEMBL244238	Fc1ccc(O)cc1	38.4	-8.2064	57.27003	1108.01636	1.24201	55.49481	2.29183
Training	CHEMBL192139	O=C(O)C(=O)F	25091.39	-6.7776	64.22778	1161.60784	1.50946	58.13234	1.94546
Training	CHEMBL244248	O=C(O)C(=O)F	256.02	-6.93468	66.12775	1270.59123	0.58962	60.1098	0.34716
Training	CHEMBL242721	Fc1ccc(O)cc1	191.12	-10.8485	67.69417	1417.1904	1.24103	54.93531	0
Training	CHEMBL191847	Fc1ccc(O)cc1	260	-6.92006	72.87742	1288.83609	0.84302	69.15322	0.50963
Training	CHEMBL191847	Fc1ccc(O)cc1	223.16	-6.23514	63.04967	1030.30756	0.81874	65.4579	1.35734
Training	CHEMBL191847	Fc1ccc(O)cc1	404.51	-6.53344	75.40365	1388.10758	1.48017	63.94381	0.61831
Training	CHEMBL370439	O=C(O)C(=O)F	524.4	-6.7776	64.22778	1233.38173	1.50946	58.13234	1.94546
Training	CHEMBL244830	O=C(O)C(=O)F	665	-10.07944	78.50125	1399.58339	0.93291	66.05758	0.61577
Training	CHEMBL365445	O=C(O)C(=O)F	433.27	-6.42513	49.87783	903.32178	1.03147	60.1098	2.22339
Training	CHEMBL365445	O=C(O)C(=O)F	880	-7.32199	47.89912	837.96538	1.05287	26.21467	2.15351
Training	CHEMBL1812859	O=C(O)C(=O)F	1550	-6.9484	53.82762	770.28079	1.18672	54.8266	1.68869
Training	CHEMBL426562	CC(=O)N(C)C(=O)O	1830	-9.14329	64.83756	1374.95911	0.53909	76.21014	0
Training	MILTRONE	CC(=O)N(C)C(=O)O	260	-10.66835	70.77882	1330.62865	3.67133	102.63468	0.61589
Training	CHEMBL483875	O=C(O)C(=O)F	3427.5	-6.23073	57.42444	1037.2793	0.82835	60.5099	0
Training	CHEMBL481111	O=C(O)C(=O)F	100000	-9.83055	77.62663	1657.85055	1.44855	51.18984	0.27756
Training	CHEMBL1638165	O=C(O)C(=O)F	100000	-10.50634	102.85747	1816.02934	1.35154	71.64464	0.69414
Training	CHEMBL365392	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL365392	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL222984	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.7691	1165.62374	1.8414	71.68072	0.46866
Training	CHEMBL191796	O=C(O)C(=O)F	100000	-6.97372	107.				

Tranino	CHEMBL221512	CCCCCCCCCCCCCCCC(C)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	All	D8=8	Molecules	-8.01086	107.72723	1638.17746	1.74296	111.43841	0.53431
Tranino	CHEMBL222712	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	419		-9.00815	69.41511	127.98911	2.87281	6.6288	2.86838	
Tranino	CHEMBL1812852	Bc1C(C)C(=O)C(=O)C1=CCCC2=CCCC2	2630		-9.11049	71.18444	1210.43703	1.39181	87.48844	1.87402	
Tranino	CHEMBL1812850	O=C(C)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	610		-9.01239	69.32227	1158.5353	1.01203	82.83272	1.95684	
Tranino	CHEMBL398977	O=C(C)C(=O)C(=O)C(=O)C1=CCCC2=CCCC2	2130		-8.87956	57.89638	1146.65825	0.97402	67.2408	1.00359	
Tranino	TANSHINONEA	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)C(=O)C(=O)C)cc1	1200		-9.00815	69.41511	127.98911	2.87281	6.6288	2.86838	
Tranino	CHEMBL222999	CN(C)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	2280		-7.02208	38.97218	794.36285	0.96735	31.0567	2.16367	
Tranino	CHEMBL376290	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	3410		-7.28886	44.74798	834.10486	1.14101	40.14914	1.60746	
Tranino	CHEMBL222849	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	10000		-8.25688	53.72657	1180.0811	1.19354	34.44219	1.73797	
Tranino	CHEMBL192913	Cc1ccc(NC(=O)C)cc1	800		-5.59867	37.68361	693.24969	1.32922	54.53769	0.85916	
Tranino	CHEMBL191739	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	10000		-8.50545	74.90242	1398.40239	2.35987	39.73345	3.55997	
Tranino	CHEMBL482640	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	10000		-9.70491	80.87825	1652.39388	2.06907	47.68055	3.03537	
Tranino	CHEMBL483470	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	10000		-9.39526	76.67202	1655.08703	1.0228	64.15714	0	
Tranino	CHEMBL489076	Fc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	10000		-8.82342	49.62928	784.86742	1.21077	24.17882	2.79277	
Tranino	CHEMBL491256	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	10000		-12.4223	113.4273	1948.04627	2.27129	107.64897	0	
Tranino	CHEMBL395652	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	10000		-9.73159	69.11409	1264.66116	0.93945	85.85233	0.39799	
Tranino	Dihydro-TANSHINONEI	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	398		-10.47049	79.48147	1328.36748	2.92162	54.49782	1.16527	
Tranino	CHEMBL191284	Cc1ccc(NC(=O)C)cc1	800		-5.11933	42.67861	693.24969	1.32922	54.53769	0.85916	
Tranino	CHEMBL364588	CCCCC(=O)C(=O)C	16900		-5.21158	41.83676	588.52844	0.71616	35.71157	2.14004	
Tranino	TANSHINONEI	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	26250		-11.53381	75.47291	1329.89692	1.99872	88.7735	0.95555	
Tranino	CHEMBL223001	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	3600		-7.50212	36.92989	897.25844	0.78	30.44188	1.95723	
Tranino	CHEMBL192913	Cc1ccc(NC(=O)C)cc1	800		-5.59867	37.68361	693.24969	1.32922	54.53769	0.85916	
Tranino	DIPHENYLTHANEDIOLAT	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	10000		-8.26606	62.35021	1170.24322	1.42793	2.5803	2.5803	
Tranino	CHEMBL483072	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	10000		-10.79531	96.60327	1773.2953	1.65207	76.22325	1.22252	
Tranino	CHEMBL483468	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	10000		-8.86894	56.84396	1067.00966	2.93911	75.29491	0.19153	
Tranino	CHEMBL484628	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	10000		-10.1318	97.3233	1756.28232	1.1887	61.10077	6.85353	
Tranino	CHEMBL485106	Fc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	10000		-10.1721	95.69187	1780.82797	1.32922	68.5749	0.16486	
Tranino	CHEMBL487299	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	10000		-11.5145	115.52027	1931.30379	3.99641	66.83904	3.04228	
Tranino	CHEMBL223001	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	10000		-9.81241	60.85324	1046.0466	0.67649	34.82203	0	
Tranino	CHEMBL484628	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	10000		-7.82211	63.52575	1040.2673	1.11783	45.98303	1.65776	
Tranino	CHEMBL485106	Fc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	10000		-10.1721	95.69187	1780.82797	1.32922	68.5749	0.16486	
Tranino	CHEMBL487299	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	10000		-11.5145	115.52027	1931.30379	3.99641	66.83904	3.04228	
Tranino	CHEMBL225169	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	10000		-9.81241	60.85324	1046.0466	0.67649	34.82203	0	
Tranino	CHEMBL437373	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	170		-9.32419	66.65619	1266.183	0.96456	64.63266	1.04354	
Tranino	CHEMBL242769	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	990		-8.86815	62.22238	1156.88202	0.60485	72.59447	0.35214	
Tranino	CHEMBL374970	CCCCC(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	760		-10.35715	75.11638	1404.29163	2.39885	64.56504	2.83148	
Tranino	CHEMBL223785	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	10000		-8.00159	47.64461	1058.84915	1.04872	40.89518	2.26171	
Tranino	CHEMBL223785	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	10000		-8.0779	45.07508	832.68627	1.04356	21.58913	2.46224	
Tranino	CHEMBL236337	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	10000		-8.3276	63.55114	1145.47811	1.36635	70.10101	0.26222	
Tranino	CHEMBL223785	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	10000		-7.84442	60.5329	1171.1446	1.02305	32.2073	1.10103	
Tranino	CHEMBL515326	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	10000		-10.58183	88.89447	1726.33829	1.09882	81.8099	0.43704	
Tranino	CHEMBL482639	Fc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	10000		-9.91398	84.37457	1675.74195	1.42618	62.59533	1.2816	
Tranino	CHEMBL487303	Brc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	10000		-9.37614	109.30549	1613.82843	2.74307	68.75286	0.59196	
Tranino	5-FURICOLICACID	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	10000		-8.98931	42.62993	764.89994	1.04356	23.7442	2.74282	
Tranino	CHEMBL451609	Brc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	10000		-9.48624	94.88829	1540.82115	3.94211	79.51929	2.48209	
Tranino	VALPROICACID	CCCCC(=O)C(=O)C	10000		-5.44203	47.6216	634.47801	0.8894	41.21551	2.33102	
Tranino	CHEMBL191284	CCCCC(=O)C(=O)C	102		-8.59861	57.39825	823.73328	0.39508	65.68831	0.337	
Tranino	CHEMBL244428	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	190		-10.1937	90.35937	1284.12275	1.85871	67.53681	1.45941	
Tranino	CHEMBL242722	Fc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	327		-10.58229	79.716	1390.05631	0.83413	64.81354	0.43616	
Tranino	CHEMBL1629724	Fc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	430		-10.50789	113.47581	1768.30686	2.21399	79.35597	0.209	
Tranino	1,2,3,4-TETRAHYDROQUINONE	O=C1C=CC(=O)C=C1	930		-7.39528	40.54525	790.70736	1.04784	38.06613	2.40279	
Tranino	CHEMBL244428	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	1370		-9.91398	84.37457	1675.74195	1.42618	62.59533	1.2816	
Tranino	CHEMBL222891	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	10000		-7.82257	45.24851	900.62984	1.02882	32.11835	2.21126	
Tranino	CHEMBL191676	CN(C)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	10000		-8.44461	70.08946	1367.68077	0.40889	48.81885	0	
Tranino	CHEMBL191688	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	10000		-5.93398	56.65883	658.46768	1.65993	32.3165	0.5927	
Tranino	CHEMBL191688	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	10000		-9.91398	84.37457	1675.74195	1.42618	62.59533	1.2816	
Tranino	CHEMBL396205	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	10000		-8.82981	78.37249	1283.23772	2.50857	64.29995	1.40238	
Tranino	CHEMBL1812856	CCCCC(=O)C(=O)C	3		-6.24754	54.93243	932.99514	1.26881	56.5105	1.35328	
Tranino	CHEMBL192592	Brc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	71		-7.1984	57.17362	1027.23339	1.43129	41.4575	2.24494	
Tranino	PHENYLACETICACID	Cc1ccc(NC(=O)C)cc1	148		-8.00159	47.64461	1058.84915	1.04872	40.89518	2.26171	
Tranino	CHEMBL192913	Cc1ccc(NC(=O)C)cc1	800		-5.59867	37.68361	693.24969	1.32922	54.53769	0.85916	
Tranino	CHEMBL482848	Brc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	10000		-9.90777	95.82121	1664.5705	2.32445	68.29336	1.61678	
Tranino	CHEMBL1639899	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	10000		-9.1262	94.90246	1587.44173	1.89586	57.82136	0.35206	
Tranino	CHEMBL374970	CCCCC(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	760		-10.35715	75.11638	1404.29163	2.39885	64.56504	2.83148	
Tranino	CHEMBL480809	Fc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	63.34		-7.58511	68.97841	1000.86897	1.2024	69.04085	2.03073	
Tranino	CHEMBL394806	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	1000		-9.50351	74.85337	1392.42779	1.07413	63.55685	0	
Tranino	CHEMBL398900	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	1750		-7.92988	44.68778	969.188773	1.03349	35.91073	2.21782	
Tranino	5-NITROQUINONE	O=C1C=CC(=O)C=C1	10000		-8.98931	42.62993	764.89994	1.04356	23.7442	2.74282	
Tranino	CHEMBL333636	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	10000		-7.54443	54.87819	803.98117	1.03586	50.6784	1.30957	
Tranino	CHEMBL395018	Fc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	34.7		-5.8637	74.24844	1276.44123	0.7217	70.56044	0.30052	
Tranino	CHEMBL192625	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	534.51		-9.1261	95.37628	1163.14344	1.36945	72.82192	2.00994	
Tranino	CHEMBL449675	CCCCC(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	166.15		-6.51267	62.51928	942.9431	1.91554	44.40388	1.15994	
Tranino	CHEMBL192039	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	10000		-8.13498	72.68463	1289.80082	1.56429	48.28886	1.90819	
Tranino	CHEMBL483676	Fc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	10000		-10.03936	88.50406	1650.30413	0.83819	70.25276	0.2433	
Tranino	CHEMBL487102	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	10000		-10.11857	106.87188	1746.28654	1.94888	65.08216	0.44487	
Tranino	CHEMBL326740	O=C(N)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	10000		-10.28984	90.65928	1740.24869	2.13897	78.50562	2.92227	
Tranino	CHEMBL375304	Cc1ccc(NC(=O)C(=O)C)cc1	4380		-8.93315	79.58882	1371.89154	2.33123	70.7592	1.95778	
Tranino	CHEMBL464002	CCCCCCCCC(S)C(=O)C(=O)C(=O)C(=O)C2=CCCC2	2624.29		-7.09813	79.52837	1281.61814	1.77009	68		

Table S2: List of drugs predicted as active with the MLP model

ligand ID	Basename	Score	Gauss1	Gauss2	Repulsion	Hydrophobic	Hydrogen	GenericName	MLP_prediction
260	DB00425	-10,51	77,16	1391,39	0,66	67,56	0,01	Zolpidem	0,015209675
212	DB00366	-10,09	71,07	1204,98	0,54	68,17	0,00	Doxylamine	0,018482715
531	DB00758	-10,30	75,64	1255,61	0,65	60,32	0,14	Clopidogrel	0,018669128
439	DB00645	-10,39	74,46	1297,43	0,72	63,41	0,07	Dyclonine	0,019448757
259	DB00424	-9,85	75,04	1276,02	0,80	60,05	0,51	Hyoscyamine	0,020001113
641	DB00889	-10,68	74,85	1405,22	0,78	56,74	0,12	Granisetron	0,020923913
379	DB00572	-10,14	73,97	1302,85	0,88	60,97	0,56	Atropine	0,021516668
521	DB00748	-9,80	71,37	1220,44	0,70	60,30	0,03	Carbinoxamine	0,021750808
5554	DB08800	-10,21	67,33	1215,97	0,52	56,44	0,00	Chloropyramine	0,021885276
530	DB00757	-10,47	80,59	1477,67	0,75	57,30	0,75	Dolasetron	0,022793025
1005	DB01382	-10,28	71,30	1301,28	0,50	37,50	0,22	Glycodiazine	0,023188293
407	DB00608	-10,77	81,83	1340,52	0,68	61,19	0,00	Chloroquine	0,023351759
715	DB00979	-9,80	68,90	1285,82	0,80	61,58	0,65	Cyclopentolate	0,02349639
905	DB01205	-9,90	75,50	1340,64	0,61	34,61	0,31	Flumazenil	0,023601592
68	DB00196	-10,30	77,19	1373,05	0,81	47,32	0,17	Fluconazole	0,023849726
264	DB00429	-10,75	91,77	1612,03	3,96	67,15	0,94	Carboprost Tromethamine	0,023890376
183	DB00334	-10,45	72,38	1328,49	0,56	42,62	0,00	Olanzapine	0,024311751
728	DB00993	-8,62	63,02	1194,93	0,95	0,00	1,74	Azathioprine	0,024837106
181	DB00332	-10,89	81,85	1477,30	0,83	62,75	0,22	Ipratropium bromide	0,024902225
70	DB00198	-10,11	70,77	1318,56	0,84	49,73	0,59	Oseltamivir	0,02493745
444	DB00651	-8,31	67,16	1147,17	1,03	0,00	1,48	Dyphylline	0,025066495
561	DB00792	-9,98	68,13	1146,72	0,52	59,31	0,00	Tripelennamine	0,025817573
791	DB01069	-10,22	73,01	1195,53	0,57	55,12	0,00	Promethazine	0,027144492
739	DB01006	-10,75	81,64	1321,02	0,71	64,56	0,00	Letrozole	0,027419925
520	DB00747	-9,92	75,06	1341,11	0,86	45,02	0,59	Scopolamine	0,028185934
1152	DB01618	-10,27	72,05	1210,32	0,61	52,79	0,23	Molindone	0,02865082
793	DB01071	-10,93	71,67	1386,02	0,83	73,21	0,00	Mequitazine	0,028692693
434	DB00640	-8,65	72,40	1165,19	1,08	0,00	1,65	Adenosine	0,028808236
767	DB01042	-9,54	68,03	1158,22	0,61	37,67	0,58	Melphalan	0,028875798
283	DB00454	-9,72	69,66	1073,14	0,47	59,01	0,06	Meperidine	0,028987676
668	DB00922	-10,45	74,27	1293,60	0,64	46,85	0,05	Levosimendan	0,029135823
466	DB00679	-11,28	82,14	1477,00	0,70	56,79	0,00	Thioridazine	0,029509753
457	DB00669	-9,94	75,11	1248,88	0,56	34,12	0,17	Sumatriptan	0,029818773
102	DB00238	-9,87	67,16	1224,87	0,68	42,93	0,39	Nevirapine	0,029990375
67	DB00193	-10,01	70,12	1157,37	0,62	57,57	0,08	Tramadol	0,030144274
701	DB00963	-10,32	74,04	1238,44	0,85	63,85	0,64	Bromfenac	0,030560791
105	DB00242	-8,66	65,09	1174,21	0,87	8,36	1,25	Cladribine	0,030963808
3888	DB06766	-10,85	78,43	1372,28	0,87	65,40	0,09	Alcaftadine	0,030984342
1124	DB01580	-9,88	66,60	1180,42	0,76	45,50	0,79	Oxprenolol	0,03125897
302	DB00477	-10,41	76,07	1252,55	0,65	50,90	0,00	Chlorpromazine	0,031416625
1150	DB01615	-10,54	73,88	1386,17	0,92	53,04	0,50	Aceprometazine	0,031738847
760	DB01032	-9,41	66,92	1188,49	0,76	48,22	0,67	Probenecid	0,03186956
524	DB00751	-9,86	68,28	1138,79	0,59	73,86	0,08	Epinastine	0,031937778
219	DB00374	-10,94	96,55	1611,53	2,93	76,42	0,56	Treprostinil	0,032362312
735	DB01002	-9,71	66,57	1275,88	1,01	61,55	0,04	Levobupivacaine	0,03265944
151	DB00297	-9,71	66,57	1275,88	1,01	61,55	0,04	Bupivacaine	0,03265944
299	DB00474	-9,45	69,68	1190,40	0,70	51,40	0,29	Methohexital	0,03279066
834	DB01124	-9,73	68,95	1127,65	0,70	52,50	0,36	Tolbutamide	0,032902956
504	DB00724	-9,51	67,38	1079,78	0,59	53,31	0,29	Imiquimod	0,033648282
706	DB00969	-10,80	71,53	1341,96	0,63	49,08	0,24	Alosetron	0,03383127
5556	DB08802	-9,50	64,18	1237,98	0,59	38,08	0,00	Isothipendyl	0,034156322
255	DB00420	-10,19	74,58	1191,96	0,68	55,98	0,00	Promazine	0,034639418
653	DB00904	-10,76	66,79	1346,77	0,69	52,57	0,31	Ondansetron	0,035060912
341	DB00527	-11,48	79,96	1529,46	0,67	55,06	0,09	Dibucaine	0,0351758
970	DB01297	-9,31	70,72	1186,03	0,68	37,43	0,81	Practolol	0,035223037
693	DB00953	-10,17	78,67	1195,07	0,68	49,68	0,07	Rizatriptan	0,035530716
384	DB00579	-10,28	76,18	1200,26	0,76	73,02	0,11	Mazindol	0,036393672
932	DB01237	-10,23	73,20	1191,04	0,72	75,19	0,06	Bromodiphenhydramine	0,036459267
717	DB00981	-9,90	73,57	1248,31	0,67	37,88	0,14	Physostigmine	0,036919296
108	DB00247	-11,13	82,44	1555,93	1,04	57,63	0,18	Methysergide	0,037426144
125	DB00268	-9,55	71,25	1133,11	0,75	62,91	0,27	Ropinirole	0,03757152
3822	DB04843	-11,05	81,33	1451,37	1,61	70,29	0,13	Mepenzolate	0,037658036
1000	DB01366	-9,92	74,86	1299,92	0,99	44,89	0,67	Procaterol	0,037944257
280	DB00449	-11,44	87,87	1509,80	1,22	64,56	1,06	Dipivefrin	0,037974328
544	DB00772	-8,71	66,47	1182,90	0,66	11,32	0,69	Malathion	0,03843364
699	DB00961	-9,58	68,90	1075,00	0,57	58,51	0,02	Mepivacaine	0,038762033

3818	DB04838	-10,34	70,08	1220,17	0,90	69,04	0,73	Cyclandelate	0,039043576
197	DB00349	-10,55	76,01	1258,98	0,85	70,10	0,39	Clobazam	0,039065927
3868	DB06710	-9,85	63,66	1282,20	1,65	63,59	0,23	Methyltestosterone	0,03913513
1115	DB01559	-10,53	67,83	1276,34	0,80	57,89	0,30	Clotiazepam	0,039443254
558	DB00788	-9,66	64,69	1066,31	0,67	60,98	0,48	Naproxen	0,0396339
688	DB00946	-10,56	65,64	1285,15	1,01	68,04	0,11	Phenprocoumon	0,040037602
121	DB00264	-9,57	67,95	1179,62	0,71	43,60	0,24	Metoprolol	0,040742368
426	DB00631	-9,19	74,69	1207,37	0,88	8,05	1,31	Clofarabine	0,040746182
184	DB00335	-9,50	74,06	1168,52	0,82	45,29	0,84	Atenolol	0,041326433
698	DB00960	-9,52	70,71	1126,64	0,78	40,68	0,72	Pindolol	0,041538864
378	DB00571	-9,58	72,71	1181,47	0,78	69,24	0,42	Propranolol	0,042477638
664	DB00918	-10,73	80,06	1418,26	0,81	40,87	0,22	Almotriptan	0,042690963
601	DB00837	-11,10	81,25	1408,19	0,90	53,60	0,81	Progabide	0,04283285
327	DB00508	-11,44	82,86	1461,89	0,73	63,86	0,00	Triflupromazine	0,0428344
806	DB01087	-9,30	74,61	1145,96	0,66	47,65	0,28	Primaquine	0,042994022
636	DB00880	-8,44	63,90	1089,14	0,88	14,17	1,36	Chlorothiazide	0,0432384
572	DB00806	-9,55	70,18	1254,69	0,70	20,62	0,76	Pentoxifylline	0,04344067
423	DB00628	-11,01	69,58	1357,78	1,14	68,32	1,25	Clorzepate	0,043861
98	DB00234	-11,01	74,84	1385,70	0,97	72,49	0,19	Reboxetine	0,0440664
874	DB01171	-9,21	64,74	1108,89	0,60	42,38	0,36	Moclobemide	0,044588774
744	DB01011	-9,55	71,30	1032,28	0,55	57,03	0,26	Metyrapone	0,04467991
5562	DB08808	-9,78	68,50	1104,60	0,81	53,74	0,75	Bupranolol	0,044706393
732	DB00999	-8,45	63,57	1093,27	0,95	13,55	1,48	Hydrochlorothiazide	0,04485762
591	DB00827	-9,27	68,02	1212,28	0,86	19,07	1,12	Cinoxacin	0,045307696
914	DB01214	-10,74	71,27	1338,18	0,76	48,19	0,43	Metipranolol	0,046020985
971	DB01299	-9,95	70,67	1312,10	0,67	26,12	0,54	Sulfadoxine	0,04651171
201	DB00353	-11,20	82,89	1514,25	0,99	66,00	0,45	Methylergonovine	0,046923846
1118	DB01567	-10,45	67,72	1279,98	0,94	55,77	0,48	Fludiazepam	0,047053754
215	DB00369	-8,67	68,71	1140,19	1,17	8,58	1,75	Cidofovir	0,04737562
929	DB01233	-9,88	74,50	1236,25	0,85	32,01	0,77	Metoclopramide	0,047665715
740	DB01007	-10,94	71,53	1410,47	0,95	51,90	0,17	Tioconazole	0,047709137
3603	DB04571	-9,63	66,74	1045,00	0,63	65,34	0,17	Trioxsalen	0,047802538
814	DB01096	-9,60	73,75	1220,32	1,01	41,15	1,12	Oxamniquine	0,04852119
146	DB00291	-10,14	70,10	1166,46	0,89	58,52	0,57	Chlorambucil	0,048961222
316	DB00495	-9,09	72,70	1161,85	0,89	14,70	1,27	Zidovudine	0,04904008
1126	DB01582	-9,36	66,93	1179,28	0,68	36,40	0,34	Sulfamethazine	0,04912597
411	DB00612	-10,45	84,08	1405,06	1,07	43,94	0,30	Bisoprolol	0,049145907
153	DB00299	-8,77	63,87	1134,68	0,88	12,28	1,63	Penciclovir	0,04916385
543	DB00771	-10,90	81,24	1569,10	1,16	79,60	0,02	Clidinium	0,04917726
673	DB00927	-9,34	74,02	1247,10	0,99	10,06	1,29	Famotidine	0,049295127
3893	DB06803	-10,29	76,08	1304,49	1,20	47,49	1,35	Nicosamide	0,049693078
780	DB01058	-11,09	76,19	1422,62	1,00	80,56	0,61	Praziquantel	0,0500409
540	DB00768	-11,49	80,28	1515,71	1,00	74,01	0,70	Olopatadine	0,05020711
610	DB00849	-9,60	73,25	1118,38	0,84	48,75	0,37	Methylphenobarbital	0,050239056
333	DB00518	-8,98	66,67	1131,95	0,56	29,40	0,36	Albendazole	0,050257474
655	DB00908	-10,05	78,16	1447,79	0,93	55,09	0,71	Quinidine	0,05030662
737	DB01004	-8,28	71,74	1088,44	1,18	0,00	1,89	Ganciclovir	0,051116765
559	DB00790	-11,68	86,18	1589,38	1,52	57,59	1,78	Perindopril	0,052018374
173	DB00322	-8,28	72,75	1061,47	0,97	7,91	1,29	Floxuridine	0,052619845
364	DB00552	-8,44	72,65	1192,60	1,08	3,35	1,68	Pentostatin	0,052815408
453	DB00664	-9,09	71,88	1158,90	0,66	24,43	0,44	Sulfametopyrazine	0,052829117
154	DB00300	-8,99	77,10	1189,09	1,23	8,58	1,44	Tenofovir	0,053086877
790	DB01068	-10,46	72,60	1365,79	1,12	49,85	1,09	Clonazepam	0,053309977
95	DB00231	-10,70	76,93	1266,15	1,05	70,17	0,82	Temazepam	0,0533475
262	DB00427	-10,69	78,54	1246,44	0,76	78,09	0,00	Triprolidine	0,053792864
137	DB00281	-9,29	67,72	1015,12	0,50	58,27	0,03	Lidocaine	0,05387029
3829	DB04878	-8,72	68,97	1165,45	1,32	4,76	2,04	Voglibose	0,05435267
915	DB01215	-11,08	72,29	1280,91	0,55	67,49	0,00	Estazolam	0,054531813
80	DB00211	-8,98	66,98	1142,07	0,95	18,82	1,45	Midodrine	0,05517006
940	DB01246	-10,77	78,25	1245,20	0,70	61,50	0,00	Trimeprazine	0,05555013
839	DB01131	-8,81	63,05	1054,80	0,48	36,81	0,41	Proguanil	0,055686772
605	DB00842	-10,13	73,44	1242,26	1,33	67,88	0,75	Oxazepam	0,055726975
386	DB00582	-11,27	87,17	1502,04	0,94	50,05	0,20	Voriconazole	0,055819005
603	DB00839	-10,91	77,37	1295,48	0,71	54,60	0,28	Tolazamide	0,056167364
110	DB00249	-8,11	66,44	1034,98	0,86	10,12	1,32	Idoxuridine	0,056531876
754	DB01024	-10,78	77,75	1416,01	1,17	52,42	1,10	Mycophenolic acid	0,057125837
773	DB01048	-10,43	74,67	1301,97	0,87	39,27	0,70	Abacavir	0,057296097
320	DB00499	-10,16	69,59	1181,31	0,93	49,72	1,06	Flutamide	0,057313085
939	DB01245	-9,10	65,58	1088,03	0,51	45,17	0,00	Decamethonium	0,057662606

1125	DB01581	-9,05	65,91	1134,77	1,00	28,05	1,21	Sulfamerazine	0,05823803
238	DB00400	-11,02	77,34	1434,03	0,74	39,10	0,20	Griseofulvin	0,058549643
64	DB00187	-10,55	73,80	1300,82	0,93	48,25	0,52	Esmolol	0,05873984
128	DB00271	-9,39	60,82	1224,73	0,85	32,63	0,83	Diatrizoate	0,05946359
166	DB00315	-10,47	79,00	1277,91	0,90	46,00	0,36	Zolmitriptan	0,05972156
861	DB01154	-9,05	65,03	1056,08	0,52	46,51	0,17	Thiamylal	0,060121328
573	DB00807	-10,50	76,19	1288,96	0,85	40,66	0,74	Proparacaine	0,060261846
495	DB00712	-9,79	70,05	1089,97	0,74	75,43	0,39	Flurbiprofen	0,06030169
642	DB00891	-9,07	70,90	1050,76	0,57	40,61	0,31	Sulfapyridine	0,060728878
244	DB00408	-11,44	79,75	1383,92	0,62	56,47	0,00	Loxapine	0,060879707
298	DB00473	-10,58	71,83	1152,02	0,55	70,76	0,11	Hexylcaine	0,061187804
977	DB01325	-9,37	68,86	1141,67	0,92	31,07	1,23	Quinethazone	0,06139779
77	DB00208	-9,16	64,25	1026,44	0,49	56,63	0,00	Ticlopidine	0,061486483
954	DB01262	-7,80	68,44	1007,58	0,83	4,17	1,23	Decitabine	0,06150651
72	DB00202	-8,74	68,52	1254,83	0,81	8,15	0,39	Succinylcholine	0,06178692
827	DB01114	-9,37	65,02	1150,92	0,88	66,52	0,00	Chlorpheniramine	0,062013686
505	DB00725	-11,04	75,10	1336,64	0,74	52,02	0,46	Homatropine Methylbromi	0,06227541
1135	DB01598	-8,95	75,22	1244,22	0,99	15,66	1,13	Imipenem	0,062295288
683	DB00939	-10,25	73,11	1134,21	0,79	61,71	0,51	Meclofenamic acid	0,062808335
941	DB01247	-8,99	61,70	1047,97	0,60	47,35	0,40	Isocarboxazid	0,0631845
621	DB00863	-9,86	75,50	1299,56	0,89	18,57	0,97	Ranitidine	0,06337488
1034	DB01426	-11,27	76,89	1461,23	0,96	61,54	0,52	Ajmaline	0,06357095
150	DB00296	-10,63	74,19	1185,53	0,67	69,16	0,01	Ropivacaine	0,06376156
326	DB00507	-10,01	68,78	1287,78	1,07	37,88	1,83	Nitazoxanide	0,06380239
336	DB00521	-10,83	75,54	1304,91	0,80	49,58	0,60	Carteolol	0,06393218
639	DB00885	-8,94	66,89	1059,01	0,61	38,49	0,44	Pemirolast	0,06431523
374	DB00564	-10,11	73,71	1058,06	0,56	70,35	0,06	Carbamazepine	0,06447044
557	DB00787	-7,62	68,14	1030,57	1,01	0,00	1,25	Aciclovir	0,06448388
734	DB01001	-9,22	65,88	1052,64	0,84	45,35	0,96	Salbutamol	0,06455535
947	DB01253	-11,56	83,84	1435,40	0,89	65,11	0,55	Ergonovine	0,064644635
866	DB01161	-9,20	70,45	1116,22	0,74	37,45	0,41	Chloroprocaine	0,064646274
1133	DB01595	-9,94	71,85	1324,47	1,38	48,41	1,02	Nitrazepam	0,066090256
579	DB00814	-10,50	74,13	1417,21	0,94	38,06	1,07	Meloxicam	0,0662159
1154	DB01620	-9,73	69,13	1065,53	0,78	69,42	0,00	Pheniramine	0,066239655
74	DB00205	-9,46	70,08	1082,29	0,89	56,51	0,26	Pyrimethamine	0,06665817
784	DB01062	-11,70	85,53	1578,25	0,95	76,18	0,04	Oxybutynin	0,06688303
518	DB00745	-10,38	71,90	1167,12	1,10	74,26	1,13	Modafinil	0,067065775
1031	DB01423	-8,41	63,24	1065,67	0,94	13,87	1,66	Stepronin	0,06748256
216	DB00370	-10,83	75,76	1196,10	0,56	69,56	0,01	Mirtazapine	0,06766501
152	DB00298	-11,86	77,03	1485,04	0,62	56,63	0,00	Dapiprazole	0,067690164
279	DB00446	-10,14	71,55	1255,19	1,48	40,10	2,15	Chloramphenicol	0,06779027
998	DB01359	-11,07	77,89	1269,38	0,69	82,16	0,16	Penbutolol	0,06787479
651	DB00902	-10,87	79,50	1254,06	0,74	62,68	0,00	Methdilazine	0,06830013
934	DB01239	-10,65	79,14	1234,28	0,87	80,47	0,00	Chlorprothixene	0,0685513
3863	DB06701	-9,25	67,79	1008,57	0,53	63,74	0,23	Dexmethylphenidate	0,06867537
257	DB00422	-9,25	67,79	1008,57	0,53	63,74	0,23	Methylphenidate	0,06867537
220	DB00377	-11,14	72,13	1323,28	0,72	83,25	0,16	Palonosetron	0,068783015
5553	DB08799	-10,75	72,74	1199,43	0,64	71,63	0,00	Antazoline	0,06939915
957	DB01265	-8,39	68,39	1038,50	0,80	15,05	1,27	Telbivudine	0,06949189
671	DB00925	-11,01	71,16	1266,45	0,68	71,67	0,00	Phenoxybenzamine	0,07009825
731	DB00998	-9,28	72,21	1108,76	0,84	49,19	0,89	Frovatriptan	0,07100481
1018	DB01407	-9,02	67,26	1042,72	0,63	45,08	0,34	Clenbuterol	0,07106486
3830	DB04880	-9,12	69,28	1076,09	0,83	34,74	1,00	Enoximone	0,071314335
593	DB00829	-10,71	73,12	1187,89	0,66	68,50	0,23	Diazepam	0,071484864
196	DB00348	-11,31	80,74	1422,17	1,64	52,98	2,21	Nitisonone	0,071513355
225	DB00384	-9,17	70,48	1176,51	0,97	40,74	0,88	Triamterene	0,07161993
358	DB00546	-11,83	79,63	1499,73	0,72	73,10	0,00	Adinazolam	0,07231593
995	DB01354	-9,95	78,97	1157,55	1,07	53,77	0,32	Heptabarbital	0,07241717
425	DB00630	-7,96	74,31	1039,24	1,32	0,00	1,82	Alendronate	0,07401624
3869	DB06711	-9,48	63,26	968,34	0,40	73,47	0,00	Naphazoline	0,074202746
300	DB00475	-10,88	76,34	1284,55	0,85	60,35	0,24	Chlordiazepoxide	0,074967235
695	DB00956	-11,11	83,82	1336,66	1,08	68,80	0,65	Hydrocodone	0,076345086
187	DB00338	-11,14	72,81	1483,65	0,62	33,14	0,43	Omeprazole	0,07654762
511	DB00736	-11,14	72,81	1483,65	0,62	33,14	0,43	Esomeprazole	0,07654762
309	DB00487	-10,32	73,85	1450,44	0,81	30,01	0,77	Pefloxacin	0,07689339
355	DB00543	-11,17	79,80	1314,27	0,73	61,96	0,00	Amoxapine	0,07713193
304	DB00480	-9,81	75,13	1145,99	0,99	40,47	1,09	Lenalidomide	0,07713422
575	DB00809	-11,03	78,89	1268,74	0,71	60,11	0,29	Tropicamide	0,07713497
529	DB00756	-10,81	71,75	1287,00	0,94	53,53	0,91	Hexachlorophene	0,077397436

289	DB00461	-9,95	67,71	1040,88	0,66	74,65	0,18	Nabumetone	0,077774286
547	DB00776	-10,29	76,91	1170,38	1,03	56,79	0,67	Oxcarbazepine	0,07782602
1923	DB02546	-10,44	72,60	1184,39	0,95	57,15	0,92	Vorinostat	0,07855189
733	DB01000	-10,70	75,06	1410,69	1,09	37,28	1,70	Cyclacillin	0,07886514
833	DB01123	-9,06	65,32	978,42	0,50	57,32	0,17	Proflavine	0,079057574
585	DB00821	-10,43	73,03	1172,50	0,94	62,38	0,65	Carprofen	0,07937583
274	DB00440	-9,66	64,93	1306,35	0,83	24,26	0,78	Trimethoprim	0,07955256
1149	DB01614	-11,27	74,25	1389,16	0,77	51,54	0,52	Acepromazine	0,07964867
550	DB00779	-8,86	60,63	1074,97	0,96	31,31	1,47	Nalidixic Acid	0,08057326
141	DB00286	-12,70	83,19	1502,10	1,30	86,53	1,36	Conjugated Estrogens	0,080595195
1143	DB01608	-11,76	86,53	1544,12	0,92	59,75	0,15	Propericiazine	0,080673695
1019	DB01408	-10,78	81,40	1590,90	0,90	41,52	0,36	Bambuterol	0,080685854
963	DB01280	-9,40	68,93	1301,76	1,06	0,00	1,92	Nelarabine	0,08075315
678	DB00933	-11,77	77,43	1570,85	0,82	58,96	0,38	Mesoridazine	0,08109039
462	DB00674	-10,95	81,53	1264,23	0,76	54,75	0,41	Galantamine	0,08109531
158	DB00306	-9,09	67,31	1121,11	0,80	38,99	0,38	Talbutal	0,0815922
1020	DB01409	-10,84	84,62	1585,92	0,85	38,57	0,48	Tiotropium	0,0817067
3843	DB05271	-11,11	71,70	1341,38	0,95	65,53	0,26	Rotigotine Transdermal Pa	0,08285329
322	DB00501	-7,68	66,02	1060,55	0,42	6,31	0,00	Cimetidine	0,08312982
1014	DB01399	-10,34	71,98	1188,70	1,29	52,78	1,51	Salsalate	0,08323324
996	DB01355	-9,25	73,11	1046,58	0,81	50,06	0,31	Hexobarbital	0,08333406
389	DB00586	-10,27	75,53	1133,50	0,95	61,75	0,63	Diclofenac	0,08383277
169	DB00318	-11,11	85,83	1321,55	1,14	69,27	0,71	Codeine	0,08417073
245	DB00409	-10,51	66,40	1362,58	0,94	37,60	1,00	Remoxipride	0,08497962
545	DB00774	-9,80	77,52	1273,61	1,10	18,12	1,30	Hydroflumethiazide	0,0852679
1146	DB01611	-11,17	79,55	1402,17	0,92	48,97	0,27	Hydroxychloroquine	0,08534214
206	DB00359	-8,64	69,32	1057,73	0,61	29,35	0,34	Sulfadiazine	0,085657924
763	DB01035	-8,86	67,90	1061,78	0,73	36,70	0,50	Procainamide	0,0860866
946	DB01252	-11,95	82,87	1411,27	1,05	80,83	0,81	Mitiglinide	0,08725187
626	DB00870	-9,08	65,19	1115,87	0,76	58,07	0,42	Suprofen	0,08799219
910	DB01210	-11,16	74,61	1290,98	0,73	64,55	0,34	Levobunolol	0,0881176
268	DB00434	-11,06	79,06	1309,28	1,71	102,12	0,00	Cyproheptadine	0,08967477
276	DB00442	-9,67	69,72	1234,03	1,08	21,61	1,65	Entecavir	0,0901545
1036	DB01428	-9,15	65,70	1052,50	0,81	62,83	0,68	Oxybenzone	0,09030789
599	DB00835	-9,23	65,07	1143,56	0,90	65,94	0,00	Brompheniramine	0,09046522
242	DB00405	-9,23	65,07	1143,56	0,90	65,94	0,00	Dexbrompheniramine	0,09046522
684	DB00940	-11,67	78,09	1521,16	0,98	66,57	0,38	Methantheline	0,09073743
431	DB00636	-8,83	63,32	1013,92	0,64	46,05	0,48	Clofibrate	0,09100363
294	DB00469	-9,83	71,65	1366,13	0,92	15,82	1,37	Tenoxicam	0,09104824
3857	DB06694	-10,35	68,78	1087,18	0,59	79,64	0,00	Xylometazoline	0,091106534
3833	DB04896	-10,27	70,30	1073,75	0,63	77,08	0,11	Milnacipran	0,0912565
812	DB01094	-11,12	74,88	1355,29	0,90	47,41	0,96	Hesperetin	0,092532605
3854	DB06335	-11,56	87,32	1411,73	1,01	68,23	0,51	Saxagliptin	0,09277192
301	DB00476	-10,87	72,59	1252,63	0,91	72,00	0,12	Duloxetine	0,09302679
503	DB00721	-8,89	69,66	1063,75	0,80	36,58	0,55	Procaine	0,093780726
809	DB01090	-8,81	65,97	1046,00	0,50	42,50	0,00	Pentolinium	0,094213486
5560	DB08806	-12,08	88,95	1495,99	1,03	66,79	0,74	Roxatidine acetate	0,0944497
421	DB00625	-11,16	75,79	1270,86	0,71	77,81	0,13	Efavirenz	0,094852775
437	DB00643	-11,49	71,82	1351,71	0,68	66,52	0,35	Mebendazole	0,0951744
388	DB00585	-9,31	72,60	1293,58	1,48	0,00	2,22	Nizatidine	0,09520924
556	DB00786	-10,72	71,18	1399,14	1,66	36,40	2,92	Marimastat	0,09585503
3862	DB06700	-10,64	72,97	1128,34	0,60	74,80	0,19	Desvenlafaxine	0,096007705
876	DB01173	-10,97	73,25	1201,33	0,58	75,89	0,00	Orphenadrine	0,09617111
859	DB01151	-10,65	68,06	1211,17	0,94	72,01	0,42	Desipramine	0,09707123
3873	DB06716	-10,95	71,88	1265,75	0,92	63,13	0,73	Fospropofol	0,098305225
548	DB00777	-11,63	69,23	1474,92	0,92	61,16	0,33	Propiomazine	0,09831199
345	DB00532	-8,92	65,57	1001,53	0,76	48,07	0,64	Mephenytoin	0,09855524
3845	DB06148	-10,62	72,37	1187,14	0,74	90,37	0,00	Mianserin	0,0988372
580	DB00815	-9,94	68,30	1058,86	1,26	65,21	1,40	Sodium lauryl sulfate	0,099544466
460	DB00672	-9,02	72,21	1074,89	0,85	38,10	0,49	Chlorpropamide	0,09958136
478	DB00692	-11,03	77,68	1250,64	0,76	66,00	0,25	Phentolamine	0,09993857
625	DB00869	-9,45	69,33	1194,72	1,17	21,51	1,79	Dorzolamide	0,10026732
700	DB00962	-11,37	84,47	1411,94	0,81	46,20	0,24	Zaleplon	0,100702405
352	DB00540	-9,68	62,26	1218,20	0,97	88,72	0,03	Nortriptyline	0,100982875
267	DB00433	-11,93	84,87	1504,99	0,71	50,06	0,00	Prochlorperazine	0,10311213
321	DB00500	-10,61	70,27	1155,40	0,85	66,74	0,90	Tolmetin	0,103197485
674	DB00928	-8,22	70,50	1061,27	1,22	0,00	2,15	Azacididine	0,103569716
571	DB00805	-11,48	77,12	1341,87	0,69	65,20	0,19	Minaprine	0,10376716
442	DB00649	-8,17	68,53	1009,80	0,78	19,77	0,84	Stavudine	0,10401651

835	DB01125	-10,66	72,58	1150,79	0,71	75,57	0,16	Anisindione	0,10406667
1043	DB01437	-10,04	82,20	1150,46	1,90	73,59	0,34	Glutethimide	0,104266346
724	DB00989	-8,63	66,06	1099,83	0,52	36,52	0,17	Rivastigmine	0,10448161
163	DB00311	-8,40	70,59	1037,34	0,98	22,08	1,01	Ethoxzolamide	0,10559967
863	DB01156	-9,15	67,73	952,28	0,56	63,65	0,12	Bupropion	0,10607886
795	DB01075	-10,35	67,91	1130,43	0,85	85,91	0,04	Diphenhydramine	0,106883496
139	DB00283	-11,65	83,32	1442,66	0,98	78,38	0,00	Clemastine	0,10787952
909	DB01209	-10,37	73,44	1090,99	0,74	77,04	0,09	Dezocine	0,10822168
481	DB00695	-9,81	73,74	1330,98	1,28	28,33	1,60	Furosemide	0,10854611
311	DB00489	-8,65	67,28	1133,62	0,66	33,58	0,49	Sotalol	0,10895702
210	DB00363	-11,50	81,68	1382,85	0,83	61,35	0,02	Clozapine	0,10954291
400	DB00599	-8,74	62,83	1006,04	0,54	46,68	0,23	Thiopental	0,11090347
340	DB00525	-11,59	70,57	1355,57	0,69	75,98	0,00	Tolnaftate	0,11126369
582	DB00817	-11,44	78,19	1360,84	0,89	51,80	0,98	Rosoxacin	0,111337066
1129	DB01588	-11,50	82,28	1384,39	0,89	79,19	0,14	Prazepam	0,11158419
3585	DB04552	-10,76	74,95	1257,43	1,07	47,48	1,43	Niflumic Acid	0,11165744
484	DB00698	-8,60	71,35	1105,74	1,50	9,10	2,21	Nitrofurantoin	0,11242539
1032	DB01424	-8,66	64,61	1023,38	0,54	40,62	0,18	Aminophenazone	0,11265743
1141	DB01606	-9,38	70,89	1243,07	1,12	5,86	2,01	Tazobactam	0,112787366
881	DB01178	-9,29	67,05	1054,36	1,07	43,33	1,44	Chlormezanone	0,114438266
230	DB00391	-10,63	68,65	1400,28	0,88	30,83	1,06	Sulpiride	0,11470944
936	DB01241	-10,47	71,27	1104,74	0,76	74,37	0,46	Gemfibrozil	0,11531708
680	DB00935	-10,51	74,31	1159,37	0,97	74,25	0,17	Oxymetazoline	0,116435945
405	DB00606	-10,88	75,26	1458,90	1,42	43,39	1,69	Cyclothiazide	0,117026836
562	DB00794	-9,06	68,88	998,99	0,75	55,97	0,22	Primidone	0,11809224
328	DB00509	-11,20	90,47	1431,30	1,49	66,80	0,52	Dextrothyroxine	0,11847913
903	DB01203	-11,24	74,41	1350,59	1,18	49,93	1,49	Nadolol	0,119083166
555	DB00784	-10,31	67,75	1080,56	0,81	76,79	0,53	Mefenamic acid	0,1191982
566	DB00800	-11,00	74,23	1273,78	1,10	60,68	0,99	Fenoldopam	0,120464236
716	DB00980	-10,68	75,66	1154,22	0,79	75,46	0,10	Ramelteon	0,12159547
567	DB00801	-11,92	83,90	1443,71	0,88	78,68	0,29	Halazepam	0,12267399
275	DB00441	-8,85	71,87	1112,64	1,15	12,17	1,87	Gemcitabine	0,12318581
3827	DB04876	-11,61	80,67	1338,15	0,71	64,77	0,29	Vildagliptin	0,12445077
721	DB00986	-11,77	81,64	1372,89	0,64	65,46	0,05	Glycopyrrolate	0,124700636
877	DB01174	-8,77	70,55	1076,26	0,72	43,36	0,52	Phenobarbital	0,12543762
867	DB01163	-10,85	71,96	1359,03	0,99	31,89	1,68	Amdinocillin	0,12607366
3823	DB04844	-11,48	75,18	1389,67	0,87	59,75	0,46	Tetrabenazine	0,12620988
315	DB00494	-10,80	73,66	1361,51	1,11	35,16	1,47	Entacapone	0,12729695
281	DB00451	-11,31	74,25	1483,01	1,11	49,80	0,64	Levothyroxine	0,1278562
826	DB01113	-11,49	80,18	1502,67	0,91	40,97	0,36	Papaverine	0,12970471
722	DB00987	-8,41	70,60	1067,83	1,24	5,55	2,10	Cytarabine	0,12984616
84	DB00215	-11,85	87,62	1435,75	0,83	76,83	0,04	Citalopram	0,13132462
878	DB01175	-11,85	87,62	1435,75	0,83	76,83	0,04	Escitalopram	0,13132462
266	DB00432	-10,08	75,86	1254,32	0,97	23,57	1,54	Trifluridine	0,13142917
3887	DB06751	-11,68	92,84	1745,03	1,17	59,95	0,25	Drotaverine	0,13158509
1114	DB01558	-8,89	64,59	1165,87	0,82	46,03	0,31	Bromazepam	0,13183254
193	DB00344	-10,66	68,91	1201,51	0,92	97,00	0,02	Protriptyline	0,13330796
1134	DB01597	-11,34	89,48	1455,48	1,51	51,09	1,34	Cilastatin	0,13376221
652	DB00903	-9,11	67,06	1180,79	1,05	59,14	0,87	Ethacrynic acid	0,13449883
657	DB00911	-8,07	67,54	1007,69	1,21	11,15	1,86	Tinidazole	0,13615373
366	DB00554	-11,54	73,87	1420,76	1,16	44,07	1,73	Piroxicam	0,13638207
261	DB00426	-10,36	75,37	1405,52	0,96	16,87	1,09	Famciclovir	0,13668123
292	DB00464	-10,66	74,80	1158,01	1,04	68,43	0,86	Sodium Tetradecyl Sulfate	0,13689744
253	DB00418	-9,25	73,45	1124,48	1,14	44,67	0,39	Secobarbital	0,13738072
164	DB00312	-8,83	68,23	1013,44	0,84	45,38	0,50	Pentobarbital	0,13878101
992	DB01351	-8,89	67,72	1026,26	0,89	46,94	0,49	Amobarbital	0,13899156
896	DB01195	-12,60	91,65	1682,77	0,76	53,58	0,27	Flecainide	0,1392923
623	DB00867	-11,26	76,30	1290,33	0,96	65,11	0,71	Ritodrine	0,1401195
692	DB00952	-11,45	84,47	1418,02	0,97	51,89	0,23	Naratriptan	0,1409668
921	DB01221	-9,40	74,67	1071,06	1,24	60,73	0,23	Ketamine	0,14200744
872	DB01168	-8,56	61,05	1010,34	0,55	43,39	0,20	Procarbazine	0,14299878
458	DB00670	-12,02	82,30	1558,29	0,68	39,65	0,40	Pirenzepine	0,14316684
99	DB00235	-8,68	66,50	979,70	0,59	45,66	0,27	Milrinone	0,143453
135	DB00279	-11,40	77,62	1390,66	1,03	50,86	0,94	Liothyronine	0,14464137
339	DB00524	-12,24	80,04	1459,68	0,92	58,54	1,00	Metolazone	0,14656186
127	DB00270	-11,97	84,59	1601,63	0,82	37,50	0,13	Isradipine	0,1494278
753	DB01021	-9,54	73,50	1270,91	1,34	23,67	2,09	Trichlormethiazide	0,14979216
162	DB00310	-11,80	76,36	1337,92	1,01	66,49	1,19	Chlorthalidone	0,15006778
1158	DB01624	-12,37	79,27	1632,92	1,00	74,81	0,12	Zuclopenthixol	0,15072158

231	DB00392	-11,55	77,84	1313,51	0,69	73,80	0,00	Ethopropazine	0,15085024
250	DB00414	-11,69	78,86	1361,60	1,02	59,69	1,08	Acetohexamide	0,15099299
643	DB00892	-11,18	80,49	1362,66	1,07	47,59	0,89	Oxybuprocaine	0,15129268
888	DB01186	-11,53	74,36	1324,37	0,76	76,47	0,02	Pergolide	0,1537163
147	DB00292	-8,56	60,94	1085,76	0,47	45,99	0,13	Etomidate	0,15405446
234	DB00395	-8,69	69,03	1153,50	0,98	32,22	0,82	Carisoprodol	0,15423062
5551	DB08796	-12,34	90,77	1715,07	1,16	54,24	0,12	Pipazethate	0,1568735
1105	DB01544	-11,60	83,56	1355,31	0,84	60,62	0,37	Flunitrazepam	0,1575326
944	DB01250	-11,06	77,36	1356,22	1,18	37,95	1,66	Olsalazine	0,15783307
144	DB00289	-10,67	72,06	1112,28	0,71	83,62	0,06	Atomoxetine	0,1592614
497	DB00714	-11,12	74,83	1198,18	0,80	77,22	0,41	Apomorphine	0,15971875
254	DB00419	-7,90	63,76	992,80	1,17	19,15	1,41	Miglustat	0,1602112
522	DB00749	-11,11	69,54	1295,67	1,09	70,01	0,71	Etodolac	0,16040078
965	DB01288	-11,70	78,19	1357,56	1,16	59,91	1,35	Fenoterol	0,16215259
762	DB01034	-9,31	65,01	1003,50	1,14	51,49	1,66	Cerulenin	0,16408953
332	DB00517	-11,08	72,19	1278,57	1,05	71,76	0,48	Anisotropine Methylbromid	0,16454577
492	DB00708	-12,46	89,33	1643,26	1,05	68,85	0,01	Sufentanil	0,16529366
967	DB01291	-8,28	63,91	1052,65	0,79	28,39	1,24	Pirbuterol	0,16611165
130	DB00273	-10,64	74,46	1384,45	1,16	29,66	1,35	Topiramate	0,16719466
852	DB01144	-9,11	82,70	1145,30	2,04	23,46	1,96	Dichlorphenamide	0,16725576
1015	DB01400	-7,74	63,75	987,30	0,49	17,81	0,28	Neostigmine	0,16787055
635	DB00879	-7,52	65,92	1049,72	1,01	4,19	0,80	Emtricitabine	0,16812193
383	DB00578	-11,46	77,02	1596,11	1,34	40,68	2,02	Carbenicillin	0,16890612
412	DB00613	-12,26	83,75	1524,82	0,78	58,51	0,04	Amodiaquine	0,1693829
3876	DB06725	-10,41	70,87	1439,95	1,10	27,11	1,71	Lornoxicam	0,16983661
491	DB00706	-11,39	95,67	1711,89	1,33	56,29	0,60	Tamsulosin	0,17043266
243	DB00406	-12,52	93,44	1671,30	1,54	74,15	0,01	Gentian Violet	0,17077395
454	DB00665	-11,18	77,47	1392,56	1,25	42,05	1,38	Nilutamide	0,17110208
711	DB00974	-9,17	70,60	1240,84	1,40	3,78	2,61	Edetic Acid	0,17167231
96	DB00232	-9,87	74,95	1230,46	1,38	17,85	2,37	Methyclothiazide	0,17253649
523	DB00750	-8,96	67,63	1005,37	0,90	56,03	0,28	Prilocaine	0,17324415
3841	DB05265	-12,58	81,34	1597,14	1,30	76,94	0,99	Ecabet	0,17483559
313	DB00491	-7,42	70,99	1022,19	1,52	0,00	1,53	Miglitol	0,1749506
83	DB00214	-11,90	80,32	1478,86	0,88	51,70	0,59	Toraseamide	0,1759144
775	DB01050	-9,26	59,94	917,38	0,59	76,04	0,39	Ibuprofen	0,17641816
350	DB00537	-11,59	85,57	1459,80	0,89	39,06	0,67	Ciprofloxacin	0,17660004
258	DB00423	-8,85	60,82	1067,79	1,07	26,66	1,95	Methocarbamol	0,1773397
817	DB01101	-10,92	82,16	1553,71	1,50	35,87	2,14	Capecitabine	0,18015882
382	DB00577	-10,30	76,38	1430,32	1,03	11,69	1,13	Valaciclovir	0,18032718
136	DB00280	-12,16	69,92	1521,10	0,97	70,85	0,27	Disopyramide	0,18043137
969	DB01296	-6,94	61,86	899,29	0,99	0,00	1,58	Glucosamine	0,18173555
396	DB00594	-7,03	55,59	952,34	0,65	5,57	0,83	Amiloride	0,18317112
919	DB01219	-11,48	81,70	1425,92	1,06	40,18	1,20	Dantrolene	0,18319064
848	DB01140	-11,49	82,19	1526,32	1,26	34,12	2,09	Cefadroxil	0,18378869
649	DB00899	-12,18	89,96	1612,27	1,11	60,22	0,34	Remifentanil	0,18389297
766	DB01039	-12,14	87,84	1508,67	0,97	76,85	0,12	Fenofibrate	0,18398741
239	DB00402	-11,12	84,43	1643,07	0,60	16,11	0,40	Eszopiclone	0,18628529
413	DB00614	-8,11	67,60	1002,14	1,20	10,66	1,99	Furazolidone	0,18727425
982	DB01333	-12,04	79,31	1453,28	1,18	47,68	1,78	Cefradine	0,18776545
899	DB01198	-11,12	84,56	1642,93	0,60	16,10	0,40	Zopiclone	0,18788117
227	DB00387	-11,53	77,84	1238,00	0,61	82,45	0,00	Procyclidine	0,18849209
319	DB00498	-10,28	70,45	1009,23	0,63	84,43	0,23	Phenindione	0,18874979
917	DB01217	-11,51	80,45	1297,75	0,78	74,36	0,00	Anastrozole	0,18884692
63	DB00186	-11,26	79,84	1253,04	0,94	71,05	0,44	Lorazepam	0,18899393
3849	DB06262	-7,83	65,93	962,28	1,16	14,60	1,68	Droxidopa	0,190463
506	DB00727	-7,54	62,97	987,27	1,64	0,00	2,70	Nitroglycerin	0,19082695
138	DB00282	-7,41	68,72	950,67	1,43	0,00	2,15	Pamidronate	0,19091818
365	DB00553	-8,78	69,15	1013,89	1,20	35,23	1,46	Methoxsalen	0,19129544
470	DB00683	-11,85	79,12	1380,53	0,77	73,22	0,00	Midazolam	0,19208145
433	DB00639	-12,29	82,94	1495,52	0,76	64,60	0,00	Butoconazole	0,193041
968	DB01295	-11,96	79,83	1510,40	0,97	55,58	0,35	Bevantolol	0,19414988
126	DB00269	-12,51	82,78	1630,39	1,04	76,33	0,14	Chlorotrianisene	0,19419476
841	DB01133	-9,08	75,78	1106,26	1,66	22,19	2,21	Tiludronate	0,19486538
714	DB00977	-12,16	83,65	1330,12	0,78	103,58	0,10	Ethinyl Estradiol	0,19534579
879	DB01176	-11,16	76,35	1199,45	0,74	82,17	0,00	Cyclizine	0,19631699
779	DB01057	-7,23	57,79	942,85	0,66	11,09	0,81	Echothiophate	0,19654652
893	DB01192	-11,47	81,00	1351,14	1,16	58,37	0,93	Oxymorphone	0,19691318
5555	DB08801	-11,38	79,18	1290,62	0,93	94,71	0,07	Dimethindene	0,19878003
263	DB00428	-8,64	71,53	1112,24	1,46	0,00	2,71	Streptozocin	0,19936365

54	DB00175	-12,58	94,44	1779,05	2,48	70,34	0,68	Pravastatin	0,19947904
818	DB01102	-12,24	81,88	1417,87	1,05	65,37	1,03	Arbutamine	0,19984439
498	DB00715	-11,96	79,22	1449,69	0,90	64,92	0,24	Paroxetine	0,20041066
175	DB00325	-6,85	57,79	950,74	1,32	0,00	1,71	Nitroprusside	0,20108342
574	DB00808	-12,52	82,59	1458,94	1,07	62,70	1,29	Indapamide	0,2012249
597	DB00833	-12,08	76,62	1466,04	1,31	43,66	2,33	Cefaclor	0,20122927
768	DB01043	-9,42	65,33	916,69	0,60	82,03	0,00	Memantine	0,20181811
586	DB00822	-7,65	59,90	975,07	0,32	21,55	0,00	Disulfiram	0,20384988
1009	DB01392	-12,79	79,98	1563,90	0,84	62,71	0,65	Yohimbine	0,20559126
781	DB01059	-10,84	71,79	1433,51	1,03	23,81	1,58	Norfloxacin	0,20695627
613	DB00853	-7,17	67,99	980,51	1,40	0,00	1,49	Temozolomide	0,2070806
218	DB00372	-12,37	90,89	1599,67	0,86	46,05	0,00	Thiethylperazine	0,2071541
318	DB00497	-11,88	84,47	1378,42	0,98	62,13	0,70	Oxycodone	0,20725754
831	DB01120	-11,73	80,36	1353,45	1,11	65,65	0,89	Gliclazide	0,20812732
483	DB00697	-7,94	64,23	984,18	0,42	26,56	0,00	Tizanidine	0,20905453
469	DB00682	-12,24	83,92	1373,97	0,74	74,62	0,30	Warfarin	0,20929235
57	DB00179	-12,11	77,57	1358,75	1,18	75,62	1,17	Masoprocol	0,21069995
638	DB00884	-8,98	78,29	1106,01	2,07	10,45	3,18	Risedronate	0,21118534
517	DB00744	-8,98	66,99	994,32	0,91	42,04	1,29	Zileuton	0,21259752
513	DB00739	-13,49	81,68	1658,02	1,23	55,76	1,89	Hetacillin	0,21430904
1033	DB01425	-11,36	83,18	1413,40	1,13	36,48	1,34	Alizapride	0,21484339
755	DB01025	-11,44	77,36	1335,29	1,46	65,88	1,24	Amlexanox	0,21514234
1157	DB01623	-12,29	79,89	1826,25	1,35	52,55	0,07	Thiothixene	0,21558666
354	DB00542	-14,36	95,25	1867,23	2,01	79,83	1,83	Benazepril	0,2163733
376	DB00567	-11,69	76,18	1468,88	1,37	38,08	2,09	Cephalexin	0,21658117
252	DB00417	-11,75	75,51	1489,31	1,25	37,12	1,93	Penicillin V	0,21691209
182	DB00333	-12,03	83,90	1389,56	0,83	93,63	0,00	Methadone	0,21835375
488	DB00703	-7,18	63,49	919,17	1,30	5,60	1,84	Methazolamide	0,22271875
906	DB01206	-8,02	62,59	937,21	0,66	31,13	0,72	Lomustine	0,22311005
650	DB00900	-7,73	73,72	1063,53	0,94	10,94	0,82	Didanosine	0,22344685
5557	DB08803	-8,67	62,35	1029,21	0,52	59,48	0,01	Tymazoline	0,22348723
406	DB00607	-13,08	86,49	1762,91	1,55	49,99	2,05	Nafcillin	0,22373176
786	DB01064	-8,21	63,53	954,41	0,94	33,67	1,08	Isoproterenol	0,22567195
3842	DB05266	-8,83	68,88	1014,99	0,67	61,24	0,13	Ibudilast	0,2257024
247	DB00411	-4,32	38,61	631,63	0,73	0,00	1,80	Carbachol	0,22753224
782	DB01060	-11,22	77,97	1553,21	1,09	29,85	1,64	Amoxicillin	0,22795331
554	DB00783	-10,98	77,85	1210,50	1,17	97,17	0,32	Estradiol	0,22894573
369	DB00558	-10,17	73,15	1412,06	1,53	5,89	2,82	Zanamivir	0,22993788
293	DB00467	-9,56	65,80	1415,75	0,95	13,60	1,36	Enoxacin	0,23103958
87	DB00219	-12,29	78,56	1527,93	0,96	65,34	0,23	Oxyphenonium	0,2311587
114	DB00254	-14,22	88,59	1938,38	1,77	52,58	2,63	Doxycycline	0,2317467
390	DB00587	-12,96	97,48	1735,32	1,35	81,51	0,58	Cinalukast	0,23223546
660	DB00914	-8,54	61,53	919,44	0,57	53,54	0,36	Phenformin	0,23239672
576	DB00811	-8,33	76,14	1043,38	1,30	0,00	2,26	Ribavirin	0,23305279
392	DB00589	-12,58	84,11	1520,38	0,74	64,67	0,18	Lisuride	0,23610142
241	DB00404	-11,65	75,72	1306,17	0,79	81,65	0,04	Alprazolam	0,23726183
3837	DB04948	-8,30	67,99	993,76	0,59	35,57	0,00	Lofexidine	0,23765913
3817	DB04837	-11,03	77,31	1210,76	1,04	81,28	0,10	Chlophedianol	0,23813397
647	DB00897	-11,93	79,98	1370,25	0,78	76,24	0,00	Triazolam	0,23844773
303	DB00478	-9,31	66,36	925,77	1,01	80,24	0,36	Rimantadine	0,24358791
493	DB00709	-7,24	65,03	987,00	0,86	5,16	0,64	Lamivudine	0,24414986
224	DB00382	-8,98	66,54	893,48	0,64	66,96	0,33	Tacrine	0,24492264
777	DB01055	-7,06	63,81	905,06	1,16	5,41	1,55	Mimosine	0,24576935
751	DB01019	-4,89	38,84	674,95	0,98	4,44	2,15	Bethanechol	0,24716803
112	DB00252	-10,97	84,30	1271,66	2,14	73,42	1,09	Phenytoin	0,24790302
82	DB00213	-11,50	74,92	1618,04	0,68	24,12	0,37	Pantoprazole	0,2483156
217	DB00371	-8,02	62,63	976,32	1,16	29,21	1,22	Meprobamate	0,24870077
177	DB00327	-11,10	79,18	1308,38	1,45	66,16	0,74	Hydromorphone	0,24870944
514	DB00740	-8,42	74,34	992,12	1,30	30,62	1,16	Riluzole	0,24899247
804	DB01085	-7,97	61,86	947,25	0,73	31,22	0,70	Pilocarpine	0,25030077
463	DB00675	-12,77	94,35	1672,69	1,75	106,64	0,02	Tamoxifen	0,25110078
560	DB00791	-7,65	71,95	995,31	1,14	10,93	0,92	Uracil mustard	0,2528712
532	DB00759	-13,99	90,92	1963,86	2,44	40,79	3,52	Tetracycline	0,2529673
604	DB00841	-11,90	81,18	1354,98	1,16	70,75	0,87	Dobutamine	0,25412604
895	DB01194	-10,62	77,99	1426,36	1,22	17,04	1,56	Brinzolamide	0,2545122
837	DB01127	-12,30	82,56	1465,14	0,81	70,90	0,00	Econazole	0,25538367
894	DB01193	-11,84	78,69	1500,03	1,22	45,14	1,27	Acebutolol	0,25707802
892	DB01191	-9,23	73,44	1017,59	0,93	76,66	0,00	Dexfenfluramine	0,25788862
122	DB00265	-8,86	60,06	919,98	0,55	70,96	0,38	Crotamiton	0,25823492

752	DB01020	-7,33	72,27	947,97	1,55	4,86	1,70	Isosorbide Mononitrate	0,2583354
726	DB00991	-11,98	75,99	1320,40	0,90	83,89	0,48	Oxaprozín	0,2587657
928	DB01231	-12,26	87,74	1349,81	0,88	102,75	0,06	Diphenidol	0,25901037
807	DB01088	-12,63	102,38	1817,60	2,40	100,52	1,22	Iloprost	0,26011017
100	DB00236	-7,59	59,36	1034,68	0,75	19,77	0,90	Pipobroman	0,2609595
570	DB00804	-12,14	81,28	1318,05	0,66	85,12	0,04	Dicyclomine	0,26101053
3890	DB06775	-7,03	67,70	943,51	1,48	1,39	1,62	Carglumic acid	0,26447314
937	DB01242	-11,59	78,87	1297,25	0,87	80,57	0,00	Clomipramine	0,26471275
428	DB00633	-8,97	64,08	933,26	0,83	70,85	0,15	Dexmedetomidine	0,26514566
742	DB01009	-11,32	77,49	1138,64	0,86	86,15	0,66	Ketoprofen	0,2659185
973	DB01320	-13,20	85,39	1507,70	1,09	75,56	1,11	Fosphenytoin	0,2668981
741	DB01008	-7,01	59,44	901,06	0,79	9,76	0,98	Busulfan	0,2693364
1161	DB01628	-12,22	85,13	1421,95	0,82	70,05	0,16	Etoricoxib	0,26997212
994	DB01353	-8,56	72,38	1018,87	1,12	37,11	0,63	Butethal	0,2706781
1128	DB01587	-12,42	72,92	1572,61	0,95	59,84	0,70	Ketazolam	0,27284843
705	DB00968	-8,40	70,09	1003,90	1,49	34,54	1,32	Methyl dopa	0,27341747
627	DB00871	-8,24	65,74	1014,91	0,80	39,08	0,78	Terbutaline	0,27453995
538	DB00766	-7,69	73,44	1016,67	1,63	12,09	1,71	Clavulanate	0,27518195
3894	DB06804	-8,98	58,97	1343,30	1,25	23,09	0,33	Nonoxynol-9	0,27585566
399	DB00598	-12,65	84,16	1476,67	1,72	73,29	1,55	Labetalol	0,27850938
3853	DB06288	-11,44	79,48	1529,91	0,99	32,03	0,74	Amisulpride	0,2791527
450	DB00660	-8,53	64,76	991,10	0,78	50,11	0,87	Metaxalone	0,27933502
654	DB00906	-12,50	87,34	1509,75	1,09	57,48	0,87	Tiagabine	0,2816737
577	DB00812	-12,20	74,53	1421,67	0,95	77,61	0,50	Phenylbutazone	0,2824118
185	DB00336	-7,31	63,74	901,71	1,13	11,00	1,63	Nitrofurazone	0,2834242
178	DB00328	-12,45	77,92	1542,22	1,07	60,57	0,85	Indomethacin	0,28444546
104	DB00241	-9,05	76,50	1085,91	1,47	48,85	0,42	Butalbital	0,28674832
821	DB01105	-11,19	73,59	1140,01	0,71	93,80	0,00	Sibutramine	0,2869654
1156	DB01622	-12,67	90,11	1788,10	0,87	36,89	0,08	Thiopropazine	0,2871964
840	DB01132	-12,51	86,56	1520,00	1,23	55,69	1,16	Pioglitazone	0,28928676
284	DB00455	-13,02	90,04	1611,64	0,93	84,91	0,12	Loratadine	0,29039687
828	DB01116	-12,98	84,07	1581,11	0,71	69,17	0,01	Trimethaphan	0,2909698
953	DB01261	-13,04	92,62	1729,47	0,85	51,87	0,17	Sitagliptin	0,29169
306	DB00482	-12,35	79,07	1622,45	1,46	64,89	1,15	Celecoxib	0,2936131
1151	DB01616	-11,76	72,90	1298,03	0,77	89,14	0,00	Alverine	0,29433858
5550	DB08795	-12,28	82,29	1582,93	1,08	36,44	1,40	Azidocillin	0,29579294
1025	DB01414	-10,65	73,48	1443,41	1,29	11,90	2,14	Cefacetrile	0,29780528
427	DB00632	-11,51	90,55	1347,18	1,71	94,20	0,26	Docosanol	0,3002839
961	DB01274	-12,25	83,71	1525,57	1,09	52,90	0,80	Arformoterol	0,30139858
719	DB00983	-12,25	83,71	1525,57	1,09	52,90	0,80	Formoterol	0,30139858
745	DB01012	-12,90	89,18	1587,25	1,11	113,73	0,00	Cinacalcet	0,3022794
331	DB00514	-11,59	77,21	1194,70	0,71	93,20	0,02	Dextromethorphan	0,30669912
887	DB01184	-13,88	97,65	1839,22	1,32	64,10	1,02	Domperidone	0,30817395
794	DB01073	-10,17	77,85	1487,79	1,19	7,64	1,78	Fludarabine	0,30862266
270	DB00436	-13,71	89,73	1667,46	1,24	58,25	1,57	Bendroflumethiazide	0,3087716
1148	DB01613	-9,07	77,09	1218,96	1,96	0,00	3,77	Erythryl Tetranitrate	0,30888745
527	DB00754	-8,46	68,93	958,70	1,19	43,09	0,94	Ethotoin	0,30911487
179	DB00330	-6,98	54,97	868,58	0,45	16,37	0,60	Ethambutol	0,3100084
665	DB00919	-10,74	76,48	1382,63	1,54	10,80	3,08	Spectinomycin	0,31197047
552	DB00781	-19,73	146,47	3796,71	6,29	32,35	0,41	Polymyxin B Sulfate	0,31235164
307	DB00483	-12,84	88,03	1791,81	1,16	40,88	0,01	Gallamine Triethiodide	0,31459147
583	DB00819	-6,89	62,47	874,23	1,20	6,00	1,63	Acetazolamide	0,31465873
666	DB00920	-11,51	79,73	1307,46	1,14	80,11	0,15	Ketotifen	0,31605613
764	DB01036	-12,26	82,48	1415,56	0,96	101,07	0,01	Tolterodine	0,31723887
1028	DB01418	-13,16	89,35	1584,63	1,15	62,49	0,99	Acenocoumarol	0,32138917
192	DB00343	-10,18	81,55	1594,04	1,97	45,56	0,31	Diltiazem	0,3216363
157	DB00305	-11,13	66,64	1469,74	1,59	17,50	3,24	Mitomycin	0,3219527
55	DB00176	-11,92	85,84	1329,61	0,96	75,61	0,28	Fluvoxamine	0,32200098
634	DB00878	-12,49	107,68	1894,32	2,53	49,93	0,00	Chlorhexidine	0,32349396
563	DB00795	-12,20	88,09	1692,35	1,08	39,62	0,98	Sulfasalazine	0,3237723
987	DB01340	-14,40	86,79	1815,02	1,39	60,22	1,72	Cilazapril	0,32504922
679	DB00934	-11,21	77,80	1231,04	1,16	105,62	0,03	Maprotiline	0,32600015
1160	DB01627	-11,21	76,47	1657,79	0,94	37,28	1,26	Lincomycin	0,32652432
897	DB01196	-13,06	93,18	1729,91	1,25	96,38	0,04	Estramustine	0,3297508
189	DB00340	-11,79	77,99	1315,38	0,89	84,94	0,01	Metixene	0,33218414
5565	DB08811	-12,80	85,86	1649,02	1,12	59,45	0,15	Tofisopam	0,33394125
1132	DB01594	-12,25	81,84	1534,59	1,48	53,27	1,38	Cinolazepam	0,33744758
702	DB00964	-7,70	63,22	976,78	0,70	23,77	0,28	Apraclonidine	0,33834812
237	DB00399	-7,95	76,05	1097,72	1,96	0,00	2,88	Zoledronate	0,3394068

886	DB01183	-12,70	86,52	1428,76	1,07	78,73	0,67	Naloxone	0,33960915
496	DB00713	-13,14	83,58	1687,35	1,18	47,22	1,35	Oxacillin	0,33968383
489	DB00704	-13,16	92,41	1498,17	0,90	75,38	0,45	Naltrexone	0,33969253
750	DB01018	-8,54	69,08	967,84	1,10	47,27	0,61	Guanfacine	0,3411402
709	DB00972	-13,06	92,78	1609,65	0,93	83,00	0,02	Azelastine	0,3412185
297	DB00472	-11,96	81,79	1325,67	0,86	82,18	0,09	Fluoxetine	0,34157938
925	DB01227	-12,76	76,80	1556,19	1,10	82,46	0,05	Levomethadyl Acetate	0,3416283
1039	DB01433	-12,76	76,80	1556,19	1,10	82,46	0,05	Methadyl Acetate	0,3416283
663	DB00917	-13,19	87,09	1522,13	1,04	77,62	0,67	Dinoprostone	0,3433975
3839	DB05246	-8,80	69,69	978,59	1,14	57,96	0,34	Methsuximide	0,34418747
926	DB01228	-12,82	90,37	1550,95	0,92	75,81	0,10	Encainide	0,34612572
718	DB00982	-12,87	78,57	1346,45	1,10	103,72	0,72	Isotretinoin	0,3503664
476	DB00689	-13,28	78,98	1723,73	1,30	47,76	1,69	Cephaloglycin	0,35065567
845	DB01137	-10,93	80,77	1598,06	0,99	23,24	0,82	Levofloxacin	0,35131216
869	DB01165	-10,93	80,77	1598,06	0,99	23,24	0,82	Ofloxacin	0,35131216
207	DB00360	-8,60	70,49	1053,85	1,41	8,06	2,65	Tetrahydrobiopterin	0,3514958
133	DB00276	-13,05	77,63	1705,51	0,98	61,85	0,26	Amsacrine	0,35165018
1139	DB01603	-11,14	76,97	1583,78	1,09	30,73	1,39	Meticillin	0,3520971
1035	DB01427	-7,77	60,34	894,86	0,85	27,73	1,27	Amrinone	0,3528639
853	DB01145	-12,31	92,40	1543,86	1,06	42,65	0,78	Sulfoxone	0,35306963
3836	DB04942	-14,48	87,53	1586,72	1,12	102,18	0,93	Tamibarotene	0,35358208
204	DB00357	-9,16	85,87	1181,15	2,38	63,66	0,54	Aminoglutethimide	0,35527945
844	DB01136	-13,12	88,40	1770,08	1,23	80,58	0,36	Carvedilol	0,35779545
1127	DB01586	-14,42	98,19	1675,43	1,37	112,86	0,55	Ursodeoxycholic acid	0,35893664
820	DB01104	-11,50	76,09	1188,08	0,80	94,96	0,02	Sertraline	0,36359352
397	DB00595	-15,35	94,13	2018,29	2,04	43,39	3,04	Oxytetracycline	0,3638256
3606	DB04574	-13,50	85,92	1464,88	1,16	95,49	0,88	Estropipate	0,3671679
3855	DB06689	-12,86	88,86	1412,41	1,65	82,27	1,55	Ethanolamine Oleate	0,3681562
375	DB00566	-5,68	49,05	737,33	0,75	0,00	1,31	Succimer	0,36843932
338	DB00523	-12,96	79,83	1343,26	1,11	106,08	0,69	Alitretinoin	0,37148607
850	DB01142	-11,61	78,51	1227,39	0,85	90,95	0,02	Doxepin	0,37160963
3851	DB06274	-12,37	93,83	1452,17	2,25	94,29	1,11	Alvimopan	0,37217438
429	DB00634	-7,85	69,85	914,91	1,02	25,89	1,03	Sulfacetamide	0,37231916
553	DB00782	-13,35	87,11	1611,40	0,81	71,06	0,22	Proprantherline	0,37300953
1004	DB01380	-13,98	96,34	1775,05	1,35	83,42	0,73	Cortisone acetate	0,37303758
271	DB00437	-5,74	50,14	757,78	0,43	0,64	0,66	Allopurinol	0,37310827
686	DB00943	-7,62	69,23	1008,19	1,18	14,89	0,72	Zalcitabine	0,3783324
854	DB01146	-11,95	80,74	1238,75	0,77	94,95	0,01	Diphenylpyraline	0,37893787
1130	DB01589	-12,68	85,65	1484,01	0,82	76,22	0,00	Quazepam	0,38246936
747	DB01014	-12,91	92,16	1589,40	1,33	50,11	1,37	Balsalazide	0,38595545
194	DB00345	-7,87	66,09	896,48	0,87	30,37	0,97	Aminohippurate	0,38853538
3831	DB04890	-13,50	89,51	1645,79	1,02	66,13	0,62	Bepotastine	0,38867533
630	DB00874	-7,58	55,87	880,67	0,90	24,72	1,60	Guaifenesin	0,39422327
211	DB00365	-11,76	75,60	1572,85	1,01	33,60	1,08	Grepafloxacin	0,39597502
931	DB01235	-7,58	66,25	922,95	1,24	22,22	1,25	Levodopa	0,39708722
59	DB00181	-8,20	64,44	924,57	1,03	43,63	0,81	Baclofen	0,39812487
368	DB00557	-12,91	90,26	1563,87	1,12	75,78	0,40	Hydroxyzine	0,4003253
595	DB00831	-13,34	90,15	1687,70	0,85	61,11	0,00	Trifluoperazine	0,40122485
770	DB01045	-18,66	138,24	3342,79	5,95	66,88	0,44	Rifampin	0,40269056
1006	DB01384	-14,27	96,63	1677,43	0,97	75,39	0,60	Paramethasone	0,40375522
3838	DB04967	-12,43	87,23	1428,56	0,98	75,10	0,27	Lucanthone	0,40420648
334	DB00519	-15,02	92,22	1845,55	1,60	75,43	1,58	Trandolapril	0,40456903
248	DB00412	-12,19	93,35	1508,99	1,23	44,95	0,94	Rosiglitazone	0,4051776
516	DB00742	-6,55	66,67	874,30	1,74	0,00	1,92	Mannitol	0,40638065
123	DB00266	-12,89	85,24	1531,75	1,17	71,96	0,71	Dicumarol	0,4077497
418	DB00620	-14,21	92,24	1700,23	1,13	74,55	0,84	Triamcinolone	0,41061842
923	DB01224	-12,72	88,00	1627,69	1,10	55,44	0,30	Quetiapine	0,41078418
120	DB00262	-6,33	53,98	784,36	0,67	9,49	1,01	Carmustine	0,41090983
858	DB01150	-12,97	84,39	1680,98	1,35	38,79	1,82	Cefprozil	0,4118759
452	DB00662	-12,47	92,72	1678,32	1,23	40,07	0,26	Trimethobenzamide	0,41732848
324	DB00504	-12,66	83,80	1239,33	0,74	110,85	0,04	Levallorphan	0,41895157
310	DB00488	-5,27	46,96	889,29	0,54	0,00	0,66	Altretamine	0,4211977
976	DB01324	-11,83	82,60	1531,18	1,30	25,81	2,02	Polythiazide	0,42221257
291	DB00463	-8,03	70,31	1038,40	1,39	25,20	0,78	Metharbital	0,42260462
66	DB00192	-12,17	81,98	1406,98	1,17	84,41	0,03	Indecainide	0,42376062
344	DB00531	-7,25	66,67	902,88	0,93	15,35	0,79	Cyclophosphamide	0,4237621
3605	DB04573	-12,06	80,60	1259,26	0,91	96,01	0,17	Estriol	0,42591864
537	DB00765	-8,31	65,55	965,63	1,30	44,54	0,90	Metyrosine	0,42890894
5561	DB08807	-13,86	84,33	1686,29	0,73	77,49	0,10	Bopindolol	0,4294578

907	DB01207	-13,05	88,80	1537,80	0,99	73,42	0,38	Ridogrel	0,43001062
816	DB01099	-5,43	44,97	670,86	0,51	5,33	1,05	Flucytosine	0,43272004
908	DB01208	-11,79	82,85	1688,02	0,91	30,69	0,87	Sparfloxacin	0,432928
581	DB00816	-7,67	64,17	955,75	0,79	32,35	0,74	Orciprenaline	0,4345712
343	DB00530	-13,09	86,97	1769,41	1,18	49,40	0,23	Erlotinib	0,43630356
1142	DB01607	-11,63	80,02	1541,75	1,19	20,46	1,91	Ticarcillin	0,43659633
729	DB00996	-7,95	61,67	892,39	0,88	40,45	0,82	Gabapentin	0,43779507
659	DB00913	-13,65	93,94	1579,89	1,02	77,75	0,51	Anileridine	0,4382459
851	DB01143	-6,22	56,30	773,03	0,82	5,94	1,21	Amifostine	0,43987662
662	DB00916	-6,72	59,96	895,49	0,94	7,07	0,88	Metronidazole	0,44094524
515	DB00741	-13,69	90,19	1588,52	1,08	81,25	0,59	Hydrocortisone	0,44362935
644	DB00894	-12,63	83,63	1315,81	0,85	100,27	0,11	Testolactone	0,4450126
494	DB00711	-6,46	54,96	892,93	0,74	11,43	0,84	Diethylcarbamazine	0,44598162
873	DB01170	-7,64	62,73	875,47	0,94	28,72	1,15	Guanethidine	0,44663525
356	DB00544	-5,47	46,05	672,28	0,55	5,37	1,08	Fluorouracil	0,44841167
3848	DB06209	-13,17	89,03	1567,17	0,94	73,11	0,26	Prasugrel	0,45154408
134	DB00277	-6,67	64,14	973,65	1,20	0,00	0,65	Theophylline	0,45208982
78	DB00209	-9,86	85,16	1576,87	2,50	68,08	0,23	Trospium	0,45372966
645	DB00895	-13,47	100,87	1932,58	1,33	60,30	0,83	Benzylpenicilloyl Polylysine	0,45450738
351	DB00539	-13,61	94,30	1722,39	1,92	107,45	0,01	Toremifene	0,45467466
1023	DB01412	-6,64	62,13	950,05	1,23	0,00	0,96	Theobromine	0,45520824
308	DB00485	-14,05	88,43	1812,98	1,23	52,52	1,27	Dicloxacillin	0,45627332
1030	DB01422	-7,20	58,49	904,15	0,87	27,92	1,07	Nitroxoline	0,4566698
424	DB00629	-8,17	63,02	888,38	0,92	48,31	0,73	Guanabenz	0,45737168
188	DB00339	-5,24	47,55	666,59	0,64	0,00	1,10	Pyrazinamide	0,458894
578	DB00813	-13,17	80,72	1546,35	0,85	85,82	0,04	Fentanyl	0,46045005
249	DB00413	-7,58	61,79	899,18	0,56	30,54	0,24	Pramipexole	0,46081793
401	DB00600	-8,47	63,30	911,46	0,55	66,60	0,24	Monobenzone	0,46089575
287	DB00459	-13,48	89,51	1465,23	1,53	97,16	1,06	Acitretin	0,4620203
519	DB00746	-12,15	98,53	1843,43	3,28	38,14	0,95	Deferoxamine	0,46304354
676	DB00931	-15,13	98,18	1967,49	1,93	48,03	2,43	Methacycline	0,464795
455	DB00666	-16,81	146,48	3473,84	8,58	41,04	0,75	Nafarelin	0,46494728
611	DB00850	-12,75	90,74	1626,50	1,09	51,01	0,45	Perphenazine	0,46788055
1011	DB01394	-12,75	83,16	1745,67	1,03	40,37	0,41	Colchicine	0,4691531
118	DB00259	-6,99	58,71	821,34	0,85	17,95	1,28	Sulfanilamide	0,4712717
785	DB01063	-13,50	85,87	1744,35	0,93	56,46	0,43	Acetophenazine	0,47128925
160	DB00308	-12,59	89,85	1573,58	1,26	61,51	0,30	Ibutilide	0,4717918
619	DB00860	-13,71	90,97	1596,06	1,11	80,84	0,58	Prednisolone	0,47266802
584	DB00820	-13,69	89,68	1751,89	0,91	57,02	0,39	Tadalafil	0,4727344
205	DB00358	-13,06	91,53	1608,60	1,09	73,96	0,13	Mefloquine	0,47441864
420	DB00624	-12,62	82,97	1254,03	0,87	110,59	0,09	Testosterone	0,47614366
101	DB00237	-8,51	73,88	1034,67	1,47	41,37	0,55	Butabarbital	0,47738534
445	DB00652	-12,18	80,05	1278,36	0,89	98,44	0,07	Pentazocine	0,47929832
959	DB01268	-13,60	87,34	1742,57	0,95	64,22	0,10	Sunitinib	0,48138756
501	DB00719	-12,07	81,59	1307,16	0,93	91,50	0,00	Azatadine	0,4814049
1010	DB01393	-12,91	89,23	1533,11	1,23	70,53	0,65	Bezafibrate	0,48185185
935	DB01240	-12,99	89,67	1505,40	1,12	76,79	0,48	Epoprostenol	0,48205236
479	DB00693	-13,20	92,01	1476,43	0,95	84,95	0,22	Fluorescein	0,48207188
606	DB00844	-13,82	97,04	1564,83	1,10	81,84	0,60	Nalbuphine	0,48296276
1140	DB01605	-13,33	92,84	1844,11	1,26	50,32	1,00	Pivmecillinam	0,48473296
565	DB00799	-12,93	85,78	1512,29	1,11	78,46	0,45	Tazarotene	0,48539314
233	DB00394	-14,43	93,88	1699,50	1,05	82,35	0,55	Beclomethasone	0,4900205
704	DB00967	-11,96	80,75	1312,76	1,03	90,78	0,00	Desloratadine	0,4900353
387	DB00583	-6,05	55,12	770,81	1,12	5,34	1,48	L-Carnitine	0,49047345
107	DB00245	-9,29	78,46	1362,11	1,48	79,97	0,15	Benzotropine	0,49105293
568	DB00802	-13,64	86,75	1813,76	0,97	55,00	0,15	Alfentanil	0,49556094
277	DB00443	-14,36	90,84	1708,30	1,05	81,89	0,56	Betamethasone	0,49584666
930	DB01234	-14,36	90,84	1708,30	1,05	81,89	0,56	Dexamethasone	0,49584666
588	DB00824	-7,28	68,94	998,75	1,41	10,02	0,87	Enprofylline	0,496435
477	DB00690	-13,43	84,19	1620,86	0,92	79,85	0,08	Flurazepam	0,49877435
448	DB00655	-11,49	75,53	1202,68	1,08	98,41	0,10	Estrone	0,49951673