

***Electronic supplementary information***

Table a: Observed activities and calculated descriptor values

N	HB A	HB D	MR	PC	LogP	LogS	BI	MTI	NR B	PSA	SA	S C	S D	SDV	T D	TCon	TVCon	WI	MW	Et en ev	E HOMO en ev	E LUMO en ev	Egap en ev	Electronégativi ty χ en ev	Chemical hardness 	Chimecal Softness	Electrophilicity indexIII	DM	PIC50 MOL
1	3	0	5,37 69	1,448	1,517	1,890 55	58681	225 8	2	43,3 7	12,07142 857	1	2 8	46	8	0,017010 345	0,000868 056	303	196,2 46	17809,5194375 3220	1,542065763397 3700	6,169079393326 5900	4,627013629929 2200	3,855572578361 9800	2,31350681496461 00	0,432244242174 5350	3,21275040359980 00	1,6484	5,1617807 78
2	4	0	5,71 54	0,955 2	0,8102 7	1,689 44	11047 5	323 8	3	81,7 2	14,0625	1	3 2	58	8	0,009820 928	8,68E-05	436	216,2 4	19712,1177178 6870	3,209847846309 4000	7,443113609706 7700	4,233265763397 3700	5,326480728008 0900	2,11663288169869 00	0,472448485822 1890	6,70201176386156 00	7,2094	5,3736596 33
3	4	0	6,81 79	0,173 4	1,4261 5	2,171 11	25585 9	514 8	5	84,2 3	17,05263 158	1	3 8	68	1 0	0,004009 377	2,29E-05	716	263,2 93	24326,5287458 2160	1,330361658240 6500	10,88725096056 62000	12,21761261880 69000	4,778444651162 7900	6,10880630940344 00	0,163698102272 5630	1,86890303340262 00	7,2108	5,6595558 85
4	6	3	6,99 12	0,263 8	0,6979 97	2,687 17	13230 4	424 2	1	110, 57	16,05555 556	1	3 8	64	8	0,003273 643	2,80E-05	585	248,2 86	22751,8579795 7630	1,927106006066 7300	5,490156845298 2800	3,563050839231 5500	3,708631425682 5100	1,78152541961577 00	0,561316717117 4430	3,86016020319436 00	2,78	5,1972262 75
5	6	3	6,77 56	0,347 2	1,1059 2	2,673 14	13230 4	416 2	1	104, 78	16,05555 556	1	3 8	66	8	0,003273 643	2,17E-05	585	249,2 7	23292,3036383 8800	2,387249504550 0500	5,898870940343 7800	3,511621435793 7300	4,143060222446 9200	1,75581071789687 00	0,569537473377 4340	4,88804055923018 00	1,3095	6,4202164 03
6	6	2	9,50 24	1,122 66	2,0493 2	4,227 07	41171 6	997 3	2	101, 78	22,04166 667	1	5 2	84	2	0,000272 804	8,04E-07	133 2	324,3 84	29037,6952261 2970	1,991596845298 2800	5,452605217391 3000	3,461008372093 0200	3,722101031344 7900	1,73050418604651 00	0,577866270456 4660	4,00289008233743 00	2,6453	5,7904849 85
7	6	2	9,28 68	1,654 58	2,4572 5	4,149 18	41171 6	986 6	2	95,9 9	22,04166 667	1	5 2	86	2	0,000272 804	6,23E-07	133 2	325,3 68	29578,1577845 3450	2,463713326592 5200	5,744310616784 6300	3,280597290192 1100	4,104011971688 5700	1,64029864509606 00	0,609645080784 3220	5,13409991348765 00	1,4068	6,6020599 91
8	6	3	6,97 20	0,932 92	0,1567 81	2,109 14	13230 4	416 5	1	107, 44	16,05555 556	1	3 8	64	8	0,003273 643	2,95E-05	585	251,2 86	23323,5222911 8900	2,012005338725 990	5,737507785642 0600	3,725502446916 0800	3,874756562184 0200	1,86275122345804 00	0,536840339926 6520	4,02999021745814 00	2,5202	5,9430951 49
9	6	3	6,75 64	1,119 19	0,5647 05	2,071 66	13230 4	408 5	1	101, 65	16,05555 556	1	3 8	66	8	0,003273 643	2,29E-05	585	252,2 7	23863,9398583 8980	2,247111183013 14000	6,221869362992 9200	3,974758179979 7800	4,234490273003 0300	1,98737908998989 00	0,503175264868 6100	4,51119465895370 00	2,6478	6,2518119 73
10	2	1	4,75 92	2,177	1,6826 4	2,123 02	17878	138 2	0	29,1	10,08333 333	0	2 6	38	5	0,017010 345	0,002126 293	173	163,2 2	14551,2185303 5710	1,177706127401 42000	6,482281739130 4300	5,304575611729 0200	3,829993933265 9200	2,65228780586451 00	0,377032989326 7570	2,76532084799004 00	2,1904	5,4659738 94
11	2	0	7,27 04	4,500 84	3,5831 6	4,189 91	10415 3	463 2	1	20,3 1	16,05555 556	0	4 0	58	9	0,001417 529	6,10E-05	584	239,3 18	20837,0679079 9110	1,455805864509 61000	6,366361496461 0700	4,910555631951 4700	3,911083680485 3400	2,45527781597573 00	0,407285885732 8930	3,11503966195366 00	2,5711	5,2773660 77
12	3	0	4,33 25	1,430 02	1,5679 5	1,951 4	17878	131 4	0	38,6 6	10,08333 333	0	2 6	42	5	0,017010 345	0,001344 786	173	165,1 92	15012,2584316 4150	1,539616744186 05000	6,732081698685 5400	5,192464954499 4900	4,135849221435 7900	2,59623247724975 00	0,385173519229 4200	3,29424443541571 00	2,6478	6,6020599 91
13	4	2	6,82 45	2,267 68	0,7063 04	2,573 5	69198	325 3	1	74,2	15,05882 353	1	3 8	56,6666 667	6	0,002314 815	0,000112 764	432	244,3 16	29427,5121292 0360	0,626404691607 68400	5,313011122345 8000	4,686606430738 1200	2,969707906976 7400	2,34330321536906 00	0,426748016834 2210	1,88178059819954 00	3,0002	5,8446639 63
14	4	2	7,92 7	3,914 07	1,7760 1	3,402 45	15308 7	511 5	3	76,7 1	18,05	1	4 4	66,6666 667	8	0,000945 019	2,97E-05	703	291,3 69	34186,8195815 1890	0,681099453993 93300	5,036271951466 1300	4,355172497472 1900	2,858685702730 0300	2,17758624873610 00	0,459224060851 9710	1,87640878788068 00	1,8344	5,3535962 74
15	4	1	9,33 57	4,194 36	2,0576 3	4,124 58	25571 8	826 4	2	65,4 1	21,04347 826	1	5 2	76,6666 667	1 0	0,000192 901	3,24E-06	108 0	320,4 14	35713,3699758 1820	0,799196602628 91800	5,292874742163 8000	4,493678139534 8800	3,046035672396 3600	2,24683906976744 00	0,445069704125 9410	2,06475253220327 00	3,4972	6,3665315 44
16	4	1	10,4 38	5,842 22	3,1273 4	4,950 93	45381 1	113 41	4	67,9 2	24,03846 154	1	5 8	86,6666 667	1 2	7,88E-05	8,53E-07	152 2	367,4 67	40472,6851958 7820	0,645452618806 87600	5,059129464105 1600	4,413676845298 2800	2,852291041456 0200	2,20683842264914 00	0,453136935507 7550	1,84326231174735 00	1,6377	6,2006594 51
17	4	1	6,60 89	2,142 65	0,6622 82	2,341 3	69198	319 0	1	71,4	15,05882 353	1	3 8	58,6666 667	6	0,002314 815	9,21E-05	432	245,3	29966,9290432 0940	1,001104630940 34000	5,735875106167 8500	4,734770475227 5000	3,368489868554 0900	2,36738523761375 00	0,422406959421 5970	2,39646759096731 00	7,1469	5,3187587 63
18	4	1	7,71 14	3,789 95	1,7319 9	3,194 93	15308 7	503 1	3	73,9 1	18,05	1	4 4	68,6666 667	8	0,000945 019	2,43E-05	703	292,3 53	34726,3106896 5010	0,914572618806 87600	5,442809140546 0100	4,528236521739 1300	3,178690879676 4400	2,26411826086956 00	0,441673042121 0140	2,23134892800555 00	4,3227	5,8927900 3

19	4	1	7,5803	2,02065	0,611335	2,2497	157973	4625	3	76,11	17,05263158	1	40	62,6666667	8	0,002314815	5,94E-05	631	276,354	32679,91058714920	1,24410175935288000	5,3739644893832100	4,1298627300303300	3,3090331243680500	2,0649313650151700	0,4842775972811350	2,6513472563008300	4,4305	5,790484985
20	4	1	8,6828	3,66935	1,68104	3,07348	317503	6808	5	78,62	20,04545455	1	46	72,6666667	0	0,000945019	1,57E-05	953	323,407	37438,98828200610	0,89089876643073800	5,1217155106167800	4,2308167441860500	3,0063071385237600	2,1154083720930200	0,4727219638497420	2,1362028084905100	3,3783	6,040958608
21	3	1	7,1761	3,037	2,43567	3,21306	144840	4925	2	46,17	16,05555556	1	38	60	0	0,002455232	4,82E-05	641	243,306	21411,32763220380	1,85472388270981000	5,9788722345803800	4,1241483518705800	3,9167980586451000	2,0620741759352900	0,4849486074119680	3,7198727405738600	1,6689	5,345823458
22	3	1	7,6675	4,0524	3,05765	3,91873	190279	5474	2	46,17	17,05263158	0	40	61,7777778	1	0,002004688	4,74E-05	758	277,748	33916,94197688170	2,08792493427705000	6,1677188270980800	4,0797938928210300	4,1278218806875600	2,0398969464105100	0,4902208426556250	4,1764152617281400	1,6689	6,468521083
23	3	1	7,6675	4,0524	3,05765	3,91873	190279	5474	2	46,17	17,05263158	0	40	61,7777778	1	0,002004688	4,74E-05	758	277,748	22480,96275820420	1,78261387259858000	5,8490742163801800	4,0664603437816000	3,8158440444893800	2,0332301718908000	0,4918282316605860	3,5806732491886100	8,1919	5,853871964
24	4	2	9,3795	3,15435	1,53001	3,75832	323513	8583	3	78,91	21,04347826	1	50	76,6666667	0	0,000334115	3,30E-06	1137	323,414	36287,44273591780	1,46478560161780000	5,0776331648129400	3,6128475631951500	3,2712093832153700	1,8064237815975700	0,5535799573650520	2,9618772011993300	3,6745	5,069560405
25	4	2	10,482	4,80305	2,59971	-4,603	568151	11639	5	81,42	24,03846154	1	56	86,6666667	2	0,000136402	8,70E-07	1579	370,467	41046,46041075610	1,24763923154702000	4,8662011729019200	3,6185619413549000	3,0569202022244700	1,8092809706774500	0,5527057522887500	2,5824516131591000	2,6379	5,201349355
26	4	2	9,8709	4,16975	2,15198	4,4653	403228	9368	3	78,91	22,04166667	0	52	78,4444444	1	0,000272804	3,24E-06	1306	357,856	48793,08404157610	1,68438099089990000	5,2509693023255800	3,5665883114256800	3,4676751466127400	1,7832941557128400	0,5607599827524060	3,3715051675333400	6,3066	6,37675071
27	4	2	10,973	5,81845	3,22169	5,3087	690340	12571	5	81,42	25,03703704	0	58	88,4444444	3	0,000111372	8,54E-07	1784	404,909	53552,10396651870	1,47703069767442000	5,0343671587462100	3,5573364610717900	3,2556989282103100	1,7786682305358900	0,5622183962316070	2,9796381723072200	4,0946	6,494850022
28	4	2	9,8433	3,65335	1,96717	4,10931	403228	9878	3	78,91	22,04166667	0	52	78,6666667	1	0,000272804	2,86E-06	1306	337,441	37357,06935756290	1,40356012133468000	5,0071558341759300	3,6035957128412500	3,2053579777553100	1,8017978564206300	0,5550012152786980	2,8511299780237600	3,2174	5,484126156
29	4	2	10,946	5,30205	3,03688	4,95271	690340	13189	5	81,42	25,03703704	0	58	88,6666667	3	0,000111372	7,54E-07	1784	384,494	42116,27799304150	1,22668651162791000	4,8180371284125400	3,5913506167846300	3,0223618200202200	1,7956753083923100	0,5568935515938620	2,5435196798730600	2,2022	5,195179321
30	5	3	8,2563	3,768	3,0242	4,43563	172492	6127	2	74,8	18,05	1	44	66	0	0,000708764	1,45E-05	792	269,352	23307,05346149600	0,51266135490394300	5,1132800000000000	4,6006186450960600	2,8129706774519700	2,3003093225480300	0,4347241434870640	1,7199434777405700	2,236	5,335358024
31	5	2	13,279	6,99831	7,31748	8,69971	1059017	21903	5	52,02	30,03125	0	72	106	3	4,26E-06	1,15E-08	2790	421,548	35878,54800148740	1,07702422649141000	4,8370850556117300	3,7600608291203200	2,9570546410515700	1,8800304145601600	0,5319062884596750	2,3255400770232600	3,5879	5,272458743
32	5	3	8,7477	4,58684	3,64618	5,14518	221095	6758	2	74,8	19,04761905	0	46	67,7777778	1	0,000578704	1,42E-05	925	303,794	35812,64887008520	1,07702422649141000	5,3764135085945400	4,2993892821031300	3,2267188675429700	2,1496946410515700	0,4651823477174550	2,4216729323623100	2,1561	5,987162775
33	5	2	13,77	7,74774	7,93946	9,40782	1228713	23194	5	52,02	31,03030303	1	74	107,777778	4	3,48E-06	1,13E-08	3055	455,99	48384,16539492210	1,16872639029323000	5,2999496865520700	4,1312232962588500	3,2343380384226500	2,0656116481294200	0,4841181065693450	2,5321658493407700	2,6861	6,552841969
34	5	3	8,7201	4,267	3,46136	4,78832	221095	7160	2	74,8	19,04761905	0	46	68	1	0,000578704	1,25E-05	925	283,379	24376,63762449500	0,51211712841253800	5,0789937310414600	4,5668766026289200	2,7955554297270000	2,2834383013144600	0,4379360718546020	1,7112637017994600	3,0444	6,494850022
35	5	2	13,743	7,49731	7,75465	9,05088	1228713	23992	5	52,02	31,03030303	1	74	108	4	3,48E-06	9,98E-09	3055	435,575	36948,13043711160	0,95675017189079900	5,0632111627907000	4,1064609908999000	3,0099806673407500	2,0532304954499500	0,4870373794934590	2,2062753397249800	1,3456	5,367542708
36	5	2	7,8251	4,63941	3,55367	4,44993	172492	5960	2	66,21	18,05	1	44	70	0	0,000708764	9,15E-06	792	271,32	23652,17420611490	0,97824711830131400	5,4392716683518700	4,4610245500505600	3,2087593933265900	2,2305122750252800	0,4483275035949610	2,3080206640299600	3,0448	5,203425667
37	5	2	8,3165	5,36538	4,17564	5,1589	221095	6574	2	66,21	19,04761905	0	46	71,7777778	1	0,000578704	8,99E-06	925	305,762	36892,52906141900	1,211992396359960	5,6512478867543000	4,4392554903943400	3,4316201415571300	2,2196277451971700	0,4505259957052710	2,6527008462165600	5,1623	5,021363052
38	5	2	8,2889	5,13842	3,99083	4,80245	221095	6976	2	66,21	19,04761905	0	46	72	1	0,000578704	7,92E-06	925	285,347	25402,34608367270	0,9191985439838220	5,3263446713852400	4,4071461274014100	3,1227716076845300	2,2035730637007100	0,4538084152837610	2,2127023320441900	8,6643	5,368556231

Tableau b: The correlation matrix between the 28 descriptors

Variables	HBA	HBD	MR	PC	LogP	LogS	WOULD	MTI	NRB	PSA	HIS	SC	SD	SDV	TD	TCon	TVCon	WI	MW	And in ev	GAY and ev	LUMO en ev	Egap in ev	electronegativity $\chi$ in ev	durety	molesse S	Electrophilicity index III	DM
HBA	1																											
HBD	0,758	1																										
MR	0,298	0,343	1																									
PC	-0,170	0,068	0,755	1																								
LogP	0,080	0,128	0,765	0,835	1																							
LogS	-0,222	0,295	-0,909	-0,848	-0,954	1																						
WOULD	0,237	0,205	0,934	0,671	0,804	-0,891	1																					
MTI	0,270	0,248	0,962	0,712	0,835	-0,929	0,989	1																				
NRB	0,034	0,047	0,750	0,550	0,492	-0,573	0,760	0,726	1																			
PSA	0,775	0,591	0,044	-0,473	-0,436	0,229	-0,053	-0,059	0,067	1																		
HIS	0,336	0,324	0,995	0,715	0,743	-0,888	0,939	0,962	0,778	0,096	1																	
SC	0,332	0,012	-0,064	-0,369	-0,295	0,224	-0,049	-0,052	0,077	0,418	-0,020	1																
SD	0,327	0,333	0,995	0,746	0,765	-0,909	0,932	0,963	0,734	0,057	0,995	-0,030	1															
SDV	0,441	0,354	0,969	0,626	0,695	-0,847	0,920	0,943	0,758	0,201	0,988	0,056	0,979	1														
TD	0,274	0,267	0,880	0,678	0,730	-0,816	0,799	0,826	0,719	0,042	0,885	-0,177	0,859	0,869	1													
TCon	-0,429	0,493	-0,674	-0,470	-0,339	0,522	-0,425	-0,495	-0,442	-0,358	-0,676	-0,062	-0,677	-0,686	0,648	1												
TVCon	-0,491	0,368	-0,501	-0,209	-0,174	0,330	-0,296	-0,349	-0,426	-0,481	-0,525	-0,235	-0,503	-0,566	0,552	0,875	1											
WI	0,277	0,257	0,968	0,711	0,823	-0,924	0,991	0,999	0,742	-0,035	0,970	-0,056	0,968	0,952	0,839	-0,509	-0,364	1										
MW	0,298	0,320	0,982	0,722	0,683	-0,845	0,907	0,922	0,803	0,127	0,986	-0,046	0,977	0,968	0,876	-0,700	-0,545	0,937	1									
And in ev	-0,120	0,235	-0,782	-0,632	-0,395	0,588	-0,662	-0,659	-0,709	-0,168	-0,780	0,101	-0,769	-0,744	0,654	0,631	0,478	0,689	-0,866	1								
GAY and ev	-0,158	0,088	0,286	0,605	0,319	-0,337	0,161	0,208	0,225	-0,286	0,241	-0,073	0,292	0,160	0,098	-0,257	0,001	0,198	0,252	-0,271	1							
LUMO en ev	0,209	0,521	0,498	0,513	0,281	-0,436	0,318	0,380	0,100	0,063	0,448	-0,090	0,484	0,398	0,312	-0,433	-0,233	0,383	0,471	-0,469	0,344	1						
Egap's home	-0,311	0,486	-0,344	-0,170	-0,100	0,250	-0,233	-0,268	0,031	-0,236	-0,319	0,049	-0,326	-0,316	0,264	0,294	0,241	0,277	-0,336	0,323	0,241	-0,828	1					
electronegativity $\chi$ in ev	-0,090	0,435	-0,504	-0,656	-0,354	0,480	-0,312	-0,380	-0,175	0,078	-0,446	0,100	-0,496	-0,373	0,280	0,442	0,177	0,378	-0,469	0,475	-0,701	-0,911	0,523	1				
dureté	0,311	0,486	0,344	0,170	0,100	-0,250	0,233	0,268	-0,031	0,236	0,319	-0,049	0,326	0,316	0,264	-0,294	-0,241	0,277	0,336	-0,323	-0,241	0,828	1,000	-0,523	1			
molesse S	-0,445	0,538	-0,427	-0,066	-0,054	0,246	-0,330	-0,348	-0,118	-0,453	-0,426	0,002	-0,407	-0,453	0,395	0,387	0,358	0,365	-0,445	0,403	0,394	-0,662	0,920	0,331	-0,920	1		
Electrophilicity index III	-0,158	0,144	0,350	0,667	0,356	-0,393	0,212	0,262	0,224	-0,303	0,296	-0,128	0,349	0,206	0,147	-0,290	-0,010	0,254	0,315	-0,341	0,979	0,491	0,077	-0,803	-0,077	0,248	1	
DM	-0,107	0,276	-0,138	-0,061	-0,106	0,138	-0,148	-0,158	0,070	0,014	-0,115	-0,201	-0,132	-0,100	0,059	-0,056	-0,155	0,150	-0,078	0,005	-0,048	-0,323	0,305	0,267	-0,305	0,264	-0,098	1

**Table c:** Observed and predicted anti-cancer biological activity values obtained by MLR developed on the basis of data (training set and test set)

Training			
N	obs(Pic50)	MLR	
		pred(pIC50)	pred(pIC50cv)
2	5,37	5,262	5,262
4	5,20	5,6	5,6
5	6,42	5,783	5,783
6	5,79	5,626	5,626
8	5,94	5,633	5,633
9	6,25	5,648	5,648
11	5,28	5,653	5,653
12	6,60	5,643	5,643
13	5,84	5,522	5,522
14	5,35	5,642	5,642
15	6,37	5,488	5,488
16	6,20	5,672	5,672
17	5,32	5,128	5,128
18	5,89	5,411	5,411
20	6,04	5,496	5,496
21	5,35	5,739	5,739
23	5,85	5,075	5,075
25	5,20	5,584	5,584
26	6,38	5,237	5,237
28	5,48	5,531	5,531
29	5,20	5,63	5,63
30	5,34	5,607	5,607
31	5,27	5,518	5,518
32	5,99	5,65	5,65
33	6,55	5,632	5,632
34	6,49	5,527	5,527
35	5,37	5,751	5,751
36	5,20	5,557	5,557
37	5,02	5,363	5,363
38	5,37	4,985	4,985
Test			
N	obs(Pic50)	MLR	
		pred(pIC50)	
1	5,16	5,127	
3	5,66	5,134	
7	6,60	5,824	
10	5,47	5,669	

19	5,79	5,372
22	6,47	5,759
24	5,07	5,436
27	6,49	5,956

**Table d:** Y-randomization test results

Model	R	R <sup>2</sup>	Q <sup>2</sup>
Original	0,955298	0,912594	0,843754
Random 1	0,464155	0,21544	-0,14773
Random 2	0,433817	0,188197	-0,24023
Random 3	0,34558	0,119426	-0,19069
Random 4	0,23397	0,054742	-0,4919
Random 5	0,22919	0,052528	-0,29351
Random 6	0,284762	0,081089	-0,47086
Random 7	0,151176	0,022854	-0,4756
Random 8	0,268907	0,072311	-0,29217
Random 9	0,391288	0,153106	-0,29731
Random 10	0,154593	0,023899	-0,42269
Random 11	0,142589	0,020332	-0,45276
Random 12	0,183693	0,033743	-0,37589
Random 13	0,166944	0,02787	-0,38293
Random 14	0,490911	0,240993	-0,15248
Random 15	0,268964	0,072342	-0,26271
Random 16	0,508102	0,258168	-0,05979
Random 17	0,402765	0,16222	-0,23678
Random 18	0,306365	0,09386	-0,29043
Random 19	0,535558	0,286823	0,051141
Random 20	0,337439	0,113865	-0,23217
Random 21	0,272117	0,074048	-0,26221
Random 22	0,365663	0,133709	-0,19307
Random 23	0,52502	0,275646	0,019794
Random 24	0,163545	0,026747	-0,35094
Random 25	0,518035	0,26836	-0,08465
Random 26	0,652001	0,425106	0,201834

Random 27	0,351149	0,123305	-0,29539
Random 28	0,335142	0,11232	-0,15763
Random 29	0,170551	0,029088	-0,61823
Random 30	0,455646	0,207613	-0,20781
Random 31	0,21089	0,044475	-0,54836
Random 32	0,418562	0,175194	-0,09346
Random 33	0,317255	0,100651	-0,23101
Random 34	0,727201	0,528821	0,34201
Random 35	0,586629	0,344133	0,054271
Random 36	0,474637	0,22528	-0,14456
Random 37	0,101477	0,010297	-0,51156
Random 38	0,382808	0,146542	-0,23407
Random 39	0,037623	0,001415	-0,45742
Random 40	0,22959	0,052712	-0,28287
Random 41	0,471767	0,222564	-0,12098
Random 42	0,264035	0,069715	-0,22068
Random 43	0,551617	0,304282	0,015376
Random 44	0,4242	0,179946	-0,19823
Random 45	0,335002	0,112226	-0,25852
Random 46	0,235508	0,055464	-0,31336
Random 47	0,202626	0,041057	-0,31685
Random 48	0,353449	0,124927	-0,38034
Random 49	0,572125	0,327327	-0,08597
Random 50	0,329709	0,108708	-0,22983



**Table e:** The values of observed and predicted anti-cancer biological activities obtained by MNLr developed on the basis of data (training set and test set)

Training			
N	obs(Pic50)	MNLr	
		pred(pIC50)	pred(pIC50cv)
2	5,37	5,361	5,127
4	5,20	5,565	5,372
5	6,42	5,865	5,686
6	5,79	5,594	5,598
8	5,94	5,611	5,638
9	6,25	5,617	5,651
11	5,28	5,596	5,400
12	6,60	5,592	5,521
13	5,84	5,531	5,536
14	5,35	5,729	5,727
15	6,37	5,454	5,437
16	6,20	5,771	5,765
17	5,32	5,114	5,092
18	5,89	5,342	5,438
20	6,04	5,469	5,462
21	5,35	5,756	5,659
23	5,85	5,102	5,111
25	5,20	5,583	5,484
26	6,38	5,171	5,161
28	5,48	5,489	5,489
29	5,20	5,658	5,618
30	5,34	5,671	5,682
31	5,27	5,465	5,470
32	5,99	5,657	5,636
33	6,55	5,588	5,602
34	6,49	5,545	5,561
35	5,37	5,832	5,799
36	5,20	5,515	5,620
37	5,02	5,256	5,222
38	5,37	5,095	5,149
Test			
N	obs(Pic50)	MNLr	
		pred(pIC50)	
1	5,16	5,147	
3	5,66	5,168	
7	6,60	5,858	
10	5,47	5,655	

19	5,79	5,322
22	6,47	5,778
24	5,07	5,424
27	6,49	6,377

**Tableau f:** The values of observed and predicted anti-cancer biological activities obtained by ANN developed on the basis of data (training set and test set)

Training			
N	obs(Pic50)	ANN	
		pred(pIC50)	pred(pIC50cv)
2	5,37	5,43	5,222
4	5,20	5,55	5,615
5	6,42	5,86	5,775
6	5,79	5,58	5,663
8	5,94	5,60	5,446
9	6,25	5,58	5,652
11	5,28	5,59	5,620
12	6,60	5,58	5,621
13	5,84	5,50	5,492
14	5,35	5,74	5,561
15	6,37	5,46	5,453
16	6,20	5,79	5,695
17	5,32	5,11	5,173
18	5,89	5,37	5,380
20	6,04	5,47	5,492
21	5,35	5,80	5,761
23	5,85	5,11	5,144
25	5,20	5,57	5,622
26	6,38	5,14	5,318
28	5,48	5,50	5,542
29	5,20	5,67	5,677
30	5,34	5,64	5,612
31	5,27	5,47	5,546
32	5,99	5,67	5,669
33	6,55	5,57	5,680
34	6,49	5,50	5,497
35	5,37	5,85	5,776
36	5,20	5,51	5,535
37	5,02	5,30	5,244
38	5,37	5,11	5,076
Test			

N	obs(Pic50)	ANN
		pred(pIC50)
1	5,16	5,29
3	5,66	5,21
7	6,60	5,85
10	5,47	5,61
19	5,79	5,07
22	6,47	5,85
24	5,07	5,49
27	6,49	6,40