

Material Suplementario 4: Parámetros estadísticos para los modelos seleccionados.

Modelos	Serie	C	Q	Sens	Spec	FAR	λ	D ²	F
2	SE	0,77	89,28	89,50	82,75	10,85	0,45	5,32	305,30
	SP	0,77	88,95	81,70	90,14	6,10			
35	SE	0,78	89,45	89,66	83,02	10,67	0,438	5,554	221,05
	SP	0,78	89,29	82,40	90,14	6,07			
37	SE	0,82	91,41	91,69	85,90	8,75	0,386	6,824	304,46
	SP	0,82	91,36	85,28	92,49	4,60			

Material Suplementario 5: Ecuaciones que corresponden a los modelos seleccionados en el SMC.

$$\text{Clasif (2)} = -5,69 + 0,79 \times 10^{-2} \mathbf{f}_4^H(x) - 0,23 \times 10^{-3} \mathbf{f}_7^H(x) + 0,3 \times 10^{-5} \mathbf{f}_{10}(x) - 0,12 \mathbf{f}_{3L}^H(x_E) + 0,12 \times 10^{-3} \mathbf{f}_{8L}^H(x_E) + 0,13 \mathbf{f}_{3L}(x_E) - 0,5 \times 10^{-3} \mathbf{f}_{7L}(x_E)$$

$$\begin{aligned} \text{Clasif (35)} = & -5,86 - 0,84 \mathbf{b}_8^{PVs}(x,y) + 1,56 \mathbf{b}_{10}^{PVs}(x,y) - 0,77 \mathbf{b}_{12}^{PVs}(x,y) + 0,09 \mathbf{b}_{2L}^{PVs}(x_E, y_E) + 0,45 \mathbf{b}_I^{PKs}(x, y) - 0,78 \mathbf{b}_{0L}(x_E, y_E) + 0,31 \mathbf{b}_0^{VKs}(x, y) - \\ & 0,31 \mathbf{b}_4^{VKs}(x, y) - 0,12 \mathbf{b}_0^{VKs}(x, y) + 0,12 \mathbf{b}_6^{VKs}(x, y) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Clasif (37)} = & -7,01 + 1,72 \times 10^{-2} \mathbf{f}_{2L}(x_E) + 1,94 \times 10^{-6} \mathbf{q}_9(x) - 0,51 \mathbf{q}_{1L}^H(x_{E-H}) - 8,23 \times 10^{-3} \mathbf{b}_{2L}^{VK}(x_E, y_E) - 2,80 \times 10^{-2} \mathbf{f}_I^H(x) + 1,00 \mathbf{f}_0^H(x) + 8,68 \times 10^{-2} \\ & \mathbf{f}_{2L}^{Vs}(x_E) + 1,34 \mathbf{f}_{13L}(x_E) - 3,65 \times 10^{-2} \mathbf{b}_8^{PVs}(x, y) \end{aligned}$$

Material Suplementario 6: Probabilidad posterior de los 38 compuestos clasificados como activos por los 3 modelos seleccionados.

Nombre	ΔP Modelos		
	2	35	37
LONCHOCARPIC ACID	99,99	95,78	99,76
BITHIONATE SODIUM	88,23	82,04	98,34
8-HYDROXYCARAPINIC ACID	93,98	93,45	88,42
POMIFERIN	99,97	86,15	99,16
HEXACHLOROPHENE	94,47	73,06	95,54
SALVINORIN A	93,10	83,21	89,92
ALIZARIN	84,82	22,01	27,42
ROBUSTIC ACID	99,84	94,78	98,94
OSAJIN	99,91	92,26	99,16
SOLIDAGENONE	66,16	3,91	29,25
PURPURIN	91,89	10,40	26,61
beta-MANGOSTIN	100,00	88,88	99,83
CLOZAPINE	44,48	64,38	41,86
SALVINORIN B	82,75	61,82	49,82
NOSCAPINE HYDROCHLORIDE	87,30	95,69	15,10
CORALYNE CHLORIDE	95,33	93,36	92,84
EUPATORIN	98,01	64,18	89,26
beta-TOXICAROL	97,62	97,98	87,95
LARIXOL ACETATE	92,73	24,37	74,48
LARIXOL ACETATE	92,73	24,37	74,48
PHYSCION	95,74	62,11	50,77
PTERYXIN	98,66	32,30	97,76
AZAPERONE	30,40	82,58	57,69
CHRYSOPHANOL	92,57	36,24	38,75

Nombre	ΔP Modelos		
	2	35	37
7,8-DIHYDROXYFLAVONE	94,90	16,40	72,53
SAPPANONE A DIMETHYL ETHER	67,69	91,44	17,85
MUNDULONE	99,97	93,93	99,76
DEGUELIN[-]	96,12	98,17	97,55
AVOBENZONE	58,81	68,74	38,73
ISOTECTORIGENIN, 7-METHYL ETHER	98,24	77,61	91,93
QUERCETIN TETRAMETHYL [5,7,3',4'] ETHER	98,97	89,06	94,33
RHAMNETIN	98,51	10,35	78,14
DEMETHYLNOBILETIN	99,74	92,98	95,18
GARDENIN B	99,52	89,23	93,58
5-HYDROXY-2',4',7,8-TETRAMETHOXYFLAVONE	98,58	89,51	93,86
CANRENOIC ACID, POTASSIUM SALT	76,8	55,5	74,99
URSODIOL	92,5	68,5	63,40
FLUMETHASONE	82,1	32,7	66,39
MEDROXYPROGESTERONE ACETATE	93,1	16,6	93,24