



Sara Miguel Dinis Mamede da Cruz

Licenciada em Bioquímica

**Desenvolvimento de uma abordagem computacional para
a descoberta de compostos-líderes para fármacos
anticancerígenos**

Dissertação para obtenção do Grau de Mestre em
Química Bioorgânica

Orientadora: Doutora Florbela Pereira
Investigadora Pós-Doc, LAQV-REQUIMTE-FCT/UNL

Co-orientadora: Doutora Susana P. Gaudêncio
Investigadora Auxiliar, LAQV-REQUIMTE-FCT/UNL, UCIBIO-REQUIMTE



FACULDADE DE
CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
UNIVERSIDADE NOVA DE LISBOA

Setembro 2016

Sara Miguel Dinis Mamede da Cruz

Licenciada em Bioquímica

**Desenvolvimento de uma abordagem computacional para
a descoberta de compostos-líderes para fármacos
anticancerígenos**

Dissertação para obtenção do Grau de Mestre em
Química Bioorgânica

Orientadora: Doutora Florbela Pereira

Investigadora Pós-Doc, LAQV-REQUIMTE-FCT/UNL

Co-orientadora: Doutora Susana Gaudêncio

Investigadora Auxiliar, UCIBIO-REQUIMTE, LAQV-REQUIMTE-FCT/UNL

Setembro 2016

Desenvolvimento de uma abordagem computacional para a descoberta de compostos-líderes para fármacos anticancerígenos

Copyright © Sara Miguel Dinis Mamede da Cruz, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa

A Faculdade de Ciências e Tecnologia e a Universidade Nova de Lisboa têm o direito, perpétuo e sem limites geográficos, de arquivar e publicar esta dissertação através de exemplares impressos reproduzidos em papel ou de forma digital, ou por qualquer outro meio conhecido ou que venha a ser inventado, e de a divulgar através de repositórios científicos e de admitir a sua cópia e distribuição com objetivos educacionais ou de investigação, não comerciais, desde que seja dado crédito ao autor e editor.

Agradecimentos

Primeiro gostaria de agradecer à Doutora Florbela Pereira por me ter aceite para participar neste projeto e por toda a orientação e apoio na realização deste trabalho.

À Doutora Susana Gaudêncio pelo auxílio ao longo do projeto.

À Professora Cecília M. Rodrigues, Dr. Pedro Borralho e Sofia Gomes do Centro Patogénese Molecular da Faculdade de Farmácia da Universidade de Lisboa pela realização dos ensaios biológicos utilizados neste projeto.

À Professora Ilda Santos-Sanches (FCT-UNL), devido aos crescimentos biológicos.

Relativamente ao serviço de RMN gostaria de agradecer à Doutora Ana Teresa Lopes. Os espetrómetros de RMN fazem parte da “The National RMN Facility” com o apoio da Fundação para a Ciência e a Tecnologia (RECI/BBBQB/0230/2012).

A família pelo apoio ao longo deste tempo.

A amigos que, seja por telefone ou visitas de médico, continuam a mostrar que amigos é a família que nós escolhemos, especialmente à Marília Pereira, Vânia Diogo, Jorge Oliveira e Hélder Ribeiro.

Aos companheiros de almoço, café e lanche Ana Filipa Fernandes e Rafael Mamede.

Aos membros do grupo de investigação Marisa Paulino, Fredilson Melo, Lígia Costa, Helena Macedo e Sofia Silva.

Aos amigos que ganhei no mestrado Diana Dias, Fátima Piloto, Inês Rosete, Marta Chaves e Rúben Ferreira.

Às minhas colegas de casa Débora Serra, Catarina Monteiro e Joana Morgado.

Este projeto é financiado Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT) e FEDER (através dos projetos ref. PTDC/QUI-QUI/119116/2010, IF/00700/2014, UID/multi/04378/2013, UID/QUI/50006/2013, e dado pelo 7º Programa Quadro da EU (FP7/2007-2013) sob o acordo de projeto nºPCOFUND-GA-2009-246542 e nº269138-NanoGuard.

Resumo

Atualmente o cancro é uma das principais causas de morte, causando uma crescente demanda para a descoberta de fármacos para o seu tratamento. O objetivo desta dissertação foi a construção de modelos computacionais para auxiliar a descoberta de novos compostos líder anticancerígenos contra o cancro do cólon.

Foram realizados dois diferentes estudos da Relação Quantitativa Estrutura Atividade (QSAR), o primeiro intitulado Modelo A, que utilizou conjuntos de descritores estruturais e *fingerprints* para representar os compostos retirados de várias bases de dados. O segundo, Modelo B, que teve como foco produtos naturais marinhos, utilizando como descritores os valores de desvio químico dos espectros de RMN de protão (^1H) e carbono (^{13}C) de amostras de extratos, frações e compostos puros provenientes de actinobactérias isoladas de sedimentos marinhos.

O Modelo A contém duas partes: uma de classificação e outra de regressão. Para o modelo de classificação, compostos com valor de $\text{IC}_{50} < 10 \mu\text{M}$ foram considerados ativos, o melhor resultado foi obtido com os descritores moleculares 1D2D. No caso do modelo de regressão, que previu o valor de pIC_{50} apenas para os compostos ativos, o melhor resultado foi conseguido utilizando os *fingerprints* PubChem como descritores. Utilizaram-se diferentes técnicas de aprendizagem automática. O melhor modelo obtido foi utilizando a *random Forest*.

Para o Modelo B foi adotada uma estratégia de classificação, tendo o melhor resultado sido obtido com os valores de desvio químico de ^1H e ^{13}C com os intervalos de 0,1 e 0,5 ppm, respetivamente. Ao melhor modelo foi submetido um segundo conjunto de teste constituído por cinco compostos puros isolados de duas espécies diferentes de actinobactérias e cuja atividade ainda não tinha sido avaliada. A estrutura química destes cinco compostos ainda não foi elucidada. Contudo, demonstraram pertencer à mesma família de macrólidos. Destes cinco compostos puros, dois foram previstos como inativos e três como ativos. Não foi obtido experimentalmente valores de IC_{50} para qualquer dos compostos, mas, com a concentração de $125 \mu\text{g/mL}$, os dois compostos com maior probabilidade de serem ativos apresentaram alguma atividade.

Abstract

Currently, cancer is a leading cause of death, causing an increasing demand for the discovery of drugs for its treatment. The aim of this work was the construction of computational models to aid the discovery of new lead like drugs against the colon cancer.

Two different studies Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR) were carried out, the first called Model A, that used sets of structural descriptors and fingerprints to represent the compounds from various databases. The second, Model B, focuses on marine natural products, using as descriptors the values of chemical shifts of the proton (^1H) and the carbon (^{13}C) NMR spectra of extracts, fractions and pure compounds isolated from marine sediment actinomycetes.

The Model A contains two approaches: classification and regression. For the classification model, compounds with $\text{IC}_{50} < 10 \mu\text{M}$ were considered active, the best result was obtained with the 1D2D molecular descriptors. In the regression model, which predicted the pIC_{50} value only for the active compounds, the best results were obtain using the PubChem fingerprints as descriptors. Different machine learning techniques were used. The best model was built with the random Forest.

For Model B a classification strategy was adopted, having the best result obtained with the values of chemical shifts for ^1H and ^{13}C with intervals of 0.1 and 0.5 ppm, respectively. To the best model a second test set was submitted that consisted of five pure compounds isolated from two different species and whose activity had not yet been evaluated. The chemical structure of these five compounds is not yet elucidated. However, they seem to belong to the same family of macrolides. Of these five pure compounds, two were predicted as inactive and three as active. No value of IC_{50} was obtained experimentally for any of the compounds, but, at the concentration of $125 \mu\text{g} / \text{mL}$, the two compounds with highest probability of being active had some activity.

HCT-116; machine learning techniques; QSAR; random Forest

Índice de conteúdo

Agradecimentos	v
Resumo	vii
Abstract.....	ix
Índice de conteúdo.....	xi
Índice de figuras	xiii
Índice de tabelas	xv
Índice de equações.....	xvii
Abreviaturas e siglas.....	xix
1. Introdução	1
1.1 Contextualização	1
1.1.1 Relevância do cancro do cólon.....	1
1.1.2 Importância dos compostos naturais na descoberta de novos fármacos.....	2
1.2 Representação de estruturas moleculares	3
1.2.1 Formatos de representação das estruturas	3
1.2.2 Descritores.....	4
1.2.2.1 Descritores 1D e 2D.....	6
1.2.2.2 Descritores 3D.....	7
1.2.2.3 <i>Fingerprints</i>	7
1.2.2.4 Descritores de RMN.....	8
1.3 <i>Virtual screening</i>	9
1.3.1 <i>Structured-based</i>	9
1.3.2 <i>Ligand-based</i>	9
1.4 Estudos QSAR.....	10
1.4.1 Classificação.....	10
1.4.2 Regressão	11
1.5 Técnicas de aprendizagem automática	12
1.5.1 Redes neuronais de Kohonen	12
1.5.2 Redes neuronais artificiais.....	13
1.5.3 <i>Random Forest</i>	14
1.5.4 <i>k-Nearest Neighbor</i> (kNN).....	15
1.5.5 <i>Support Vector Machine</i> (SVM)	16
2. Metodologia	21
2.1 Modelo A.....	21
2.1.1 Construção da base de dados.....	21
2.1.2 Cálculo de descritores	21
2.1.3 Partição dos conjuntos de treino e de teste.....	22
2.1.4 Seleção de descritores	23
2.1.5 Otimização do modelo (A.1).....	23
2.1.6 Avaliação de previsão do modelo por classes	23
2.1.7 Nova abordagem - Classificação/Regressão (Modelo A.2).....	24
2.1.8 Comparação de outras técnicas	25
2.2 Modelo B.....	26
2.2.1 Preâmbulo.....	26
2.2.2 Construção da base de dados.....	26
2.2.3 Partição do conjunto de treino e do conjunto de teste	26
2.2.4 Obtenção dos descritores.....	26
2.2.5 Obtenção do modelo e sua validação	27
3. Resultados	31
3.1 Modelo A.....	31
3.1.1 Partição do conjunto de treino e de teste.....	31
3.1.2 Seleção de descritores	32

3.1.3	Otimização do modelo (A.1).....	32
3.1.4	Avaliação da previsão do modelo por classes	33
3.1.5	Modelo de classificação (A.2).....	34
3.1.5.1	Descritores relevantes	34
3.1.5.2	Fragmentos de interesse	35
3.1.5.3	Seleção de descritores	36
3.1.5.4	Validação externa mais recente.....	37
3.1.6	Modelo de regressão (A.2)	37
3.1.6.1	Descritores relevantes	38
3.1.6.2	Seleção de descritores	39
3.1.6.3	Validação externa recente	40
3.1.7	Comparação de técnicas	40
3.1.7.1	Classificação	41
3.1.7.2	Regressão	41
3.2	Modelo B.....	42
3.2.1	Descritores de ^{13}C	42
3.2.2	Descritores de ^1H	42
3.2.3	Combinação dos descritores de ^{13}C e ^1H	43
3.2.4	Otimização do modelo	43
3.2.5	Segunda validação externa	44
4.	Discussão.....	47
4.1	Modelo A.....	47
4.1.1	Partição dos conjuntos de treino e de teste.....	47
4.1.2	Seleção de descritores	47
4.1.3	Otimização do modelo (A.1).....	48
4.1.4	Avaliação de previsão do modelo por classes	48
4.1.5	Modelo de classificação (A.2).....	48
4.1.6	Modelo de regressão (A.2)	50
4.1.7	Comparação de técnicas	53
4.2	Modelo B.....	53
4.2.1	Otimização do Modelo B	54
4.2.2	Validação externa de compostos ainda não estudados	55
5.	Conclusões	59
6.	Bibliografia	63
7.	Anexos.....	69
7.1	Previsões para o conjunto de treino do Modelo A – classificação, obtido com a <i>random Forest</i> utilizando os descritores 1D2D.....	71
7.2	Previsões para o conjunto de teste do Modelo A – classificação, obtido com a <i>random Forest</i> utilizando os descritores 1D2D	105
7.3	revisões para o conjunto de treino do Modelo A – regressão, obtido com a <i>random Forest</i> utilizando os <i>fingerprints</i> PubChem.....	115
7.4	Previsões para o conjunto de teste do Modelo A – regressão, obtido com a <i>random Forest</i> utilizando os <i>fingerprints</i> PubChem.....	135
7.5	Quantidade de compostos nos diferentes intervalos de pIC_{50} para oito dos <i>fingerprints</i> PubChem mais relevantes fornecidos pela <i>random Forest</i> para a regressão.....	137
7.6	Descrição das espécies dos extratos provenientes de actinobactérias de sedimentos marinhos utilizados na base de dados do Modelo B.....	145
7.7	Previsões para o conjunto de treino do Modelo B, obtido com a <i>random Forest</i> utilizando os desvios químicos de 0,1 ppm para o espectro ^1H e 0,5 ppm para o ^{13}C , na coluna esquerda encontram-se os extratos na coluna direita as frações.....	147
7.8	Previsões para o conjunto de teste do Modelo B, obtido com a <i>random Forest</i> utilizando os desvios químicos de 0,1 ppm para o espectro ^1H e 0,5 ppm para o ^{13}C	149

Índice de figuras

Figura 1.1 - Representação mundial da taxa de incidência e da mortalidade do cancro do cólon no sexo masculino no ano 2012.	1
Figura 1.2 - Famílias dos compostos estudados em antigos estudos QSAR realizados para a linha celular HCT-116 (derivados de 1- benzoperhidroisindole; 2- spiropirroledinil-oxindole; 3- triazolopiridina; 4- benzodithiazine-dioxido; 5- Acilbenzenosulfonamides).....	2
Figura 1.3 - Novos fármacos aprovados mundialmente entre 2000-2013	2
Figura 1.4 - Variação no número de produtos marinhos ao longo dos anos (1985-2012).....	3
Figura 1.5 - Exemplos de valores de E-State para diferentes moléculas.	6
Figura 1.6 - Comparação de valores de RDF para compostos aromáticos (não foram considerados os hidrogénios)	7
Figura 1.7 - Esquema de trabalho realizado nesta dissertação	10
Figura 1.8 – Esquema de uma rede neuronal e representação de um dos seus neurónios ...	13
Figura 1.9 - Representação de duas <i>convolutional layers</i>	14
Figura 1.10 - Esquema de uma <i>random Forest</i>	14
Figura 1.11 - Esquema de SVM para um exemplo de classificação.....	16
Figura 2.1 - Estruturas de composto do segundo conjunto de validação para o Modelo A (1 corresponde a TMC-264; 2 e 3 colchicina e derivado; 4 e 5 escaleno e β -sitosterol).....	25
Figura 3.1 - Resultado do mapa de rede neuronal. Vermelho, Azul, Verde, Preto e Branco representam as classes A ($IC_{50} < 10 \mu M$), B ($10 \mu M \leq IC_{50} < 50 \mu M$), C ($IC_{50} \geq 50 \mu M$), classes sobrepostas e neurónios sem classe, respetivamente.....	31
Figura 3.2 - Estruturas dos fragmentos ativos descritos na Tabela 3.7	36
Figura 3.3 – Estruturas dos fragmentos inativos descritos na Tabela 3.7.....	36
Figura 4.1 - Estrutura de compostos do conjunto de teste com a probabilidade de 1 de ser ativo.....	49
Figura 4.2 - Resultados obtidos para o modelo de regressão para o conjunto de treino com a técnica <i>random Forest</i> utilizando os <i>fingerprints</i> PubChem.....	51
Figura 4.3 - Estruturas de outliers para o conjunto de treino que se encontram assinadas a vermelho na Figura 4.2.....	51
Figura 4.4 - Resultados obtidos para o modelo de regressão para o conjunto de teste com a técnica <i>random Forest</i> utilizando os <i>fingerprints</i> PubChem.....	52
Figura 4.5 - Representação gráfica do valor de média geométrica para os descritores obtidos a partir dos espetros de ^{13}C e 1H e a sua combinação.....	54

Índice de tabelas

Tabela 1.1- Classificação de descritores ¹⁷	5
Tabela 1.2 - Descritores calculados provenientes do software PaDEL	8
Tabela 2.1 - Classes usadas para avaliar capacidade de previsão do modelo A.1 do conjunto de treino.....	24
Tabela 3.1 - Resultados obtido da validação interna do conjunto de treino utilizando a random Forest para os diferentes casos de partição obtidos com os fingerprints Substructure.	31
Tabela 3.2 – Resultados obtidos da validação interna do conjunto de treino para a seleção de descritores juntamente com o número de descritores selecionados para cada conjunto	32
Tabela 3.3 - Resultados para o conjunto de treino para a otimização do modelo dos melhores conjuntos descritores	33
Tabela 3.4 - Avaliação das classes para a previsão do modelo A.1 com os resultados obtidos utilizando a técnica <i>random Forest</i> para os <i>fingerprints</i> PubChem.....	33
Tabela 3.5 – Resultados obtidos com a random Forest para os modelos de classificação A.2	34
Tabela 3.6 - Descritores mais relevantes do modelo de classificação obtido para o conjunto de descritores estruturais 1D2D	35
Tabela 3.7 – Fragmentos relevantes para a classificação e a sua dimensão existente na base de dados.....	35
Tabela 3.8 - Resultados obtidos com a random Forest para a seleção de descritores no modelo de classificação.....	37
Tabela 3.9 – Previsão de classe e probabilidade dos cinco compostos representados na Figura 2.1.....	37
Tabela 3.10 - Resultados para os modelos de regressão A.2 obtidos com a random Forest	38
Tabela 3.11 - Descritores mais relevantes do modelo de regressão A.2 utilizando os fingerprints PubChem	39
Tabela 3.12 - Resultados da seleção de descritores para o modelo de regressão utilizando a random Forest.....	40
Tabela 3.13 – Valores de pIC ₅₀ experimental e previstos para os compostos da Figura 2.1 obtidos com o modelo com os 150 fingerprints PubChem mais relevantes dados pela random Forest.....	40
Tabela 3.14 - Comparação de técnicas de aprendizagem automática para modelos de classificação utilizando 104 descritores 1D2D provenientes da seleção realizada no Weka	41
Tabela 3.15 - Comparação de técnicas de aprendizagem automática para os modelos de regressão utilizando o conjunto dos 150 fingerprints PubChem	42

Tabela 3.16 - Resultados dos modelos realizados com os dados espectrais de ^{13}C	42
Tabela 3.17 - Resultados dos modelos realizados com os dados espectrais de ^1H	43
Tabela 3.18 - Resultados dos modelos de classificação para os descritores obtidos com a combinação dos dados de ^{13}C e ^1H	43
Tabela 3.19 - Resultados da otimização do Modelo B para os melhor modelos obtidos anteriormente	44
Tabela 3.20 - Previsão de compostos puros ainda não estudados	44
Tabela 3.21 - Resultados de absorvância obtidos do ensaio MTS realizado na Faculdade de Farmácia, Universidade de Lisboa	44

Índice de equações

Equação 1 - Índex do estado eletropológico.....	6
Equação 2 - Função de distribuição radial.....	7
Equação 3 - Sensibilidade (parâmetro de classificação).....	11
Equação 4 - Especificidade (parâmetro de classificação).....	11
Equação 5 - Previsibilidade (parâmetro de classificação)	11
Equação 6 - Média geométrica (parâmetro de classificação)	11
Equação 7 - Quadrado de coeficiente de correlação de Pearson	11
Equação 8 - Raiz quadrada do erro médio.....	11
Equação 9 - Média do erro absoluto	11
Equação 10 - Distância euclidiana.....	12
Equação 11 - Neurónio vencedor da rede neuronal.....	12
Equação 12 - Correção dos pesos	12
Equação 13 - Função sigmoideal.....	13
Equação 14 - Função kernel da SVM.....	16
Equação 15 - Função de perda da SVM	17
Equação 16 - Conversão a pIC_{50}	21

Abreviaturas e siglas

0D – não dimensional

^{13}C – Espectro de RMN de carbono 13

1D – unidimensional

1D2D – junção de uni e bidimensional

1D2D3D – junção de uni, bi e tridimensional

^1H – Espectro de RMN de próton

2D – bidimensional

3D – tridimensional

ANN – *Artificial Neural Networks* (Redes neurais artificiais)

BF ou BFirst – *Best First* (seleção de descritores)

BPG – *Backpropagation* (algoritmo)

DAD – *Diode array detector* (detetor de fotodíodos)

EA – Erro absoluto (parâmetro de regressão)

EGFR – *Epidermal Growth Factor Receptor*

E-State ou S_i – Índice de estado eletrológico

FN – Falsos negativos (parâmetro de classificação)

FP – Falsos positivos (parâmetro de classificação)

FPs – *Fingerprints*

G-mean – Média geométrica (parâmetro da classificação)

GSWb – *GreedyStepwise backwards* (seleção de descritores)

HCT-116 – Linha celular do carcinoma do cólon humano

HPLC – *High Performance Liquid Chromatography* (Cromatografia líquida de alta eficiência)

IC₅₀ – Medida de concentração de inibição de metade da população

kNN – *k-Nearest Neighbor* (técnica de aprendizagem automática)

LFS – *LinearForwardSelection* (seleção de descritores)

MAE – Média do erro absoluto (parâmetro de regressão)

MDL – *Molecular Design Limited*

MLP – *Multilayer Perceptron* (técnica de aprendizagem automática)

MLR – Regressão multilinear (técnica de aprendizagem automática)

MOL – *Molecule file*

m_{try} – Número de descritores utilizados em cada nóculo da *random Forest*

NNs – Redes neurais (técnica de aprendizagem automática)

OOB – *Out-Of-Bag* (método de avaliação utilizado na *random Forest*)

PCA – *Principal Component Analysis* (técnica de aprendizagem automática)

pIC₅₀ – Conversão do IC₅₀ (equação 16)

PLS – *Partial Least Squares* (técnica de aprendizagem automática)

PN – Produtos naturais

ppm – partes por milhão (unidade de RMN)

PSO ou PSOsearch – *Particle Swarm Optimization* (seleção de descritores)

PTM – Código das estirpes obtidas dos sedimentos oceânicos do arquipélago da Madeira,

Portugal

Q – Previsibilidade (parâmetro da classificação)

QSAR – *Quantitative Structure-Activity Relationship*, em português relação quantitativa estrutura-atividade

QSTR – *Quantitative Structure-Toxicity Relationship*

R² – Quadrado do coeficiente de correlação de Pearson (parâmetro da regressão)

RBD – *Radial basis*

RDF – Função de distribuição radial

rF – *random Forest* (técnica de aprendizagem automática)

RMN – Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear

RMSE – Raiz quadrada do erro quadrático médio (parâmetro de regressão)

SDF – *Structure Data File*

SE – Sensibilidade (parâmetro de classificação)

SMARTS – *SMILES Arbitrary Target Specification*

SMILES – *Simplified Molecular Input Line System*

SOM – *Self-Organized Maps*, em português mapas auto-organizativos (técnica de aprendizagem automática)

SP – Especificidade (parâmetro da classificação)

SVM – *Support Vector Machine* (técnica de aprendizagem automática)

TMS – tetrametilsilano (referência de RMN)

TN – Verdadeiros negativos (parâmetro de classificação)

TP – Verdadeiros positivos (parâmetro de classificação)

Capítulo 1 – INTRODUÇÃO

1. Introdução

1.1 Contextualização

1.1.1 Relevância do cancro do cólon

Nesta dissertação foi aplicada uma metodologia de aprendizagem automática de forma a criar ferramentas que possam auxiliar no processo de descoberta de novos agentes bioativos candidatos a fármacos para a linha celular HCT-116 relativa ao cancro do cólon que é, segundo estudos estatísticos realizados recentemente, o quarto tipo de cancro mais mortal no mundo, sendo esperado que entre 2015 e 2030 sejam diagnosticados mais de 2,2 milhões de casos e 1,1 milhões de mortes.¹

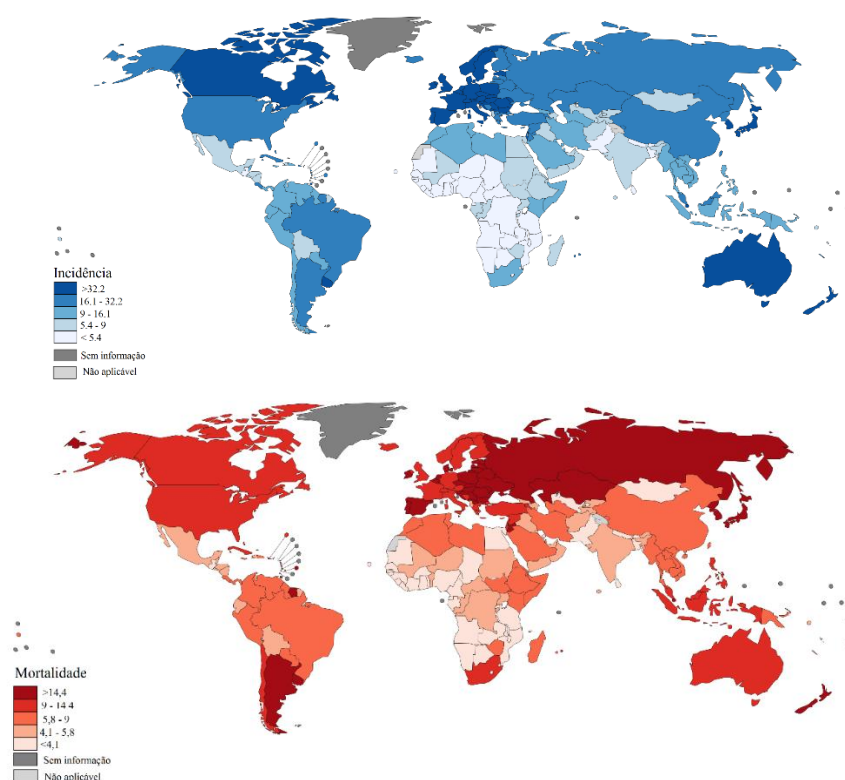


Figura 1.1 - Representação mundial da taxa de incidência e da mortalidade do cancro do cólon no sexo masculino no ano 2012.²

Estudos computacionais utilizando a linha celular HCT-116 foram previamente reportados, quer considerando uma abordagem de *docking* com recetores do fator de crescimento epidérmico(EGFR),^{3,4} quer por um estudo da relação atividade-estrutura de compostos [*Quantitative Structure-Activity Relationship* (QSAR)].⁵⁻⁹ Para este último caso, que é também a abordagem utilizada nesta dissertação, foram documentados quatro estudos⁶⁻⁹ utilizando a técnica de aprendizagem automática de regressão multilinear (MLR) e um outro estudo utilizando as técnicas *Partial Least Squares* (PLS) e *Principal Component Analysis* (PCA)⁵. Este último estudo

utilizou 127 compostos, enquanto que para os restantes estudos o conjunto de treino consistiu entre 10 a 28 compostos. Em todos os estudos as bases de dados eram focadas para determinadas classes de compostos, cujas fórmulas gerais se encontram na Figura 1.2.

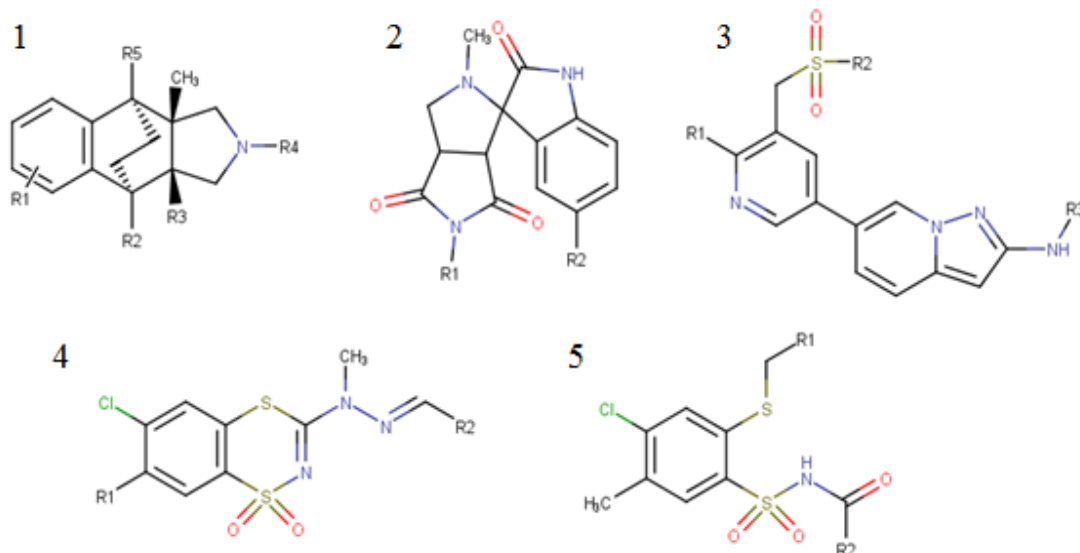


Figura 1.2 - Famílias dos compostos estudados em antigos estudos QSAR realizados para a linha celular HCT-116 (derivados de 1- benzoperhidroisindole⁵; 2- spiropiroledinil-oxindole⁶; 3- triazolopiridina⁷; 4- benzodithiazine-dioxido⁸; 5- Acilbenzenosulfonamides⁹)

1.1.2 Importância dos compostos naturais na descoberta de novos fármacos

Até ao fim de 2013, um total de cem produtos naturais ou seus derivados (PN-derivados) encontravam-se a ser avaliados nas diversas etapas dos ensaios clínicos, destes trinta e oito destinavam-se ao tratamento oncológico. Vinte e cinco PN-derivados foram aprovados em todo o mundo entre 2008 e 2013.¹⁰

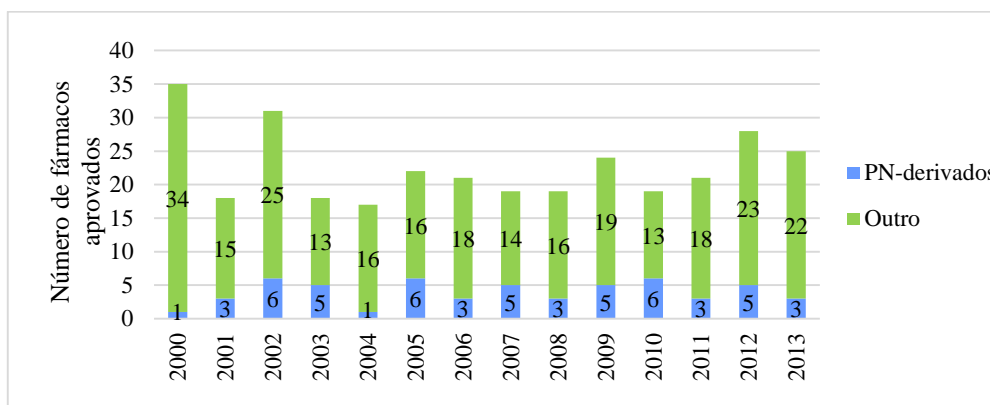


Figura 1.3 - Novos fármacos aprovados mundialmente entre 2000-2013¹⁰

Uma das abordagens nesta dissertação teve como foco compostos provenientes de bactérias isoladas de sedimentos marinhos. Este habitat apresenta um grande interesse devido ao facto de estar menos estudado e ter uma extensa diversidade. Até ao ano 2000 já se encontravam três fármacos de origem marinha comercializados [Cefalosporina C, Zidovudina (AZT) e Ziconotida].¹¹ Apesar da taxa de sucesso para a descoberta de compostos marinhos para o desenvolvimento de fármacos ser superior à dos compostos de síntese, tem-se verificado nos últimos anos um decréscimo no número de fármacos aprovados pelas organizações reguladoras o que consequentemente tem provocado o encerramento de vários programas de investigação nesta área.¹²⁻¹⁴

Na Figura 1.4 encontra-se representado o número de compostos marinhos descobertos até 2012 e a proporção entre compostos ativos e inativos, sendo de salientar que compostos considerados como inativos podem apenas não ter sido testados para uma determinada atividade biológica. O facto da taxa de descoberta de novos compostos ser muito superior à obtida para os compostos ativos demonstra bem a importância do desenvolvimento de novos métodos e ferramentas para o estudo da bioatividade destes compostos.¹⁵

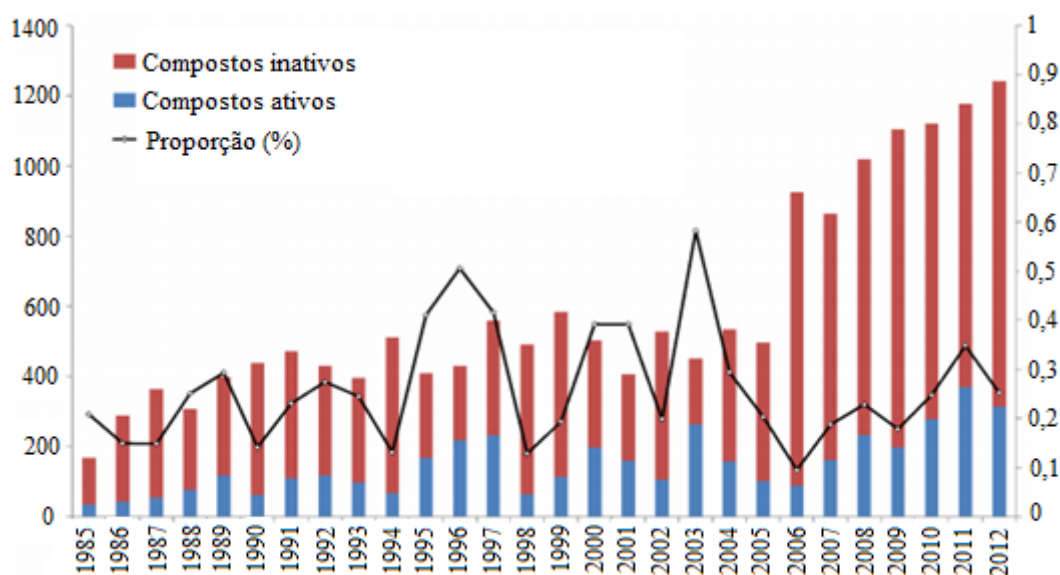


Figura 1.4 - Variação no número de produtos marinhos ao longo dos anos (1985-2012)¹⁵

1.2 Representação de estruturas moleculares

1.2.1 Formatos de representação das estruturas

Uma das primeiras necessidades para o uso de moléculas em ferramentas computacionais, como por exemplo, para o cálculo de descritores moleculares, está relacionada com a sua representação estrutural. Houve o desenvolvimento de formatos com este intuito, como por exemplo SMILES, SMARTS, e ficheiros MOL e SDF.

SMILES (*Simplified Molecular Input Line System*) tem como vantagem a representação da estrutura como uma linha de símbolos que é fácil de ler e de guardar em sistemas computacionais *e.g.* bases de dados.

SMARTS (*SMILES Arbitrary Target Specification*) uma linguagem de extensão dos SMILES que especifica padrões subestruturais tais como grupos funcionais (*e.g.* ácidos carboxílicos, amidas, álcoois e etc.) e grupos farmacóforos (*e.g.* centros aniônicos, centros cationicos, dadores de ligações de hidrogénio, aceitadores de ligações de hidrogénio e etc.) permitindo obter dados sobre a variabilidade entre as estruturas representadas muito utilizada em análises de similaridade.¹⁶

MDL (*Molecular Design Limited*) criou vários ficheiros para guardar estruturas através de tabelas de conectividade. Estas tabelas consistem numa linha geral e três blocos: um de átomos, outro de ligações e outro de propriedades. Dois destes ficheiros são o ficheiro MOL (*molecule file*) e o SDF (*structure data file*) onde no primeiro apenas guarda uma estrutura e o segundo guarda várias.

1.2.2 Descritores

Descritores podem ser qualquer propriedade que ajude na representação de uma dada molécula. Descritores estruturais, em que vários exemplos estão referidos na Tabela 1.1, são representações matemáticas obtidas através de uma transformação da informação estrutural de uma molécula com o objetivo de a codificar.

Para além de descritores estruturais, nesta dissertação também se utilizaram como descritores *fingerprints*, que normalmente são utilizados para estudos de similaridade, e descritores obtidos através de espetros unidimensionais de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de carbono e protão.

Tabela 1.1- Classificação de descritores¹⁷

Representação molecular	Descritor	Exemplos
0D	contagem de átomos, contagem de ligações, peso molecular, soma de propriedades atômicas	peso molecular, média do peso molecular, número de: átomos, átomos de hidrogénio, átomos de carbono, heteroátomos, ligações simples, ligações duplas, ligações triplas, ligações aromáticas, ligações rotáveis, anéis, soma de volume atômico van der Waals
1D	contagem de fragmentos	número de: C primários (sp ³), C secundários (sp ³), C terciários (sp ³), C quaternários (sp ³), C secundário num anel, C terciário num anel, C quaternário num anel, C aromático não substituído, C substituído, C primários (sp ²), C secundários (sp ²), C terciários (sp ²), C terminal (sp), C interno (sp), isocianatos, tiocianatos, isotiocianatos, amidas (alifáticas/aromáticas, primárias, secundárias, terciárias), aminas (alifáticas/aromáticas, primárias, secundárias, terciárias), grupos amino, grupos N em diazo, carbamatos, N em hidrazinas, nitrilos, iminas, enaminas, hidroxilaminas, oximas, grupos nitrosos, grupos nitro, imidas, grupos hidroxil, fenóis, álcoois (alifáticos/aromáticos, primários, secundários, terciários), éteres, ácidos carboxílicos, ésteres, tióis, tiocetonas, tioésteres, sulfóxidos, sulfonas, sulfatos, ácidos sulfúricos, sulfoamidas, número de átomos dadores de H, número de átomos aceitadores de H Índice de insaturação, fator hidrofílico, refratividade molar (Ghose Crippen), área polar de superfície por fragmento
2D	descritores topológicos	índice de Zagreb, índice de Wiener, índice de Balaban, índices de conectividade chi, índices de forma kappa, descritores BCUT, vetores de autocorrelação 2D
3D	descritores geométricos	eccentricidade molecular, raio de giro, parâmetros topológicos E-state, índice de Wiener 3D, índice de Balaban 3D, descritor MoRSE 3D, função de distribuição radial (RDF), descritores WHIM, descritores GETAWAY, vetores de autocorrelação 3D
3D	propriedades de superfícies	média do potencial electroestático, potencial hidrofóbico, potencial de ligações de hidrogénio
3D	propriedades grade	<i>Comparative Molecular Field Analysis (CoMFA)</i>
4D	coordenadas	coordenadas 3D + conformações

1.2.2.1 Descritores 1D e 2D

Descritores uni ou bidimensionais codificam informação relacionada com a molécula sem ter em conta a sua configuração e conformação.

Um exemplo é o índice do estado eletropológico (E-State S_i), que é um tipo de descritor que serve para representar átomos em moléculas que combina o estado eletrónico do átomo com a sua natureza topológica através da sua polaridade e acessibilidade estéreo dentro da molécula. O E-State é dado pela equação:

$$S_i = I_i + \sum_{j=1}^A \frac{I_i - I_j}{(d_{ij} + 1)^k} \quad (1)$$

onde I_i e I_j representam os estados intrínsecos dos átomos i e j respetivamente, que se baseiam na eletronegatividade Kier-Hall¹⁸ e é derivada da proporção desta eletronegatividade e o número de ligações σ ao átomo. O valor do estado intrínseco é grande para átomos eletronegativos, especialmente para átomos com poucas ligações, e é menor para átomos menos eletronegativos e para átomos com várias ligações σ . Para os restantes parâmetros tem-se d_{ij} que corresponde à distância entre os átomos i e j , e k que é um parâmetro variável para considerar a influência de outros átomos consoante a sua proximidade, normalmente é igual a 2.

Desta forma valores de S_i grandes e positivos normalmente estão relacionados com átomos muito eletronegativos, possuindo eletrões π e pares de eletrões não ligantes, ou são átomos terminais ou átomos que se situam no exterior da molécula, enquanto valores pequenos ou negativos dizem respeito a átomos que possuem apenas eletrões σ , que estão na parte interna da molécula com maior impedimento estéreo ou próximos de átomos eletronegativos, como se pode ver nos exemplos dados na Figura 1.5.

Os valores de E-State são calculados para todos os átomos exceto os de hidrogénio, contendo neles informação da sua ligação com os átomos de hidrogénio. Para se poder ter a informação apenas sobre os átomos de hidrogénio, relevante principalmente em moléculas com grupos muito polares, utiliza-se o índice do estado eletropológico do hidrogénio (H E-State). Enquanto os descritores E-State codificam a densidade eletrónica e a acessibilidade do átomo i (diferente do átomo de hidrogénio), os descritores H E-State codificam a capacidade que os átomos de hidrogénio ligados têm de interagir.¹⁹

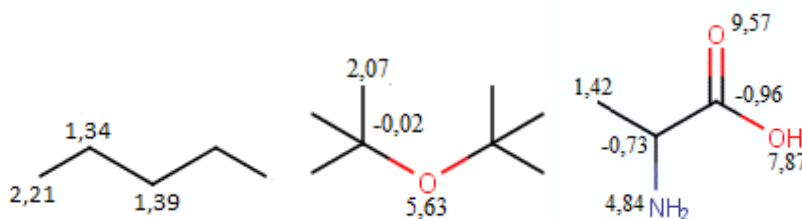


Figura 1.5 - Exemplos de valores de E-State para diferentes moléculas.²⁰

1.2.2.2 Descritores 3D

Descritores 3D codificam aspetos da estrutura tridimensional da molécula. Normalmente utilizados em estudos QSAR devido à relevância que normalmente acompanha a relação entre a conformação do ligando e a sua bioatividade.

Um exemplo de um descritor 3D é a função de distribuição radial (RDF) que dá a distribuição dos átomos num espaço tridimensional, cuja fórmula é:

$$g(r) = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N p_i p_j e^{-B(r-r_{ij})^2} \quad (2)$$

onde N é o número de átomos na molécula, p_i e p_j diz respeito a uma propriedade do átomo i e j , respetivamente, r_{ij} distância entre os átomos i e j e B é um parâmetro ajustável. Na Figura 1.6 encontra-se um exemplo de aplicação da RDF a compostos aromáticos com diferentes substituintes.¹⁷

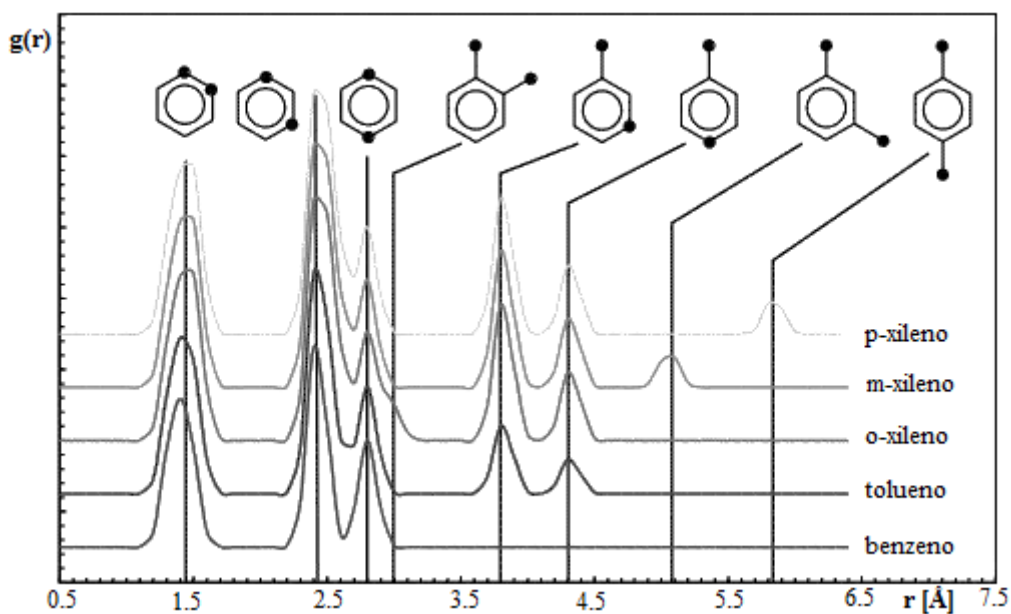


Figura 1.6 - Comparação de valores de RDF para compostos aromáticos (não foram considerados os hidrogénios)¹⁷

1.2.2.3 Fingerprints

Fingerprints são um tipo particular e complexo de descritores que representam as estruturas moleculares e propriedades das moléculas. Estes são normalmente codificados como cadeias de bits binários (vetores de bits binários) cujo objetivo é reproduzir, de formas diferentes, um padrão característico de uma dada molécula. Os *fingerprints* foram concebidos para explicar diferentes conjuntos de descritores moleculares²¹, fragmentos estruturais²², ou diferentes tipos de

farmacóforos²³. Os *fingerprints* de fragmentos binários em cada bit indicam a presença ou a ausência, com os valores de 1 e 0 respetivamente, de um determinado fragmento estrutural na molécula. Mais recentemente *fingerprints* têm sido utilizados com sucesso como descritores moleculares em metodologias computacionais para o desenvolvimento de novos candidatos a fármacos.^{24,25}

Existem fundamentalmente dois tipos de descritores *fingerprints*: *fingerprints* de fragmentos e *hashed fingerprints*. O primeiro consiste num mapa de bits onde normalmente cada bit corresponde a um fragmento específico. O segundo caso tem o objetivo de não utilizar tantos bits, registrando o padrão da molécula até um determinado número de átomo, não tendo de pré-definir os fragmentos. Neste trabalho utilizaram-se os conjuntos de *fingerprints* disponíveis no PaDEL²⁶ apresentados na Tabela 1.2, sendo que são *fingerprints* de fragmentos exceto os *fingerprints* provenientes do CDK. Sem ser para os casos em que se trata de *fingerprints* de contagem (*Count*) os *fingerprints* são binários.^{19,27,28}

Tabela 1.2 - Descritores calculados provenientes do software PaDEL

Nome da classe de descritores	Número de descritores
<i>CDK fingerprint</i>	1024
<i>CDK extended fingerprint</i>	1024
<i>Estate fingerprint</i>	79
<i>CDK graph only fingerprint</i>	1024
<i>MACCS fingerprint</i>	166
<i>PubChem fingerprint</i>	881
<i>Substructure fingerprint</i>	307
<i>Substructure fingerprint count</i>	307
<i>Klekota-Roth fingerprint</i>	4860
<i>Klekota-Roth fingerprint count</i>	4860
<i>2D atom pairs</i>	780
<i>2D atom pairs count</i>	780

1.2.2.4 Descritores de RMN

Técnicas de RMN têm sido utilizadas para vários propósitos, sendo uma das técnicas mais importantes para a elucidação de estruturas de novas moléculas. Os desvios químicos de RMN protão (¹H) e carbono (¹³C) têm sido utilizados como descritores moleculares para estudos QSAR quer com os espetros reais quer com a previsão dos espetros de RMN, desde desvios químicos de ¹³C como a sua combinação com valores obtidos dos espetros ¹H.²⁹⁻³³

Nesta dissertação os espetros utilizados para a construção de modelos foram adquiridos a partir de amostras de extratos, frações e compostos puros provenientes de actinobactérias isoladas de sedimentos marinhos do Arquipélago da Madeira.

1.3 *Virtual screening*

Virtual Screening trata-se da aplicação de técnicas computacionais para a procura de novos compostos-líderes que contenham melhor afinidade para um dado recetor alvo ou atividade biológica. Estes estudos também podem ser realizados sem saber qual a estrutura alvo ou em caso de os compostos de referência se ligarem a mais de um recetor. Tendo em conta o foco do *screening* pode-se separar este em duas categorias: *Structured-based* e *Ligand-based*.³⁴

1.3.1 *Structured-based*

Estudos com base na estrutura da proteína alvo são realizados através da previsão de estruturas e características físico-químicas do complexo formado entre esta e os ligandos, através do cálculo de energia de interação entre a estrutura da proteína alvo para todos os compostos testados. Para tal ser possível deve-se ter a estrutura da proteína, apesar de estudos já terem sido realizados utilizando estruturas semelhantes, sendo assim mais habitualmente empregue para proteínas solúveis (passíveis de cristalização). O cálculo de otimização da conformação ligando-recetor é pesado computacionalmente, não sendo o melhor método para o *screening* de uma grande quantidade de compostos. Dois exemplos de técnicas utilizadas neste tipo de estudo são o docking de ligandos e métodos de desenho de ligandos.^{16,34,35}

1.3.2 *Ligand-based*

Estudos que têm por base os ligandos utilizam uma pesquisa para encontrar compostos de interesse através da similaridade destes com ligandos cuja atividade é conhecida, assumindo que compostos com estruturas químicas semelhantes têm tendência a terem atividade biológica semelhante. Alguns dos métodos utilizados são estudo de farmacóforos, relação quantitativa estrutura-atividade (QSAR), que quando dizem respeito ao estudo de toxicidade tratam-se por QSTR (*Quantitative Structure-Toxicity Relationship*).¹⁶

Estes estudos utilizam técnicas de similaridade e de classificação de compostos. A primeira utiliza *fingerprints* derivados de estruturas moleculares (2D) e conformações (3D) e através do cálculo de simetria ordena os compostos de acordo com a sua diferença molecular. Técnicas de classificação de compostos são utilizadas para prever a partição de compostos dentro de classes (*e.g.* ativo ou inativo para uma certa bioatividade) e também fornecer uma ordem de probabilidade de um dado composto ser ativo. Estas técnicas de previsão podem ser divididas em métodos estatísticos (*e.g.* regressão multilinear) e métodos de aprendizagem automática, tais como *Support Vector Machine* (SVM), árvores de decisão, *random forest*, redes neuronais (NNs), *k-nearest neighbors* (kNN) entre outros.³⁴

1.4 Estudos QSAR

A premissa fundamental de estudos SAR é que compostos com estruturas semelhantes devem apresentar propriedades parecidas.³⁶

Estudos de relação atividade-estrutura são usados para a previsão de atividade biológica de novos compostos e para a compreensão dos seus mecanismos de ação, tendo uma grande gama de aplicabilidade em descoberta e desenvolvimento de possíveis novos fármacos.³⁷

Um estudo QSAR pode ser dividido em cinco etapas: construção da base de dados; cálculo de descritores; seleção de descritores; construção e otimização do modelo e a validação deste.¹⁷ Na Figura 1.7 encontra-se um esquema que sistematiza o trabalho realizado nesta dissertação.

Para a construção de um modelo QSAR com significado científico deve-se referir a qualidade de dados utilizados para a sua construção, providenciar os valores estatísticos do modelo e fornecer a gama de aplicabilidade do modelo.³⁷

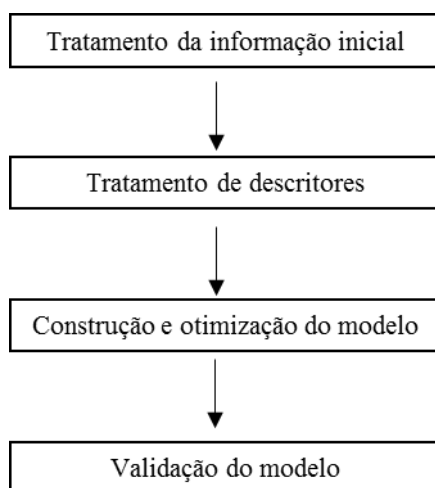


Figura 1.7 - Esquema de trabalho realizado nesta dissertação

1.4.1 Classificação

Os modelos de classificação utilizados nesta dissertação foram utilizados para prever se um composto seria ativo ou inativo. O resultado destes modelos é uma previsão da classe a que o composto deveria pertencer, comparando a previsão obtida para a classe com a classe experimental, verifica-se que os resultados podem ser divididos em 4 tipos: verdadeiros positivos (TP), compostos que são previstos corretamente como ativos; falsos positivos (FP), compostos que não são ativos mas o modelo prevê-os como se fossem; e analogamente para os compostos inativos: verdadeiros negativos (TN) e falsos negativos (FN).

Devem ser utilizados parâmetros estatísticos para a avaliação da capacidade de previsão do modelo de classificação. Dentro dos parâmetros utilizados nesta dissertação estão: a sensibilidade

(SE); a especificidade (SP); a previsibilidade (Q); e a média geométrica (G-mean), cujas fórmulas se encontram seguidamente.^{38,39}

$$SE = \frac{TP}{TP + FN} \quad (3)$$

$$SP = \frac{TN}{TN + FP} \quad (4)$$

$$Q = \frac{TP + TN}{TP + FN + TN + FP} \quad (5)$$

$$G - mean = \sqrt{SE \times SP} \quad (6)$$

1.4.2 Regressão

Nesta dissertação utilizou-se modelos de regressão para prever os valores de pIC₅₀ (equação 16) dos compostos contra a linha celular HCT-116. Para a avaliação destes modelos teve-se em conta três parâmetros: o quadrado do coeficiente de correlação de Pearson (R²), que compara a linearidade do valor previsto pelo modelo com o valor experimental obtido; a raiz quadrada do erro quadrático médio (RMSE), que fornece o erro entre a média dos valores de atividade experimentais e previstos e a média do erro absoluto (MAE), que dá informação acerca da média dos desvios obtidos na previsão da atividade. As fórmulas destes parâmetros encontram-se seguidamente.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y}_i)^2} \quad (7)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{N}} \quad (8)$$

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^N |y_i - \hat{y}_i|}{N} \quad (9)$$

onde y e \hat{y} são os valores de atividade experimental e prevista, respetivamente; \bar{y}_i é a média dos valores de atividade experimental e N é o número de moléculas.⁴⁰

Para além destes parâmetros também se teve em conta a percentagem de compostos com um valor de erro absoluto igual ou superior a 1 e com valor inferior a 1.

1.5 Técnicas de aprendizagem automática

1.5.1 Redes neuronais de Kohonen

Redes neuronais de Kohonen ou mapas auto-organizativos [*Self-Organized Maps (SOM)*] é um método de aprendizagem competitiva de um treino não supervisionado onde os dados são organizados em mapas 2D. Uma das primeiras aplicações desta técnica foram os estudos de similaridade⁴¹, sendo depois também utilizada para estudos QSAR onde já foi utilizada para passos intermediários como na seleção de descritores ou, como foi utilizado para esta dissertação, na partição dos conjuntos de treino e teste.³⁶ Recentemente, foi descrito o método de seleção de descritores não linear tratando as diretrizes provenientes do mapa de Kohonen como descritores de compostos.⁴²

O mapa pode aparecer em vários formatos, mas neste caso utilizou-se uma grelha bidimensional composta por neurónios. Cada um destes neurónios é um vetor $M_i = (m_{i_1}, m_{i_2}, \dots, m_{i_n})$ tal como os compostos utilizados para realizar o mapa $X_i = (x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_n})$, onde n representa o número de descritores utilizados.

Primeiramente o mapa é gerado utilizando pesos aleatórios para cada variável. Em cada treino seguinte compara-se cada composto X_i com todos os neurónios e determina-se o mais próximo pela distância euclidiana

$$d_{pq} = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_{p_i} - m_{q_i})^2} \quad (10)$$

O neurónio mais semelhante intitula-se o neurónio vencedor e é alterado tal como os seus vizinhos pela equação:

$$m_i(t+1) = m_i(t) + h_{ci}(t)[x(t) - m_i(t)] \quad (11)$$

onde t corresponde às interações do treino, m_i corresponde ao neurónio vencedor, x ao composto e h_{ci} é uma função que determina os neurónios vizinhos e como devem ser alterados.

Nesta dissertação o programa utilizado para a formação do mapa de Kohonen é através da aplicação JATOON⁴³, onde a correção dos pesos é realizada através da fórmula:

$$w_{i_n} = w_{i_v} + (x_{i_j} - w_{i_v}) \left(0,4995 \times \frac{epoch_{max} - epoch}{epoch_{max} - 1} + 0,0005 \right) \left(\frac{1-d}{dL+1} \right) \quad (12)$$

onde w_i é o peso do neurónio tendo n -novo e v -velho para o valor depois e antes da correção, x_{i_j} é o descritor j do composto i e d é a distância entre o neurónio vencedor e o neurónio que está a ser corrigido.⁴⁴

1.5.2 Redes neuronais artificiais

Nesta dissertação realizou-se uma comparação de diferentes técnicas de aprendizagem automática, introduzindo um tipo de rede neuronal ainda não mencionado, as redes neuronais *feed-forward*.

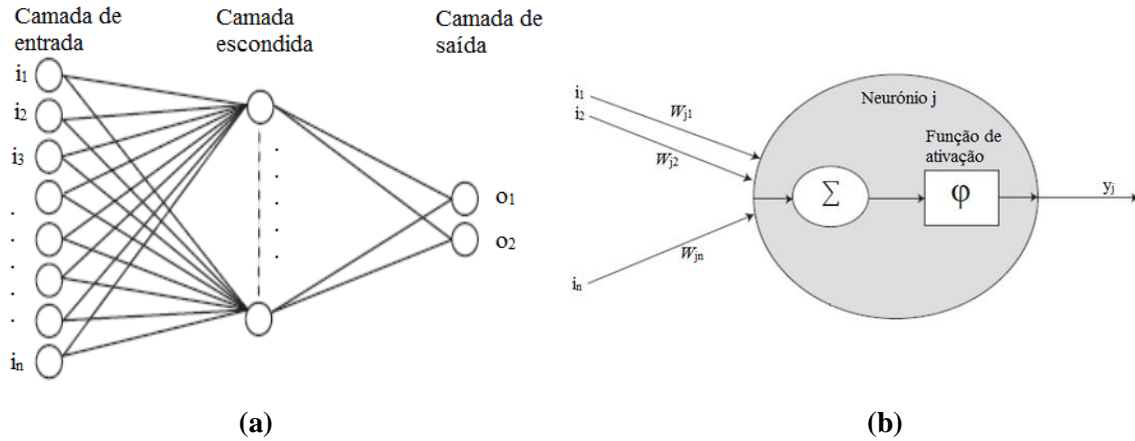


Figura 1.8 – Esquema de uma rede neuronal e representação de um dos seus neurónios⁴⁵

A arquitetura de uma rede neuronal *feed-forward* encontra-se representada na Figura 1.8(a), onde cada camada é constituída por neurónios, onde há o processamento da rede. Todos os neurónios de uma determinada camada estão ligados a todos os neurónios da camada adjacente, tendo para cada ligação entre dois neurónios um valor específico de peso (W), que vai ser multiplicado ao valor proveniente do neurónio prévio. O processamento realizado por cada neurónio, representado na Figura 1.8(b), trata-se do somatório dos valores mencionados anteriormente, que serão posteriormente transformados por uma função de ativação antes de saírem do neurónio. Há vários tipos de funções de ativação, sendo uma das mais utilizadas a sigmoideal, cuja fórmula se encontra a seguir.^{45,46}

$$\varphi = \frac{1}{1 + e^{-\beta x}} \quad (13)$$

O treino deste tipo de redes utiliza o algoritmo *back-propagation* (BPG) que usa os valores dos pesos, que no início assumem valores aleatórios, corrigindo-os ao longo do treino de forma a otimizar os resultados finais.

Uma das ferramentas utilizadas fornece a possibilidade de criar *convolutional layers*, onde as camadas são constituídas por mapas, e estes constituídos por pixéis (conjuntos de neurónios). Um exemplo de duas destas camadas encontra-se representado na Figura 1.9, onde a primeira camada é constituída por 4 mapas e a segunda por 2, que se encontram interligadas.

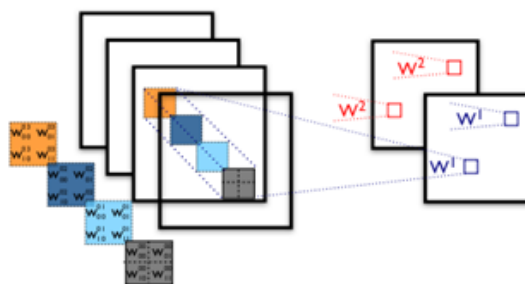


Figura 1.9 - Representação de duas *convolutional layers*⁴⁷

1.5.3 *Random Forest*

A árvore de decisão é uma técnica utilizada em QSAR que consegue lidar com um grande conjunto de dados, ignora os descritores irrelevantes, tem capacidade de prever para vários mecanismos de ação e é facilmente interpretado. A sua maior desvantagem é normalmente apresentar uma capacidade de previsão pequena e sofrer *overfitting*, ou seja, prevê bem para os compostos utilizados no seu treino mas não compostos novos. Esforços foram feitos para otimizar esta técnica, sendo um deles a combinação de métodos.⁴⁸

A combinação de métodos consiste em gerar vários classificadores e agregar os seus resultados. Dois dos métodos mais conhecidos são: *boosting* e *bagging*. A *Random Forest* foi proposto em 2001⁴⁹, e é uma variação de *bagging* com a adição de uma componente aleatória.⁵⁰

Random Forest consiste no conjunto de i árvores $\{T_1(X), \dots, T_i(X)\}$ onde $X=(x_1, \dots, x_n)$ representa o vetor com n dimensões para um composto. O resultado fornecido pelo modelo é dado por $\{Y_1=T_1(X), \dots, Y_i=T_i(X)\}$ onde Y_i é a previsão para um composto dada pela árvore i . Os resultados de todas as árvores são combinados para obter uma previsão final Y . A média para o caso de regressão e a classe maioritariamente dada para o caso de classificação.⁴⁸

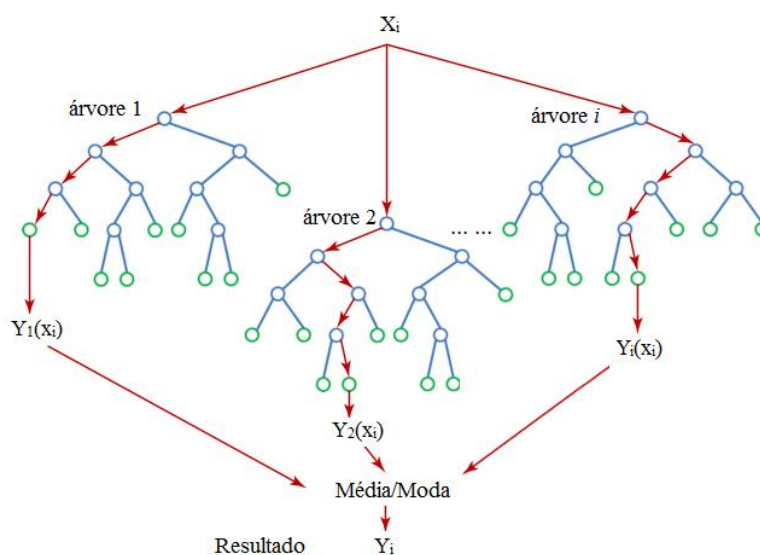


Figura 1.10 - Esquema de uma *random Forest*³⁴

O treino de uma *random Forest* passa pelas seguintes etapas:⁵⁰

1. Partição dos conjuntos iniciais

A informação inicial é colocada aleatoriamente em grupos (tantos como o número de árvores a realizar). Em cada um destes conjuntos treina-se a árvore com aproximadamente dois terços do total. O restante considera-se o conjunto *Out-Of-Bag* (OOB) e vai ser utilizado para validação cruzada OOB, que utiliza estas moléculas, que não participaram no treino do modelo, para determinar a previsibilidade deste.

2. Treino da árvore

Ao contrário de *bagging*, onde quando se chega a um nóculo escolhe-se o melhor entre todos os descritores, na *random Forest* em cada nóculo escolhe-se o melhor entre um determinado número de descritores (m_{try}).

3. Previsão do resultado.

Seria de esperar que a complexidade computacional de uma *random Forest* com 100 árvores seria 100 vezes maior do que a obtida para uma única árvore de decisão, mas tal não é verdade. Isto deve-se a 2 diferenças entre os seus logaritmos: o facto da *random Forest* usar apenas o número m_{try} de descritores em cada nóculo em vez de todos e o facto que para uma árvore de decisão ter uma previsibilidade aceitável é normal utilizar algum método de ajuste via validação cruzada que identifica os ramos da árvore de menor confiança e remove-os, uma revisão de cinco destes métodos foi realizada por John Mingers (referência 51).^{48,51}

A *random Forest* produz um modelo de maior complexidade de interpretação do que a árvore de decisão, por não dar a conhecer a relação entre descritor e atividade estudada. Porém a *random Forest* fornece dois parâmetros de avaliação: a importância de cada descritor e a proximidade intrínseca. A importância de cada descritor é calculada de duas formas: através da observação do aumento do erro para o conjunto OOB e através da soma do aumento da pureza para todos os nós e todas as árvores quando os valores deste descritor são alterados. Apesar da primeira implicar mais tempo de cálculo, é mais fiável que a segunda. A grande vantagem deste parâmetro é que pode ser utilizado para a redução do modelo, ou seja, usar os descritores mais importantes para construir modelos mais simples e mais fáceis de interpretar. A proximidade consta do princípio que observações semelhantes devam estar no mesmo nóculo terminal mais vezes do que observações diferentes, sendo o cálculo da proximidade entre duas moléculas a proporção de árvores no conjunto de árvores em que o par se encontra no mesmo nóculo terminal.^{48,50}

1.5.4 *k-Nearest Neighbor* (kNN)

kNN trata-se de um teste de similaridade estrutural entre os objetos do teste e do treino. Quanto menor a distância, mais semelhantes estes compostos vão ser. Esta distância é avaliada

por métricas de similaridade, sendo que uma das mais utilizadas é a distância Euclidiana, dada pela equação 10.

Esta técnica classifica os compostos baseados nos exemplos mais parecidos no espaço. Desta forma, a distância euclidiana, por exemplo, entre o vetor não classificado e cada vetor individual no conjunto de treino é calculada. Total de k número de vetores mais perto do vetor X são usados para determinar o *output* do vetor não classificado.³⁸

1.5.5 Support Vector Machine (SVM)

A forma de cálculo da SVM trata primeiro de projetar os compostos, representados por um vetor, num espaço multi-dimensionado onde se separam, idealmente de uma forma linear.

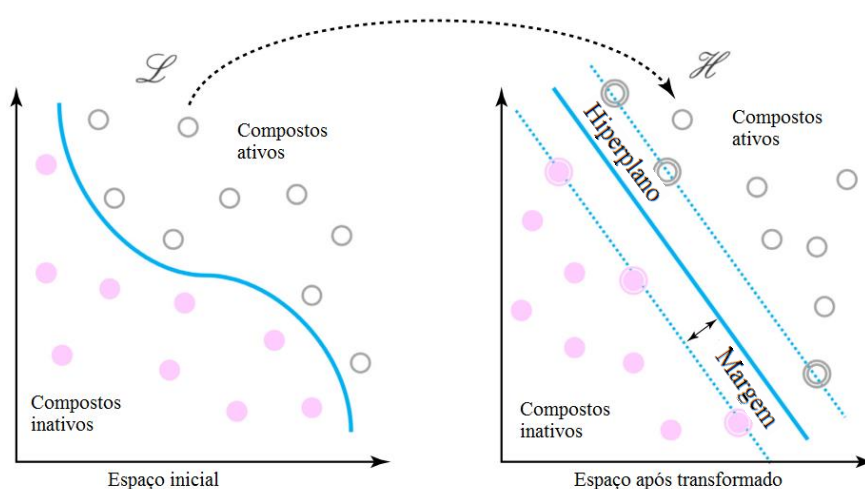


Figura 1.11 - Esquema de SVM para um exemplo de classificação³⁴

Esta separação é obtida usando uma função kernel, sendo as mais utilizadas as funções: linear, polinomial, sigmoideal e *radial basis (RBD)*. Constrói-se um modelo linear, dado pela equação:

$$f_{(x,\omega)} = \sum_{j=1}^m \omega_j g_j(x) + b \quad (14)$$

com $g_j(x)$ representando as transformações não lineares com $j=1,\dots,m$ e b o termo *bias*. A separação entre as classes utiliza um hiperplano que maximiza a margem entre elas. Caso não seja possível separar as classes aplica-se um hiperplano *soft margin* onde se mantêm o número de compostos não classificados o mínimo possível.^{34,52}

A SVM foi utilizada primeiro para casos de classificação podendo ser aplicada à regressão pelo acréscimo de uma função de perda ϵ insensível: $L_\epsilon(y, f_{(x,\omega)})$ que é igual a zero se o módulo de $y - f_{(x,\omega)}$ é inferior ou igual a ϵ , e igual a $|y - f_{(x,\omega)}| - \epsilon$ para os outros casos.

Em paralelo com a função de perda, ocorre o cálculo com o objetivo de reduzir a complexidade do modelo tendo:

$$\min \frac{1}{2} \|\omega\|^2 + C \sum_{i=1}^n (\xi_i + \xi_i^*) \text{ de forma que } \begin{cases} y_i - f(x_i, \omega) \leq \epsilon + \xi_i^* \\ f(x_i, \omega) - y_i \leq \epsilon + \xi_i \\ \xi_i, \xi_i^* \geq 0 \quad i = 1, \dots, n \end{cases} \quad (15)$$

com ξ_i, ξ_i^* sendo variáveis que medem o desvio de *outliers* da zona ϵ -insensível. C é o parâmetro da capacidade (*cost*).

A capacidade de previsão da SVM depende da otimização dos seus parâmetros, principalmente do valor de *cost* que controla o ajuste entre maximizar a margem e minimizar o erro do treino.⁵²

Capítulo 2 - METODOLOGIA

2. Metodologia

2.1 Modelo A

2.1.1 Construção da base de dados

Para a realização da base de dados foram extraídos todos os compostos orgânicos que continham valores de IC₅₀ (medida da concentração de inibição de metade da população) contra a linha celular HCT-116 nas bases de dados ChemBL⁵³, ZINC⁵⁴ e Antimarin⁵⁵. Na primeira extraíram-se 9866 compostos, na ZINC 8953 compostos, e na Antimarin 31 compostos. A base de dados ZINC apresenta como principal vantagem a possibilidade de compra de compostos, que ainda não foram testados, para possível validação do modelo, a Antimarin é a junção da base dados AntiBase (produtos naturais microbianos terrestres e marinhos) com a MarinLit (produtos naturais marinhos), tendo sido descontinuada em 2013. Obteve-se 18850 compostos, removendo estruturas com peso molecular superior a 1500Da. De forma a completar e atualizar a base de dados, fez-se uma pesquisa no Web of Science desde Maio 2013 a 12 Outubro 2015, de onde foram recolhidas 668 estruturas, que foram construídas no Marvin Sketch (versão:15.9.14)⁵⁶.

Os SMILES das estruturas foram uniformizadas no Standardizer de JChem (versão:15.9.14)⁵⁷ com os parâmetros: adicionar hidrogénios, mesomerizar, tautomerizar, neutralizar, remover sais e aromatizar.

Para casos com valores de IC₅₀ diferentes para um determinado composto, teve-se em conta o valor mais recente descrito na bibliografia. Utilizando o software Mona⁵⁸⁻⁶⁰, foram retirados os restantes duplicados, obtendo-se uma base de dados com 8958 compostos. As correções adicionais foram realizadas ao decorrer da seleção de descritores e encontram-se descritas ao longo do texto.

Converteu-se o valor de IC₅₀ em M para pIC₅₀, seguindo a equação:

$$pIC_{50} = -\log_{10}(IC_{50}) \quad (16)$$

2.1.2 Cálculo de descritores

Utilizando o software PaDEL (versão 2.21)²⁶ calculou-se os descritores 1D, 2D, 3D e *fingerprints*, tendo para o cálculo dos descritores 3D utilizado as estruturas 3D produzidas pelo programa CORINA⁶¹.

Os descritores 1D, 2D e alguns *fingerprints* não foram calculados para três estruturas, possivelmente pela sua complexidade. Houve sete compostos onde não foi possível calcular o volume de Van der Waals, tendo sido descartado o descritor.

Para os descritores 3D, o programa CORINA não conseguiu calcular a estrutura 3D de um número significativo de compostos. De modo a tentar resolver este problema foi feito o cálculo

dos descritores 3D usando as duas possibilidades do conversor de 3D dado pelo PaDEL, *MM2 forcefield* e *MMFF94 forcefield*. Contudo o problema não foi resolvido e obtiveram-se mais compostos onde não foi possível calcular os descritores 3D. A base de dados ficou então reduzida a 7447 compostos.

2.1.3 Partição dos conjuntos de treino e de teste

Para a partição da base de dados em conjunto de treino e conjunto de teste, foram efetuados dois modos de separação distintos: um aleatório e outro usando o mapa de Kohonen para a seleção dos compostos.

Para construir o conjunto não aleatório, usando o mapa de Kohonen⁴³, utilizaram-se os *fingerprints Substructure* para codificar a diversidade estrutural do conjunto de dados, e foram consideradas 3 classes com base na bioatividade apresentada contra a linha celular HCT-116, podendo classificar os compostos como: ativos **A** (valores de IC_{50} inferiores de $10 \mu M^{16}$), moderadamente ativos **B** (valores de IC_{50} entre $10 \mu M$ e $50 \mu M$) e inativos **C** (valores de IC_{50} superiores a $50 \mu M$), com 4552, 1726 e 1061 compostos respetivamente. Desta forma, 108 compostos foram descartados devido à sua redundância, tendo valores de IC_{50} superiores a um valor inferior a $10 \mu M$, não se podendo tirar conclusões sobre a sua bioatividade. Casos sem valor específico de IC_{50} , mas cuja relação é superior a $10 \mu M$ foram colocados na categoria C.

Após a remoção de descritores desnecessários e a normalização dos dados usando a ferramenta Weka (versão 3.7)^{62,63}, os dados foram utilizados para construir um mapa de Kohonen, usando a aplicação JATOON⁴³. O melhor mapa representado na Figura 3.1, página 31 foi obtido numa rede de tamanho 15, com 50 *epochs* e com um *learning span* de 5 tendo um valor de *clustering factor* de 3,21, originou a seleção de 1464 compostos para o conjunto de teste e 5875 compostos para o conjunto de treino.

A partição aleatória foi realizada no Mona com uma separação de 20% obtendo assim 1466 e 5873 compostos para o conjunto de teste e de treino, respetivamente.

Utilizando o programa R (versão 3.7), com a ferramenta *random Forest* comparou-se o modo aleatório com o modo SOM, utilizando os *fingerprints Substructure* tendo os melhores modelos obtidos com os valores de m_{try} de 112 e 120 respetivamente. Também se utilizou o conjunto de treino resultante da partição com o SOM depois da remoção de descritores com uma correlação superior de 99% utilizando um dos filtros do Weka, para comprovar que quando se utiliza a *random Forest* não há necessidade de haver seleção de descritores, neste caso o melhor modelo teve-se com um m_{try} de 44. Os resultados da validação interna obtida com o conjunto de treino encontram-se na Tabela 3.1, página 31.

2.1.4 Seleção de descritores

De forma a selecionar os melhores descritores removendo a informação redundante, correu-se o filtro `weka.filters.unsupervised.attribute.RemoveUseless` do programa Weka, que também tinha sido utilizado no ponto anterior. De seguida, foram selecionados os descritores com o classificador `weka.classifiers.meta.AttributeSelectedClassifier` e a formação do modelo com a técnica de aprendizagem automática *k*NN com os parâmetros $K=10$ com distância $=1/d$, sendo d a distância Euclidiana. Utilizou-se vários métodos de pesquisa: *BestFirst* (BF); *LinearForwardSelection* (LFS) alterando o número de descritores usados entre 10, 30, 50 e 80; *GreedyStepwise* pesquisando *backwards* (GSWb); *PSOsearch* com diferentes valores para os pesos: individuais, inertia e social (exemplo: PSO334: *PSOsearch* com 0,33 para o peso individual e de inertia e 0,34 para o peso social).

O melhor resultado da validação cruzada com 10 *folds* para cada um dos conjuntos de descritores e *fingerprints* utilizados e as suas condições encontram-se na Tabela 3.2, página 32.

2.1.5 Otimização do modelo (A.1)

Para os conjuntos de descritores selecionados no passo anterior (descritores moleculares 1D2D e 1D2D3D e os *fingerprints* CDK e PubChem) foram otimizados os modelos de previsão tendo em conta o RMSE obtido em validação interna. Tentou-se melhorar os resultados alterando o número de interações que se realizavam com o *PSOsearch*, utilizando a *SVM LibSVM* do programa Weka com o tipo epsilon-SVR alterando o valor de *cost* e utilizando também a *randomForest* do programa R com 500 árvores. Os parâmetros de avaliação para os melhores modelos de cada um dos casos juntamente com as suas condições encontram-se na Tabela 3.3, página 33.

2.1.6 Avaliação de previsão do modelo por classes

De forma a esclarecer quais os intervalos de IC_{50} que o modelo estava a prever melhor ou pior dividiu-se o conjunto de treino em 5 classes descritas na Tabela 2.1. Para cada uma destas classes, utilizando o melhor resultado do ponto anterior para o conjunto de treino, calculou-se a média dos valores previstos e dos valores experimentais de pIC_{50} e a diferença entre estes dois valores para determinar se havia classes onde o modelo era mais aplicável do que outras. Os resultados encontram-se na Tabela 3.4, página 33.

Tabela 2.1 - Classes usadas para avaliar capacidade de previsão do modelo A.1 do conjunto de treino

Classe	IC ₅₀ (μM)	Nº de compostos	pIC ₅₀ (M _{exp})
A	<1	1856	7,129
B	1-5	1016	5,634
C	5-10	569	5,157
D	10-50	1407	4,710
E	≥50	928	3,888

pIC₅₀ (M_{exp}) é o valor médio de pIC₅₀ experimental dos compostos

2.1.7 Nova abordagem - Classificação/Regressão (Modelo A.2)

Compostos com IC₅₀ ≥ 10 μM mas sem valor exato, podem estar a piorar a capacidade de previsão do modelo. Tendo em conta este facto e a avaliação realizada no passo anterior foi realizada uma nova abordagem intitulada A.2, que consta de primeiro um modelo de classificação e depois um modelo de previsão do valor de pIC₅₀ para os ativos.

Continuou-se a usar ambos conjuntos de descritores 2D e 2D3D e os *fingerprints* CDK e PubChem para a construção dos modelos.

Para o modelo de classificação considerou-se os compostos com IC₅₀ < 10 μM¹⁶ como ativos e os restantes como inativos, tendo para o conjunto de treino 3441 compostos ativos e 2434 inativos.

De forma a tentar encontrar fragmentos de interesse para a classificação de compostos ativos e inativos, utilizou-se os SMARTS dos *fingerprints* e tentou-se encontrar uma relação entre a presença ou ausência destes e a sua classificação. Os resultados encontram-se na secção 3.1.5.2.

Para a segunda parte desta abordagem, o modelo de regressão, treinaram-se os modelos usando os 3441 compostos ativos e os seus valores de pIC₅₀.

Sendo que a *random Forest* tinha sido a melhor ferramenta na abordagem anterior foi esta a técnica de aprendizagem automática utilizada para a construção destes novos modelos. Os resultados de validação interna com o conjunto de treino e de validação externa utilizando o conjunto de teste encontram-se na Tabela 3.5, página 34 e na Tabela 3.10, página 38 para o modelo de classificação e para o de regressão respetivamente. Sendo que esta ferramenta fornece informação sobre os descritores mais relevantes.

Para tentar seleccionar o número necessário de descritores, e constatar se o modelo perde capacidade de previsão reduzindo o número de descritores, realizam-se modelos com a *random Forest* com os 75, 100 e 150 descritores mais relevantes fornecidos nos resultados anteriores, foi também utilizado o conjunto de descritores que deram melhores resultados provenientes da seleção feita através do Weka para comparação. Os resultados da seleção de descritores

encontram-se na Tabela 3.8, página 37 e na Tabela 3.12, página 40 para os modelos de classificação e de regressão, respetivamente.

Cinco compostos recentemente publicados com um valor de IC_{50} para a linha celular HCT-116 foram utilizados como um segundo conjunto de validação externa, para o melhor modelo quer para a classificação quer para a regressão. As estruturas destes compostos encontram-se na Figura 2.1, e as suas previsões encontram-se na Tabela 3.9, página 37.

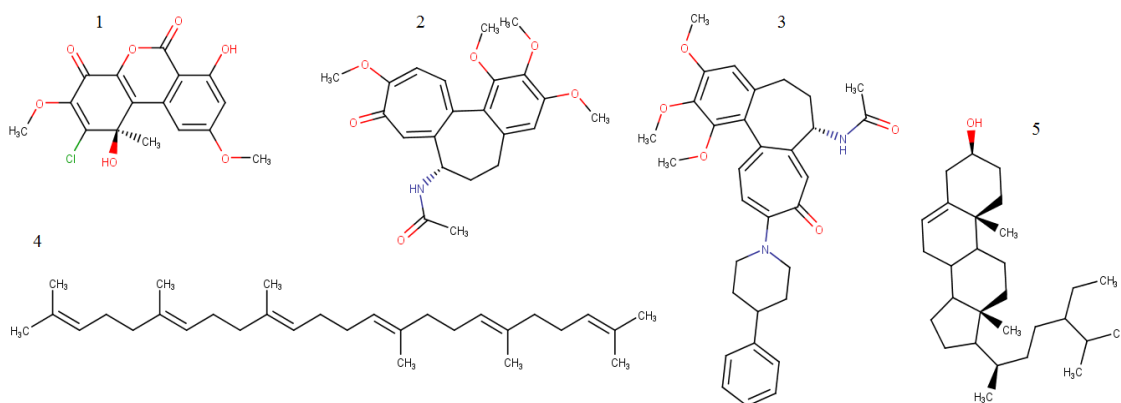


Figura 2.1 - Estruturas de composto do segundo conjunto de validação para o Modelo A (1 corresponde a TMC-264⁶⁴; 2 e 3 colchicina e derivado⁶⁵; 4 e 5 escaleno e β -sitosterol⁶⁶)

2.1.8 Comparação de outras técnicas

Com os conjuntos dos melhores resultados após a seleção do número de descritores para a classificação e para a regressão, comparou-se os resultados da *random Forest* no passo anterior com os obtidos através de várias técnicas de aprendizagem automática disponíveis no programa Weka. A SVM *LibSVM* com os mesmos parâmetros descritos na secção 2.1.5. e duas técnicas de redes neuronais artificiais: *Multilayer Perceptron* (MLP) e *Artificial Neural Networks* (ANN). A primeira encontra-se disponível no pacote proveniente do Weka, enquanto a segunda tem de ser instalada à parte. Para o caso da MLP (`weka.classifiers.functions.MultilayerPerceptron`) alterou-se o número de neurónios e utilizou-se os valores de 0,003 e de 0,002 para a *learning rate* e para o *momentum*, respetivamente, tendo o melhor modelo obtido com 9 neurónios. No caso da técnica ANN (`weka.classifiers.functions.NeuralNetwork`) usou-se o valor de 0,001 para os parâmetros *inputLayerDropoutRate* e *hiddenLayerParams*, e variou-se o número de neurónios entre 20, 50 e 100, tendo que para ambos os conjuntos o melhor resultado foi obtido com 100 neurónios. De forma a tentar otimizar os modelos ANN utilizou-se *convolutional layers* alterando os valores para a largura e a altura do fragmento (*patch*) entre 5, 10 e 15. Os resultados desta secção encontram-se na Tabela 3.14 e Tabela 3.15 nas páginas 41 e 42.

2.2 Modelo B

2.2.1 Preâmbulo

A segunda abordagem utilizou informação de extratos, frações e compostos puros provenientes de actinobactérias isoladas de sedimentos marinhos do Arquipélago da Madeira no âmbito do projeto “Tesouros Oceânicos – Sedimentos oceânicos do arquipélago da Madeira: nova fonte de compostos inovativos e bioactivos” (ref-PTDC/QUI-QUI/119116/2010). Após o tratamento das bactérias e de uma extração líquido-líquido foi obtido o extrato. Este foi separado, através de cromatografia Flash fase normal com um gradiente de eluentes, em oito ou nove frações. Compostos puros foram isolados através de HPLC (*High Performance Liquid Chromatography*) fase reversa, com o aparelho da marca Dionex, modelo Ultimate 3000, detetor de fotodíodos (*Diode array detector*, DAD) com uma coluna semi-preparativa, 100 Å, da marca Phenomenex, modelo luna (250 × 100 mm, 5 µm). No Anexo 7.8 encontra-se a descrição da espécie para cada actinobactéria isolada utilizada para a base de dados.

Ensaio biológico contra a linha celular HCT-116 foram realizados pela aluna de doutoramento Sofia Gomes na Faculdade de Farmácia da Universidade de Lisboa.

Espetros de RMN foram adquiridos usando um espectrómetro Bruker, modelo ARX 400 (400 MHz para ¹H e 100 MHz para ¹³C), onde os desvios químicos (δ) foram expressos em partes por milhão (ppm), usando o tetrametilsilano (TMS) como referência interna, diclorometano deuterado como solvente

2.2.2 Construção da base de dados

A segunda abordagem começou também pela construção da base de dados utilizando os extratos, frações e compostos puros mencionados na secção 2.2.1 que tivessem sido testados contra a linha celular HCT-116. A base de dados constou assim de 111 amostras: 50 de extratos, 55 de frações e 5 de compostos puros, correspondendo a 34 amostras ativas e 76 inativas.

2.2.3 Partição do conjunto de treino e do conjunto de teste

A partição do conjunto de treino e teste foi realizada aleatoriamente com uma separação de aproximadamente 70% para o conjunto de treino (74 amostras), e 30% para o conjunto de teste onde se colocaram todos os compostos puros.

2.2.4 Obtenção dos descritores

Utilizou-se o programa ACD/NMR Processor (versão 12.01)⁶⁷ para a aquisição de descritores através dos espectros 1D, este programa no início desta dissertação era de acesso livre para o uso académico apesar de agora esta opção já não estar disponível. Os valores de desvio químico em que a informação foi retirada foi: 0-200 ppm e 0-12 ppm, para os espectros de ¹³C e

^1H , respetivamente. Diferentes dimensões de intervalos foram consideradas para os diferentes espetros. Tendo para os espetros de ^{13}C considerado os intervalos de 1,5 ppm, 1 ppm e 0,5 ppm e para os espetros de ^1H os intervalos de 0,2 ppm, 0,1 ppm e 0,05 ppm.

2.2.5 Obtenção do modelo e sua validação

Para a escolha do melhor modelo continuou-se a usar a técnica de aprendizagem automática *random Forest* com 500 árvores e um *seed* de 6, utilizando o parâmetro m_{try} para otimização do modelo. Para além dos modelos utilizando individualmente os descritores produzidos com os espetros de ^1H e ^{13}C , modelos também foram realizados combinando os dados dos dois espetros.

A validação externa deste modelo foi realizada a partir do conjunto de teste. Os resultados constam nas Tabelas 3.16; 3.17 e 3.18, páginas 42 e 43 para os modelos realizados com os descritores provenientes dos espetros de ^1H , ^{13}C e a combinação dos dois, respetivamente.

De forma a tentar otimizar o modelo, e visto que havia um desequilíbrio do número de amostras nas diferentes classes, forçou-se a *random Forest* a dar peso igual as duas classes, ativo e inativo. Cujas condições e resultados se encontram na Tabela 3.19, página 44.

Visto o objetivo da construção do modelo é a sua possível aplicação como *screening virtual* para outras amostras obtidas no grupo de investigação, procedeu-se à previsão da atividade de cinco compostos puros (dois isolados da estirpe *Salinispora arenicola* PTM-99 pelo aluno de mestrado em Bioquímica, Fredilson Melo, e três da estirpe *Streptomyces aculeolatus* PTM-420 isolados pela aluna de mestrado em Química Bioorgânica, Marisa Paulino) que ainda não tinham sido testados na linha celular HCT-116. A estrutura destes cinco compostos não se encontra ainda elucidada, contudo têm perfil da mesma família de macrólidos. As previsões de classificação e os resultados obtidos destes compostos encontram-se na secção 3.2.5, página 44.

Capítulo 3 - RESULTADOS

3. Resultados

3.1 Modelo A

3.1.1 Partição do conjunto de treino e de teste

Na Figura 3.1 encontra-se a representação do melhor mapa de Kohonen obtido para a partição entre os conjuntos de treino e de teste.

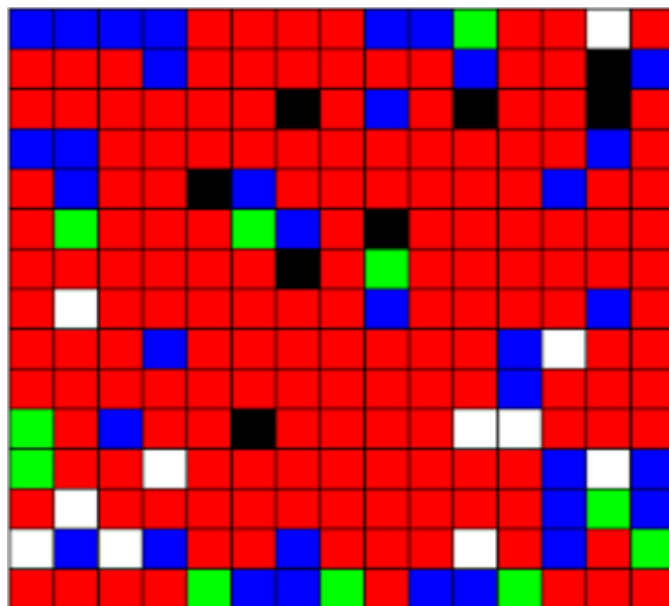


Figura 3.1- Resultado do mapa de rede neuronal. Vermelho, Azul, Verde, Preto e Branco representam as classes A ($IC_{50} < 10 \mu M$), B ($10 \mu M \leq IC_{50} < 50 \mu M$), C ($IC_{50} \geq 50 \mu M$), classes sobrepostas e neurónios sem classe, respetivamente

Na Tabela 3.1 encontram-se os resultados da validação interna com o conjunto de treino da *random Forest* para os diferentes tipos de partição com os parâmetros otimizados para 500 árvores e m_{try} de 112, 120 e 44 para o conjunto aleatório, SOM e SOM após a remoção dos descritores irrelevantes, respetivamente, obtidos com os *fingerprints Substructure*.

Tabela 3.1 - Resultados obtido da validação interna do conjunto de treino utilizando a *random Forest* para os diferentes casos de partição obtidos com os *fingerprints Substructure*.

Partição	R ²	RMSE	MAE	%EA \geq 1	%EA<1
Aleatória	0,676	0,759	0,545	15	85
SOM	0,676	0,756	0,541	15	85
SOM sem irrelevantes	0,677	0,756	0,544	15	85

3.1.2 Seleção de descritores

Na Tabela 3.2 encontram-se os melhores resultados obtidos em validação cruzada 10-fold utilizando o conjunto de descritores e *fingerprints* selecionados e através do KNN do Weka de acordo com o ponto 2.1.4. Entre parênteses foi registado o modo de pesquisa de descritores utilizado.

Tabela 3.2 – Resultados obtidos da validação interna do conjunto de treino para a seleção de descritores juntamente com o número de descritores selecionados para cada conjunto

	R ²	RMSE	MAE	%EA ≥1	%EA <1	#Desc
1D2D (PSO334)	0,703	0,737	0,493	13	87	367
1D2D3D (PSO343)	0,705	0,733	0,493	13	87	393
Estate (GSWb)	0,174	1,208	0,927	38	62	13
MACCS (PSO343)	0,512	0,937	0,665	22	78	34
Substructure FPs (PSO343)	0,372	1,055	0,797	30	70	63
SubstructureCount FPs (BF)	0,509	0,942	0,671	23	77	63
AtomPairs2D (PSO343)	0,442	1,007	0,702	23	77	120
AtomPairs2DCount (PSO433)	0,589	0,866	0,589	18	82	174
PubChem FPs (PSO433)	0,696	0,742	0,500	14	86	252
CDK FPs (PSO343)	0,725	0,707	0,474	12	88	283
ExtendedCDK FPs (PSO343)	0,718	0,717	0,476	13	87	257
GraphOnly FPs (PSO343)	0,644	0,807	0,546	16	84	179
KlekotaRoth FPs (PSO343)	0,604	0,847	0,591	19	81	192
KlekotaRothCount FPs (PSO334)	0,618	0,832	0,579	18	82	160

BF- BestFirst; GSWb- GreedyStepwise backwards; PSO(individual, inertia, social)

3.1.3 Otimização do modelo (A.1)

Na Tabela 3.3 estão descritos as condições de otimização para as três técnicas de aprendizagem automática e os resultados obtidos por estas para os descritores moleculares 1D2D, 1D2D3D e os *fingerprints* CDK e PubChem.

Tabela 3.3 - Resultados para o conjunto de treino para a otimização do modelo dos melhores conjuntos descritores

	R²	RMSE	MAE	%EA_{≥1}	%EA_{<1}
1D2D					
<i>randomForest m_{try}489</i>	0,730	0,708	0,523	13	87
<i>meta_IBK_PSO334 i40</i>	0,705	0,734	0,491	13	87
<i>meta_LibSVM_c12500</i>	0,647	0,800	0,566	16	84
1D2D3D					
<i>randomForest m_{try}658</i>	0,729	0,713	0,525	13	87
<i>meta_IBK_PSO343 i40</i>	0,715	0,720	0,483	13	87
<i>meta_LibSVM_c13500</i>	0,615	0,842	0,572	17	83
PubChem FPs					
<i>randomForest m_{try}314</i>	0,751	0,664	0,466	12	88
<i>meta_IBK_PSO433 i20</i>	0,696	0,742	0,500	14	86
<i>meta_LibSVM_c500</i>	0,677	0,762	0,535	15	85
CDK FPs					
<i>randomForest m_{try}301</i>	0,753	0,665	0,471	11	89
<i>meta_IBK_PSO343 i20</i>	0,725	0,707	0,474	12	88
<i>meta_LibSVM_c50</i>	0,744	0,674	0,469	12	88

3.1.4 Avaliação da previsão do modelo por classes

Na Tabela 3.4 encontram-se os valores das médias de pIC₅₀ para o conjunto experimental e o previsto para as classes separadas do conjunto de treino obtidos utilizando a técnica *random Forest* para os *fingerprints* PubChem.

Tabela 3.4 - Avaliação das classes para a previsão do modelo A.1 com os resultados obtidos utilizando a técnica *random Forest* para os *fingerprints* PubChem.

Classe	IC ₅₀ (μM)	Nº de compostos	pIC ₅₀ (M _{exp})	pIC ₅₀ (M _{prev})	MAE (M _{prev})	Diferença entre pIC ₅₀
A	<1	1856	7,129	6,720	0,606	0,409
B	1-5	1016	5,634	5,543	0,359	0,091
C	5-10	569	5,157	5,221	0,278	0,063
D	10-50	1506	4,710	4,997	0,370	0,287
E	≥50	928	3,888	4,445	0,574	0,556

pIC₅₀ (M_{exp}) e pIC₅₀ (M_{prev}) são os valores médios de pIC₅₀ experimental e previsto dos compostos; A diferença entre pIC₅₀ diz respeito à diferença entre pIC₅₀ (M_{exp}) e pIC₅₀ (M_{prev})

3.1.5 Modelo de classificação (A.2)

Na Tabela 3.5 encontra-se a matriz resultante do melhor modelo para cada um dos conjuntos de descritores usados e os parâmetros de avaliação da classificação do modelo calculados pelas fórmulas descritas na secção 1.4.1. Todos estes resultados foram obtidos através da *random Forest* com 500 árvores, com um m_{ny} de 525, 623, 303 e 332 para os conjuntos 1D2D, 1D2D3D, CDK FPs e PubChem FPs, respetivamente.

Tabela 3.5 – Resultados obtidos com a *random Forest* para os modelos de classificação A.2

		TP	TN	FP	FN	SE	SP	Q	G-mean
1D2D	treino	3016	1873	561	425	0,876	0,770	0,832	0,821
	teste	984	310	83	87	0,919	0,789	0,884	0,851
1D2D3D	treino	3012	1871	563	429	0,875	0,769	0,831	0,820
	teste	977	310	83	94	0,912	0,789	0,879	0,848
CDK FPs	treino	2975	1884	550	466	0,865	0,774	0,827	0,818
	teste	979	313	80	92	0,914	0,796	0,882	0,853
PubChem FPs	treino	2979	1887	547	462	0,866	0,775	0,828	0,819
	teste	967	315	78	104	0,903	0,802	0,876	0,851

3.1.5.1 Descritores relevantes

Na Tabela 3.6 constam os dez descritores com melhores resultados consoante o aumento do erro para cada variável que a *random Forest* fornece.

Tabela 3.6 - Descritores mais relevantes do modelo de classificação obtido para o conjunto de descritores estruturais 1D2D

Descritor	%AumentoMSE	Descrição
nT12Ring	18,957	Número de anéis com 12 membros (inclui anéis geminados)
JGI3	14,236	Índex da carga topológica média de ordem 3
nwHBa	14,126	Contagem dos E-State para aceptadores fracos de ligação de H
SdssC	13,194	Soma dos átomos tipo E-State: =C<
minHCsatu	13,027	Mínimo de átomos tipo H E-State: H em Csp ³ ligado a um C saturado
BCUTp-1h	12,332	<i>Nlow highest polarizability weighted BCUTS</i>
ETA-dEpsilon_D	11,645	Medição da contribuição de átomos doadores de ligações de H
maxHBint3	11,609	<i>Max E-State descriptors of strength for potential H bond path lenght 3</i>
MATS4s	11,090	<i>Moran autocorrelation - lag 4 / weighted by I-state</i>
GATS8s	10,804	<i>Geary autocorrelation - lag 8 / weighted by I-state</i>

3.1.5.2 Fragmentos de interesse

Na Tabela 3.7 encontram-se a correlação entre os fragmentos representados nas Figuras 3.2 e 3.3 e o número de compostos ativos e inativos para cada um dos casos.

Tabela 3.7 – Fragmentos relevantes para a classificação e a sua dimensão existente na base de dados

Fragmento	Número de compostos		Fragmento	Ativos	Inativos	Fragmento	Ativos	Inativos
	Ativos	Inativos						
I1	0	4	A4	11	0	A11	21	0
I2	0	27	A5	12	0	A12	27	0
I3	5	58	A6	14	0	A13	29	0
A1	8	0	A7	15	0	A14	65	0
A2	8	0	A8	18	0	A15	92	0
A3	8	0	A9	19	4	A16	103	2
			A10	20	0			

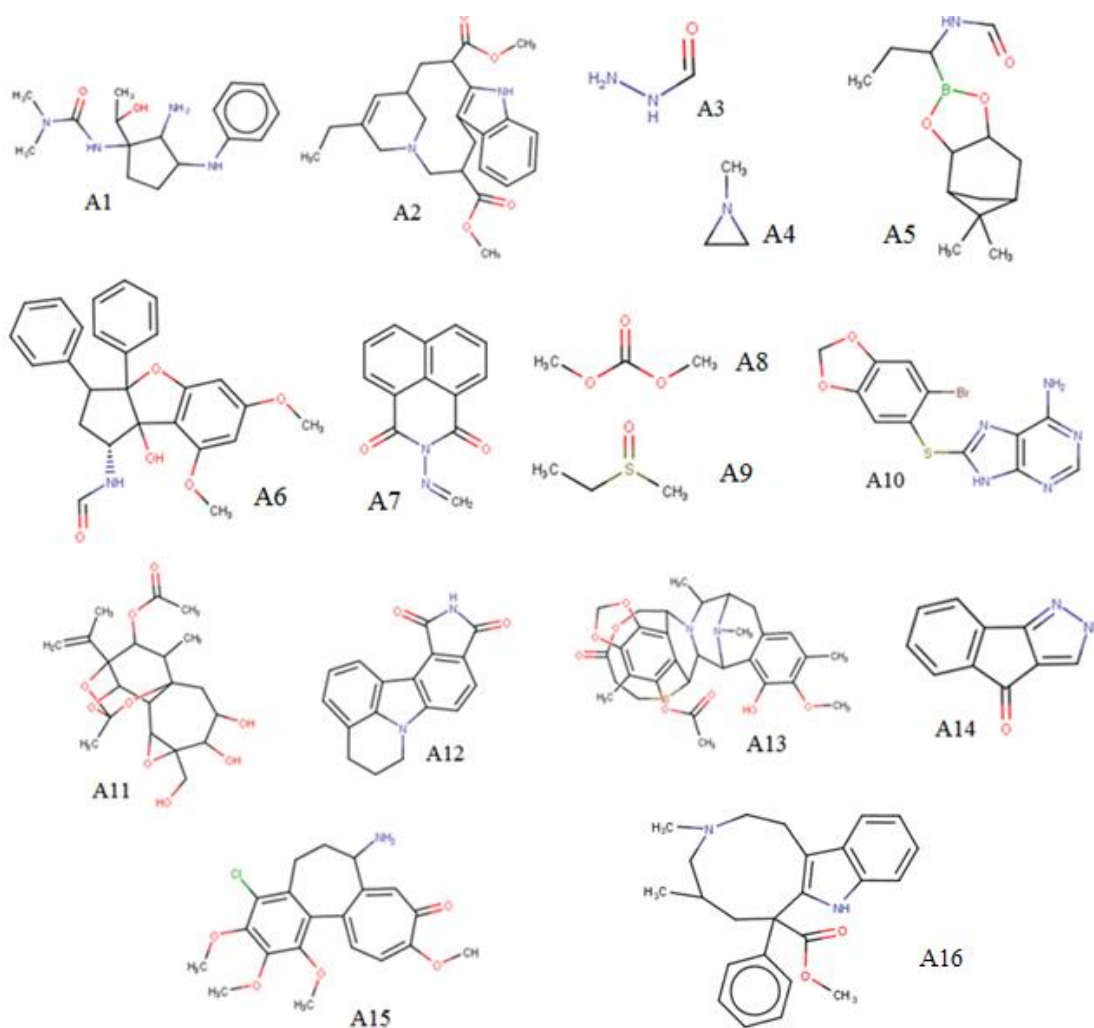


Figura 3.2 - Estruturas dos fragmentos ativos descritos na Tabela 3.7

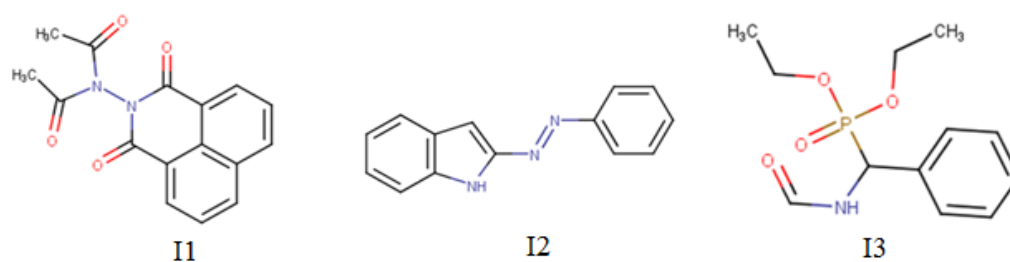


Figura 3.3 – Estruturas dos fragmentos inativos descritos na Tabela 3.7

3.1.5.3 Seleção de descritores

Na Tabela 3.8 constam os resultados para os modelos realizados usando a técnica *random Forest* para os diferentes conjuntos de descritores: todos os descritores 1D2D, os 75, 100 e 150 descritores mais relevantes provenientes da *random Forest* e os 104 descritores obtidos por seleção de descritores provenientes da seleção realizada no programa Weka. Os m_{try} para os cinco casos foram de 525, 38, 95, 124 e 40, respectivamente.

Tabela 3.8 - Resultados obtidos com a *random Forest* para a seleção de descritores no modelo de classificação

		TP	TN	FP	FN	SE	SP	Q	G-mean
todos	treino	3016	1873	561	425	0,876	0,770	0,832	0,821
	teste	984	310	83	87	0,919	0,789	0,884	0,851
75 rF	treino	3008	1806	628	433	0,874	0,742	0,819	0,805
	teste	999	56	337	72	0,933	0,142	0,721	0,365
100 rF	treino	3012	1794	640	429	0,875	0,737	0,818	0,803
	teste	1014	39	354	57	0,947	0,099	0,719	0,307
150 rF	treino	3025	1786	648	416	0,879	0,734	0,819	0,803
	teste	1017	33	360	54	0,950	0,084	0,717	0,282
104 BFirst	treino	3014	1852	582	427	0,876	0,761	0,828	0,816
	teste	976	311	82	95	0,911	0,791	0,879	0,849

3.1.5.4 Validação externa mais recente

Na Tabela 3.9 encontram-se a classe prevista, juntamente com a sua probabilidade, para os cinco compostos representados na Figura 2.1, página 25 obtidas através do modelo de classificação com os 104 descritores 1D2D provenientes da seleção realizada no programa Weka.

Tabela 3.9 – Previsão de classe e probabilidade dos cinco compostos representados na Figura 2.1

Composto	Classe		Probabilidade	
	Experimental	Prevista	Ativo	Inativo
TMC-264	Ativo	Ativo	0,532	0,468
colchina	Ativo	Ativo	0,524	0,476
derivado de colchina	Ativo	Ativo	0,542	0,458
escaleno	Ativo	Inativo	0,464	0,536
β-sitosterol	Ativo	Ativo	0,518	0,482

3.1.6 Modelo de regressão (A.2)

Na Tabela 3.10 encontram-se os resultados dos melhores modelos para a previsão de pIC_{50} realizada apenas com os compostos ativos. Estes foram todos obtidos usando a *random Forest* com 500 árvores e com um m_{try} de 534, 631, 315 e 324 para os descritores moleculares 1D2D, 1D2D3D e os *fingerprints* CDK e PubChem, respetivamente.

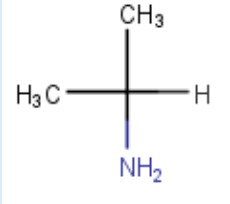
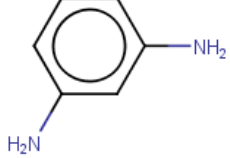
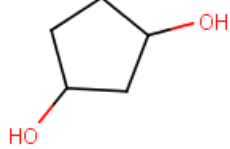

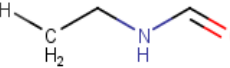
Tabela 3.10 - Resultados para os modelos de regressão A.2 obtidos com a *random Forest*

		R²	RMSE	MAE	%EA\geq1	%EA$<$1
1D2D	treino	0,648	0,648	0,486	10	90
	teste	0,670	0,647	0,491	10	90
1D2D3D	treino	0,652	0,646	0,483	10	90
	teste	0,677	0,647	0,493	11	89
CDK FPs	treino	0,677	0,615	0,449	9	91
	teste	0,683	0,624	0,461	10	90
PubChem FPs	treino	0,675	0,614	0,444	9	91
	teste	0,684	0,621	0,452	10	90

3.1.6.1 Descritores relevantes

Na Tabela 3.11 encontram-se os dez *fingerprints* PubChem mais relevantes provenientes do melhor modelo de regressão realizado com a *random Forest*, utilizando apenas composto ativos. No Anexo 7.5 encontram-se tabelas para cada um destes *fingerprints* com o número de compostos que contêm ou não contêm este *fingerprint* para diferentes intervalos de atividade.

Tabela 3.11 - Descritores mais relevantes do modelo de regressão A.2 utilizando os *fingerprints* PubChem

<i>Fingerprint</i>	%AumentoMSE	Descrição/SMARTS	Estrutura base
PubChem 338	20,694	<chem>C(~C)(~C)(~H)(~N)</chem>	
PubChem 308	19,211	O-H	
PubChem 261	18,276	≥4 anéis aromáticos	
PubChem 749	17,578	<chem>Nc1cc(N)ccc1</chem>	
PubChem 181	17,406	≥1 anel saturado ou aromático de tamanho 6 contendo um heteroátomo	
PubChem 845	17,280	<chem>OC1CC(O)CC1</chem>	
PubChem 16	17,162	≥4 N	
PubChem 713	17,003	<chem>Cc1ccc(C)cc1</chem>	
PubChem 192	16,279	≥3 anéis com tamanho 6	
PubChem 646	16,179	<chem>O=C-N-C-C-[#1]</chem>	

3.1.6.2 Seleção de descritores

Na Tabela 3.12 constam os parâmetros de avaliação para os modelos realizados usando a técnica *random Forest* para os diferentes conjuntos de descritores: todos os *fingerprints* PubChem, os 75, 100 e 150 *fingerprints* mais relevantes provenientes da *random Forest* e os 241

fingerprints obtidos por seleção de descritores realizada no programa Weka. Os m_{try} para os cinco casos foram de 324, 20, 24, 49 e 60, respetivamente.

Tabela 3.12 - Resultados da seleção de descritores para o modelo de regressão utilizando a *random Forest*

		R²	RMSE	MAE	%EA\geq1	%EA$<$1
todos	treino	0,675	0,614	0,444	9	91
	teste	0,684	0,621	0,452	10	90
75 rF	treino	0,665	0,624	0,455	9	91
	teste	0,661	0,643	0,474	10	90
100 rF	treino	0,672	0,618	0,450	9	91
	teste	0,675	0,630	0,465	10	90
150 rF	treino	0,677	0,613	0,444	9	91
	teste	0,679	0,625	0,455	10	90
241	treino	0,658	0,630	0,461	10	90
PSO433	teste	0,660	0,644	0,474	11	89

3.1.6.3 Validação externa recente

Na Tabela 3.13 encontram-se os valores de pIC_{50} experimentais e previstos para os compostos mais recentes da bibliografia que se encontram na Figura 2.1, página 25 obtidos com o melhor modelo do ponto anterior.

Tabela 3.13 – Valores de pIC_{50} experimental e previstos para os compostos da Figura 2.1 obtidos com o modelo com os 150 *fingerprints* PubChem mais relevantes dados pela *random Forest*

Composto	pIC_{50}	
	Experimental	Previsão
TMC-264	10,72	5,78
colchina	10,55	7,41
derivado de colchina	5,38	6,10
escaleno	7,30	5,67
β-sitosterol	6,00	5,86

3.1.7 Comparação de técnicas

Para comparar os modelos de classificação para as diferentes técnicas utilizou-se o conjunto de descritores que tinha o melhor resultado na secção de seleção de descritores. Para os modelos de classificação consistiu dos 104 descritores 1D2D provenientes da seleção realizada no Weka

e para os modelos de regressão consistiu dos 150 *fingerprints* PubChem que resultaram da matriz de descritores mais relevantes da *random Forest*.

3.1.7.1 Classificação

Na Tabela 3.14 constam os melhores resultados para as quatro técnicas utilizadas para a construção dos modelos de classificação. Para a *random Forest* (rF) utilizou-se o m_{try} de 40, para a SVM o valor de *cost* foi de 7500, enquanto que para MLP utilizou-se 9 neurónios para ANN utilizaram-se 100 neurónios, tendo 5 *convolutional layers*.

Tabela 3.14 - Comparação de técnicas de aprendizagem automática para modelos de classificação utilizando 104 descritores 1D2D provenientes da seleção realizada no Weka

		TP	TN	FP	FN	SE	SP	Q	G-mean
rF	treino	3014	1852	582	427	0,876	0,761	0,828	0,816
	teste	976	311	82	95	0,911	0,791	0,879	0,849
SVM	treino	2866	1811	623	575	0,833	0,744	0,796	0,787
	teste	912	295	98	159	0,852	0,751	0,824	0,799
MLP	treino	2698	1646	788	743	0,784	0,676	0,739	0,728
	teste	864	271	122	207	0,807	0,690	0,775	0,746
ANN	treino	2865	1814	620	576	0,833	0,745	0,796	0,788
	teste	933	289	104	138	0,871	0,735	0,835	0,800

3.1.7.2 Regressão

Os parâmetros de avaliação dos modelos de regressão para as quatro técnicas utilizadas encontram-se na Tabela 3.15, tendo-se utilizado para a rF o m_{try} de 49, para a SVM o valor de *cost* de 40, enquanto que para MLP e para ANN os melhores parâmetros foram os mesmos que os usados para os modelos de classificação.

Tabela 3.15 - Comparação de técnicas de aprendizagem automática para os modelos de regressão utilizando o conjunto dos 150 *fingerprints* PubChem

		R²	RMSE	MAE	%EA_{≥1}	%EA_{<1}
rF	treino	0,677	0,613	0,444	9	91
	teste	0,679	0,625	0,455	10	90
SVM	treino	0,634	0,654	0,462	11	89
	teste	0,634	0,671	0,473	12	88
MLP	treino	0,549	0,743	0,543	15	85
	teste	0,561	0,749	0,551	15	85
ANN	treino	0,599	0,688	0,503	13	87
	teste	0,601	0,700	0,508	12	88

3.2 Modelo B

3.2.1 Descritores de ¹³C

Para a aquisição de descritores a partir dos espectros de ¹³C utilizaram-se os desvios químicos para os intervalos de 0,5; 1 e 1,5 ppm, originando bases de dados com 400, 200 e 133 descritores respetivamente. Na Tabela 3.16 encontram-se os parâmetros de avaliação do modelo de classificação para a validação interna e externa, tendo o valor de m_{try} de 210 para o modelo obtido com os integrais para 0,5 ppm e um m_{try} de 90 para os outros dois casos.

Tabela 3.16 - Resultados dos modelos realizados com os dados espectrais de ¹³C

		TP	TN	FP	FN	SE	SP	Q	G-mean
0,5ppm	treino	12	38	11	13	0,480	0,776	0,676	0,610
	teste	3	20	7	6	0,333	0,741	0,639	0,497
1ppm	treino	13	35	8	12	0,520	0,814	0,706	0,651
	teste	3	16	7	6	0,333	0,696	0,594	0,482
1,5ppm	treino	12	42	7	13	0,480	0,857	0,730	0,641
	teste	2	20	7	7	0,222	0,741	0,611	0,406

3.2.2 Descritores de ¹H

No caso dos descritores obtidos a partir dos espectros de ¹H, utilizaram-se os desvios químicos para diferentes valores de ppm: 0,05; 0,1 e 0,2, tendo assim bases de dados com 640, 520 e 320 descritores. Na Tabela 3.17 encontram-se os resultados para os modelos de classificação para estes três casos, tendo o valor de m_{try} de 460, 160 e 270, respetivamente.

Tabela 3.17 - Resultados dos modelos realizados com os dados espectrais de ^1H

		TP	TN	FP	FN	SE	SP	Q	G-mean
0,05ppm	treino	13	41	8	12	0,520	0,837	0,730	0,660
	teste	2	20	7	7	0,222	0,741	0,611	0,406
0,1ppm	treino	15	40	9	10	0,600	0,816	0,743	0,700
	teste	2	19	8	7	0,222	0,704	0,583	0,395
0,2ppm	treino	14	39	10	11	0,560	0,796	0,716	0,668
	teste	2	18	9	7	0,222	0,667	0,556	0,385

3.2.3 Combinação dos descritores de ^{13}C e ^1H

Com as bases de dados utilizadas para formar os modelos prévios, foi possível realizar-se nove combinações, originando assim nove novos modelos. Os resultados dos três melhores modelos constam na Tabela 3.18. Estes modelos foram obtidos com valores de m_{try} de 460, 160 e 270 tendo em conta a ordem em que eles aparecem na tabela.

Tabela 3.18 - Resultados dos modelos de classificação para os descritores obtidos com a combinação dos dados de ^{13}C e ^1H

^1H	^{13}C		TP	TN	FP	FN	SE	SP	Q	G-mean
0,05 ppm	0,5 ppm	treino	13	44	5	12	0,520	0,898	0,770	0,683
		teste	4	21	6	5	0,444	0,778	0,694	0,588
0,1 ppm	0,5 ppm	treino	14	44	5	11	0,560	0,898	0,784	0,709
		teste	5	19	8	4	0,556	0,704	0,667	0,625
0,1 ppm	1 ppm	treino	13	44	5	12	0,520	0,898	0,770	0,683
		teste	3	19	8	6	0,333	0,704	0,611	0,484

3.2.4 Otimização do modelo

Utilizando a base de dados do melhor modelo obtido em cada uma das três secções anteriores, e vistos que a base de dados consiste maioritariamente de amostras inativas, realizou-se modelos provenientes da *random Forest* obrigando a considerar o mesmo peso para cada uma das classes. Os resultados desta otimização encontram-se na Tabela 3.19, onde se utilizaram valores de m_{try} de 120, 90 e 480 para os modelos de ^1H , ^{13}C e a combinação de ambos, respetivamente.

Tabela 3.19 - Resultados da otimização do Modelo B para os melhor modelos obtidos anteriormente

¹ H	¹³ C		TP	TN	FP	FN	SE	SP	Q	G-mean
0,1 ppm	--	treino	18	36	13	7	0,720	0,735	0,730	0,727
		teste	4	17	10	5	0,444	0,630	0,583	0,529
--	1 ppm	treino	16	38	11	9	0,640	0,776	0,730	0,705
		teste	3	19	8	6	0,333	0,704	0,611	0,484
0,1 ppm	0,5 ppm	treino	18	36	13	7	0,720	0,735	0,730	0,727
		teste	6	17	10	3	0,667	0,630	0,639	0,648

3.2.5 Segunda validação externa

Na Tabela 3.20 encontram-se as previsões obtidas usando o melhor modelo obtido no ponto anterior para os cinco compostos puros que ainda não tinham sido previamente testados contra a linha celular HCT-116.

Tabela 3.20 - Previsão de compostos puros ainda não estudados

Código	Probabilidade		
	Previsão	Ativo	Inativo
PTM-99_F2_F27	Inativo	0,262	0,738
PTM-99_F2_F31	Inativo	0,420	0,580
PTM-420_F4_F15	Ativo	0,644	0,356
PTM-420_F5_F42	Ativo	0,526	0,474
PTM-420_F5_F43	Ativo	0,546	0,454

Para a gama normal considerada nos ensaios biológicos não foi possível calcular IC₅₀ para nenhum dos compostos. Visto que o modelo utilizado não tinha um *cut-off* definido realizaram-se ensaios com concentrações superiores cujos resultados se encontram na Tabela 3.21.

Tabela 3.21 - Resultados de absorvância obtidos do ensaio MTS realizado na Faculdade de Farmácia, Universidade de Lisboa

[] (µg/mL)	PTM-99 _F2_F27	PTM-99 _F2_F31	PTM-420 _F4_F15	PTM-420 _F5_F42	PTM-420 _F5_F43	DMSO	5-FU
15,6	0,397	0,451	0,439	0,499	0,512	0,475	0,107
62,5	0,410	0,407	0,304	0,446	0,295	0,449	0,059
125	0,300	0,324	0,056	0,289	0,076	0,322	0,052

Capítulo 4 -DISCUSSÃO

4. Discussão

4.1 Modelo A

4.1.1 Partição dos conjuntos de treino e de teste

Através do mapa de Kohonen representado na Figura 3.1, página 31 procedeu-se à separação dos conjuntos de treino e de teste. Para ter o conjunto de treino o mais representativo possível, todos os compostos que foram categorizados num neurónio preto, ou seja, onde havia sobreposição de classes de bioatividade, foi colocado no conjunto de treino.

Observando os resultados descritos na Tabela 3.1, página 31 e utilizando como parâmetro de avaliação o valor de RMSE, pode-se notar um valor menor para o modelo realizado em SOM, o que é indicativo de um melhor modelo. Também se pode notar que para os diferentes tipos de partição realizados não se nota uma diferença acentuada entre os modelos. Isto pode ter sido devido ao *fingerprint* escolhido para realizar o mapa de Kohonen não ter uma relação próxima com a bioatividade dos compostos contra a linha celular HCT-116. Pode-se também confirmar que a *random Forest* não necessita de seleção de descritores dando resultados aproximadamente iguais para o caso da SOM com e sem descritores redundantes, ou seja descritores cuja correlação entre si é superior a 99%. Progrediu-se então com a partição realizada pelo SOM com 5875 compostos para o conjunto treino e 1464 para o conjunto de teste.

4.1.2 Seleção de descritores

Com os resultados apresentados na Tabela 3.2, página 32 pode-se selecionar os descritores utilizados. O facto do valor de RMSE dos descritores moleculares 1D2D ser aproximadamente igual ao dos descritores moleculares 1D2D3D fez com que se continuasse a manter os dois conjuntos para a otimização do modelo. Relativamente aos *fingerprints*, o que apresenta melhor resultado é o CDK FPs, ainda melhor do que os descritores estruturais, de modo a escolher outro *fingerprint* para a otimização escolheu-se o PubChem FPs, que apesar de ter pior resultado do que o *ExtendedCDK* FPs tem menor número de descritores e é um conjunto de *fingerprints* de fragmentos, ao contrário dos *fingerprints* provenientes do CDK que são *hashed fingerprints*.

Foi realizada uma análise dos compostos em que não foi possível o cálculo de descritores tridimensionais que tinham sido referidos na secção 2.1.2. Tendo em conta o relatório proveniente do CORINA, notou-se que o cálculo não era possível devido à complexidade da molécula ou por não ter informação quanto à sua configuração, como por exemplo, falta de definição de centros estereogénicos.

4.1.3 Otimização do modelo (A.1)

Com base na Tabela 3.3, página 33, que contém os resultados para a otimização dos modelos para os quatro conjuntos escolhidos no ponto anterior, pode-se ver que o melhor resultado para todos os conjuntos foi o obtido utilizando a técnica de aprendizagem automática *random Forest*. Apesar de o valor de RMSE ser inferior para os descritores moleculares no caso sem os descritores 3D, continuou-se a utilizá-los ao longo do trabalho porque, apesar de implicarem um aumento na necessidade de cálculo, geralmente a conformação de um ligando encontram-se relacionada à atividade de um composto. Relativamente aos *fingerprints*, tanto os provenientes do CDK e do PubChem deram resultados semelhantes, ambos tendo sido melhores comparando com os obtidos dos descritores moleculares. Apesar do coeficiente de correlação ser superior para o modelo proveniente do conjunto CDK o valor de RMSE é inferior para o caso dos *fingerprints* obtidos pelo PubChem, sendo este o melhor modelo para a previsão do valor de pIC₅₀.

4.1.4 Avaliação de previsão do modelo por classes

O melhor valor de MAE da Tabela 3.3, página 33 é de 0,466 para o modelo utilizando os *fingerprints* PubChem. Comparando este com o valor da diferença entre os pIC₅₀ experimental e previsto que se obteve utilizando a média das classes apresentados na Tabela 3.4, página 33 pode-se constatar que apenas para a classe E, onde os compostos são muito inativos, se verifica o valor da diferença superior ao do modelo total. Também se pode averiguar que enquanto o modelo prevê muito bem para compostos moderadamente ativos, ou seja com intervalos de IC₅₀ entre 1 µM e 10 µM (Classes B e C), a diferença entre pIC₅₀ aumenta nos extremos de bioatividade, isto é quando os compostos são muito ativos ou muito inativos.

4.1.5 Modelo de classificação (A.2)

Todos os modelos foram construídos até alcançar o melhor resultado através da validação interna do conjunto de treino, estes valores conjuntamente com os da validação externa realizada com o conjunto de teste encontram-se na Tabela 3.5, página 34. Tendo em conta estes valores podemos averiguar que para todos os modelos há uma melhor sensibilidade do que especificidade, significando que os modelos discriminam melhor os compostos ativos do que os inativos. Utilizando a média geométrica como o parâmetro prioritário para a avaliação dos modelos, e tendo em conta a validação interna, o melhor modelo corresponde ao que utiliza os descritores moleculares 1D2D. Seria de esperar que o modelo com a adição dos descritores tridimensionais tivesse melhores resultados, o que não se notou neste caso, este facto pode estar relacionado com a possível existência de diferentes mecanismos de ação.

No caso da validação externa, pode-se notar que há um modelo com um melhor valor de média geométrica que o obtido com os descritores 1D2D, o que utilizou o conjunto de *fingerprints*

CDK, mas através da análise dos resultados podemos ver que isto se deve ao facto de prever mais corretamente os compostos inativos e menos os compostos ativos. Visto que o objetivo final da construção do modelo de classificação era encontrar os compostos ativos considerou-se como melhor modelo de classificação o modelo com os descritores 1D2D. Para este modelo, utilizando o conjunto de teste, verificou-se que todos os compostos com uma probabilidade superior a 91,5% de serem previstos como ativos eram experimentalmente ativos, encontrando-se mais de 20% do conjunto de teste acima desta probabilidade. Na Figura 4.1 encontram-se as estruturas dos compostos que tinham a probabilidade máxima de serem ativos.

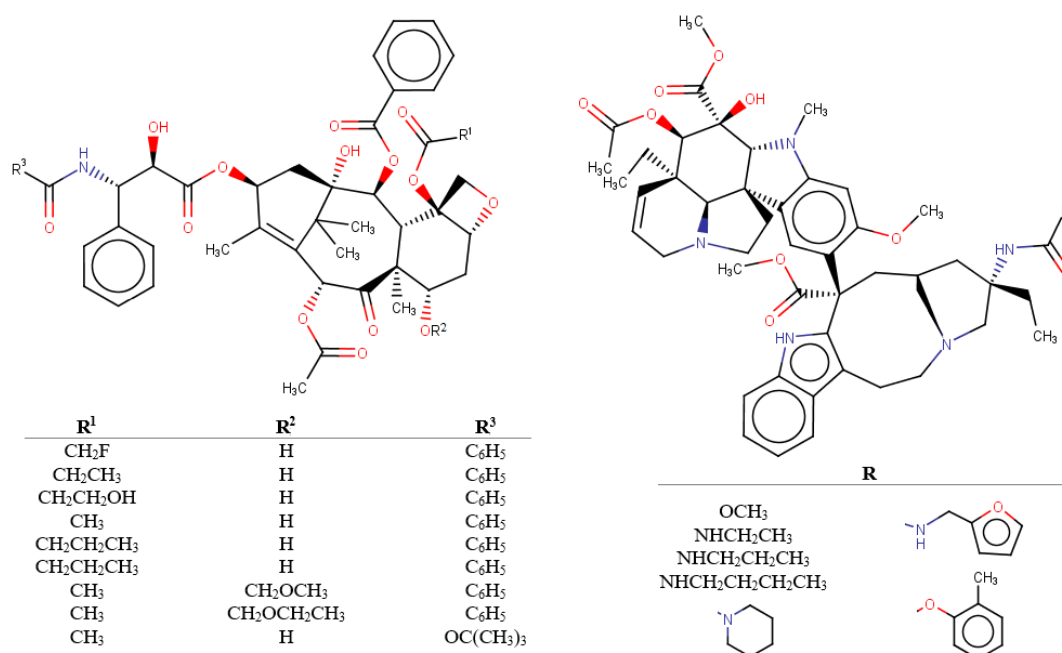


Figura 4.1 - Estrutura de compostos do conjunto de teste com a probabilidade de 1 de ser ativo

Utilizando os descritores mais relevantes que se encontram na Tabela 3.6, página 35, não se conseguiu distinguir um só descritor que pudesse auxiliar como filtro dos compostos, o que seria de esperar devido à grande diversidade da base de dados. Porém pode-se constatar que o modelo considerou como descritores mais relevantes os descritores topológicos e os descritores que caracterizam ligações de hidrogénio, algo que se encontra normalmente relacionado com a bioatividade. Os descritores mais relevantes provenientes da *random Forest* também foram utilizados para a construção de modelos com um menor conjunto de descritores (conjuntos de 75, 100 e 150) comparando também estes resultados com os obtidos com os descritores selecionados com o classificador do Weka. Os resultados desta comparação na Tabela 3.8, página 37, demonstram que os descritores provenientes da *random Forest*, independentemente do número de descritores utilizados, obtiveram sempre piores valores comparando com os provenientes do classificador do Weka, principalmente se se tiver em conta a validação externa. Como a técnica utilizada para esta comparação foi a *random Forest*, foi possível obter os valores de probabilidade,

tendo que para o modelo utilizando os 104 descritores mais de 16% do conjunto de teste tinha uma probabilidade igual ou superior a 94% em que todos os compostos previstos como ativos eram experimentalmente ativos.

Na secção 3.1.5.2 encontram-se dezanove fragmentos que foram encontrados como uma alternativa de interesse para a classificação de compostos. Apenas três foram encontrados para compostos inativos, tendo dois deles ligações azoto-azoto, apesar de também se ter encontrado este tipo de ligações em três fragmentos correspondentes a compostos ativos (A3, A7 e A14). Nos fragmentos para os compostos ativos pode-se observar vários casos com anéis com 12 ou mais membros, que foi o descritor considerado mais relevante da *random Forest* (Tabela 3.6, página 35), mas também há um caso para um fragmento inativo (I1). Devido há grande diversidade da base de dados, o que inclui um grande número de diferentes famílias de compostos, estes fragmentos podem ser uma via de exploração de novos derivados e procura de novos compostos líder para a descoberta de fármacos.

Na validação realizada com os cinco compostos mais recentes retirados da bibliografia, as previsões da sua bioatividade encontram-se na Tabela 3.9, página 37, pode-se notar que um dos cinco compostos foi mal previsto, e para todos os compostos os valores de probabilidade encontravam-se perto do de 0,5, ou seja, do maior ponto de incerteza para a previsão. Isto pode-se dever à base de dados não conter compostos com estrutura semelhante a estes, ou ter aproximadamente o mesmo número de compostos ativos e inativos com estrutura semelhante.

4.1.6 Modelo de regressão (A.2)

Através dos dados da Tabela 3.10, página 38, pode-se notar que os modelos construídos com *fingerprints* deram sempre melhores resultados que os construídos com os descritores estruturais. Tendo o melhor modelo ser obtido com os *fingerprints* PubChem com um valor de RMSE de 0,614 para a validação interna e 0,621 para a validação externa. Na Figura 4.2 encontra-se a representação gráfica da comparação dos valores de pIC_{50} previstos com os valores experimentais, para o conjunto de treino, onde os compostos com maior erro absoluto, superior a 3,5, estão identificados a vermelho e as suas estruturas moleculares estão representadas na Figura 4.3. Estes três compostos não apresentam uma correlação em termos de estrutura, e tratam-se de casos que experimentalmente apresentam uma grande atividade e o modelo, apesar dos considerar ativos, não consegue prever corretamente o seu valor, o que está de acordo com o tema abordado na secção 4.1.4, em que se notou que onde havia maior erro era nos extremos de atividade.

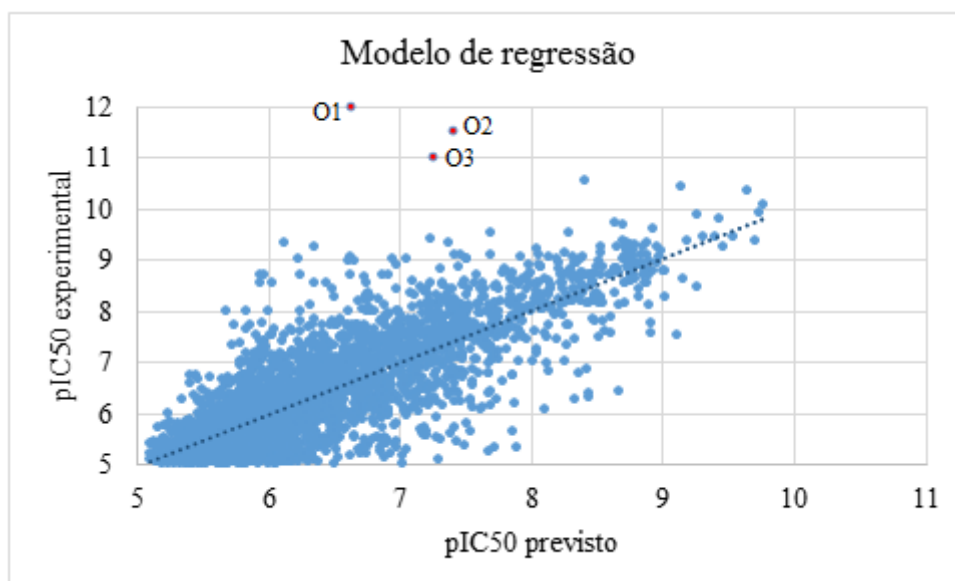


Figura 4.2 - Resultados obtidos para o modelo de regressão para o conjunto de treino com a técnica random Forest utilizando os *fingerprints* PubChem

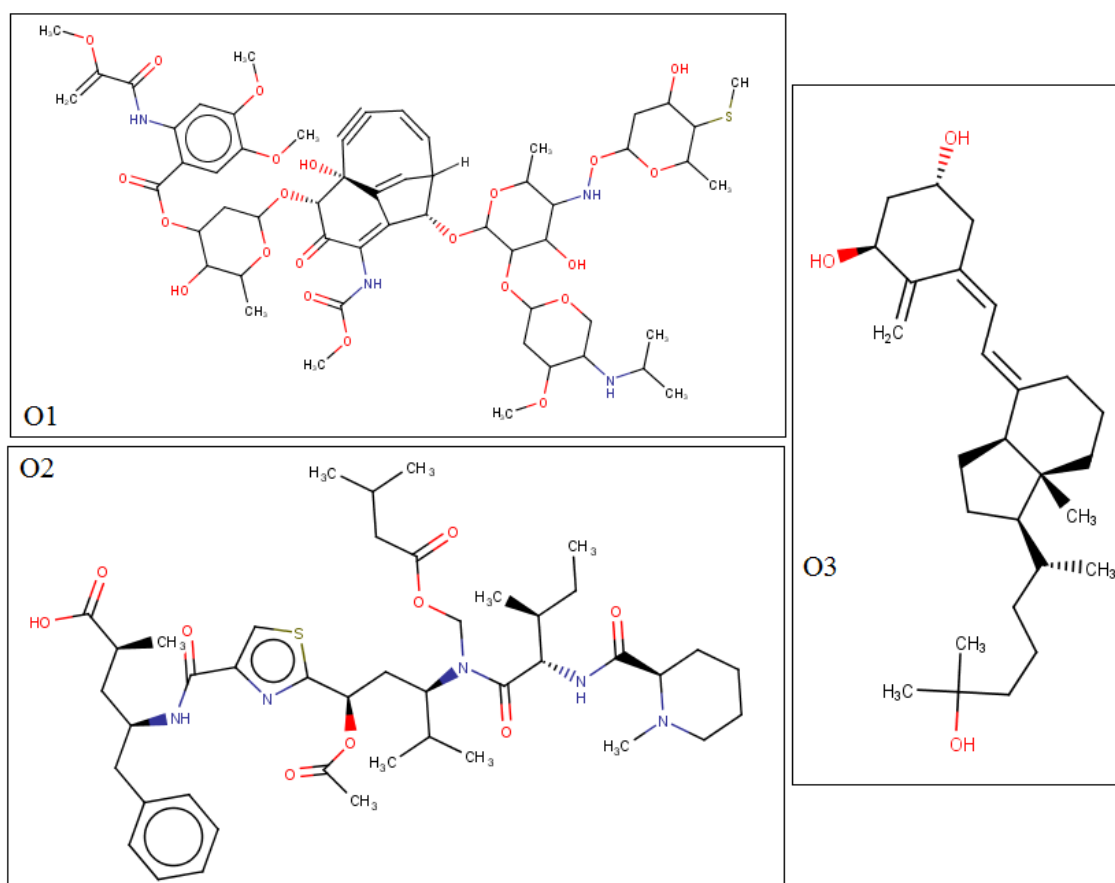


Figura 4.3 - Estruturas de outliers para o conjunto de treino que se encontram assinadas a vermelho na Figura 4.2

A representação gráfica do conjunto de teste encontra-se na Figura 4.4, e apesar de se notar uma maior dispersão dos valores previsto com os valores experimentais, apenas um composto

apresenta um erro absoluto superior a três, assinalado a vermelho, onde experimentalmente tem um valor de pIC_{50} superior a nove mas o valor previsto é inferior a seis. Para este composto utilizou-se uma matriz de proximidade que tinha sido realizada para o melhor modelo A.1, relacionando os compostos do conjunto de treino com os do conjunto de teste, e notou-se que os compostos que tinham um maior valor de proximidade com o *outlier* do conjunto de teste tinham valores de pIC_{50} entre cinco e sete.

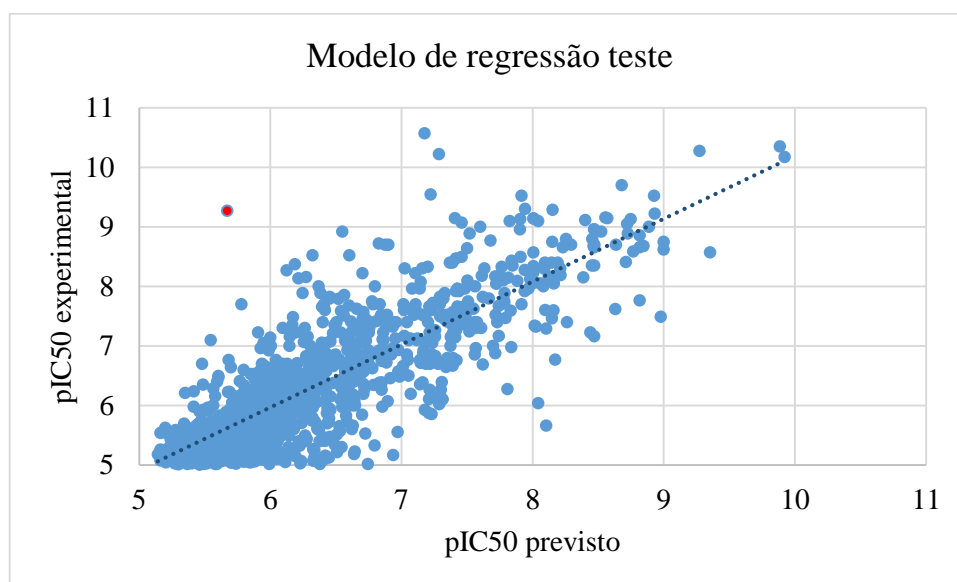


Figura 4.4 - Resultados obtidos para o modelo de regressão para o conjunto de teste com a técnica *random Forest* utilizando os *fingerprints* PubChem

Utilizando os descritores mais relevantes da regressão presentes na Tabela 3.11, página 39, e analisando os valores deste para os compostos com diferente pIC_{50} (Anexo 7.5) observa-se que a proporção entre compostos nos diferentes intervalos de pIC_{50} com o descritor presente e ausente é parecida. Pode-se também observar que entre estes dez descritores, pelo menos quatro descrevem a presença de azoto, podendo especular que a presença deste heteroátomo é importante para a atividade, como também já se tinha averiguado devido à sua presença predominante nos fragmentos explorados na secção de classificação.

Os descritores mais relevantes fornecidos pela *random Forest* também serviram para a construção de modelos com o objetivo de selecionar o número dos *fingerprints* utilizados, para tal usaram-se conjuntos de 75, 100 e 150, juntamente com o conjunto de 241 descritores provenientes da seleção com o classificador do programa Weka. Tendo em conta os resultados da Tabela 3.12, página 40, pode-se notar que todos os modelos que utilizaram os melhores descritores da *random Forest* deram melhores resultados que o conjunto proveniente do Weka. Tendo que o modelo que utilizou apenas os 150 descritores mais relevantes conseguiu um melhor resultado para a validação interna que o que continha todos os descritores, apesar do mesmo não

ter acontecido com a validação externa. Pode-se então notar que uma redução superior a 80% dos *fingerprints* não causou uma grande alteração na previsibilidade e qualidade do modelo.

Na validação realizada com os cinco compostos mais recentes retirados da bibliografia cujas previsões se encontram na Tabela 3.13, página 40, pode-se notar que, tal como mencionado nas análises anteriores, o modelo encontra alguma dificuldade em prever compostos extremamente ativos, como para o caso dos compostos TMC-264 e colchicina, que experimentalmente têm pIC_{50} superiores a dez e cujas previsões têm mais de três valores de discrepância. Para os restantes compostos pode-se notar que o maior erro absoluto é relativo ao escaleno, o composto que tinha sido previamente mal previsto no modelo de classificação, é de esperar que este composto não esteja bem representado na base de dados, ou seja que não tenha compostos com estrutura semelhante.

4.1.7 Comparação de técnicas

Para a comparação das técnicas descritas na secção 2.1.8 teve-se em conta os resultados para a classificação na Tabela 3.14, página 41 e para a regressão na Tabela 3.15, página 42. Os melhores resultados para os dois modelos foram obtidos utilizando a *random Forest*. A segunda técnica com melhor resultado para o modelo de regressão, considerando a validação interna, seria a SVM. Considerando as duas técnicas de redes neuronais artificiais, concluiu-se que para ambos os modelos a ANN apresentava melhores resultados do que a MLP, isto pode-se dever à adição de *convolutional layer*.

Uma das aplicações das diferentes técnicas seria a utilização de três para a criação de um consenso, onde para o modelo de classificação seria considerado a moda e para o modelo de regressão a média. Visto que para estes modelos a *random Forest* tinha uma capacidade de previsão significativamente melhor do que qualquer outra das técnicas, o consenso de técnicas produzia piores resultados do que os obtidos com apenas a *random Forest*.

4.2 Modelo B

Para a abordagem em que se utilizou descritores obtidos a partir dos espectros de RMN de amostras produzidas por actinobactérias de sedimentos marinhos, usaram-se diferentes intervalos de desvios químicos para espectros unidimensionais de ^{13}C e 1H . Os resultados e parâmetros de avaliação para os modelos de classificação construídos com base nos dados dos espectros de ^{13}C , 1H e a combinação dos dois encontram-se na Tabela 3.16, página 42 e Tabelas 3.17 e 3.18, página 43, respetivamente. Uma representação gráfica para os valores de média geométrica encontra-se na Figura 4.5, onde se pode notar que os melhores resultados para a validação interna constam de valores perto de 0,7. Entre os modelos apenas considerando um dos espectros, pode-se notar que o melhor resultado é obtido para intervalos de 1 ppm para o espectro de ^{13}C e de 0,1 ppm para o

espectro de ^1H , enquanto que para a combinação dos dois espectros o melhor modelo foi obtido com os intervalos de 0,5 e 0,1 ppm para os espectros de ^{13}C e ^1H , respetivamente, sendo este o melhor modelo obtido quer em validação interna quer em validação externa.

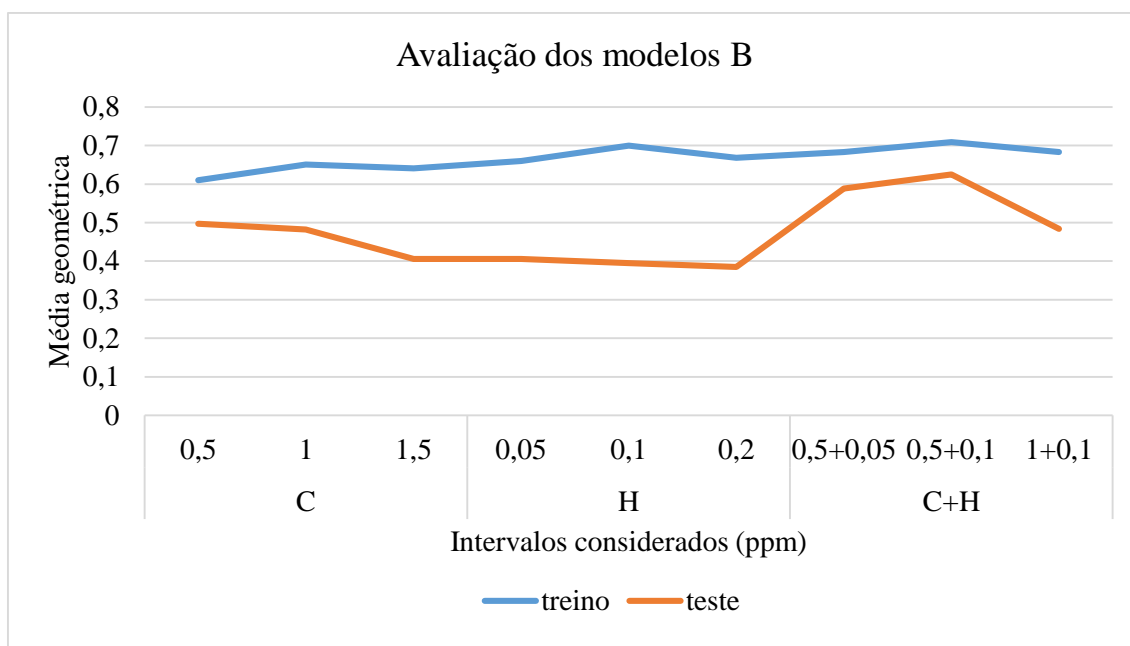


Figura 4.5 - Representação gráfica do valor de média geométrica para os descritores obtidos a partir dos espectros de ^{13}C e ^1H e a sua combinação

4.2.1 Otimização do Modelo B

Tendo em conta que o pretendido deste modelo é a capacidade de selecionar novas amostras através dos espectros de RMN para o possível estudo de atividade, pretende-se prever melhor os compostos possivelmente ativos. Como o conjunto de treino, tal como a base de dados é maioritariamente composta por amostras inativas, os modelos preveem mais amostras inativas do que ativas. Otimizou-se assim os modelos obrigando-os a considerar que o conjunto de treino tinha a mesma porção de amostras ativas e inativas, através de um código introduzido na *random Forest*. Uma das consequências deste processo é a perda de capacidade de prever amostras inativas. Os resultados destes modelos encontram-se na Tabela 3.19, página 44, onde se pode notar que apesar de a especificidade diminuir em todos os casos, como seria de esperar, os valores de sensibilidade e média geométrica melhoram significativamente. Comparando os parâmetros de avaliação dos diferentes modelos, o melhor modelo foi obtido com a junção dos dados dos dois espectros.

Para o melhor modelo analisou-se os resultados que dizem respeito às amostras mais ativas, ou seja, com valor de IC_{50} inferior a $5 \mu\text{g/mL}$. No conjunto de treino existem duas amostras (PTM-309 e PTM-128_F8) que são previstas como inativas, com probabilidade de ser ativa inferior a

0,25, e cinco amostras que são previstas corretamente, com probabilidade de serem ativas superior a 0,80. Respetivamente ao conjunto de teste existem duas amostras com valores de IC_{50} inferior a 5 $\mu\text{g/mL}$ (PTM-99 e PTM-29_F2), ambas elas se encontram incorretamente previstas, tendo valores de probabilidade de serem ativas muito baixos (0,07 e 0,22, respetivamente). Pode-se assim concluir que esta abordagem também tem alguma dificuldade na previsão de amostras mais ativas.

Relativamente aos compostos puros, nenhum se encontrava no conjunto de treino devido à pouca quantidade e ao facto de serem todos inativos. Quando os cinco compostos puros presentes no conjunto de teste foram previstos, o modelo previu-os como ativos quando todos eram inativos, com a gama de percentagem a variar desde 0,57 a 0,73. Isto pode-se dever à falta de representação destes compostos no conjunto de treino que é apenas constituído por extratos e frações. Na secção 4.2.2 encontram-se previsões para outros cinco compostos puros cuja atividade contra a linha celular HCT-116 encontra-se a ser estudada na Faculdade de Farmácia.

Um dos intervalos mais relevante foi entre 4,3 e 4,4 ppm do espectro de ^1H , normalmente onde se encontra o desvio químico correspondente a ligações de O-H (-CHOH), o que também foi um dos *fingerprints* com maior relevância no modelo de regressão A.2.

4.2.2 Validação externa de compostos ainda não estudados

Cinco compostos puros pertencentes a duas estirpes diferentes isoladas no grupo de investigação foram previstos utilizando o modelo com a informação proveniente dos espectros de ^1H e de ^{13}C , cujas previsões se encontram na Tabela 3.20, página 44. Os dois compostos da estirpe PTM-99 foram previstos como inativos, no entanto os três compostos da estirpe PTM-420 foram previstos como ativos. Comparando com as frações, na estirpe PTM-99 a fração 2 não apresentava atividade, enquanto que as frações 4 e 5 da PTM-420 apresentavam, o que está consistente com a previsão. Tendo em conta os resultados provenientes da Faculdade de Farmácia da Universidade de Lisboa, não foi possível calcular o IC_{50} para nenhuma das amostras. Devido ao facto de o modelo utilizado não ter usado um *cutoff* de atividade, devido à pouca quantidade de amostras ativas, ensaios com concentrações superiores foram realizados, cujos resultados se encontram na Tabela 3.21, página 44. Segundo estes, pode-se notar que para concentrações de 125 $\mu\text{g/mL}$ tanto o composto PTM-420_F4_F15 como o PTM-420_F5_F43 parecem apresentar alguma atividade, o que valida de certa forma o modelo visto serem as amostras com maior probabilidade de terem atividade. Outros estudos de atividade teriam de ser realizados para conclusões definitivas visto que, para estas concentrações o solvente já apresenta alguma inibição.

Capítulo 5 - CONCLUSÕES

5. Conclusões

O objetivo deste trabalho foi a construção de modelos computacionais para o auxiliar a descoberta de compostos líder contra o cancro do cólon. Tendo utilizado duas abordagens diferentes, a primeira utilizando descritores e *fingerprints* obtidos pela estrutura da molécula e a segunda utilizando valores de desvio químico dos espetros de ^1H e ^{13}C de diferentes amostras provenientes de actinobactérias de sedimentos marinhos.

Na primeira abordagem utilizaram-se dois modelos, um de classificação que considerava ativos compostos com um valor de IC_{50} inferior a $10\ \mu\text{M}$ e um modelo de regressão para a previsão do valor de pIC_{50} para os compostos ativos. O melhor modelo de classificação foi obtido usando os descritores 1D2D com os valores de média geométrica de 0,821 e 0,851 para o conjunto de treino e teste, respetivamente, utilizando todos os descritores. Efetuou-se uma seleção dos descritores, passando de 1438 descritores para 104 sem perda significativa de informação. Para o modelo de regressão a utilização dos *fingerprints* PubChem facultou o melhor resultado, comprovando a relevância dos *fingerprints* no desenvolvimento de modelos QSAR. Enquanto a utilização de todos os descritores resultou num valor de RMSE de 0,614 e 0,621 para o conjunto de treino e de teste, respetivamente, a utilização de apenas 150 descritores mais relevantes provenientes da *random Forest* não causou uma grande perda na capacidade de previsão do modelo. Para o modelo de regressão notou-se alguma dificuldade na previsão de compostos extremamente ativos, ou seja, com pIC_{50} superior a 10, isto deve-se ao facto de a base de dados ser pouco representativa de compostos com estes valores.

Através de uma análise dos *fingerprints* foi possível separar 19 fragmentos relacionados com a atividade, três inativos e dezasseis ativos, podendo ser de interesse o estudo destes fragmentos para a descoberta de novos compostos líder.

Realizou-se uma comparação entre técnicas de aprendizagem automática, entre estas a *random Forest*, a *Support Vector Machine* (SVM) e duas vertentes diferentes de redes neuronais artificiais: a *Multilayer Perceptron* (MLP) e a *Artificial Neural Networks* (ANN). Quer para o modelo de classificação quer para o modelo de regressão, os melhores resultados foram obtidos utilizando a *random Forest*. Apesar da estratégia envolver a utilização das diferentes técnicas para a realização de um consenso, o facto de a *random Forest* prever significativamente melhor implicaria que o resultado fosse pior do que utilizando apenas os dados da *random Forest*, não justificando o esforço computacional da realização das outras técnicas.

Na segunda abordagem, que utilizou os dados espectrais unidimensionais de RMN de diferentes amostras, o melhor modelo foi obtido com a combinação dos valores de desvio químico de 0,1 ppm para ^1H e 0,5 ppm para ^{13}C . Demonstrou-se que este modelo apresentou alguma dificuldade na previsão de amostras muito ativas. O modelo não teve a capacidade para prever

corretamente a classe para os compostos puros presentes no conjunto de teste, o que pode estar ligado à falta de representação de compostos puros no conjunto de treino. Cinco novos compostos puros foram previstos, dois como inativos e três ativos, sendo que experimentalmente não foi possível calcular valores de IC_{50} para nenhum dos compostos, contudo, utilizando a concentração de 125 $\mu\text{g/mL}$ os dois compostos com maior probabilidade de serem ativos apresentaram alguma atividade. Em suma, considerando que para a construção do modelo foram utilizadas apenas 25 amostras ativas, nenhuma correspondendo a compostos puros, a sua capacidade de previsão foi surpreendente, podendo-se destacar a relevância desta abordagem na discriminação da atividade contra a linha celular HCT-116.

Futuramente, as duas abordagens realizadas nesta dissertação serão utilizadas complementarmente no grupo de investigação, a primeira para a previsão de atividade para compostos puros cuja estrutura química já tenha sido elucidada, e a segunda para um *screening* de priorização de amostras (extratos, frações e compostos puros) para a avaliação da atividade contra linha celular HCT-116.

Capítulo 6 - BIBLIOGRAFIA

6. Bibliografia

1. Arnold, Melina, et al. "Global patterns and trends in colorectal cancer incidence and mortality." *Gut* (2016): gutjnl-2015.
2. Globocan, I. A. R. C. "Cancer incidence and mortality worldwide in 2008." *Lyon: International Agency for Research on Cancer, WHO* (2008).
3. Gabr, Moustafa T., et al. "EGFR tyrosine kinase targeted compounds: in vitro antitumor activity and molecular modeling studies of new benzothiazole and pyrimido [2, 1-b] benzothiazole derivatives." *EXCLI journal* 13 (2014): 573.
4. Kuo, Gee-Hong, et al. "Synthesis and structure-activity relationships of pyrazine-pyridine biheteroaryls as novel, potent, and selective vascular endothelial growth factor receptor-2 inhibitors." *Journal of medicinal chemistry* 48.15 (2005): 4892-4909.
5. Giraud, Elie, et al. "Multivariate data analysis using D-optimal designs, partial least squares, and response surface modeling: a directional approach for the analysis of farnesyltransferase inhibitors." *Journal of medicinal chemistry* 43.9 (2000): 1807-1816.
6. Girgis, Adel S., et al. "Synthesis and QSAR study of novel cytotoxic spiro [3H-indole-3, 2'(1' H)-pyrrolo [3, 4-c] pyrrole]-2, 3', 5'(1H, 2' aH, 4' H)-triones." *European journal of medicinal chemistry* 47 (2012): 312-322.
7. Jin-can, C. et al. 2 D / 3 D -QSAR studies of derivatives as potent anticancer agents. *Chinese Journal Structure Chemistry* 33 (2014) 1729-1740
8. Sławiński, Jarosław, et al. "Synthesis and QSAR study of novel 6-chloro-3-(2-arylmethylene-1-methylhydrazino)-1, 4, 2-benzodithiazine 1, 1-dioxide derivatives with anticancer activity." *Molecules* 20.4 (2015): 5754-5770.
9. Żołnowska, Beata, et al. "Synthesis, molecular structure, metabolic stability and QSAR studies of a novel series of anticancer N-Acylbenzenesulfonamides." *Molecules* 20.10 (2015): 19101-19129.
10. Butler, Mark S., Avril AB Robertson, and Matthew A. Cooper. "Natural product and natural product derived drugs in clinical trials." *Natural product reports* 31.11 (2014): 1612-1661.
11. Souza, M. V. N., et al. "Natural products in advance clinical trials applied to cancer." *Rev. Fitos* 3 (2007): 25-41.
12. Gerwick, William H., and Bradley S. Moore. "Lessons from the past and charting the future of marine natural products drug discovery and chemical biology." *Chemistry & biology* 19.1 (2012): 85-98.

13. David, Bruno, Jean-Luc Wolfender, and Daniel A. Dias. "The pharmaceutical industry and natural products: historical status and new trends." *Phytochemistry Reviews* 14.2 (2015): 299-315.
14. Kinch, Michael S., et al. "An overview of FDA-approved new molecular entities: 1827–2013." *Drug discovery today* 19.8 (2014): 1033-1039.
15. Hu, Yiwen, et al. "Statistical research on the bioactivity of new marine natural products discovered during the 28 years from 1985 to 2012." *Marine drugs* 13.1 (2015): 202-221.
16. Sliwoski, Gregory, et al. "Computational methods in drug discovery." *Pharmacological reviews* 66.1 (2014): 334-395.
17. Gasteiger, Johann, and Thomas Engel, eds. *Cheminformatics: a textbook*. John Wiley & Sons, 2006.
18. Hall, Lowell H., and Lemont B. Kier. "Electrotopological state indices for atom types: a novel combination of electronic, topological, and valence state information." *Journal of Chemical Information and Computer Sciences* 35.6 (1995): 1039-1045.
19. Todeschini, Roberto, and Viviana Consonni. *Molecular Descriptors for Chemoinformatics, Volume 41 (2 Volume Set)*. Vol. 41. John Wiley & Sons, 2009.
20. Hall, Lowell H., Brian Mohney, and Lemont B. Kier. "The electrotopological state: structure information at the atomic level for molecular graphs." *Journal of chemical information and computer sciences* 31.1 (1991): 76-82.
21. Xue, Ling, et al. "Design and evaluation of a molecular fingerprint involving the transformation of property descriptor values into a binary classification scheme." *Journal of chemical information and computer sciences* 43.4 (2003): 1151-1157.
22. McGregor, Malcolm J., and Peter V. Pallai. "Clustering of large databases of compounds: Using the MDL "keys" as structural descriptors." *Journal of chemical information and computer sciences* 37.3 (1997): 443-448.
23. Pickett, S. D., et al. "DIVSEL and COMPLIB-Strategies for the design and comparison of combinatorial libraries using pharmacophoric descriptors." *Journal of chemical information and computer sciences* 38.2 (1998): 144-150.
24. Myint, Kyaw Z., and Xiang-Qun Xie. "Ligand biological activity predictions using Fingerprint-Based Artificial Neural Networks (FANN-QSAR)." *Artificial Neural Networks* (2015): 149-164.
25. Lei, Tailong, et al. "ADMET evaluation in drug discovery: 15. Accurate prediction of rat oral acute toxicity using relevance vector machine and consensus modeling." *Journal of cheminformatics* 8.1 (2016): 1.
26. Yap Chun Wei. PaDEL-Descriptor. at <http://padel.nus.edu.sg>

27. James, Craig, Dave Weininger, and Jack Delany. "Daylight Theory Manual Ver. 4.9 (08/01/11)." (2011).
28. Guha, R. & Rojas-Chertó, M. "rcdk : Integrating the CDK with R." *Chem. Informatics Funct. R* (2010) 1–17
29. Pereira, Florbela. "1D ¹³C-NMR data as molecular descriptors in spectra—structure relationship analysis of oligosaccharides." *Molecules* 17.4 (2012): 3818-3833.
30. Khadikar, Padmakar V., et al. "Novel use of chemical shift in NMR as molecular descriptor: a first report on modeling carbonic anhydrase inhibitory activity and related parameters." *Bioorganic & medicinal chemistry letters* 15.4 (2005): 931-936.
31. Scotti, Luciana, et al. "¹³C NMR spectral data and molecular descriptors to predict the antioxidant activity of flavonoids." *Brazilian Journal of Pharmaceutical Sciences* 47.2 (2011): 241-249.
32. Verma, Rajeshwar P., and Corwin Hansch. "Use of ¹³C NMR chemical shift as QSAR/QSPR descriptor." *Chemical reviews* 111.4 (2011): 2865-2899.
33. Willighagen, Egon L., et al. "On the use of ¹H and ¹³C 1D NMR Spectra as QSPR descriptors." *Journal of chemical information and modeling* 46.2 (2006): 487-494.
34. Lavecchia, Antonio. "Machine-learning approaches in drug discovery: methods and applications." *Drug discovery today* 20.3 (2015): 318-331.
35. Cherigo, Lilia, Dioxelis Lopez, and Sergio Martinez-Luis. "Marine natural products as breast cancer resistance protein inhibitors." *Marine drugs* 13.4 (2015): 2010-2029.
36. Guha, Rajarshi, Jon R. Serra, and Peter C. Jurs. "Generation of QSAR sets with a self-organizing map." *Journal of Molecular Graphics and Modelling* 23.1 (2004): 1-14.
37. Puzyn, Tomasz, Jerzy Leszczynski, and Mark T. Cronin, eds. *Recent advances in QSAR studies: methods and applications*. Vol. 8. Springer Science & Business Media, 2010.
38. Wang, Ling, et al. "Discovering new agents active against methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* with ligand-based approaches." *Journal of chemical information and modeling* 54.11 (2014): 3186-3197.
39. Ul-Haq, Zaheer, and Jeffrey D. Madura. *Frontiers in Computational Chemistry: Volume 2: Computer Applications for Drug Design and Biomolecular Systems*. Elsevier, 2015.
40. Gramatica, Paola, and Alessandro Sangion. "A historical excursus on the statistical validation parameters for QSAR models: a clarification concerning metrics and terminology." *Journal of chemical information and modeling* (2016).
41. Hanke, Jens, and Jens G. Reich. "Kohonen map as a visualization tool for the analysis of protein sequences: multiple alignments, domains and segments of secondary structures." *Computer applications in the biosciences: CABIOS* 12.6 (1996): 447-454.
42. Schneider, Petra, et al. "Hybrid network model for "Deep Learning" of chemical data: Application to antimicrobial peptides." *Molecular Informatics* (2016).

43. JATOON - SOM. at <<http://joao.airesdesousa.com/jatoon/v103/som106.htm>>
44. jaton formula. at <<http://joao.airesdesousa.com/jatoon/v103/doc/index.htm>>
45. Gil, David, and Magnus Johnson. "Diagnosing Parkinson by using artificial neural networks and support vector machines." *Global Journal of Computer Science and Technology* 9.4 (2009): 63-71.
46. Artificial Neural Network. At <http://www.saedsayad.com/artificial_neural_network.htm>
47. Convolutional Neural Networks. at <<http://deeplearning.net/tutorial/lenet.html>>
48. Svetnik, Vladimir, et al. "Random forest: a classification and regression tool for compound classification and QSAR modeling." *Journal of chemical information and computer sciences* 43.6 (2003): 1947-1958.
49. Breiman, Leo. "Random forests." *Machine learning* 45.1 (2001): 5-32.
50. Liaw, Andy, and Matthew Wiener. "Classification and regression by randomForest." *R news* 2.3 (2002): 18-22.
51. Mingers, John. "An empirical comparison of selection measures for decision-tree induction." *Machine learning* 3.4 (1989): 319-342.
52. Yao, X. J., et al. "Comparative study of QSAR/QSPR correlations using support vector machines, radial basis function neural networks, and multiple linear regression." *Journal of chemical information and computer sciences* 44.4 (2004): 1257-1266.
53. ChemBL. at <<https://www.ebi.ac.uk/chembl/target>>
54. ZINC database. at <<http://zinc.docking.org/browse/targets/>>
55. Blunt, J.W., Munro, M.H.G., Laatsch, H., E. Antimarin Database. (2007).
56. Marvin 15.9.14, 2015, ChemAxon (<http://www.chemaxon.com>).
57. JChem 15.9.14, 2015, ChemAxon (<http://www.chemaxon.com>).
58. Mona. at <<http://www.zbh.uni-hamburg.de/ueber-das-zbh.html>>
59. Hilbig, Matthias, et al. "MONA–Interactive manipulation of molecule collections." *Journal of cheminformatics* 5.1 (2013): 1.
60. Hilbig, Matthias, and Matthias Rarey. "MONA 2: a light cheminformatics platform for interactive compound library processing." *Journal of chemical information and modeling* 55.10 (2015): 2071-2078.
61. Sadowski, Jens, Johann Gasteiger, and Gerhard Klebe. "Comparison of automatic three-dimensional model builders using 639 X-ray structures." *Journal of chemical information and computer sciences* 34.4 (1994): 1000-1008.
62. Weka. at <<http://www.cs.waikato.ac.nz/ml/weka/downloading.html>>
63. Hall, Mark, et al. "The WEKA data mining software: an update." *ACM SIGKDD explorations newsletter* 11.1 (2009): 10-18.

64. Lai, Daowan, et al. "Bioactive dibenzo- α -pyrone derivatives from the endophytic fungus *Rhizopycnis vagum* Nitaf22." *Journal of Natural Products* 79.8 (2016): 2022-2031.
65. Kumar, Ashok, et al. "A novel microtubule depolymerizing colchicine analogue triggers apoptosis and autophagy in HCT-116 colon cancer cells." *Cell biochemistry and function* 34.2 (2016): 69-81.
66. Reyes, M. M. D. L., et al. "Cytotoxic compounds from *dysoxylum gaudichaudianum* (A. Juss.) Miq". *International Journal of Pharmacognosy Phytochemical Research* 8 (2016) 668–674
67. ACD/NMR Processor 12.01, Build39104, 2010, www.acdlabs.com.

Capítulo 7 – ANEXOS

ANEXO 7.1 - Previsões para o conjunto de treino do Modelo A – classificação, obtido com a random Forest utilizando os descritores 1D2D

Código	Classe		Código	Exp	Prev	Código	Exp	Prev
	Exp	Prev						
ANTIMARIN8518	A	B	CHEMBL1078692	A	A	CHEMBL1089700	A	A
ANTIMARIN11089	B	A	CHEMBL1078774	A	A	CHEMBL1089701	A	A
ANTIMARIN11358	A	B	CHEMBL1078893	A	A	CHEMBL1089790	B	B
ANTIMARIN19915	B	B	CHEMBL1078894	A	A	CHEMBL1089817	B	B
ANTIMARIN21098	B	B	CHEMBL1078997	B	A	CHEMBL1090330	A	B
ANTIMARIN24591	B	B	CHEMBL1078998	A	A	CHEMBL1090333	A	A
ANTIMARIN24606	B	B	CHEMBL1079033	B	B	CHEMBL1090334	B	A
ANTIMARIN24610	B	B	CHEMBL1079127	A	A	CHEMBL1090335	A	B
ANTIMARIN28086	B	A	CHEMBL1079130	A	A	CHEMBL1090337	A	A
ANTIMARIN28643	A	A	CHEMBL1079328	A	B	CHEMBL1090338	A	A
ANTIMARIN30662	A	B	CHEMBL1080077	B	B	CHEMBL1090340	A	B
ANTIMARIN31949	B	B	CHEMBL1080280	B	B	CHEMBL1090341	B	A
ANTIMARIN31950	B	B	CHEMBL1080762	A	A	CHEMBL1090546	B	B
ANTIMARIN31951	B	B	CHEMBL1080792	B	A	CHEMBL1090551	B	B
ANTIMARIN51166	A	B	CHEMBL1081516	B	B	CHEMBL1090656	B	B
CHEMBL101477	A	A	CHEMBL1081673	A	A	CHEMBL1090657	B	B
CHEMBL1023	B	B	CHEMBL1081854	A	A	CHEMBL1090672	A	B
CHEMBL102714	B	A	CHEMBL1082248	A	A	CHEMBL1090771	B	B
CHEMBL102888	A	A	CHEMBL1082249	A	A	CHEMBL1090849	B	B
CHEMBL103054	A	A	CHEMBL1083086	A	A	CHEMBL1090850	B	B
CHEMBL103334	A	A	CHEMBL1083439	A	A	CHEMBL1090871	B	B
CHEMBL103667	B	A	CHEMBL1083517	A	A	CHEMBL1090872	A	A
CHEMBL104148	A	A	CHEMBL1083521	A	A	CHEMBL1090873	B	B
CHEMBL104408	A	A	CHEMBL1083829	B	A	CHEMBL1091192	A	B
CHEMBL104941	A	A	CHEMBL1083836	A	A	CHEMBL1091193	B	B
CHEMBL105442	A	A	CHEMBL1084115	A	A	CHEMBL1091194	B	B
CHEMBL106389	A	A	CHEMBL1084116	A	A	CHEMBL1091869	B	B
CHEMBL106439	A	A	CHEMBL1084143	A	A	CHEMBL1091870	B	B
CHEMBL1075789	A	A	CHEMBL1084342	A	A	CHEMBL1092159	A	A
CHEMBL1076825	A	A	CHEMBL1084390	B	A	CHEMBL1092203	B	B
CHEMBL1076840	A	A	CHEMBL1084391	A	A	CHEMBL1092207	B	A
CHEMBL1077080	A	B	CHEMBL1084431	A	A	CHEMBL1092399	B	B
CHEMBL1077182	B	B	CHEMBL1084624	A	A	CHEMBL1093051	A	A
CHEMBL1077184	B	B	CHEMBL1084678	A	A	CHEMBL1093053	A	A
CHEMBL1077204	A	A	CHEMBL1084935	A	A	CHEMBL1093087	A	A
CHEMBL1077259	A	A	CHEMBL1085422	B	B	CHEMBL1093088	A	A
CHEMBL1077357	A	A	CHEMBL108551	A	A	CHEMBL1093128	B	A
CHEMBL1077383	A	A	CHEMBL1085666	A	A	CHEMBL1093129	B	B
CHEMBL1077389	A	A	CHEMBL1085712	B	B	CHEMBL1093335	A	A
CHEMBL1077563	B	B	CHEMBL1085714	B	B	CHEMBL1093351	A	A
CHEMBL1077604	A	B	CHEMBL1085715	B	B	CHEMBL1093362	A	A
CHEMBL1078126	B	B	CHEMBL1085716	A	B	CHEMBL1094041	A	A
CHEMBL1078142	B	B	CHEMBL1085717	B	B	CHEMBL1094042	A	A
CHEMBL1078204	A	B	CHEMBL1085718	A	B	CHEMBL1094276	B	B
CHEMBL1078221	A	B	CHEMBL1085719	B	B	CHEMBL1094277	B	B
CHEMBL1078315	B	B	CHEMBL1085895	A	A	CHEMBL1094304	A	B
CHEMBL1078316	B	B	CHEMBL1086409	A	A	CHEMBL1094408	A	A
CHEMBL1078317	B	B	CHEMBL1086410	A	A	CHEMBL1094597	B	B
CHEMBL1078318	B	B	CHEMBL1088740	A	A	CHEMBL109480	A	A
CHEMBL1078319	B	B	CHEMBL1088928	A	B	CHEMBL1095030	B	B
CHEMBL1078389	B	B	CHEMBL1088949	A	A	CHEMBL109527	A	A
CHEMBL1078572	A	A	CHEMBL1089050	A	A	CHEMBL1095348	B	B
CHEMBL1078573	A	A	CHEMBL1089343	A	A	CHEMBL1095485	B	B
CHEMBL1078690	A	A	CHEMBL1089359	A	A	CHEMBL1096002	A	A
			CHEMBL1089393	A	A	CHEMBL1096003	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL109612	B	B
CHEMBL1096225	A	A
CHEMBL1096227	A	A
CHEMBL1096229	A	A
CHEMBL1096231	A	A
CHEMBL1096232	A	A
CHEMBL1096233	A	A
CHEMBL1096234	A	A
CHEMBL1096235	A	A
CHEMBL1096236	A	A
CHEMBL1096237	A	A
CHEMBL1096238	A	A
CHEMBL1096239	A	A
CHEMBL1096240	A	A
CHEMBL1096241	A	A
CHEMBL1096242	A	A
CHEMBL1096260	B	B
CHEMBL1096261	B	B
CHEMBL1096262	B	B
CHEMBL1097104	A	B
CHEMBL1097601	B	B
CHEMBL1097935	B	B
CHEMBL109822	B	B
CHEMBL1098258	A	B
CHEMBL111146	A	B
CHEMBL111172	A	A
CHEMBL111733	A	A
CHEMBL112834	B	B
CHEMBL112896	B	B
CHEMBL112944	A	A
CHEMBL112953	B	B
CHEMBL113194	B	B
CHEMBL114053	A	A
CHEMBL11475	A	B
CHEMBL115523	B	B
CHEMBL115706	A	A
CHEMBL1159657	A	A
CHEMBL116081	A	A
CHEMBL1162993	A	B
CHEMBL1163553	A	A
CHEMBL1163806	A	A
CHEMBL1163886	A	A
CHEMBL1163973	A	A
CHEMBL1164335	A	A
CHEMBL1164552	A	A
CHEMBL1164847	A	A
CHEMBL116510	A	A
CHEMBL1165102	A	A
CHEMBL1165135	B	B
CHEMBL1165189	B	B
CHEMBL1165237	B	B
CHEMBL1165443	A	A
CHEMBL1165508	B	A
CHEMBL1165580	A	A
CHEMBL1165787	B	A
CHEMBL116582	A	A
CHEMBL116614	B	A
CHEMBL116619	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL116646	A	A
CHEMBL116647	A	A
CHEMBL1169759	A	A
CHEMBL1169797	B	B
CHEMBL1169840	B	B
CHEMBL1169841	A	B
CHEMBL1169842	B	A
CHEMBL1169843	A	B
CHEMBL1169844	B	B
CHEMBL1169845	B	B
CHEMBL1169905	B	B
CHEMBL1169914	B	A
CHEMBL1169918	B	B
CHEMBL117	B	B
CHEMBL1170019	B	B
CHEMBL1170020	B	B
CHEMBL1170103	B	B
CHEMBL1170112	B	B
CHEMBL1170203	B	B
CHEMBL1170204	B	B
CHEMBL1170371	B	B
CHEMBL1170389	B	B
CHEMBL1170390	B	B
CHEMBL1170815	B	B
CHEMBL1171229	B	B
CHEMBL1171231	B	B
CHEMBL1171393	B	B
CHEMBL1171394	B	B
CHEMBL1171517	B	B
CHEMBL1171583	A	B
CHEMBL1171584	B	B
CHEMBL1171730	B	A
CHEMBL1171731	B	A
CHEMBL1172072	B	B
CHEMBL1172124	B	B
CHEMBL1172271	B	B
CHEMBL1172324	B	B
CHEMBL1172326	B	B
CHEMBL1172327	B	B
CHEMBL1172499	B	B
CHEMBL1172514	B	B
CHEMBL1172517	B	B
CHEMBL1172542	B	B
CHEMBL1172543	B	A
CHEMBL117259	A	A
CHEMBL1172702	B	B
CHEMBL1173465	B	B
CHEMBL1173586	B	A
CHEMBL1173655	A	A
CHEMBL1173731	A	B
CHEMBL1173801	B	A
CHEMBL117473	A	A
CHEMBL117593	A	A
CHEMBL117647	A	A
CHEMBL117712	A	A
CHEMBL117866	A	A
CHEMBL117939	A	A
CHEMBL118	B	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL1180	A	A
CHEMBL119106	A	A
CHEMBL1201182	A	B
CHEMBL1208892	A	A
CHEMBL1208893	A	A
CHEMBL1208965	A	A
CHEMBL1209015	A	A
CHEMBL1209757	A	A
CHEMBL1209758	A	A
CHEMBL1209759	A	A
CHEMBL1209841	A	A
CHEMBL1209843	A	A
CHEMBL1209935	B	B
CHEMBL1209936	B	B
CHEMBL1209937	B	B
CHEMBL1210001	B	B
CHEMBL1210002	B	B
CHEMBL1210055	B	B
CHEMBL1214676	A	A
CHEMBL1214677	A	A
CHEMBL1214679	A	A
CHEMBL1214746	A	A
CHEMBL1214748	A	A
CHEMBL1214750	A	A
CHEMBL1214827	A	A
CHEMBL1215008	B	B
CHEMBL1215014	B	A
CHEMBL1215148	B	B
CHEMBL1215218	A	B
CHEMBL1215282	B	A
CHEMBL1215283	B	A
CHEMBL1215284	B	B
CHEMBL1215347	B	A
CHEMBL1215348	A	A
CHEMBL1215349	A	A
CHEMBL1215467	A	A
CHEMBL1215468	A	A
CHEMBL1215538	B	A
CHEMBL1215539	A	A
CHEMBL1215540	A	A
CHEMBL1215541	A	A
CHEMBL1215542	A	A
CHEMBL1215543	A	A
CHEMBL1215609	B	A
CHEMBL1215611	A	A
CHEMBL1215613	A	A
CHEMBL1215676	A	A
CHEMBL1215677	A	A
CHEMBL1215741	A	A
CHEMBL1215742	A	A
CHEMBL1215743	A	A
CHEMBL1215744	A	A
CHEMBL1215745	A	A
CHEMBL1215879	B	B
CHEMBL1215880	B	B
CHEMBL1215881	B	B
CHEMBL1215882	B	B
CHEMBL1221446	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL1221447	A	B
CHEMBL1221448	A	A
CHEMBL1221600	A	B
CHEMBL1223570	B	B
CHEMBL1223572	B	B
CHEMBL1223635	B	B
CHEMBL1224775	A	A
CHEMBL1229517	B	A
CHEMBL1230020	B	A
CHEMBL1230201	A	A
CHEMBL1230607	A	B
CHEMBL1231552	B	B
CHEMBL1233002	A	A
CHEMBL1236095	A	A
CHEMBL123777	B	A
CHEMBL124033	B	A
CHEMBL124072	A	A
CHEMBL1241214	A	A
CHEMBL1241229	A	A
CHEMBL1241232	A	A
CHEMBL1241564	B	B
CHEMBL1241656	B	B
CHEMBL1241657	B	B
CHEMBL1241753	B	A
CHEMBL1241754	A	B
CHEMBL1241846	A	A
CHEMBL1241930	A	A
CHEMBL1242450	A	B
CHEMBL1242451	A	B
CHEMBL1242452	B	B
CHEMBL1242546	B	B
CHEMBL1242547	A	A
CHEMBL1242637	A	A
CHEMBL1242638	B	B
CHEMBL1242730	B	B
CHEMBL1242731	B	B
CHEMBL1242745	A	A
CHEMBL1242821	A	A
CHEMBL1242822	A	A
CHEMBL1242824	B	B
CHEMBL1242990	B	B
CHEMBL124373	A	A
CHEMBL124477	A	A
CHEMBL124620	A	A
CHEMBL125082	A	A
CHEMBL1253209	A	B
CHEMBL1253265	A	A
CHEMBL1253268	A	B
CHEMBL1253359	B	B
CHEMBL1253360	A	B
CHEMBL1253520	B	B
CHEMBL1253523	A	B
CHEMBL1253524	B	A
CHEMBL1253525	B	A
CHEMBL1253527	A	A
CHEMBL1253528	A	A
CHEMBL1253530	B	B
CHEMBL1253717	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL1253718	A	A
CHEMBL1253719	A	A
CHEMBL1253720	B	A
CHEMBL1253721	B	A
CHEMBL125393	A	A
CHEMBL1253978	A	A
CHEMBL125401	A	B
CHEMBL1254071	A	A
CHEMBL1254142	A	A
CHEMBL1254396	A	A
CHEMBL1254397	A	A
CHEMBL1254478	A	A
CHEMBL1254575	B	A
CHEMBL1254631	A	A
CHEMBL1254632	A	A
CHEMBL1254712	B	A
CHEMBL1255103	A	A
CHEMBL1256130	A	A
CHEMBL1257179	A	A
CHEMBL1257180	A	A
CHEMBL1257296	A	A
CHEMBL125750	A	A
CHEMBL1257995	A	A
CHEMBL1258115	A	A
CHEMBL1258346	A	A
CHEMBL1258347	A	A
CHEMBL1258568	A	A
CHEMBL1258569	A	A
CHEMBL1258680	A	A
CHEMBL1258793	A	A
CHEMBL1258794	A	A
CHEMBL1258912	A	A
CHEMBL1258913	A	A
CHEMBL1258947	A	A
CHEMBL126077	B	B
CHEMBL126087	A	A
CHEMBL126545	A	A
CHEMBL126922	A	A
CHEMBL1269228	A	A
CHEMBL1269230	A	A
CHEMBL1269232	A	A
CHEMBL1269234	A	A
CHEMBL1269235	A	A
CHEMBL1269236	B	A
CHEMBL1269237	A	A
CHEMBL1269516	B	B
CHEMBL1269521	A	A
CHEMBL1269524	A	A
CHEMBL1269535	A	A
CHEMBL1269536	A	A
CHEMBL1269812	A	B
CHEMBL1270230	A	B
CHEMBL1271280	B	B
CHEMBL1271483	B	B
CHEMBL1271536	B	B
CHEMBL1271592	B	B
CHEMBL1271866	A	B
CHEMBL1272140	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL1275974	A	A
CHEMBL1275975	A	A
CHEMBL1276283	B	B
CHEMBL1276353	B	B
CHEMBL1276354	B	B
CHEMBL1276376	B	A
CHEMBL1276464	B	B
CHEMBL1276498	B	B
CHEMBL1276844	A	B
CHEMBL1276845	B	A
CHEMBL1277017	B	B
CHEMBL1277038	A	A
CHEMBL1277039	A	A
CHEMBL1277110	B	B
CHEMBL1277111	B	A
CHEMBL1277128	A	A
CHEMBL1277129	A	A
CHEMBL1277155	B	A
CHEMBL1277199	B	B
CHEMBL1277220	A	A
CHEMBL1277221	A	A
CHEMBL1277243	A	B
CHEMBL1277245	A	A
CHEMBL1277293	A	A
CHEMBL1277294	B	A
CHEMBL1277316	A	A
CHEMBL1277334	A	A
CHEMBL1277335	B	A
CHEMBL1277336	A	A
CHEMBL1277382	B	B
CHEMBL1277424	A	B
CHEMBL1277473	A	A
CHEMBL1277474	B	A
CHEMBL1277517	A	A
CHEMBL1277518	B	A
CHEMBL1277644	A	A
CHEMBL1277738	A	A
CHEMBL1277826	A	A
CHEMBL1277908	A	A
CHEMBL1278004	B	B
CHEMBL1278096	B	A
CHEMBL1278186	B	B
CHEMBL1278187	A	B
CHEMBL127852	A	A
CHEMBL127997	A	A
CHEMBL12850	B	B
CHEMBL1287817	A	B
CHEMBL1288405	A	B
CHEMBL1288406	B	A
CHEMBL1288407	B	A
CHEMBL1288830	A	B
CHEMBL1288831	A	B
CHEMBL1288832	B	B
CHEMBL1288833	B	B
CHEMBL1288834	B	B
CHEMBL1288835	B	B
CHEMBL1288836	B	B
CHEMBL1288837	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL1288839	B	B
CHEMBL1306725	B	B
CHEMBL1340723	B	B
CHEMBL135561	B	A
CHEMBL136053	B	B
CHEMBL136175	B	A
CHEMBL136268	B	A
CHEMBL1363219	A	A
CHEMBL138236	B	B
CHEMBL1385551	B	B
CHEMBL138662	A	A
CHEMBL139653	A	A
CHEMBL139657	A	A
CHEMBL140000	A	A
CHEMBL140014	A	A
CHEMBL140530	A	A
CHEMBL140566	A	A
CHEMBL140718	B	B
CHEMBL140811	A	A
CHEMBL140899	A	A
CHEMBL140900	A	A
CHEMBL140952	A	A
CHEMBL1413473	A	B
CHEMBL141689	A	A
CHEMBL142120	A	A
CHEMBL1426845	B	B
CHEMBL142918	A	A
CHEMBL142931	A	A
CHEMBL142992	A	A
CHEMBL1431	B	B
CHEMBL143179	A	A
CHEMBL143255	A	A
CHEMBL143283	A	A
CHEMBL1433041	B	B
CHEMBL143329	A	A
CHEMBL1443272	A	A
CHEMBL1443379	A	B
CHEMBL145	B	B
CHEMBL1451880	B	B
CHEMBL146035	A	A
CHEMBL1462900	A	A
CHEMBL1465339	B	B
CHEMBL1466	B	B
CHEMBL147350	A	A
CHEMBL14762	B	A
CHEMBL148313	A	A
CHEMBL1483261	B	A
CHEMBL148638	A	A
CHEMBL148968	A	A
CHEMBL148995	A	A
CHEMBL149096	A	A
CHEMBL149172	B	A
CHEMBL149322	B	B
CHEMBL149352	A	A
CHEMBL149450	A	A
CHEMBL149623	B	A
CHEMBL149834	A	A
CHEMBL150016	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL150072	A	A
CHEMBL150607	A	B
CHEMBL150867	A	A
CHEMBL1512579	A	A
CHEMBL151336	A	A
CHEMBL151831	A	A
CHEMBL151840	A	A
CHEMBL1533728	A	A
CHEMBL154716	A	B
CHEMBL1551	B	B
CHEMBL155405	A	B
CHEMBL155693	A	A
CHEMBL1563	A	A
CHEMBL1566492	A	A
CHEMBL15872	B	A
CHEMBL159	A	A
CHEMBL16063	A	A
CHEMBL1614701	A	A
CHEMBL1615165	A	A
CHEMBL162423	A	B
CHEMBL16294	A	B
CHEMBL1629726	A	A
CHEMBL1630875	A	B
CHEMBL1630878	A	A
CHEMBL1630879	A	A
CHEMBL1630881	A	A
CHEMBL1630882	A	A
CHEMBL1630883	B	B
CHEMBL1630885	B	B
CHEMBL1631237	B	B
CHEMBL1631240	B	B
CHEMBL1631242	B	A
CHEMBL1631244	B	A
CHEMBL1631246	A	A
CHEMBL1631910	A	A
CHEMBL1631911	A	A
CHEMBL1631912	A	A
CHEMBL1631914	A	A
CHEMBL1631915	A	A
CHEMBL1631916	A	A
CHEMBL1631917	A	A
CHEMBL1631918	A	A
CHEMBL16364	B	B
CHEMBL164	B	A
CHEMBL1641606	B	A
CHEMBL1641624	A	A
CHEMBL1641642	B	B
CHEMBL1641644	A	B
CHEMBL1641646	B	B
CHEMBL1641647	B	B
CHEMBL1641648	A	B
CHEMBL1641650	A	B
CHEMBL1643027	A	A
CHEMBL1643031	A	A
CHEMBL1643038	A	A
CHEMBL1643040	A	A
CHEMBL1643041	A	A
CHEMBL1643044	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL1643045	A	A
CHEMBL1643048	A	A
CHEMBL1643051	A	A
CHEMBL1643054	A	A
CHEMBL1643765	A	A
CHEMBL1643807	A	A
CHEMBL1643808	A	A
CHEMBL1643809	A	A
CHEMBL1643810	A	A
CHEMBL1643811	A	A
CHEMBL1643813	A	A
CHEMBL1643815	A	A
CHEMBL1643817	A	A
CHEMBL1643823	A	A
CHEMBL1643825	A	A
CHEMBL1643826	A	A
CHEMBL1643903	A	A
CHEMBL1644987	A	A
CHEMBL164660	B	B
CHEMBL165020	A	A
CHEMBL1651415	A	A
CHEMBL1651417	A	A
CHEMBL1651418	A	A
CHEMBL1651419	A	A
CHEMBL1651420	A	A
CHEMBL1651421	A	A
CHEMBL1651422	A	A
CHEMBL1651423	A	A
CHEMBL1651429	A	A
CHEMBL1651435	B	A
CHEMBL1651437	A	B
CHEMBL1651440	A	B
CHEMBL1651443	B	B
CHEMBL1651461	A	A
CHEMBL1651462	A	A
CHEMBL1651463	A	A
CHEMBL1651465	A	A
CHEMBL1651466	A	A
CHEMBL1651470	A	A
CHEMBL1651473	A	A
CHEMBL1651476	A	A
CHEMBL1651478	A	A
CHEMBL1651483	A	A
CHEMBL1651484	B	A
CHEMBL1651485	A	B
CHEMBL1651486	B	A
CHEMBL1651487	A	A
CHEMBL1651489	A	B
CHEMBL1651490	A	A
CHEMBL1651491	B	A
CHEMBL1651915	A	A
CHEMBL1651917	A	A
CHEMBL1651918	A	A
CHEMBL1651921	B	A
CHEMBL1652013	A	B
CHEMBL1652176	A	A
CHEMBL1652382	A	A
CHEMBL1652383	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL1652384	A	A
CHEMBL1652385	A	A
CHEMBL1652386	A	A
CHEMBL1652387	A	A
CHEMBL1652388	B	A
CHEMBL166221	A	A
CHEMBL1668121	B	A
CHEMBL1668229	A	A
CHEMBL1668233	A	A
CHEMBL168	B	B
CHEMBL1684593	A	A
CHEMBL1684594	A	A
CHEMBL1684595	A	A
CHEMBL1684596	A	A
CHEMBL1684601	B	A
CHEMBL1684603	A	A
CHEMBL1684605	A	A
CHEMBL1684609	A	A
CHEMBL1684610	B	A
CHEMBL1684612	A	A
CHEMBL1684613	A	A
CHEMBL1684615	A	A
CHEMBL1684616	A	B
CHEMBL1684984	A	A
CHEMBL168668	B	B
CHEMBL1688184	A	A
CHEMBL1688185	A	A
CHEMBL1688186	A	A
CHEMBL1688187	A	A
CHEMBL1688188	A	A
CHEMBL1688189	A	A
CHEMBL1688191	A	A
CHEMBL1688194	B	A
CHEMBL1688195	A	A
CHEMBL1689413	A	A
CHEMBL1689414	A	A
CHEMBL1689415	A	A
CHEMBL1689417	A	A
CHEMBL1689419	A	A
CHEMBL1689420	A	A
CHEMBL1689421	A	A
CHEMBL1689424	A	B
CHEMBL169	B	B
CHEMBL16923	B	B
CHEMBL16937	B	B
CHEMBL16958	A	A
CHEMBL16993	B	B
CHEMBL17006	B	B
CHEMBL17008	B	B
CHEMBL17199	A	B
CHEMBL17291	B	B
CHEMBL17322	B	B
CHEMBL17324	B	B
CHEMBL17329	A	B
CHEMBL17347	A	B
CHEMBL1738703	A	A
CHEMBL1738728	A	A
CHEMBL1739368	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL1743599	B	A
CHEMBL17444	B	B
CHEMBL174820	A	B
CHEMBL17497	A	B
CHEMBL1751	A	A
CHEMBL175431	A	A
CHEMBL175441	A	A
CHEMBL175897	A	A
CHEMBL17594	B	B
CHEMBL1760911	A	A
CHEMBL1760913	A	A
CHEMBL1760914	A	A
CHEMBL176131	A	A
CHEMBL1762456	B	B
CHEMBL176435	A	A
CHEMBL17647	B	B
CHEMBL1766681	B	B
CHEMBL1766682	B	A
CHEMBL1766683	A	A
CHEMBL1766685	A	A
CHEMBL1766686	B	A
CHEMBL1766687	B	B
CHEMBL1766688	A	B
CHEMBL1766689	A	A
CHEMBL1766691	B	B
CHEMBL1766692	A	B
CHEMBL1766693	A	A
CHEMBL1766694	B	A
CHEMBL1766695	B	B
CHEMBL1770234	A	A
CHEMBL1770235	A	A
CHEMBL1770236	A	A
CHEMBL1770239	A	A
CHEMBL1770240	A	A
CHEMBL1770242	B	A
CHEMBL1773418	A	A
CHEMBL1773419	A	A
CHEMBL1773420	A	A
CHEMBL1773899	A	A
CHEMBL1775018	B	B
CHEMBL1775022	A	A
CHEMBL1775023	A	A
CHEMBL1775024	A	A
CHEMBL1775026	B	A
CHEMBL1775027	B	A
CHEMBL1775030	A	B
CHEMBL1775070	B	B
CHEMBL1775071	B	B
CHEMBL1775213	A	B
CHEMBL1775214	A	A
CHEMBL1777816	B	B
CHEMBL1778034	B	B
CHEMBL1778035	B	B
CHEMBL1778036	B	B
CHEMBL1778037	B	B
CHEMBL1778038	B	B
CHEMBL1778039	B	B
CHEMBL1778040	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL1778042	B	B
CHEMBL1778043	B	B
CHEMBL1778044	B	B
CHEMBL1778194	A	A
CHEMBL1779239	A	A
CHEMBL1779240	A	A
CHEMBL1779241	A	A
CHEMBL1779242	A	A
CHEMBL1779531	A	A
CHEMBL1782082	A	B
CHEMBL1782150	B	B
CHEMBL1782151	B	B
CHEMBL1782152	B	B
CHEMBL1782153	B	B
CHEMBL1782154	B	B
CHEMBL1782155	B	B
CHEMBL1782156	B	B
CHEMBL1782157	B	B
CHEMBL1782760	A	A
CHEMBL1782763	A	A
CHEMBL1782766	A	A
CHEMBL1783385	B	B
CHEMBL1783386	B	A
CHEMBL178395	A	B
CHEMBL1784242	A	B
CHEMBL1784622	B	A
CHEMBL178715	B	A
CHEMBL179029	A	A
CHEMBL179143	B	A
CHEMBL1794067	A	A
CHEMBL1794068	A	A
CHEMBL1794069	A	A
CHEMBL1795548	B	B
CHEMBL1795549	B	B
CHEMBL1795551	B	B
CHEMBL1795553	B	B
CHEMBL1795554	B	B
CHEMBL1795556	B	B
CHEMBL1795558	B	B
CHEMBL1795559	B	B
CHEMBL1795731	A	B
CHEMBL1795734	A	B
CHEMBL1795735	B	A
CHEMBL1795736	A	B
CHEMBL1795738	B	B
CHEMBL1795739	B	B
CHEMBL1795740	B	B
CHEMBL1795741	B	B
CHEMBL1795833	A	A
CHEMBL1795944	B	B
CHEMBL1795946	B	B
CHEMBL1795947	B	B
CHEMBL1795949	B	B
CHEMBL1795950	B	B
CHEMBL1795951	B	B
CHEMBL1795959	A	A
CHEMBL1795961	A	A
CHEMBL1795963	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL1795965	A	A
CHEMBL1795966	A	A
CHEMBL1795967	A	A
CHEMBL1795969	A	A
CHEMBL1795970	B	A
CHEMBL179749	A	A
CHEMBL17979	B	B
CHEMBL179829	B	B
CHEMBL180005	A	A
CHEMBL180216	A	A
CHEMBL180244	A	A
CHEMBL180631	B	B
CHEMBL1807790	A	A
CHEMBL1807792	A	A
CHEMBL1807794	A	A
CHEMBL1807795	A	A
CHEMBL1807796	A	A
CHEMBL1807797	A	A
CHEMBL1807798	A	A
CHEMBL1807800	A	A
CHEMBL1807803	A	A
CHEMBL1807805	A	A
CHEMBL1807806	A	A
CHEMBL1807807	A	A
CHEMBL1807808	A	A
CHEMBL1807810	A	A
CHEMBL1807812	A	A
CHEMBL1807813	A	A
CHEMBL180796	A	A
CHEMBL1808240	B	B
CHEMBL1808242	B	B
CHEMBL1808243	B	B
CHEMBL1808246	B	B
CHEMBL1808247	B	A
CHEMBL1808248	B	B
CHEMBL1808250	B	A
CHEMBL1808252	B	A
CHEMBL1808346	B	B
CHEMBL1808347	B	B
CHEMBL1808348	B	B
CHEMBL1808377	B	B
CHEMBL1808379	B	A
CHEMBL1808622	A	A
CHEMBL1808624	A	A
CHEMBL1808625	A	A
CHEMBL1808629	A	A
CHEMBL1808631	A	A
CHEMBL1808634	A	A
CHEMBL1808635	A	A
CHEMBL1808637	A	A
CHEMBL1808639	A	A
CHEMBL1808640	A	A
CHEMBL1808642	A	A
CHEMBL1808643	A	A
CHEMBL1808644	A	A
CHEMBL1808645	A	A
CHEMBL1808671	B	B
CHEMBL1808672	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL1808673	A	A
CHEMBL1808674	A	A
CHEMBL1808803	A	A
CHEMBL1808804	A	A
CHEMBL1808805	A	A
CHEMBL1808806	A	A
CHEMBL1808807	A	A
CHEMBL1808808	A	A
CHEMBL1808811	A	A
CHEMBL1808814	A	A
CHEMBL1808816	A	A
CHEMBL1808817	A	A
CHEMBL1808819	A	A
CHEMBL1808820	A	A
CHEMBL1808821	A	A
CHEMBL1808823	A	A
CHEMBL1808825	A	A
CHEMBL1808826	A	A
CHEMBL1808827	A	A
CHEMBL1808828	A	A
CHEMBL1808830	A	A
CHEMBL180889	A	A
CHEMBL180895	A	B
CHEMBL181061	A	A
CHEMBL181064	B	A
CHEMBL181150	A	A
CHEMBL181206	B	B
CHEMBL1813144	A	A
CHEMBL181354	B	B
CHEMBL181459	A	A
CHEMBL1814767	A	A
CHEMBL1814769	A	B
CHEMBL1814774	B	A
CHEMBL1818538	B	A
CHEMBL1818541	A	A
CHEMBL1818638	B	A
CHEMBL1818652	A	A
CHEMBL1818654	A	A
CHEMBL1819137	A	A
CHEMBL1819138	A	A
CHEMBL1819140	A	A
CHEMBL1819141	A	A
CHEMBL1819143	A	A
CHEMBL1819255	A	A
CHEMBL1819258	A	A
CHEMBL1819260	A	A
CHEMBL1819266	A	A
CHEMBL1819268	A	A
CHEMBL1819269	A	A
CHEMBL1819271	A	A
CHEMBL1819273	A	A
CHEMBL1819274	A	A
CHEMBL1819275	A	A
CHEMBL1819375	A	A
CHEMBL1819379	A	A
CHEMBL1819429	B	A
CHEMBL1821761	A	A
CHEMBL1822486	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL1822487	A	A
CHEMBL1822489	A	A
CHEMBL1822490	A	A
CHEMBL1822492	A	A
CHEMBL1822493	A	A
CHEMBL1822495	A	A
CHEMBL182260	A	A
CHEMBL1822637	A	A
CHEMBL1822638	A	A
CHEMBL1822639	A	A
CHEMBL1822640	A	A
CHEMBL1822641	A	A
CHEMBL1822643	A	A
CHEMBL1822644	A	A
CHEMBL1822645	A	A
CHEMBL1822648	A	A
CHEMBL1822650	A	A
CHEMBL1822652	A	A
CHEMBL1822653	A	A
CHEMBL1822654	A	A
CHEMBL1822655	A	A
CHEMBL1822658	A	A
CHEMBL1822659	A	A
CHEMBL1822661	A	A
CHEMBL1822979	A	A
CHEMBL1822980	A	A
CHEMBL1822981	A	A
CHEMBL1822982	A	A
CHEMBL1822983	B	B
CHEMBL1822984	B	B
CHEMBL1822985	B	B
CHEMBL1822986	B	B
CHEMBL1822987	B	B
CHEMBL1822988	B	B
CHEMBL1825089	A	A
CHEMBL1825090	A	A
CHEMBL1825092	A	A
CHEMBL1825093	A	A
CHEMBL1825095	A	A
CHEMBL1828648	A	A
CHEMBL1828920	A	A
CHEMBL1829304	A	A
CHEMBL1830396	A	A
CHEMBL1830397	A	A
CHEMBL1830420	A	A
CHEMBL1830422	A	A
CHEMBL1830424	A	A
CHEMBL1830536	A	A
CHEMBL1830537	A	A
CHEMBL1830540	A	A
CHEMBL1830668	B	A
CHEMBL1830669	A	A
CHEMBL1830670	A	B
CHEMBL1830671	A	B
CHEMBL1830672	A	B
CHEMBL1830673	A	B
CHEMBL1830675	B	B
CHEMBL1830676	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL1830678	B	B
CHEMBL1830679	B	B
CHEMBL1830681	A	B
CHEMBL1833978	A	A
CHEMBL1834094	B	B
CHEMBL1834095	B	B
CHEMBL1834096	A	A
CHEMBL1834353	A	A
CHEMBL1834354	A	A
CHEMBL1834356	A	A
CHEMBL1834357	A	A
CHEMBL1834358	A	A
CHEMBL1834359	A	A
CHEMBL1834360	A	A
CHEMBL1834361	A	A
CHEMBL1834461	A	A
CHEMBL1834462	A	A
CHEMBL1834463	A	A
CHEMBL1834464	A	A
CHEMBL1834465	A	A
CHEMBL1834467	A	A
CHEMBL1834468	A	A
CHEMBL1834469	A	A
CHEMBL1834470	A	A
CHEMBL1834471	A	A
CHEMBL1834472	A	A
CHEMBL1834473	A	A
CHEMBL1834475	A	A
CHEMBL1834477	A	A
CHEMBL1834478	A	A
CHEMBL1834479	A	A
CHEMBL1834482	A	A
CHEMBL18351	A	A
CHEMBL183513	B	B
CHEMBL1835154	B	B
CHEMBL1835158	B	B
CHEMBL1835159	B	B
CHEMBL1835161	B	B
CHEMBL1835377	B	B
CHEMBL1836655	A	A
CHEMBL1836656	A	A
CHEMBL1836657	A	A
CHEMBL1836795	A	A
CHEMBL1836817	A	A
CHEMBL1836818	A	A
CHEMBL1836821	A	A
CHEMBL1836822	A	A
CHEMBL1836823	A	A
CHEMBL1836824	A	A
CHEMBL1836825	A	A
CHEMBL183950	A	A
CHEMBL185255	A	A
CHEMBL185633	A	A
CHEMBL186004	A	A
CHEMBL186157	A	A
CHEMBL186830	A	A
CHEMBL187414	A	A
CHEMBL187433	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL187522	A	A
CHEMBL187666	A	A
CHEMBL187816	A	A
CHEMBL187984	A	A
CHEMBL188005	A	A
CHEMBL188251	A	A
CHEMBL188587	A	A
CHEMBL188650	A	A
CHEMBL188678	B	B
CHEMBL188863	A	A
CHEMBL189434	B	A
CHEMBL189584	B	A
CHEMBL189937	A	A
CHEMBL189963	A	A
CHEMBL190091	A	A
CHEMBL190171	A	A
CHEMBL190252	A	A
CHEMBL190460	A	A
CHEMBL190636	A	A
CHEMBL190789	A	A
CHEMBL1908360	B	A
CHEMBL190887	A	A
CHEMBL1910158	A	B
CHEMBL1910254	A	B
CHEMBL1910255	B	A
CHEMBL1910256	B	A
CHEMBL1910259	B	A
CHEMBL1910262	B	A
CHEMBL1910263	B	A
CHEMBL1910264	B	B
CHEMBL1910265	B	B
CHEMBL1911253	A	A
CHEMBL1911255	A	A
CHEMBL1911256	A	A
CHEMBL1911257	A	A
CHEMBL1911258	A	A
CHEMBL1911259	A	A
CHEMBL1911262	A	A
CHEMBL1911263	A	B
CHEMBL1911265	A	A
CHEMBL1911266	B	A
CHEMBL1911267	A	A
CHEMBL1911381	A	A
CHEMBL1911382	B	B
CHEMBL1911383	B	A
CHEMBL1911384	B	B
CHEMBL1911385	B	B
CHEMBL191144	A	A
CHEMBL1911631	B	B
CHEMBL191312	A	A
CHEMBL191334	A	A
CHEMBL1914473	A	A
CHEMBL1914687	A	A
CHEMBL1914688	B	A
CHEMBL1914689	A	A
CHEMBL1914909	B	B
CHEMBL1914910	B	B
CHEMBL1915490	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL1915491	B	B
CHEMBL1915825	A	A
CHEMBL1915826	A	A
CHEMBL1915827	A	A
CHEMBL1915829	A	A
CHEMBL1915832	A	A
CHEMBL1915835	A	A
CHEMBL1915836	A	A
CHEMBL1915837	A	A
CHEMBL1915838	A	A
CHEMBL1915839	B	A
CHEMBL1915841	B	B
CHEMBL1915842	B	A
CHEMBL1915843	B	A
CHEMBL1915844	A	A
CHEMBL1915846	B	B
CHEMBL1915847	B	A
CHEMBL1915848	B	A
CHEMBL1915849	A	A
CHEMBL1915850	A	A
CHEMBL1915851	B	A
CHEMBL1915852	A	A
CHEMBL1915853	A	A
CHEMBL1915854	A	A
CHEMBL1916059	A	A
CHEMBL1916060	A	A
CHEMBL1916061	B	A
CHEMBL1916062	A	A
CHEMBL1916063	A	A
CHEMBL1916064	A	A
CHEMBL1916065	A	A
CHEMBL1916067	A	A
CHEMBL1916068	A	A
CHEMBL1916069	A	A
CHEMBL1916070	A	A
CHEMBL1916071	A	A
CHEMBL1916072	A	A
CHEMBL1916073	A	A
CHEMBL1916074	B	A
CHEMBL1916075	A	A
CHEMBL1916076	A	A
CHEMBL1916077	A	A
CHEMBL1917878	A	A
CHEMBL191816	A	A
CHEMBL191834	A	A
CHEMBL192046	A	A
CHEMBL192264	A	B
CHEMBL1922717	A	A
CHEMBL1922718	A	A
CHEMBL1922719	A	A
CHEMBL1922720	A	A
CHEMBL1922721	B	B
CHEMBL1922722	B	B
CHEMBL1922723	B	B
CHEMBL1922724	B	B
CHEMBL192281	A	A
CHEMBL1923074	B	B
CHEMBL1923075	A	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL1923076	B	B
CHEMBL1923078	A	B
CHEMBL1923079	B	B
CHEMBL1923080	B	B
CHEMBL1923336	A	A
CHEMBL192575	A	A
CHEMBL1927071	A	A
CHEMBL1927072	A	A
CHEMBL1927073	A	A
CHEMBL1927075	A	A
CHEMBL1927077	A	A
CHEMBL1927078	A	A
CHEMBL1927079	A	A
CHEMBL1927171	B	A
CHEMBL1927610	A	A
CHEMBL1927611	A	A
CHEMBL1927612	A	A
CHEMBL1927613	A	A
CHEMBL1927614	A	A
CHEMBL1927615	A	A
CHEMBL1927616	A	A
CHEMBL1927618	A	A
CHEMBL1927620	A	A
CHEMBL1927621	A	A
CHEMBL1928291	A	B
CHEMBL1928309	B	A
CHEMBL1928311	A	A
CHEMBL1928312	B	A
CHEMBL1928541	A	B
CHEMBL1929098	A	B
CHEMBL1929100	A	A
CHEMBL1929103	A	B
CHEMBL1929104	A	A
CHEMBL1929105	A	A
CHEMBL1929106	A	A
CHEMBL1929320	B	B
CHEMBL1929321	B	B
CHEMBL1929322	B	B
CHEMBL1929323	B	B
CHEMBL1929325	B	B
CHEMBL1929326	B	B
CHEMBL1929327	B	B
CHEMBL1929328	B	B
CHEMBL1929329	B	B
CHEMBL1929330	B	B
CHEMBL1929331	B	B
CHEMBL1929332	B	B
CHEMBL1929333	B	B
CHEMBL1929334	B	B
CHEMBL1929335	A	A
CHEMBL1929336	A	A
CHEMBL1929337	B	A
CHEMBL192945	A	A
CHEMBL1929466	A	A
CHEMBL1929470	A	A
CHEMBL1929471	A	A
CHEMBL1929472	B	B
CHEMBL1929473	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL1929474	B	B
CHEMBL1929475	B	B
CHEMBL1929476	B	B
CHEMBL1933071	A	B
CHEMBL1933425	A	A
CHEMBL1933426	A	A
CHEMBL1933427	A	A
CHEMBL1933437	A	B
CHEMBL1933438	B	A
CHEMBL1933440	B	A
CHEMBL1933576	A	A
CHEMBL1933582	A	A
CHEMBL1934144	B	B
CHEMBL1934146	B	B
CHEMBL1934147	A	B
CHEMBL1934149	B	B
CHEMBL1934151	B	B
CHEMBL1934152	B	B
CHEMBL1934155	B	A
CHEMBL1938425	B	B
CHEMBL1938427	B	A
CHEMBL1938428	B	B
CHEMBL1938429	A	A
CHEMBL1938430	A	A
CHEMBL1938431	A	A
CHEMBL1938432	A	A
CHEMBL1938433	A	A
CHEMBL1938434	A	A
CHEMBL1938435	B	A
CHEMBL1938436	A	A
CHEMBL1938437	B	A
CHEMBL1938438	A	A
CHEMBL1938439	A	A
CHEMBL1938440	A	A
CHEMBL1938441	A	A
CHEMBL1938443	B	A
CHEMBL1938444	B	A
CHEMBL1938445	A	A
CHEMBL1938446	B	A
CHEMBL1938448	A	A
CHEMBL1938449	B	A
CHEMBL1938450	B	A
CHEMBL1939317	A	B
CHEMBL1939318	A	A
CHEMBL1939369	A	A
CHEMBL1939370	B	A
CHEMBL1939371	A	A
CHEMBL1939372	A	A
CHEMBL1939373	A	A
CHEMBL1939374	A	A
CHEMBL1939376	A	A
CHEMBL1939377	A	A
CHEMBL1939378	A	A
CHEMBL1939379	A	A
CHEMBL1939380	A	A
CHEMBL1939382	A	A
CHEMBL1939383	A	A
CHEMBL1939384	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL1939385	A	A
CHEMBL1939397	B	B
CHEMBL1939398	B	B
CHEMBL1939399	B	B
CHEMBL1939400	B	B
CHEMBL1939401	B	B
CHEMBL1939402	B	B
CHEMBL1939403	B	B
CHEMBL1939404	B	B
CHEMBL1939405	B	B
CHEMBL1939406	B	B
CHEMBL1939407	A	B
CHEMBL1939408	A	B
CHEMBL1939410	B	B
CHEMBL1939411	B	B
CHEMBL1939433	B	B
CHEMBL1940318	B	B
CHEMBL1940319	B	B
CHEMBL1940320	B	B
CHEMBL1940486	B	B
CHEMBL1940487	B	B
CHEMBL1940488	B	B
CHEMBL1940489	B	B
CHEMBL1940490	B	B
CHEMBL1940491	B	B
CHEMBL1940492	B	B
CHEMBL1940493	B	B
CHEMBL1940494	B	B
CHEMBL1940668	B	B
CHEMBL1940669	B	B
CHEMBL1940671	B	B
CHEMBL1940672	B	B
CHEMBL1940673	B	B
CHEMBL1940674	B	B
CHEMBL1940675	B	B
CHEMBL1940676	B	B
CHEMBL1940677	B	B
CHEMBL1940678	B	B
CHEMBL1940679	B	B
CHEMBL1940680	B	B
CHEMBL1944698	A	A
CHEMBL1944701	A	A
CHEMBL1944935	A	A
CHEMBL1944936	A	A
CHEMBL1944940	A	A
CHEMBL1944942	A	A
CHEMBL1945119	A	A
CHEMBL1945120	A	B
CHEMBL1945122	A	A
CHEMBL1945232	A	A
CHEMBL1945233	A	A
CHEMBL1945234	A	A
CHEMBL1945439	A	A
CHEMBL1945441	A	A
CHEMBL1945442	A	A
CHEMBL1945443	A	A
CHEMBL1945569	A	A
CHEMBL1949774	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL1949775	B	B
CHEMBL1949776	B	B
CHEMBL1949777	B	B
CHEMBL1949778	A	B
CHEMBL1949779	B	A
CHEMBL1949781	A	A
CHEMBL1949782	A	A
CHEMBL1949783	B	B
CHEMBL1949784	B	B
CHEMBL1949785	B	B
CHEMBL1949787	B	B
CHEMBL1949788	B	B
CHEMBL1949789	B	B
CHEMBL1949790	B	B
CHEMBL1950812	A	A
CHEMBL1950813	B	B
CHEMBL1950814	B	B
CHEMBL1951576	A	A
CHEMBL1951578	A	A
CHEMBL1951579	A	A
CHEMBL1951582	A	A
CHEMBL1952352	B	B
CHEMBL1952353	B	B
CHEMBL1952354	B	B
CHEMBL1952355	B	B
CHEMBL1952357	B	B
CHEMBL1952358	B	B
CHEMBL1952360	B	B
CHEMBL1952361	B	B
CHEMBL1952362	A	B
CHEMBL1952363	B	A
CHEMBL1952365	B	B
CHEMBL1952366	B	B
CHEMBL1952371	B	B
CHEMBL1952373	B	B
CHEMBL1952374	B	B
CHEMBL1952375	B	B
CHEMBL1952376	B	B
CHEMBL1952377	B	B
CHEMBL1952378	B	B
CHEMBL1952379	B	B
CHEMBL1952380	B	A
CHEMBL195267	B	B
CHEMBL1956069	A	A
CHEMBL1956070	A	A
CHEMBL1956190	A	A
CHEMBL1956693	A	A
CHEMBL1956696	A	A
CHEMBL1956697	A	A
CHEMBL1956702	A	A
CHEMBL1957344	B	B
CHEMBL1957345	B	B
CHEMBL1957346	B	B
CHEMBL1957347	B	B
CHEMBL1957458	A	A
CHEMBL1957459	A	A
CHEMBL1957463	A	A
CHEMBL1957464	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL1958021	A	A
CHEMBL1958034	A	A
CHEMBL1958181	B	B
CHEMBL1958182	B	B
CHEMBL1958183	B	B
CHEMBL1958184	B	B
CHEMBL1958185	B	B
CHEMBL1958186	B	B
CHEMBL1958187	B	B
CHEMBL1958188	B	B
CHEMBL1958189	B	B
CHEMBL1958190	B	B
CHEMBL1958191	B	B
CHEMBL1958192	B	B
CHEMBL1958193	B	B
CHEMBL1958194	B	B
CHEMBL1958195	B	B
CHEMBL1958196	B	B
CHEMBL1958212	A	A
CHEMBL1958213	A	A
CHEMBL1958216	A	A
CHEMBL1958221	A	A
CHEMBL195891	A	A
CHEMBL1963387	B	B
CHEMBL1964262	A	A
CHEMBL1964263	A	A
CHEMBL1964264	A	A
CHEMBL1964265	A	A
CHEMBL196437	B	A
CHEMBL196651	B	B
CHEMBL196843	B	A
CHEMBL196950	A	A
CHEMBL1972860	A	B
CHEMBL197406	B	A
CHEMBL198350	A	A
CHEMBL2000089	A	A
CHEMBL200280	A	A
CHEMBL200306	A	A
CHEMBL200726	A	A
CHEMBL200808	A	A
CHEMBL200899	A	A
CHEMBL2010819	B	B
CHEMBL2010940	B	B
CHEMBL2010942	B	B
CHEMBL2010943	A	B
CHEMBL2010944	B	B
CHEMBL2010945	B	B
CHEMBL2011161	A	B
CHEMBL2011164	B	B
CHEMBL2011170	B	B
CHEMBL2011660	B	B
CHEMBL2011661	B	B
CHEMBL2011662	B	B
CHEMBL2011663	B	B
CHEMBL2011664	B	B
CHEMBL2011665	B	B
CHEMBL2011666	B	B
CHEMBL2011667	A	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL2011669	B	A
CHEMBL2011671	B	B
CHEMBL2012302	B	B
CHEMBL2012304	B	B
CHEMBL2012309	A	A
CHEMBL2012321	B	B
CHEMBL2012322	B	B
CHEMBL2012323	B	B
CHEMBL2012324	B	B
CHEMBL2012325	B	B
CHEMBL2012326	B	B
CHEMBL2012327	B	B
CHEMBL2012328	B	B
CHEMBL2012329	B	B
CHEMBL2012330	B	B
CHEMBL2012331	B	B
CHEMBL2012332	B	B
CHEMBL2012333	B	B
CHEMBL2012334	B	B
CHEMBL2012335	A	B
CHEMBL2012336	B	B
CHEMBL2012337	B	B
CHEMBL2012338	B	B
CHEMBL2012342	B	B
CHEMBL2012343	B	B
CHEMBL2012344	B	B
CHEMBL2012345	B	B
CHEMBL2012347	B	B
CHEMBL2012348	B	A
CHEMBL2012350	B	B
CHEMBL2012352	B	B
CHEMBL2012353	B	B
CHEMBL2012354	B	B
CHEMBL2012398	A	A
CHEMBL2012400	A	A
CHEMBL2012402	A	A
CHEMBL2012403	A	A
CHEMBL2012406	A	A
CHEMBL2012407	A	A
CHEMBL2012409	A	A
CHEMBL2012410	A	A
CHEMBL2012411	A	A
CHEMBL2012412	A	A
CHEMBL2012413	A	A
CHEMBL2012414	A	A
CHEMBL2012415	A	A
CHEMBL2012925	A	A
CHEMBL2012926	A	A
CHEMBL2012927	A	A
CHEMBL2012930	A	A
CHEMBL2012931	A	A
CHEMBL2012933	A	A
CHEMBL2012934	A	A
CHEMBL2013119	A	A
CHEMBL2016603	B	B
CHEMBL2017898	B	B
CHEMBL2017899	B	B
CHEMBL2017900	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL2017902	B	B
CHEMBL2018033	B	B
CHEMBL2018035	B	B
CHEMBL2018036	B	B
CHEMBL2018038	B	B
CHEMBL2018039	B	B
CHEMBL2018041	B	B
CHEMBL2018042	B	B
CHEMBL2018043	B	B
CHEMBL2018594	A	A
CHEMBL2018595	A	A
CHEMBL2018597	A	A
CHEMBL2018598	A	A
CHEMBL2018602	B	A
CHEMBL2018603	B	A
CHEMBL2018604	A	A
CHEMBL2018605	A	A
CHEMBL2018606	A	A
CHEMBL2018607	B	A
CHEMBL2018609	A	A
CHEMBL2018610	A	A
CHEMBL2018612	A	A
CHEMBL2018613	A	A
CHEMBL2018614	A	A
CHEMBL2018617	A	A
CHEMBL2018620	B	A
CHEMBL2018624	A	A
CHEMBL2018625	A	A
CHEMBL2018626	A	A
CHEMBL2018726	A	A
CHEMBL2018727	A	A
CHEMBL2018728	A	A
CHEMBL2018729	A	A
CHEMBL2018730	A	A
CHEMBL2018731	A	A
CHEMBL2018732	A	A
CHEMBL2018733	A	A
CHEMBL2018734	A	A
CHEMBL2018737	A	A
CHEMBL2018738	A	A
CHEMBL2018739	A	A
CHEMBL2018742	B	B
CHEMBL2018743	B	A
CHEMBL2018744	B	B
CHEMBL2018877	A	B
CHEMBL2018971	B	B
CHEMBL2018972	B	B
CHEMBL2018973	B	B
CHEMBL2018974	B	B
CHEMBL2018975	B	B
CHEMBL2018976	B	B
CHEMBL2018978	B	B
CHEMBL2018979	B	B
CHEMBL2018980	B	B
CHEMBL2018981	B	B
CHEMBL2018982	B	B
CHEMBL2018983	B	B
CHEMBL2018984	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL2018985	B	B
CHEMBL2018986	B	B
CHEMBL2018987	B	B
CHEMBL2018988	B	B
CHEMBL2018989	B	B
CHEMBL2018990	B	B
CHEMBL2018991	B	B
CHEMBL2018993	B	B
CHEMBL2018994	B	B
CHEMBL2018995	B	B
CHEMBL2018996	B	B
CHEMBL2018997	B	B
CHEMBL2019058	B	B
CHEMBL2019059	B	B
CHEMBL2019060	B	B
CHEMBL2019061	B	B
CHEMBL2019063	B	B
CHEMBL2019064	B	B
CHEMBL2019065	B	B
CHEMBL2021461	A	A
CHEMBL2021469	A	A
CHEMBL2022560	A	A
CHEMBL2022561	A	A
CHEMBL2022562	A	A
CHEMBL2022563	A	A
CHEMBL2022564	A	A
CHEMBL2022566	A	A
CHEMBL2024572	A	A
CHEMBL2024680	B	B
CHEMBL202671	A	A
CHEMBL202721	A	A
CHEMBL2029900	A	A
CHEMBL2029901	A	A
CHEMBL2029902	A	A
CHEMBL2029904	A	A
CHEMBL2029905	A	A
CHEMBL2029906	A	A
CHEMBL2029907	B	A
CHEMBL2029910	A	A
CHEMBL2029911	A	A
CHEMBL2029912	A	A
CHEMBL2029913	A	A
CHEMBL2029914	A	A
CHEMBL2030972	A	A
CHEMBL2030973	A	A
CHEMBL2030975	A	A
CHEMBL2030976	A	A
CHEMBL2030978	A	A
CHEMBL2030979	A	A
CHEMBL2030981	A	A
CHEMBL2030982	A	A
CHEMBL2030983	A	A
CHEMBL2030984	A	A
CHEMBL2030985	A	A
CHEMBL2030986	A	A
CHEMBL2030987	A	A
CHEMBL2030990	A	A
CHEMBL2030992	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL203296	A	B
CHEMBL2035264	A	B
CHEMBL2035265	B	B
CHEMBL2035266	B	A
CHEMBL2035267	A	A
CHEMBL2035268	A	A
CHEMBL2035269	A	B
CHEMBL2035272	B	B
CHEMBL2035906	A	B
CHEMBL2035907	A	A
CHEMBL2035911	B	B
CHEMBL2035915	A	B
CHEMBL2035926	A	A
CHEMBL2037060	A	A
CHEMBL2037061	A	A
CHEMBL2037062	A	A
CHEMBL2037071	A	A
CHEMBL2037072	A	A
CHEMBL2037073	A	A
CHEMBL2037139	A	A
CHEMBL2037141	A	A
CHEMBL2040855	B	B
CHEMBL2041121	A	B
CHEMBL2041122	B	B
CHEMBL2041123	A	B
CHEMBL2041124	B	A
CHEMBL2041125	B	B
CHEMBL2041126	B	B
CHEMBL2041127	B	B
CHEMBL2041128	B	B
CHEMBL2041129	A	B
CHEMBL2041130	A	B
CHEMBL2041131	B	B
CHEMBL2041258	B	A
CHEMBL2041259	A	B
CHEMBL2041260	B	B
CHEMBL2041262	A	B
CHEMBL2041263	A	B
CHEMBL2041264	B	A
CHEMBL2041267	B	B
CHEMBL2041268	A	B
CHEMBL2041269	B	B
CHEMBL2041270	B	B
CHEMBL2041271	B	A
CHEMBL2041273	B	B
CHEMBL2041274	B	B
CHEMBL2041276	A	B
CHEMBL2041277	B	B
CHEMBL2041278	B	B
CHEMBL2041279	B	B
CHEMBL2041280	B	B
CHEMBL2041281	B	A
CHEMBL2041282	B	B
CHEMBL2041283	A	B
CHEMBL2042165	B	A
CHEMBL2042167	A	B
CHEMBL2042168	B	A
CHEMBL2043184	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL2043185	B	A
CHEMBL2043186	B	A
CHEMBL2043187	A	A
CHEMBL2043189	A	B
CHEMBL2043190	A	B
CHEMBL2043191	B	A
CHEMBL2043192	B	A
CHEMBL2043193	A	A
CHEMBL2043194	A	A
CHEMBL2043196	A	A
CHEMBL2043198	A	A
CHEMBL2043199	A	A
CHEMBL204454	A	A
CHEMBL2046448	B	B
CHEMBL2046699	B	B
CHEMBL2046700	B	B
CHEMBL2046702	B	B
CHEMBL2046703	B	B
CHEMBL2046705	B	B
CHEMBL2046706	B	B
CHEMBL2046707	B	B
CHEMBL2046708	B	B
CHEMBL2046709	B	B
CHEMBL2046710	B	B
CHEMBL2046713	B	B
CHEMBL2046715	B	B
CHEMBL2046717	B	B
CHEMBL2046719	B	B
CHEMBL2046720	B	B
CHEMBL2046721	B	B
CHEMBL2046722	B	B
CHEMBL2046724	B	B
CHEMBL2046725	B	B
CHEMBL2046727	B	B
CHEMBL2046728	B	B
CHEMBL2046729	B	B
CHEMBL2046732	B	B
CHEMBL2046733	B	B
CHEMBL2046879	B	B
CHEMBL2046880	B	B
CHEMBL2046881	B	B
CHEMBL2046883	B	B
CHEMBL2046884	B	B
CHEMBL204689	B	B
CHEMBL2047605	B	A
CHEMBL2047606	A	A
CHEMBL2047607	A	A
CHEMBL2047608	A	A
CHEMBL2047609	A	A
CHEMBL2047611	A	A
CHEMBL2047613	B	A
CHEMBL2047615	A	A
CHEMBL2047617	A	A
CHEMBL2047618	A	A
CHEMBL2047620	A	A
CHEMBL204784	B	B
CHEMBL2047943	A	A
CHEMBL2047946	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL2047950	A	A
CHEMBL2047951	A	A
CHEMBL2047952	A	A
CHEMBL2047955	A	A
CHEMBL2047956	A	A
CHEMBL2047958	A	A
CHEMBL2047959	A	A
CHEMBL2047960	A	A
CHEMBL2047961	A	A
CHEMBL2047962	A	A
CHEMBL2047963	A	A
CHEMBL2047964	A	A
CHEMBL2047966	A	A
CHEMBL2047967	A	A
CHEMBL2047970	A	A
CHEMBL2047971	A	A
CHEMBL2048078	A	A
CHEMBL2048079	A	A
CHEMBL2048080	A	A
CHEMBL2048081	A	A
CHEMBL2048082	A	A
CHEMBL2048601	A	A
CHEMBL2048605	A	A
CHEMBL2048607	B	B
CHEMBL2048609	B	B
CHEMBL204940	A	A
CHEMBL205038	B	A
CHEMBL205596	B	B
CHEMBL205625	A	A
CHEMBL2057434	A	A
CHEMBL2057715	A	B
CHEMBL2057716	B	B
CHEMBL2057718	B	A
CHEMBL2058006	A	A
CHEMBL2058008	A	A
CHEMBL2058009	A	A
CHEMBL2058013	A	A
CHEMBL2058018	A	A
CHEMBL2058019	A	A
CHEMBL2058020	A	A
CHEMBL2058021	A	A
CHEMBL2058022	A	A
CHEMBL2058024	A	A
CHEMBL2058029	A	A
CHEMBL2058030	A	A
CHEMBL2059300	A	A
CHEMBL2059435	A	A
CHEMBL205954	A	A
CHEMBL2062563	A	A
CHEMBL2062571	A	A
CHEMBL2062572	A	A
CHEMBL2062573	A	A
CHEMBL2062574	A	A
CHEMBL2062577	A	A
CHEMBL2062579	A	A
CHEMBL2062581	A	A
CHEMBL2062582	A	A
CHEMBL2062583	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL2062585	A	A
CHEMBL2063154	B	B
CHEMBL2063155	B	B
CHEMBL2063157	B	B
CHEMBL2063158	B	B
CHEMBL2063160	B	B
CHEMBL2063161	B	B
CHEMBL2063162	B	B
CHEMBL2063163	B	B
CHEMBL2063164	B	B
CHEMBL2063165	B	B
CHEMBL2063314	A	A
CHEMBL2063315	A	A
CHEMBL2063316	A	A
CHEMBL2063486	A	A
CHEMBL2063487	A	A
CHEMBL2063489	A	A
CHEMBL206679	B	B
CHEMBL206827	A	A
CHEMBL2070041	B	B
CHEMBL2070042	B	B
CHEMBL2070043	B	B
CHEMBL2070164	B	B
CHEMBL2070165	B	B
CHEMBL2070167	B	B
CHEMBL2070169	B	B
CHEMBL2070170	B	B
CHEMBL2070171	B	B
CHEMBL2070173	B	B
CHEMBL2070175	B	B
CHEMBL2070176	B	B
CHEMBL2070177	B	B
CHEMBL2070178	B	B
CHEMBL2070180	B	B
CHEMBL2070181	B	B
CHEMBL2070182	B	B
CHEMBL2070184	B	B
CHEMBL2070185	B	B
CHEMBL2070187	B	B
CHEMBL2070189	B	B
CHEMBL2070441	B	B
CHEMBL2070545	B	B
CHEMBL2070546	B	B
CHEMBL2071078	A	A
CHEMBL2071080	A	A
CHEMBL2071081	A	A
CHEMBL2071082	A	A
CHEMBL2071083	A	A
CHEMBL2071084	A	A
CHEMBL2071085	A	A
CHEMBL2071087	A	A
CHEMBL2071088	A	A
CHEMBL2071089	A	A
CHEMBL2071090	A	A
CHEMBL2071091	A	A
CHEMBL2071092	B	A
CHEMBL2071093	B	B
CHEMBL2071094	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL2071166	A	A
CHEMBL2071167	A	A
CHEMBL2071168	A	A
CHEMBL2071170	A	A
CHEMBL207307	A	A
CHEMBL207352	B	A
CHEMBL207397	B	A
CHEMBL207613	B	B
CHEMBL207701	B	A
CHEMBL207734	A	A
CHEMBL207757	A	A
CHEMBL208239	A	A
CHEMBL2087023	A	A
CHEMBL2087138	A	B
CHEMBL2087602	A	A
CHEMBL2088269	B	B
CHEMBL2088270	B	B
CHEMBL2088271	B	B
CHEMBL2088272	B	B
CHEMBL2088274	B	B
CHEMBL2088275	B	B
CHEMBL2088657	A	B
CHEMBL2088658	A	B
CHEMBL2088659	B	A
CHEMBL2088660	A	A
CHEMBL2088663	A	A
CHEMBL2088664	A	A
CHEMBL2088667	A	A
CHEMBL2088671	A	A
CHEMBL2088672	A	A
CHEMBL2088673	A	A
CHEMBL2088675	A	A
CHEMBL2088677	A	A
CHEMBL2089142	A	A
CHEMBL209234	A	A
CHEMBL209280	B	B
CHEMBL2093953	A	A
CHEMBL209762	B	B
CHEMBL209850	A	A
CHEMBL210122	B	B
CHEMBL210581	B	B
CHEMBL210722	A	A
CHEMBL2107358	A	A
CHEMBL210806	A	A
CHEMBL211045	A	A
CHEMBL211320	B	B
CHEMBL211342	B	A
CHEMBL211624	A	A
CHEMBL211625	A	A
CHEMBL212264	B	B
CHEMBL213066	B	B
CHEMBL213077	B	A
CHEMBL2134202	B	B
CHEMBL213604	A	A
CHEMBL2138601	A	A
CHEMBL2140523	A	A
CHEMBL214433	B	A
CHEMBL2146520	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL2146926	A	A
CHEMBL215086	A	A
CHEMBL2151384	A	A
CHEMBL2151385	A	A
CHEMBL2151397	A	A
CHEMBL2151398	A	A
CHEMBL2151402	A	A
CHEMBL2151730	B	B
CHEMBL2151731	B	B
CHEMBL2152974	B	A
CHEMBL2152975	A	A
CHEMBL2152976	B	A
CHEMBL2152977	B	A
CHEMBL2152979	A	A
CHEMBL2152980	A	A
CHEMBL2152981	A	B
CHEMBL2152984	A	B
CHEMBL2152985	B	A
CHEMBL2152986	A	A
CHEMBL2152988	B	A
CHEMBL2152989	B	B
CHEMBL2152990	A	A
CHEMBL2152992	A	A
CHEMBL2152993	B	A
CHEMBL2152994	A	A
CHEMBL2152995	A	A
CHEMBL2152998	A	A
CHEMBL2153122	A	A
CHEMBL2153125	A	A
CHEMBL2153128	A	B
CHEMBL2153129	A	A
CHEMBL2153130	A	A
CHEMBL2153131	A	A
CHEMBL2153133	A	A
CHEMBL2153134	A	A
CHEMBL2153135	A	A
CHEMBL2153137	A	A
CHEMBL2153138	A	A
CHEMBL2153139	A	A
CHEMBL2153143	A	A
CHEMBL2153144	B	A
CHEMBL2153145	A	A
CHEMBL2153146	A	A
CHEMBL2153147	B	A
CHEMBL2153148	B	B
CHEMBL2153149	A	A
CHEMBL2153151	A	A
CHEMBL2153152	B	A
CHEMBL2153155	A	A
CHEMBL2153156	A	A
CHEMBL2153846	B	B
CHEMBL2153847	B	B
CHEMBL2158139	A	A
CHEMBL2158140	A	A
CHEMBL2158141	A	A
CHEMBL2158142	B	A
CHEMBL2158144	B	B
CHEMBL2158145	B	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL2158146	B	A
CHEMBL2158148	A	B
CHEMBL2158149	A	A
CHEMBL2158150	B	A
CHEMBL2158151	A	B
CHEMBL2158152	A	B
CHEMBL2158153	B	A
CHEMBL2158154	B	A
CHEMBL2158155	B	A
CHEMBL2160081	A	A
CHEMBL2160082	B	B
CHEMBL2160083	B	B
CHEMBL2160088	B	A
CHEMBL2160090	B	A
CHEMBL2160095	A	A
CHEMBL2160096	A	B
CHEMBL2160205	B	B
CHEMBL2160206	B	B
CHEMBL2163363	A	A
CHEMBL2163387	A	A
CHEMBL2163388	A	A
CHEMBL2163389	A	A
CHEMBL2163390	A	A
CHEMBL2163392	A	A
CHEMBL2163393	A	A
CHEMBL2163396	A	A
CHEMBL2163397	A	A
CHEMBL2163398	A	A
CHEMBL2163400	A	A
CHEMBL2163401	A	A
CHEMBL2163402	A	A
CHEMBL2163406	A	A
CHEMBL2163407	A	A
CHEMBL2163408	A	A
CHEMBL2163410	A	A
CHEMBL2163411	A	A
CHEMBL2163412	A	A
CHEMBL2163413	A	A
CHEMBL2164968	A	A
CHEMBL216641	A	A
CHEMBL216691	A	A
CHEMBL2170456	A	A
CHEMBL2170457	A	A
CHEMBL2170461	A	A
CHEMBL2170463	A	A
CHEMBL2170465	A	A
CHEMBL2170466	A	A
CHEMBL2170469	A	A
CHEMBL2170470	A	A
CHEMBL2170473	A	A
CHEMBL2170474	A	A
CHEMBL2170476	A	A
CHEMBL2170478	A	A
CHEMBL2170479	A	A
CHEMBL2170481	A	A
CHEMBL2170483	A	A
CHEMBL2170485	A	A
CHEMBL2170486	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL2170487	A	A
CHEMBL2170488	A	A
CHEMBL2170490	A	A
CHEMBL2170491	A	A
CHEMBL2170494	A	A
CHEMBL2170495	B	A
CHEMBL217089	A	A
CHEMBL2171679	A	A
CHEMBL2171687	A	A
CHEMBL2171688	A	A
CHEMBL2171830	A	A
CHEMBL2171839	A	A
CHEMBL2171840	A	A
CHEMBL2171841	A	A
CHEMBL2171843	A	A
CHEMBL2172076	A	A
CHEMBL2172087	A	A
CHEMBL2172088	A	A
CHEMBL2172089	A	A
CHEMBL2172091	A	A
CHEMBL2172108	A	A
CHEMBL2172109	A	A
CHEMBL2172112	A	A
CHEMBL2172113	A	A
CHEMBL2172114	A	A
CHEMBL2172115	A	A
CHEMBL2172118	A	A
CHEMBL2172121	A	A
CHEMBL2172122	A	A
CHEMBL2172125	A	A
CHEMBL2172220	A	A
CHEMBL217443	A	A
CHEMBL217537	A	A
CHEMBL2177118	A	A
CHEMBL217716	A	A
CHEMBL2178352	A	A
CHEMBL2178399	A	A
CHEMBL2178400	B	B
CHEMBL2178401	B	A
CHEMBL2178402	B	A
CHEMBL2178403	A	A
CHEMBL2178404	A	A
CHEMBL2178405	A	A
CHEMBL2178406	B	A
CHEMBL2178407	A	A
CHEMBL2178408	A	A
CHEMBL2178409	A	A
CHEMBL2178410	A	A
CHEMBL2178412	B	A
CHEMBL2178413	B	B
CHEMBL2178414	A	A
CHEMBL2178415	A	A
CHEMBL2178416	A	A
CHEMBL2178417	A	A
CHEMBL2178418	A	A
CHEMBL2178419	A	A
CHEMBL2179334	A	A
CHEMBL2179336	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL2179337	A	A
CHEMBL2179338	A	A
CHEMBL2179339	A	A
CHEMBL2179340	A	A
CHEMBL2179341	A	A
CHEMBL2179342	A	A
CHEMBL2179343	A	A
CHEMBL2179344	A	A
CHEMBL2179345	A	A
CHEMBL2179713	A	A
CHEMBL2179717	A	A
CHEMBL2179919	A	A
CHEMBL2179921	A	A
CHEMBL2179922	A	A
CHEMBL2179923	A	A
CHEMBL2179927	A	A
CHEMBL2179928	A	A
CHEMBL2179929	A	A
CHEMBL2179930	A	A
CHEMBL2179931	A	A
CHEMBL2179932	A	A
CHEMBL2179935	A	A
CHEMBL2179938	A	A
CHEMBL2179939	A	A
CHEMBL2179940	A	A
CHEMBL2179941	A	A
CHEMBL2179942	A	A
CHEMBL2179943	A	A
CHEMBL2179944	A	A
CHEMBL2180563	B	A
CHEMBL218534	A	A
CHEMBL219676	A	A
CHEMBL219677	B	A
CHEMBL219729	A	A
CHEMBL219983	A	A
CHEMBL220391	A	A
CHEMBL2204300	A	A
CHEMBL2204302	A	A
CHEMBL2204303	A	A
CHEMBL2204304	A	A
CHEMBL2204305	A	A
CHEMBL2204306	A	A
CHEMBL2204308	A	A
CHEMBL220444	A	A
CHEMBL2205257	B	B
CHEMBL2205258	B	B
CHEMBL2205259	B	B
CHEMBL2205260	B	B
CHEMBL2205261	B	B
CHEMBL2205262	B	B
CHEMBL2205264	B	B
CHEMBL2205266	B	B
CHEMBL2205267	B	B
CHEMBL2205268	B	B
CHEMBL2205269	B	B
CHEMBL2205270	B	B
CHEMBL2205271	B	B
CHEMBL2205272	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL2205274	B	B
CHEMBL2205275	B	B
CHEMBL2205277	B	B
CHEMBL2205278	B	B
CHEMBL2205662	A	A
CHEMBL2205734	A	A
CHEMBL220694	A	A
CHEMBL2208239	B	B
CHEMBL2208241	B	A
CHEMBL2208242	B	B
CHEMBL2208243	A	A
CHEMBL2208244	A	A
CHEMBL2208245	A	B
CHEMBL220854	B	B
CHEMBL220890	A	A
CHEMBL221190	B	B
CHEMBL221224	A	A
CHEMBL221628	A	A
CHEMBL222076	A	A
CHEMBL222088	A	A
CHEMBL222102	B	B
CHEMBL222244	A	A
CHEMBL222377	A	A
CHEMBL222419	A	A
CHEMBL222686	A	A
CHEMBL222819	A	A
CHEMBL222892	A	A
CHEMBL223086	A	A
CHEMBL223147	A	A
CHEMBL2234293	A	A
CHEMBL2234704	B	B
CHEMBL2234706	B	B
CHEMBL2234708	B	B
CHEMBL2234710	B	B
CHEMBL2234711	B	B
CHEMBL2234713	B	B
CHEMBL2234714	B	B
CHEMBL2234715	B	B
CHEMBL2234717	B	B
CHEMBL2234718	B	B
CHEMBL2234720	B	B
CHEMBL2234722	B	B
CHEMBL2234723	B	B
CHEMBL223486	A	A
CHEMBL223534	A	A
CHEMBL223535	A	A
CHEMBL2236352	B	B
CHEMBL2236353	B	B
CHEMBL2236354	B	B
CHEMBL2236357	B	B
CHEMBL2236358	B	B
CHEMBL2236359	B	B
CHEMBL2236361	B	B
CHEMBL2236362	B	A
CHEMBL2236364	B	B
CHEMBL2236366	A	B
CHEMBL2236367	A	B
CHEMBL2236369	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL2236370	B	B
CHEMBL2236371	B	B
CHEMBL223730	A	A
CHEMBL2237956	B	B
CHEMBL2237958	B	B
CHEMBL2237959	B	B
CHEMBL2238113	B	B
CHEMBL2238114	B	B
CHEMBL2238115	B	B
CHEMBL2238116	B	B
CHEMBL2238117	B	B
CHEMBL223812	A	A
CHEMBL224339	B	B
CHEMBL224364	B	B
CHEMBL224390	B	B
CHEMBL224447	B	B
CHEMBL224700	B	B
CHEMBL225016	A	A
CHEMBL225269	B	B
CHEMBL225541	B	B
CHEMBL2262783	A	B
CHEMBL2262784	A	A
CHEMBL2262785	B	B
CHEMBL2262786	B	B
CHEMBL2262787	A	B
CHEMBL2262790	B	B
CHEMBL2262791	B	A
CHEMBL2262792	A	A
CHEMBL2262793	A	A
CHEMBL2262794	A	A
CHEMBL227188	B	A
CHEMBL228043	B	B
CHEMBL228063	B	A
CHEMBL2281624	B	B
CHEMBL2281625	B	B
CHEMBL2281626	B	B
CHEMBL2281627	B	B
CHEMBL2281628	B	B
CHEMBL2281629	B	B
CHEMBL2281631	B	B
CHEMBL2281632	B	B
CHEMBL2281943	A	B
CHEMBL2281949	B	B
CHEMBL228226	B	B
CHEMBL228286	A	A
CHEMBL229451	B	B
CHEMBL229452	B	A
CHEMBL229453	A	A
CHEMBL2296329	B	B
CHEMBL2296330	B	B
CHEMBL2296331	B	B
CHEMBL2296332	B	B
CHEMBL2296333	B	B
CHEMBL2296335	B	B
CHEMBL2296336	B	B
CHEMBL2296338	B	B
CHEMBL2296339	B	B
CHEMBL2296340	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL2296341	B	B
CHEMBL2296342	B	B
CHEMBL2296343	B	B
CHEMBL2296344	B	B
CHEMBL2296500	A	A
CHEMBL2296501	A	A
CHEMBL2296635	B	B
CHEMBL2296637	B	B
CHEMBL2296638	B	B
CHEMBL2296639	B	B
CHEMBL2296640	B	B
CHEMBL2296641	B	B
CHEMBL2296642	B	B
CHEMBL2296643	B	B
CHEMBL2296644	B	B
CHEMBL2297932	A	A
CHEMBL2297933	A	A
CHEMBL2297934	A	A
CHEMBL2297937	A	A
CHEMBL2297939	A	A
CHEMBL2297946	A	A
CHEMBL2297947	A	A
CHEMBL2297948	A	A
CHEMBL2297950	A	A
CHEMBL2298339	B	B
CHEMBL2298340	B	B
CHEMBL2298341	B	B
CHEMBL2298342	B	B
CHEMBL2298343	B	B
CHEMBL2298345	B	B
CHEMBL2298474	B	B
CHEMBL2298475	B	B
CHEMBL2298477	B	B
CHEMBL2298478	B	B
CHEMBL2298479	B	B
CHEMBL2298480	B	B
CHEMBL230006	B	B
CHEMBL230354	A	A
CHEMBL2304286	A	A
CHEMBL230463	B	A
CHEMBL230568	A	A
CHEMBL230673	B	A
CHEMBL230674	A	A
CHEMBL230779	A	A
CHEMBL230781	B	A
CHEMBL230868	A	A
CHEMBL2311569	A	A
CHEMBL2311779	A	A
CHEMBL2311781	A	A
CHEMBL2311782	A	A
CHEMBL2311783	A	A
CHEMBL2311784	A	A
CHEMBL2311785	A	A
CHEMBL2311786	A	A
CHEMBL2311787	A	A
CHEMBL2311790	A	A
CHEMBL2311791	A	A
CHEMBL2312458	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL2312460	A	A
CHEMBL2312461	A	A
CHEMBL2312462	A	A
CHEMBL2312463	A	A
CHEMBL2312464	A	A
CHEMBL2312466	A	A
CHEMBL2312757	A	B
CHEMBL2312758	A	B
CHEMBL2312759	B	B
CHEMBL2312760	A	B
CHEMBL2312761	B	B
CHEMBL2312762	A	B
CHEMBL2313462	A	A
CHEMBL2313489	A	A
CHEMBL2313787	A	A
CHEMBL2313795	A	A
CHEMBL2313797	A	A
CHEMBL2313806	A	A
CHEMBL2314524	A	A
CHEMBL2314526	A	A
CHEMBL2314529	A	A
CHEMBL2314530	A	A
CHEMBL2314532	A	A
CHEMBL2314533	A	A
CHEMBL2314536	A	A
CHEMBL2314539	A	A
CHEMBL2314540	A	A
CHEMBL2314541	A	A
CHEMBL2314542	A	A
CHEMBL2314544	A	A
CHEMBL2314545	A	A
CHEMBL2314546	A	A
CHEMBL2314547	A	A
CHEMBL2314548	A	A
CHEMBL2314550	A	A
CHEMBL2314551	A	A
CHEMBL2314552	A	A
CHEMBL2314554	A	A
CHEMBL2314555	A	A
CHEMBL2314558	A	A
CHEMBL2314559	A	A
CHEMBL2314560	A	A
CHEMBL2314561	A	A
CHEMBL2314563	A	A
CHEMBL2314565	A	A
CHEMBL2314566	A	A
CHEMBL2314567	A	A
CHEMBL2315423	A	A
CHEMBL231903	B	B
CHEMBL232329	B	A
CHEMBL2323951	A	A
CHEMBL2323952	A	A
CHEMBL2323954	A	A
CHEMBL2323955	A	A
CHEMBL2323957	A	A
CHEMBL232462	B	B
CHEMBL2324791	A	A
CHEMBL2324793	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL2324794	A	A
CHEMBL2324795	A	A
CHEMBL2324796	A	A
CHEMBL2324797	A	A
CHEMBL2324798	A	A
CHEMBL2324802	A	A
CHEMBL2324804	A	A
CHEMBL2324805	A	A
CHEMBL2324806	A	A
CHEMBL2324808	A	A
CHEMBL2324809	A	A
CHEMBL2324810	A	A
CHEMBL2324812	A	A
CHEMBL2324813	A	A
CHEMBL232658	B	B
CHEMBL232659	B	B
CHEMBL2326904	B	B
CHEMBL2326911	B	A
CHEMBL2326912	A	B
CHEMBL232977	A	A
CHEMBL232985	A	B
CHEMBL232987	A	B
CHEMBL233013	A	A
CHEMBL233014	A	A
CHEMBL233148	B	B
CHEMBL2331641	A	A
CHEMBL233188	A	A
CHEMBL2331882	A	A
CHEMBL2331884	A	A
CHEMBL2331885	A	A
CHEMBL2331888	A	A
CHEMBL2331891	A	A
CHEMBL2331892	A	A
CHEMBL2331893	A	A
CHEMBL2331894	A	A
CHEMBL2331895	A	A
CHEMBL2331896	A	A
CHEMBL2331900	B	A
CHEMBL2331906	A	A
CHEMBL2331909	A	A
CHEMBL233192	A	A
CHEMBL233205	A	A
CHEMBL233208	A	A
CHEMBL233209	A	A
CHEMBL233224	A	A
CHEMBL233225	A	A
CHEMBL2332418	A	B
CHEMBL2332707	B	B
CHEMBL2332840	B	A
CHEMBL2333109	B	B
CHEMBL2333520	A	A
CHEMBL2333522	A	A
CHEMBL2333523	A	A
CHEMBL2333525	A	A
CHEMBL233367	B	B
CHEMBL2334404	B	B
CHEMBL2334405	B	B
CHEMBL2334406	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL2334409	B	B
CHEMBL2334410	B	A
CHEMBL2334413	A	B
CHEMBL2334414	B	B
CHEMBL2334966	A	A
CHEMBL2335635	A	A
CHEMBL2335636	A	A
CHEMBL2336015	A	A
CHEMBL2336017	A	A
CHEMBL233604	A	B
CHEMBL2336043	A	A
CHEMBL2337351	A	A
CHEMBL2337354	A	A
CHEMBL2337356	A	A
CHEMBL23393	B	B
CHEMBL234094	B	B
CHEMBL234244	A	A
CHEMBL234299	A	B
CHEMBL234300	A	B
CHEMBL234443	A	A
CHEMBL234451	A	A
CHEMBL234452	A	A
CHEMBL234515	B	B
CHEMBL234516	B	B
CHEMBL234517	B	B
CHEMBL234624	A	A
CHEMBL234625	A	A
CHEMBL234626	A	A
CHEMBL234723	B	B
CHEMBL234726	B	B
CHEMBL2347574	A	A
CHEMBL2347575	A	A
CHEMBL2347577	A	A
CHEMBL2347578	A	A
CHEMBL2347579	B	A
CHEMBL2347580	B	B
CHEMBL2347582	B	B
CHEMBL2347583	B	A
CHEMBL2347584	B	B
CHEMBL2347585	A	B
CHEMBL2347586	B	A
CHEMBL2347590	A	A
CHEMBL2347592	A	A
CHEMBL2348153	A	B
CHEMBL2348170	B	B
CHEMBL2348176	B	B
CHEMBL2348724	B	B
CHEMBL2348734	B	B
CHEMBL2348735	A	B
CHEMBL234888	A	A
CHEMBL2349188	B	B
CHEMBL2349189	B	A
CHEMBL2349190	A	B
CHEMBL2349191	B	A
CHEMBL2349192	B	A
CHEMBL2349194	A	A
CHEMBL234941	A	B
CHEMBL234942	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL234953	B	A
CHEMBL235191	A	B
CHEMBL235210	A	A
CHEMBL23532	B	B
CHEMBL235552	A	B
CHEMBL235772	B	B
CHEMBL235773	B	B
CHEMBL235842	A	A
CHEMBL235888	B	B
CHEMBL235934	A	A
CHEMBL235989	B	B
CHEMBL235990	B	B
CHEMBL236061	B	B
CHEMBL236143	B	A
CHEMBL2363137	A	B
CHEMBL236386	B	B
CHEMBL236387	A	B
CHEMBL236390	B	A
CHEMBL236425	A	A
CHEMBL236763	A	A
CHEMBL236764	A	B
CHEMBL236789	B	B
CHEMBL2368547	B	B
CHEMBL2368873	B	B
CHEMBL237480	B	B
CHEMBL2375372	A	A
CHEMBL2375473	B	A
CHEMBL2375474	A	A
CHEMBL2375476	A	A
CHEMBL2375477	A	B
CHEMBL2375552	A	B
CHEMBL2375816	B	B
CHEMBL2375817	B	B
CHEMBL2375818	B	B
CHEMBL2375819	B	B
CHEMBL2375821	B	B
CHEMBL2375822	B	B
CHEMBL2375824	B	B
CHEMBL2375826	B	B
CHEMBL2375827	A	B
CHEMBL2375828	B	B
CHEMBL2375829	B	B
CHEMBL2375830	B	B
CHEMBL2375831	B	B
CHEMBL2375832	B	B
CHEMBL2375833	B	B
CHEMBL2375835	B	B
CHEMBL2375836	B	B
CHEMBL2375837	B	B
CHEMBL2375838	B	A
CHEMBL2375839	A	B
CHEMBL2375841	B	B
CHEMBL2375842	B	B
CHEMBL2375843	B	B
CHEMBL2375844	B	B
CHEMBL2375845	B	B
CHEMBL2375846	B	B
CHEMBL2375847	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL2376662	A	A
CHEMBL2376663	A	A
CHEMBL2376664	A	A
CHEMBL2376665	A	A
CHEMBL2376666	A	A
CHEMBL2376667	A	A
CHEMBL2376673	A	A
CHEMBL2376675	A	A
CHEMBL2376676	A	A
CHEMBL2376684	A	A
CHEMBL2376686	A	A
CHEMBL2376808	B	B
CHEMBL2376809	B	B
CHEMBL2376810	B	B
CHEMBL2376811	B	B
CHEMBL2376812	B	B
CHEMBL2376813	B	B
CHEMBL2376814	B	B
CHEMBL2376815	B	B
CHEMBL2376816	B	B
CHEMBL2376817	B	B
CHEMBL2376818	B	B
CHEMBL2376820	B	B
CHEMBL2376822	B	B
CHEMBL2376824	B	B
CHEMBL2376826	B	B
CHEMBL2377276	B	A
CHEMBL2377277	A	A
CHEMBL2377278	B	B
CHEMBL2377280	B	B
CHEMBL2377281	B	B
CHEMBL2377282	B	B
CHEMBL2377283	B	B
CHEMBL2377284	A	B
CHEMBL2377286	B	B
CHEMBL2377287	B	B
CHEMBL2377288	B	B
CHEMBL2377289	B	B
CHEMBL2377290	A	A
CHEMBL2377291	A	A
CHEMBL2377292	A	B
CHEMBL2377293	A	A
CHEMBL2380328	A	B
CHEMBL2380351	B	A
CHEMBL2380352	A	A
CHEMBL2380353	A	A
CHEMBL2380355	A	A
CHEMBL2380356	B	A
CHEMBL2380357	A	A
CHEMBL2380358	A	A
CHEMBL2380359	A	A
CHEMBL2380360	A	A
CHEMBL2381775	B	B
CHEMBL2381776	B	A
CHEMBL2381865	B	A
CHEMBL2381866	B	B
CHEMBL2381867	B	B
CHEMBL2381869	B	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL2381870	A	A
CHEMBL2381871	A	A
CHEMBL2381873	A	A
CHEMBL2381875	A	A
CHEMBL2381876	A	A
CHEMBL2381877	A	A
CHEMBL2381878	A	A
CHEMBL2381879	A	A
CHEMBL2381880	B	A
CHEMBL2381881	A	A
CHEMBL2381882	B	B
CHEMBL2381883	A	B
CHEMBL2381884	A	A
CHEMBL2381885	B	A
CHEMBL2381886	A	A
CHEMBL2385211	B	B
CHEMBL2385336	B	A
CHEMBL2385453	B	A
CHEMBL2385517	A	A
CHEMBL2385518	A	A
CHEMBL2385521	A	A
CHEMBL2385523	A	A
CHEMBL2385954	A	A
CHEMBL2385956	A	A
CHEMBL2385957	A	A
CHEMBL238608	A	A
CHEMBL2386167	B	A
CHEMBL2386168	B	A
CHEMBL2386169	A	A
CHEMBL2386170	B	A
CHEMBL238622	B	A
CHEMBL238623	A	B
CHEMBL2386343	A	A
CHEMBL2386345	A	A
CHEMBL2386348	A	A
CHEMBL2386349	A	A
CHEMBL2386350	A	A
CHEMBL2386351	B	B
CHEMBL2386522	B	B
CHEMBL2386525	B	B
CHEMBL2386526	A	A
CHEMBL2387089	A	A
CHEMBL2387090	A	A
CHEMBL2387092	A	A
CHEMBL2387093	A	A
CHEMBL2387094	A	A
CHEMBL2387095	A	A
CHEMBL2387096	B	A
CHEMBL2387098	A	A
CHEMBL2387100	A	A
CHEMBL2387102	A	A
CHEMBL2387103	A	A
CHEMBL2387104	A	A
CHEMBL2387107	A	A
CHEMBL2387108	A	A
CHEMBL2387109	A	A
CHEMBL2387763	B	B
CHEMBL2387764	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL2387766	B	B
CHEMBL2387767	B	B
CHEMBL2387768	B	B
CHEMBL2387769	B	B
CHEMBL238838	B	A
CHEMBL238840	A	A
CHEMBL238841	A	A
CHEMBL2390991	A	A
CHEMBL2390992	A	A
CHEMBL2390993	A	A
CHEMBL2390994	A	A
CHEMBL2390995	A	A
CHEMBL2390996	A	A
CHEMBL2390997	A	A
CHEMBL2390999	A	A
CHEMBL2391000	A	A
CHEMBL2391003	A	A
CHEMBL2391004	A	A
CHEMBL2391005	A	A
CHEMBL2391007	A	A
CHEMBL2391204	A	A
CHEMBL2391205	A	A
CHEMBL2391206	B	A
CHEMBL2391207	A	A
CHEMBL2391209	A	A
CHEMBL2391210	A	A
CHEMBL2391211	B	A
CHEMBL2391212	A	A
CHEMBL2391214	A	A
CHEMBL2391215	B	A
CHEMBL2391216	A	A
CHEMBL2391217	A	A
CHEMBL2391218	A	A
CHEMBL2391219	A	A
CHEMBL2391220	B	B
CHEMBL2391221	A	A
CHEMBL2391222	A	A
CHEMBL2391403	B	B
CHEMBL2391404	B	B
CHEMBL2391405	B	B
CHEMBL2391407	B	B
CHEMBL2391408	B	B
CHEMBL2391409	B	B
CHEMBL2391411	B	B
CHEMBL2391412	B	B
CHEMBL2391414	B	B
CHEMBL2391415	B	B
CHEMBL2391416	B	B
CHEMBL2391417	B	B
CHEMBL2391418	B	B
CHEMBL2391419	B	B
CHEMBL2391420	B	B
CHEMBL2391453	B	A
CHEMBL2391454	A	A
CHEMBL2391455	A	A
CHEMBL2391456	A	A
CHEMBL2391457	A	A
CHEMBL2391458	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL2391460	A	A
CHEMBL2391461	A	A
CHEMBL2391462	A	A
CHEMBL2391463	A	A
CHEMBL2391464	A	A
CHEMBL2391466	A	A
CHEMBL2391467	A	A
CHEMBL2391468	B	A
CHEMBL2391469	B	A
CHEMBL2391470	A	A
CHEMBL2391472	B	A
CHEMBL2391473	A	A
CHEMBL2391474	A	A
CHEMBL2391537	B	B
CHEMBL2391538	B	B
CHEMBL2391692	B	B
CHEMBL2391693	B	B
CHEMBL2391696	B	B
CHEMBL2391697	B	B
CHEMBL2391699	B	B
CHEMBL2391731	B	B
CHEMBL2391732	B	B
CHEMBL2391733	B	B
CHEMBL2391734	B	B
CHEMBL2391736	B	B
CHEMBL2391760	A	A
CHEMBL2391761	A	A
CHEMBL2391762	B	A
CHEMBL2391763	A	A
CHEMBL2391764	A	A
CHEMBL2391765	A	A
CHEMBL2391767	A	A
CHEMBL2391769	A	A
CHEMBL2391770	B	B
CHEMBL239237	B	B
CHEMBL239267	A	A
CHEMBL239269	A	B
CHEMBL239445	A	A
CHEMBL239476	B	B
CHEMBL239477	B	B
CHEMBL239625	A	A
CHEMBL239660	B	B
CHEMBL2396674	A	A
CHEMBL2396876	A	A
CHEMBL2396877	A	A
CHEMBL2396879	A	A
CHEMBL2396882	A	A
CHEMBL2396883	A	A
CHEMBL2396884	A	A
CHEMBL2396885	A	A
CHEMBL2396886	B	B
CHEMBL2396887	B	A
CHEMBL2396888	A	B
CHEMBL2396889	A	A
CHEMBL2396890	B	A
CHEMBL2396891	B	A
CHEMBL239690	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL239691	B	B
CHEMBL2397713	A	B
CHEMBL2398657	A	A
CHEMBL239907	B	B
CHEMBL239908	B	B
CHEMBL240119	B	B
CHEMBL240120	B	B
CHEMBL2401759	B	B
CHEMBL2402007	B	A
CHEMBL2402573	A	A
CHEMBL2402729	A	A
CHEMBL2402731	A	A
CHEMBL2402733	A	A
CHEMBL2402734	A	A
CHEMBL2402736	A	A
CHEMBL2402737	A	A
CHEMBL2402943	B	B
CHEMBL2402945	A	A
CHEMBL2402947	A	A
CHEMBL2402948	A	A
CHEMBL2402952	A	A
CHEMBL2402953	A	A
CHEMBL2402954	A	A
CHEMBL2402976	A	A
CHEMBL2402989	A	A
CHEMBL2403083	A	A
CHEMBL2403084	A	A
CHEMBL2403085	A	A
CHEMBL2403087	A	A
CHEMBL2403088	A	A
CHEMBL2403089	B	A
CHEMBL2403093	A	A
CHEMBL240310	B	B
CHEMBL2403103	B	A
CHEMBL240311	B	B
CHEMBL2403464	A	A
CHEMBL2403466	A	A
CHEMBL2403467	A	A
CHEMBL2403468	A	A
CHEMBL2403469	A	A
CHEMBL2403470	A	A
CHEMBL2403473	A	A
CHEMBL2403475	A	A
CHEMBL2403476	A	A
CHEMBL2403477	A	A
CHEMBL2403478	A	A
CHEMBL2403479	A	A
CHEMBL2403481	A	A
CHEMBL2403794	B	B
CHEMBL2403795	A	A
CHEMBL2403796	A	A
CHEMBL2403800	B	B
CHEMBL240597	B	B
CHEMBL2407094	B	B
CHEMBL2407520	B	B
CHEMBL2407522	B	B
CHEMBL2407523	B	B
CHEMBL2407524	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL2407525	B	B
CHEMBL2407526	B	B
CHEMBL2407528	B	B
CHEMBL2407529	B	B
CHEMBL2407531	B	B
CHEMBL2407532	B	B
CHEMBL2407533	B	B
CHEMBL2407534	B	B
CHEMBL2407535	B	B
CHEMBL2407536	B	B
CHEMBL2407537	B	B
CHEMBL2407538	B	B
CHEMBL2407539	B	B
CHEMBL2407564	A	A
CHEMBL2407567	A	A
CHEMBL2407568	A	A
CHEMBL2407569	A	A
CHEMBL2407570	A	A
CHEMBL2407572	A	A
CHEMBL2407575	A	A
CHEMBL2407685	A	A
CHEMBL2407686	A	A
CHEMBL2407717	A	A
CHEMBL2407720	A	A
CHEMBL2407735	B	A
CHEMBL2407737	A	A
CHEMBL2408688	A	A
CHEMBL2408689	A	A
CHEMBL2408690	A	A
CHEMBL2408691	A	A
CHEMBL2408694	A	A
CHEMBL2408696	A	A
CHEMBL2408818	A	A
CHEMBL2408819	A	A
CHEMBL2408820	A	A
CHEMBL2409173	A	A
CHEMBL2409175	A	A
CHEMBL2409177	A	A
CHEMBL2409178	A	A
CHEMBL2409179	A	A
CHEMBL2409181	A	A
CHEMBL2409182	A	A
CHEMBL2409195	A	A
CHEMBL2409196	A	A
CHEMBL2409197	A	A
CHEMBL2409198	A	A
CHEMBL241129	A	A
CHEMBL241161	A	A
CHEMBL241162	B	B
CHEMBL241337	A	A
CHEMBL241338	A	A
CHEMBL2413417	A	A
CHEMBL241370	B	B
CHEMBL2414904	A	B
CHEMBL2414905	B	B
CHEMBL2414907	B	B
CHEMBL2414908	A	B
CHEMBL2414909	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL2414937	A	A
CHEMBL2414941	A	B
CHEMBL2414943	B	A
CHEMBL2414946	B	A
CHEMBL2414951	A	A
CHEMBL2414952	B	B
CHEMBL2414953	A	B
CHEMBL2414954	A	B
CHEMBL241549	A	A
CHEMBL241551	A	A
CHEMBL241591	B	B
CHEMBL241592	A	A
CHEMBL241757	A	A
CHEMBL2417583	A	A
CHEMBL241759	A	A
CHEMBL241781	A	A
CHEMBL241800	A	A
CHEMBL241861	B	B
CHEMBL2419005	A	B
CHEMBL2419009	A	A
CHEMBL2419014	B	B
CHEMBL2419016	B	B
CHEMBL2419017	B	B
CHEMBL2419251	B	B
CHEMBL2419254	B	B
CHEMBL2419258	B	A
CHEMBL2419260	A	B
CHEMBL2419842	A	B
CHEMBL2419843	B	B
CHEMBL2419845	B	B
CHEMBL2419846	B	B
CHEMBL2419847	B	B
CHEMBL242055	B	B
CHEMBL2420603	A	A
CHEMBL2420605	B	B
CHEMBL2420606	B	B
CHEMBL2420607	B	B
CHEMBL2420608	A	A
CHEMBL2420629	A	A
CHEMBL2420696	A	A
CHEMBL2420697	A	A
CHEMBL2420698	A	A
CHEMBL2420699	A	A
CHEMBL242080	B	B
CHEMBL242135	A	A
CHEMBL242341	B	B
CHEMBL242533	A	A
CHEMBL2425559	A	A
CHEMBL2425560	A	A
CHEMBL2425561	A	A
CHEMBL242557	A	B
CHEMBL242558	A	A
CHEMBL2425584	A	B
CHEMBL2425649	B	A
CHEMBL2425650	B	B
CHEMBL2425652	A	A
CHEMBL2425653	B	A
CHEMBL2425654	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL2425655	A	A
CHEMBL242770	A	A
CHEMBL242771	A	A
CHEMBL242814	A	A
CHEMBL2430309	B	B
CHEMBL2430310	B	B
CHEMBL2430311	B	B
CHEMBL2430312	B	B
CHEMBL2430313	B	B
CHEMBL2430314	B	B
CHEMBL243034	A	A
CHEMBL243035	A	A
CHEMBL2430831	A	A
CHEMBL2430832	A	A
CHEMBL2430834	A	A
CHEMBL2430835	A	A
CHEMBL2430836	A	A
CHEMBL243446	A	A
CHEMBL2434970	A	A
CHEMBL2434982	B	B
CHEMBL2435055	A	B
CHEMBL2435060	A	B
CHEMBL2435063	A	A
CHEMBL2435064	B	A
CHEMBL2435065	A	A
CHEMBL2435072	A	A
CHEMBL2435073	A	A
CHEMBL2435076	A	A
CHEMBL2435082	A	A
CHEMBL2435083	A	A
CHEMBL2435143	A	A
CHEMBL2435333	A	B
CHEMBL2435334	B	A
CHEMBL243595	A	A
CHEMBL243600	B	A
CHEMBL2436236	B	B
CHEMBL2436240	B	B
CHEMBL2436242	B	B
CHEMBL2436246	B	B
CHEMBL2436249	B	B
CHEMBL2436252	B	B
CHEMBL2436255	B	B
CHEMBL2436260	B	B
CHEMBL2436261	B	B
CHEMBL2436262	B	B
CHEMBL2436263	B	B
CHEMBL2436599	B	B
CHEMBL243684	A	A
CHEMBL2437089	A	B
CHEMBL243806	A	A
CHEMBL243930	A	B
CHEMBL243931	B	A
CHEMBL2441115	B	B
CHEMBL2441116	B	B
CHEMBL2441117	B	B
CHEMBL2441120	B	B
CHEMBL2441121	B	B
CHEMBL2441122	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL2441125	B	B
CHEMBL2441126	B	B
CHEMBL244140	A	A
CHEMBL244141	A	A
CHEMBL2441605	A	A
CHEMBL2441606	A	A
CHEMBL2441608	A	A
CHEMBL2441610	A	A
CHEMBL2441611	A	A
CHEMBL244166	B	A
CHEMBL2442691	A	A
CHEMBL2442693	B	A
CHEMBL2442694	A	A
CHEMBL2442695	A	A
CHEMBL2442696	A	A
CHEMBL2442697	A	A
CHEMBL2442699	B	A
CHEMBL2442789	B	A
CHEMBL2442790	A	A
CHEMBL2442791	A	A
CHEMBL2442793	B	A
CHEMBL2442794	A	A
CHEMBL2442796	B	B
CHEMBL2442797	A	A
CHEMBL2442800	A	A
CHEMBL2442801	A	A
CHEMBL2442802	B	A
CHEMBL2442814	A	B
CHEMBL2442815	A	B
CHEMBL2442817	A	A
CHEMBL2442818	B	A
CHEMBL2442819	B	B
CHEMBL2442820	B	B
CHEMBL2442821	B	B
CHEMBL2442822	A	A
CHEMBL2442823	A	A
CHEMBL2442825	A	A
CHEMBL2442826	B	A
CHEMBL2442827	A	A
CHEMBL2442828	A	A
CHEMBL2442829	A	A
CHEMBL244353	B	B
CHEMBL244711	A	A
CHEMBL244712	A	A
CHEMBL2448099	A	A
CHEMBL2448602	B	A
CHEMBL244899	A	A
CHEMBL244901	A	A
CHEMBL244944	A	B
CHEMBL244969	A	A
CHEMBL245364	A	A
CHEMBL245376	A	A
CHEMBL245749	A	A
CHEMBL245770	A	A
CHEMBL245932	A	A
CHEMBL245966	A	A
CHEMBL245967	A	A
CHEMBL246165	B	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL246167	A	B
CHEMBL246383	A	B
CHEMBL247183	A	A
CHEMBL247184	A	A
CHEMBL247384	A	A
CHEMBL247501	A	A
CHEMBL248712	A	A
CHEMBL248713	A	A
CHEMBL248718	A	A
CHEMBL248796	A	A
CHEMBL248797	A	A
CHEMBL248798	A	A
CHEMBL248891	A	A
CHEMBL248909	A	A
CHEMBL248998	A	A
CHEMBL249095	A	A
CHEMBL249096	A	A
CHEMBL249198	A	A
CHEMBL249302	A	A
CHEMBL249303	A	A
CHEMBL249304	A	A
CHEMBL249484	A	A
CHEMBL249485	B	A
CHEMBL249500	A	A
CHEMBL249519	A	A
CHEMBL249687	A	A
CHEMBL249891	B	A
CHEMBL250095	A	A
CHEMBL250867	B	B
CHEMBL251009	A	A
CHEMBL251010	A	A
CHEMBL251012	A	A
CHEMBL251144	A	A
CHEMBL251249	A	B
CHEMBL251336	A	A
CHEMBL251337	A	A
CHEMBL251338	A	A
CHEMBL251406	A	A
CHEMBL251544	A	A
CHEMBL251546	A	A
CHEMBL251673	A	A
CHEMBL251739	A	A
CHEMBL251740	A	A
CHEMBL251747	B	B
CHEMBL251756	A	A
CHEMBL251757	A	A
CHEMBL252005	B	B
CHEMBL252164	A	A
CHEMBL252572	A	A
CHEMBL252574	A	A
CHEMBL252642	B	B
CHEMBL252778	A	A
CHEMBL252858	A	A
CHEMBL252980	A	A
CHEMBL252981	A	A
CHEMBL252982	A	A
CHEMBL253178	A	A
CHEMBL253191	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL253482	B	B
CHEMBL253910	A	A
CHEMBL253912	A	A
CHEMBL253973	B	B
CHEMBL254110	A	A
CHEMBL254111	A	A
CHEMBL254112	A	A
CHEMBL254165	A	A
CHEMBL254170	B	A
CHEMBL254219	A	A
CHEMBL254311	A	A
CHEMBL254360	A	A
CHEMBL254367	A	A
CHEMBL254519	A	A
CHEMBL255152	B	B
CHEMBL255255	A	A
CHEMBL255342	B	A
CHEMBL255933	A	A
CHEMBL255990	A	A
CHEMBL256322	A	A
CHEMBL256496	A	B
CHEMBL256711	A	A
CHEMBL257219	A	A
CHEMBL257631	A	A
CHEMBL257632	A	A
CHEMBL257736	A	A
CHEMBL257831	A	A
CHEMBL257835	A	A
CHEMBL258040	A	A
CHEMBL258176	A	A
CHEMBL258297	A	A
CHEMBL258592	B	B
CHEMBL258659	B	B
CHEMBL258799	B	B
CHEMBL258844	A	A
CHEMBL259084	A	A
CHEMBL259181	B	A
CHEMBL259432	B	A
CHEMBL259631	A	A
CHEMBL259644	B	B
CHEMBL259714	B	B
CHEMBL259715	B	B
CHEMBL259985	B	B
CHEMBL260200	A	A
CHEMBL260256	A	A
CHEMBL260471	B	B
CHEMBL260477	B	B
CHEMBL260530	A	A
CHEMBL260574	A	A
CHEMBL260655	A	A
CHEMBL260740	A	B
CHEMBL260772	A	A
CHEMBL260780	B	B
CHEMBL260864	A	A
CHEMBL260958	B	A
CHEMBL261301	A	A
CHEMBL26158	A	A
CHEMBL261705	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL261720	A	A
CHEMBL261834	A	A
CHEMBL262328	A	B
CHEMBL262329	B	B
CHEMBL263042	A	B
CHEMBL263393	B	B
CHEMBL263624	A	A
CHEMBL264422	B	B
CHEMBL264565	A	A
CHEMBL264661	A	A
CHEMBL264685	A	A
CHEMBL264961	A	A
CHEMBL265446	A	A
CHEMBL265607	A	A
CHEMBL265691	B	A
CHEMBL265903	A	A
CHEMBL267024	B	A
CHEMBL267616	A	A
CHEMBL267933	B	B
CHEMBL268368	A	A
CHEMBL26844	A	A
CHEMBL268840	A	A
CHEMBL269277	B	B
CHEMBL269908	A	A
CHEMBL269937	A	A
CHEMBL270097	A	A
CHEMBL270686	A	B
CHEMBL270935	A	B
CHEMBL271100	A	A
CHEMBL271164	B	A
CHEMBL271308	A	A
CHEMBL271651	A	A
CHEMBL271652	A	A
CHEMBL272052	A	A
CHEMBL272240	A	A
CHEMBL272401	A	A
CHEMBL273319	A	A
CHEMBL273596	B	B
CHEMBL273619	A	A
CHEMBL274456	B	A
CHEMBL275362	B	B
CHEMBL275380	A	A
CHEMBL275497	A	B
CHEMBL276625	A	A
CHEMBL27666	B	A
CHEMBL277008	A	A
CHEMBL277077	A	B
CHEMBL277127	B	A
CHEMBL277351	A	A
CHEMBL278315	A	A
CHEMBL278699	B	B
CHEMBL27891	A	A
CHEMBL278960	B	B
CHEMBL27897	A	A
CHEMBL27898	A	A
CHEMBL278986	A	A
CHEMBL279591	B	B
CHEMBL280099	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL280740	A	A
CHEMBL280792	B	B
CHEMBL280867	A	A
CHEMBL281500	A	A
CHEMBL28217	A	A
CHEMBL282810	A	A
CHEMBL283439	A	A
CHEMBL283698	B	A
CHEMBL283931	A	A
CHEMBL285793	B	B
CHEMBL285852	B	B
CHEMBL286749	A	A
CHEMBL287402	B	A
CHEMBL287633	A	A
CHEMBL288441	A	A
CHEMBL289228	A	A
CHEMBL289277	A	B
CHEMBL292520	A	A
CHEMBL292873	A	A
CHEMBL29292	B	B
CHEMBL293157	A	A
CHEMBL293834	A	A
CHEMBL293898	A	A
CHEMBL294740	B	B
CHEMBL295316	B	B
CHEMBL295602	B	B
CHEMBL296411	A	A
CHEMBL296468	A	A
CHEMBL296567	A	B
CHEMBL297046	B	A
CHEMBL29711	A	B
CHEMBL297453	B	B
CHEMBL297570	A	A
CHEMBL298459	B	B
CHEMBL300031	B	A
CHEMBL301515	A	A
CHEMBL302234	A	A
CHEMBL302389	A	A
CHEMBL302854	A	A
CHEMBL303470	A	A
CHEMBL3037931	A	A
CHEMBL304428	A	A
CHEMBL306034	A	A
CHEMBL306045	B	A
CHEMBL306047	A	A
CHEMBL306082	B	A
CHEMBL306114	A	A
CHEMBL306226	B	B
CHEMBL306367	A	A
CHEMBL306501	A	A
CHEMBL306527	B	A
CHEMBL306611	A	A
CHEMBL307007	A	A
CHEMBL307067	B	B
CHEMBL307150	A	A
CHEMBL307219	A	A
CHEMBL307714	B	B
CHEMBL307920	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL308099	A	A
CHEMBL308116	A	A
CHEMBL308479	A	A
CHEMBL3085389	B	B
CHEMBL3085391	B	B
CHEMBL308541	A	A
CHEMBL308542	B	A
CHEMBL3085432	B	B
CHEMBL3085433	B	B
CHEMBL308594	A	A
CHEMBL3086062	A	A
CHEMBL3086063	A	A
CHEMBL3086065	A	A
CHEMBL3086068	A	A
CHEMBL3086070	A	A
CHEMBL3086071	A	A
CHEMBL3086072	A	A
CHEMBL3086074	A	A
CHEMBL3086075	A	A
CHEMBL3086076	A	A
CHEMBL3086078	A	A
CHEMBL3086425	A	A
CHEMBL3086438	A	A
CHEMBL3086439	A	A
CHEMBL3086566	A	A
CHEMBL3086567	A	A
CHEMBL3087380	B	B
CHEMBL3087381	B	B
CHEMBL3087382	B	B
CHEMBL3087384	B	B
CHEMBL3087385	B	B
CHEMBL3087386	B	B
CHEMBL308761	B	B
CHEMBL3087981	A	A
CHEMBL3087982	B	A
CHEMBL3087984	A	A
CHEMBL3087985	A	A
CHEMBL3087986	B	A
CHEMBL3087989	A	A
CHEMBL3087990	B	A
CHEMBL3087991	A	A
CHEMBL3087992	B	A
CHEMBL3087993	A	A
CHEMBL3087994	B	B
CHEMBL308979	A	A
CHEMBL308994	B	A
CHEMBL3092025	A	A
CHEMBL3092028	A	A
CHEMBL3092029	A	A
CHEMBL3092035	A	A
CHEMBL3092036	A	A
CHEMBL3092037	A	A
CHEMBL3092039	A	A
CHEMBL3092176	A	A
CHEMBL3092178	A	A
CHEMBL3092179	A	A
CHEMBL3092181	A	A
CHEMBL3092182	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL3092185	A	A
CHEMBL3092186	A	A
CHEMBL3092187	A	A
CHEMBL3092189	A	A
CHEMBL3092190	A	A
CHEMBL3092191	A	A
CHEMBL3092192	A	A
CHEMBL3092194	A	A
CHEMBL3092195	A	A
CHEMBL3092196	A	A
CHEMBL3093058	A	A
CHEMBL3093059	A	A
CHEMBL3093060	B	A
CHEMBL3093061	B	A
CHEMBL3093063	A	A
CHEMBL3093064	A	A
CHEMBL3093065	A	A
CHEMBL3093069	A	A
CHEMBL3093070	A	A
CHEMBL3093071	A	A
CHEMBL3093072	A	A
CHEMBL3093074	A	A
CHEMBL3093075	A	A
CHEMBL3093271	B	B
CHEMBL3093272	B	B
CHEMBL3093406	B	B
CHEMBL3093407	B	B
CHEMBL3093408	B	B
CHEMBL309343	B	A
CHEMBL3093509	A	A
CHEMBL3093514	A	A
CHEMBL3093515	A	A
CHEMBL3093521	B	A
CHEMBL3093523	B	A
CHEMBL3093524	A	B
CHEMBL3093526	A	B
CHEMBL3093533	A	A
CHEMBL3093544	B	A
CHEMBL3094228	A	A
CHEMBL3098351	B	A
CHEMBL3098353	B	A
CHEMBL3098355	B	B
CHEMBL3098359	B	B
CHEMBL3099240	B	A
CHEMBL3099241	B	A
CHEMBL3099242	A	A
CHEMBL3099244	A	A
CHEMBL3099245	A	A
CHEMBL3099246	B	A
CHEMBL3099247	B	A
CHEMBL310260	A	A
CHEMBL3102885	B	B
CHEMBL3103323	A	A
CHEMBL3103324	A	B
CHEMBL3103330	A	A
CHEMBL3103332	A	B
CHEMBL3103347	A	A
CHEMBL3103348	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL3103349	A	A
CHEMBL3104272	A	A
CHEMBL3104274	A	A
CHEMBL3104275	A	A
CHEMBL3104277	A	A
CHEMBL3104279	A	A
CHEMBL3104280	A	A
CHEMBL3104281	A	A
CHEMBL3104282	A	A
CHEMBL3104283	A	A
CHEMBL3104284	A	A
CHEMBL3104286	A	A
CHEMBL3104288	A	A
CHEMBL3104289	A	A
CHEMBL3104417	B	A
CHEMBL3104418	B	A
CHEMBL3104796	B	B
CHEMBL3104797	B	B
CHEMBL3104798	B	B
CHEMBL3104799	B	B
CHEMBL3104800	B	B
CHEMBL3104801	B	B
CHEMBL3104802	B	B
CHEMBL3104803	B	B
CHEMBL3104804	B	B
CHEMBL3104805	B	B
CHEMBL3104806	B	B
CHEMBL3104808	A	B
CHEMBL3104809	B	B
CHEMBL3104810	B	B
CHEMBL3104811	B	B
CHEMBL3104838	B	B
CHEMBL3104839	B	B
CHEMBL3104840	A	A
CHEMBL3104841	B	B
CHEMBL3104842	B	B
CHEMBL3104843	A	A
CHEMBL3104875	B	B
CHEMBL3104876	A	A
CHEMBL3104877	B	B
CHEMBL3104878	A	B
CHEMBL310491	A	A
CHEMBL3104982	B	B
CHEMBL3105502	B	A
CHEMBL3105503	B	B
CHEMBL3105506	B	B
CHEMBL3105507	B	A
CHEMBL3105509	B	B
CHEMBL3105510	B	B
CHEMBL3105511	B	B
CHEMBL3105512	A	B
CHEMBL3105513	B	A
CHEMBL3105514	A	B
CHEMBL3105515	A	A
CHEMBL3105516	A	B
CHEMBL3105530	B	B
CHEMBL3105531	B	B
CHEMBL3105532	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL3105586	A	A
CHEMBL3105587	B	A
CHEMBL310737	A	A
CHEMBL3109480	B	B
CHEMBL3109937	A	A
CHEMBL3109938	A	A
CHEMBL3113129	A	B
CHEMBL3113130	B	A
CHEMBL3113140	A	A
CHEMBL3113141	B	A
CHEMBL3113142	B	A
CHEMBL3113143	B	B
CHEMBL3113144	B	B
CHEMBL3113145	B	B
CHEMBL3113148	A	B
CHEMBL3113149	B	B
CHEMBL3113150	B	B
CHEMBL3113275	A	A
CHEMBL3113276	B	A
CHEMBL3113277	A	A
CHEMBL3113279	A	A
CHEMBL3113280	B	A
CHEMBL3113281	A	A
CHEMBL3113282	B	B
CHEMBL3113283	A	A
CHEMBL3113284	A	A
CHEMBL3113285	A	A
CHEMBL3113286	B	A
CHEMBL3113287	A	A
CHEMBL3113288	A	A
CHEMBL3113290	A	A
CHEMBL3114420	A	A
CHEMBL3114421	B	A
CHEMBL3114422	B	A
CHEMBL3114423	A	B
CHEMBL3114424	B	B
CHEMBL3114580	A	B
CHEMBL3114582	B	B
CHEMBL3114583	A	B
CHEMBL3114584	B	A
CHEMBL3114585	A	A
CHEMBL3114586	A	B
CHEMBL3114587	B	A
CHEMBL3114588	A	A
CHEMBL3114589	A	A
CHEMBL311540	B	B
CHEMBL3115965	B	B
CHEMBL3115970	B	B
CHEMBL3115971	B	B
CHEMBL311636	A	A
CHEMBL311851	A	A
CHEMBL311907	A	A
CHEMBL3120214	B	B
CHEMBL3120215	A	A
CHEMBL3120229	B	B
CHEMBL312292	A	A
CHEMBL312300	B	B
CHEMBL3124965	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL3125702	A	A
CHEMBL3125801	B	B
CHEMBL3125802	B	B
CHEMBL3125804	B	B
CHEMBL3125805	B	B
CHEMBL3125806	B	B
CHEMBL3125807	B	B
CHEMBL3125809	B	B
CHEMBL3125810	B	B
CHEMBL3125812	B	B
CHEMBL3125814	B	B
CHEMBL3125816	B	B
CHEMBL3125817	B	B
CHEMBL3125818	B	B
CHEMBL3125819	B	B
CHEMBL3126055	B	B
CHEMBL3126056	A	A
CHEMBL3126057	A	A
CHEMBL3126058	A	A
CHEMBL3126059	B	B
CHEMBL3126060	B	B
CHEMBL3126061	B	B
CHEMBL3126062	A	A
CHEMBL3126063	A	A
CHEMBL3126064	A	A
CHEMBL3126065	B	B
CHEMBL3126066	B	B
CHEMBL3126070	B	B
CHEMBL3126071	B	B
CHEMBL3126072	B	B
CHEMBL3126073	B	A
CHEMBL3126074	B	A
CHEMBL3126075	B	B
CHEMBL3126076	A	A
CHEMBL3126077	A	A
CHEMBL3126078	B	A
CHEMBL3126079	A	A
CHEMBL3126081	A	A
CHEMBL3126082	A	A
CHEMBL3126083	B	A
CHEMBL3126084	B	B
CHEMBL3126085	B	B
CHEMBL3126865	B	B
CHEMBL3126867	B	B
CHEMBL3126868	B	B
CHEMBL3126872	B	B
CHEMBL3126884	B	B
CHEMBL3126885	B	B
CHEMBL3126886	B	B
CHEMBL3126887	B	B
CHEMBL3126888	B	B
CHEMBL3126889	B	B
CHEMBL3126890	B	B
CHEMBL3126891	B	B
CHEMBL3126892	B	B
CHEMBL3126893	B	B
CHEMBL3126894	B	B
CHEMBL3126895	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL3126896	B	B
CHEMBL3126897	B	B
CHEMBL3126898	B	B
CHEMBL3126899	A	B
CHEMBL3126900	B	A
CHEMBL3126901	B	B
CHEMBL3126902	B	B
CHEMBL3126904	B	B
CHEMBL3126905	A	B
CHEMBL3126906	B	B
CHEMBL3126907	A	B
CHEMBL3126908	A	B
CHEMBL3126909	B	A
CHEMBL3126910	B	A
CHEMBL3126911	A	B
CHEMBL3126912	B	B
CHEMBL3126913	B	B
CHEMBL3126914	B	B
CHEMBL3126915	A	B
CHEMBL3127044	B	B
CHEMBL3127045	B	B
CHEMBL3127046	B	B
CHEMBL3127047	A	B
CHEMBL3127048	B	B
CHEMBL3127049	A	A
CHEMBL3127050	A	B
CHEMBL3127051	B	B
CHEMBL3127052	B	B
CHEMBL3127053	B	B
CHEMBL3127054	B	B
CHEMBL3127055	A	B
CHEMBL3127056	B	B
CHEMBL3127057	B	B
CHEMBL3127058	A	B
CHEMBL3127059	B	A
CHEMBL3127060	B	B
CHEMBL3127061	B	B
CHEMBL3127062	B	B
CHEMBL3127063	B	B
CHEMBL3127064	B	A
CHEMBL3127065	A	A
CHEMBL3127066	A	A
CHEMBL3127067	A	A
CHEMBL3127068	A	A
CHEMBL3127376	B	B
CHEMBL3127377	B	A
CHEMBL3127378	A	A
CHEMBL3127380	A	B
CHEMBL3127620	A	A
CHEMBL3127845	B	B
CHEMBL3127846	B	B
CHEMBL3127847	B	B
CHEMBL3127848	B	B
CHEMBL3127849	B	B
CHEMBL3127850	B	B
CHEMBL3127851	B	B
CHEMBL3134158	B	B
CHEMBL3134160	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL3134161	A	A
CHEMBL3134162	A	B
CHEMBL3134165	B	B
CHEMBL3134166	B	B
CHEMBL3134167	B	B
CHEMBL3134229	B	B
CHEMBL3134517	A	A
CHEMBL3134519	A	A
CHEMBL3134523	A	A
CHEMBL3134524	A	A
CHEMBL3134527	A	A
CHEMBL3134529	A	A
CHEMBL3134530	A	A
CHEMBL3134532	A	A
CHEMBL3134533	A	A
CHEMBL3134535	A	A
CHEMBL3134538	A	A
CHEMBL3134539	A	A
CHEMBL3134540	A	A
CHEMBL3134541	A	A
CHEMBL3134542	A	A
CHEMBL3134544	A	A
CHEMBL3134545	A	A
CHEMBL3134546	A	A
CHEMBL3134549	A	A
CHEMBL3134550	A	A
CHEMBL3134553	A	A
CHEMBL3134554	A	A
CHEMBL3134555	A	A
CHEMBL3134556	A	A
CHEMBL3134558	A	A
CHEMBL3134559	A	A
CHEMBL3134560	A	A
CHEMBL3134561	A	A
CHEMBL3134564	A	A
CHEMBL3134567	A	A
CHEMBL3134568	A	A
CHEMBL3134569	A	A
CHEMBL3134570	A	A
CHEMBL3134582	B	A
CHEMBL3134583	A	B
CHEMBL313523	B	B
CHEMBL313524	B	B
CHEMBL314301	B	A
CHEMBL314523	A	A
CHEMBL314854	A	B
CHEMBL315167	B	B
CHEMBL315888	A	A
CHEMBL316186	B	B
CHEMBL316564	B	A
CHEMBL317190	A	A
CHEMBL317339	B	B
CHEMBL317718	B	A
CHEMBL317814	A	A
CHEMBL317884	B	A
CHEMBL318076	A	A
CHEMBL318431	B	A
CHEMBL318529	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL318599	A	A
CHEMBL318613	B	A
CHEMBL318821	B	B
CHEMBL319177	B	B
CHEMBL320229	A	A
CHEMBL320304	A	A
CHEMBL321063	A	A
CHEMBL321235	A	A
CHEMBL321299	A	A
CHEMBL321541	A	A
CHEMBL3216230	A	A
CHEMBL3216673	A	A
CHEMBL3218072	A	A
CHEMBL3218073	A	A
CHEMBL3218074	A	A
CHEMBL3218075	A	A
CHEMBL3218076	A	A
CHEMBL3218078	A	A
CHEMBL3218079	A	A
CHEMBL3218081	A	A
CHEMBL3218082	A	A
CHEMBL3218083	A	A
CHEMBL3218084	A	A
CHEMBL3218085	A	A
CHEMBL3218086	A	A
CHEMBL3218087	A	A
CHEMBL3218089	A	A
CHEMBL3218090	A	A
CHEMBL3218092	A	A
CHEMBL3218094	A	A
CHEMBL3218095	A	A
CHEMBL3218096	A	A
CHEMBL3218097	A	A
CHEMBL3218098	A	A
CHEMBL3218099	A	A
CHEMBL3218100	A	A
CHEMBL3218102	A	A
CHEMBL3218103	A	A
CHEMBL3218104	A	A
CHEMBL3218107	A	A
CHEMBL3218108	A	A
CHEMBL3218109	A	A
CHEMBL3218110	A	A
CHEMBL3218261	A	A
CHEMBL3218262	A	A
CHEMBL3218263	A	A
CHEMBL3218264	A	A
CHEMBL3218265	B	B
CHEMBL3218266	B	B
CHEMBL3218267	B	B
CHEMBL3218268	B	B
CHEMBL3218269	A	A
CHEMBL3218270	A	A
CHEMBL3218271	A	A
CHEMBL3218273	A	A
CHEMBL3218382	B	B
CHEMBL3218384	B	B
CHEMBL3218385	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL3218386	B	B
CHEMBL3218706	A	A
CHEMBL3218707	A	A
CHEMBL3218708	A	A
CHEMBL3218709	A	A
CHEMBL3218710	A	A
CHEMBL3218948	A	A
CHEMBL3218949	A	A
CHEMBL3218950	A	A
CHEMBL3218951	A	A
CHEMBL3218952	A	A
CHEMBL3218953	B	A
CHEMBL3218954	A	A
CHEMBL321907	A	A
CHEMBL3219597	A	A
CHEMBL3220330	B	A
CHEMBL3220331	A	A
CHEMBL3220332	A	A
CHEMBL3220333	A	A
CHEMBL3220334	A	A
CHEMBL3220335	A	A
CHEMBL3220336	A	A
CHEMBL3220337	B	A
CHEMBL3220338	A	A
CHEMBL3220339	A	A
CHEMBL3220341	A	A
CHEMBL322146	A	A
CHEMBL3233687	A	A
CHEMBL3233696	A	A
CHEMBL3233698	A	A
CHEMBL3233703	A	A
CHEMBL3233708	A	A
CHEMBL3233733	B	B
CHEMBL3233742	B	B
CHEMBL3233749	A	B
CHEMBL3234200	A	A
CHEMBL3234201	A	A
CHEMBL3234202	A	A
CHEMBL3234413	B	B
CHEMBL3234421	B	B
CHEMBL3234422	B	B
CHEMBL3234423	A	B
CHEMBL3234424	B	B
CHEMBL3234425	B	A
CHEMBL3234426	B	B
CHEMBL3234427	A	A
CHEMBL3234428	A	B
CHEMBL3234752	A	A
CHEMBL3234828	A	B
CHEMBL3235120	B	B
CHEMBL3235121	B	B
CHEMBL3235462	B	A
CHEMBL3235463	A	A
CHEMBL3235464	A	A
CHEMBL3235605	B	B
CHEMBL3235606	B	B
CHEMBL3235607	B	B
CHEMBL3235608	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL3235609	B	B
CHEMBL3235611	B	B
CHEMBL3235612	B	B
CHEMBL3235614	B	B
CHEMBL3235616	B	B
CHEMBL3235617	B	B
CHEMBL3235618	B	B
CHEMBL3235619	B	B
CHEMBL3235787	A	A
CHEMBL3235788	A	A
CHEMBL3235789	A	A
CHEMBL3235791	A	A
CHEMBL3235792	A	A
CHEMBL3235849	B	B
CHEMBL3235851	B	B
CHEMBL3235852	B	B
CHEMBL3235853	B	B
CHEMBL3235854	B	B
CHEMBL3235855	B	A
CHEMBL3235856	A	B
CHEMBL3235857	A	A
CHEMBL3235858	A	A
CHEMBL3237164	A	A
CHEMBL3237166	A	A
CHEMBL3237167	B	A
CHEMBL3237168	A	A
CHEMBL3237169	A	A
CHEMBL3237172	A	A
CHEMBL3237174	A	A
CHEMBL3237176	A	A
CHEMBL3237181	A	A
CHEMBL3237184	A	A
CHEMBL3237188	A	A
CHEMBL323781	A	A
CHEMBL3237860	A	B
CHEMBL3237861	B	B
CHEMBL3237862	A	A
CHEMBL3237863	A	A
CHEMBL3237864	A	A
CHEMBL3237865	A	A
CHEMBL3237866	A	A
CHEMBL3237867	A	A
CHEMBL3237869	A	A
CHEMBL3237870	A	A
CHEMBL3237873	A	A
CHEMBL3237874	A	A
CHEMBL323813	A	A
CHEMBL323908	A	A
CHEMBL324612	A	A
CHEMBL324951	B	B
CHEMBL325023	A	A
CHEMBL325121	B	A
CHEMBL325453	A	A
CHEMBL325654	A	A
CHEMBL32571	B	B
CHEMBL3260161	A	B
CHEMBL3260162	B	A
CHEMBL3260163	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL3260164	A	A
CHEMBL3260165	B	A
CHEMBL3260166	B	B
CHEMBL3260167	A	B
CHEMBL3260168	A	B
CHEMBL3260169	A	A
CHEMBL3260170	B	A
CHEMBL3260171	B	A
CHEMBL3260172	A	B
CHEMBL3260173	B	A
CHEMBL3260358	A	A
CHEMBL326082	A	B
CHEMBL3262493	A	A
CHEMBL3262494	A	A
CHEMBL3262495	A	A
CHEMBL3262496	A	A
CHEMBL3262497	A	A
CHEMBL3262498	A	A
CHEMBL3262499	B	B
CHEMBL3262501	B	B
CHEMBL3262502	B	B
CHEMBL3262503	A	B
CHEMBL3262504	A	A
CHEMBL3262506	B	A
CHEMBL3262507	B	B
CHEMBL3262508	B	A
CHEMBL3262509	A	B
CHEMBL3262510	B	A
CHEMBL3262511	A	B
CHEMBL3262512	B	A
CHEMBL3262513	B	B
CHEMBL3262723	A	A
CHEMBL3262727	A	A
CHEMBL3262728	A	A
CHEMBL3263195	A	B
CHEMBL3263220	B	A
CHEMBL3263994	A	A
CHEMBL3264003	B	A
CHEMBL326523	B	B
CHEMBL326564	B	B
CHEMBL326651	B	B
CHEMBL326828	A	A
CHEMBL326903	A	A
CHEMBL327212	A	A
CHEMBL327400	A	A
CHEMBL327555	B	B
CHEMBL327610	A	A
CHEMBL327856	A	A
CHEMBL327867	B	B
CHEMBL327924	A	B
CHEMBL328071	A	A
CHEMBL328103	A	A
CHEMBL328553	B	B
CHEMBL328672	B	B
CHEMBL3286731	B	B
CHEMBL328679	A	A
CHEMBL3289003	A	A
CHEMBL3289006	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL3290498	A	B
CHEMBL3290499	B	B
CHEMBL3290500	B	B
CHEMBL3290501	B	B
CHEMBL3290502	B	B
CHEMBL3290503	B	B
CHEMBL3291067	A	A
CHEMBL3291068	A	A
CHEMBL3291290	A	A
CHEMBL3291291	A	A
CHEMBL329237	B	B
CHEMBL329745	A	A
CHEMBL3297804	B	B
CHEMBL3297805	B	B
CHEMBL3297806	B	B
CHEMBL3297989	B	B
CHEMBL3297990	B	B
CHEMBL3297991	B	B
CHEMBL3297992	B	B
CHEMBL3297993	B	B
CHEMBL3297995	B	B
CHEMBL3297996	B	B
CHEMBL3298069	B	B
CHEMBL3298072	B	B
CHEMBL3298073	B	B
CHEMBL3298074	B	B
CHEMBL3298075	B	B
CHEMBL3298077	B	B
CHEMBL3298078	B	B
CHEMBL3298079	B	B
CHEMBL3298080	B	B
CHEMBL3298115	B	B
CHEMBL3298116	B	B
CHEMBL3298117	B	B
CHEMBL3298118	B	B
CHEMBL3298119	B	B
CHEMBL3298120	B	B
CHEMBL3298121	B	B
CHEMBL3298122	B	B
CHEMBL3298123	B	B
CHEMBL3298124	B	B
CHEMBL3298125	B	B
CHEMBL3298126	B	B
CHEMBL3298127	B	B
CHEMBL3298128	B	B
CHEMBL3298135	B	B
CHEMBL3298136	B	B
CHEMBL3298137	B	B
CHEMBL3298138	B	B
CHEMBL3298139	B	B
CHEMBL3298175	B	B
CHEMBL3298176	B	B
CHEMBL3298177	B	B
CHEMBL3298356	A	B
CHEMBL3298358	B	B
CHEMBL3298393	B	B
CHEMBL3298394	B	B
CHEMBL3298396	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL3298484	B	B
CHEMBL3298485	B	B
CHEMBL3298486	B	B
CHEMBL3298487	B	B
CHEMBL3298489	B	B
CHEMBL3298490	B	B
CHEMBL3298491	B	B
CHEMBL3298492	A	B
CHEMBL3298493	B	B
CHEMBL3298494	B	B
CHEMBL3298512	B	B
CHEMBL3298558	B	B
CHEMBL3298637	B	A
CHEMBL3298639	B	B
CHEMBL3298640	B	B
CHEMBL3298641	B	B
CHEMBL3298642	B	B
CHEMBL3298643	A	A
CHEMBL3298644	A	A
CHEMBL3298645	A	A
CHEMBL3298721	A	A
CHEMBL3298723	A	A
CHEMBL3298725	A	A
CHEMBL3298726	A	A
CHEMBL3298912	B	B
CHEMBL3298930	B	B
CHEMBL3298959	A	A
CHEMBL3299017	B	B
CHEMBL3299061	B	B
CHEMBL3299062	B	B
CHEMBL3299063	B	B
CHEMBL3299064	B	B
CHEMBL3299065	B	B
CHEMBL3299066	B	B
CHEMBL3299067	B	B
CHEMBL3299068	B	B
CHEMBL3299069	A	B
CHEMBL3299070	B	B
CHEMBL3299071	B	B
CHEMBL3299072	B	B
CHEMBL329993	A	A
CHEMBL330015	A	A
CHEMBL330056	A	A
CHEMBL330201	A	A
CHEMBL330407	A	A
CHEMBL332122	B	B
CHEMBL332575	A	B
CHEMBL332712	A	A
CHEMBL334285	A	A
CHEMBL334648	B	B
CHEMBL334658	A	A
CHEMBL334881	B	A
CHEMBL335603	B	B
CHEMBL335812	A	A
CHEMBL335838	A	B
CHEMBL336253	B	B
CHEMBL336674	A	A
CHEMBL338264	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL338289	B	A
CHEMBL338604	A	A
CHEMBL339948	A	A
CHEMBL340884	A	A
CHEMBL341035	A	A
CHEMBL341110	A	A
CHEMBL341601	A	A
CHEMBL341800	B	B
CHEMBL341831	B	B
CHEMBL341914	A	A
CHEMBL341915	A	A
CHEMBL341926	A	A
CHEMBL342474	A	A
CHEMBL342862	A	A
CHEMBL343042	A	A
CHEMBL343091	A	A
CHEMBL343096	A	A
CHEMBL343118	A	A
CHEMBL343823	A	A
CHEMBL344218	B	B
CHEMBL344227	A	A
CHEMBL344243	B	B
CHEMBL344443	A	A
CHEMBL344664	A	A
CHEMBL345525	A	A
CHEMBL346164	A	A
CHEMBL346184	A	A
CHEMBL346435	A	A
CHEMBL346445	A	A
CHEMBL347994	A	A
CHEMBL348438	A	A
CHEMBL349015	B	A
CHEMBL353629	A	A
CHEMBL354586	A	A
CHEMBL356066	A	A
CHEMBL356208	A	B
CHEMBL356728	A	A
CHEMBL357231	A	A
CHEMBL357268	A	A
CHEMBL358102	A	A
CHEMBL359200	A	A
CHEMBL359475	A	B
CHEMBL360899	B	B
CHEMBL360902	A	B
CHEMBL361030	A	A
CHEMBL361078	B	B
CHEMBL361126	B	A
CHEMBL361900	A	A
CHEMBL361992	B	B
CHEMBL362075	A	A
CHEMBL362087	A	B
CHEMBL362109	A	A
CHEMBL362121	A	A
CHEMBL362414	B	A
CHEMBL362560	A	A
CHEMBL362756	A	A
CHEMBL363130	A	A
CHEMBL363174	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL363202	A	B
CHEMBL36327	B	B
CHEMBL363607	A	A
CHEMBL363679	A	A
CHEMBL363835	B	A
CHEMBL363857	A	A
CHEMBL364001	A	A
CHEMBL364226	A	A
CHEMBL364249	B	B
CHEMBL364493	B	B
CHEMBL364927	A	A
CHEMBL364965	A	B
CHEMBL365713	A	A
CHEMBL366209	A	A
CHEMBL368233	B	B
CHEMBL368902	A	A
CHEMBL369135	A	A
CHEMBL370237	A	A
CHEMBL370271	B	A
CHEMBL370292	B	B
CHEMBL370698	A	A
CHEMBL370721	A	A
CHEMBL371363	B	B
CHEMBL371405	A	A
CHEMBL371910	A	A
CHEMBL371949	A	A
CHEMBL372123	A	A
CHEMBL373201	B	A
CHEMBL373382	A	A
CHEMBL373396	A	B
CHEMBL373826	A	A
CHEMBL373834	A	B
CHEMBL374092	B	B
CHEMBL374240	A	A
CHEMBL374520	A	A
CHEMBL374568	A	A
CHEMBL374626	B	B
CHEMBL374720	B	B
CHEMBL375045	B	B
CHEMBL375062	A	A
CHEMBL375269	A	A
CHEMBL375578	A	A
CHEMBL376133	B	B
CHEMBL376138	B	B
CHEMBL376408	B	B
CHEMBL376532	A	A
CHEMBL376616	B	B
CHEMBL376628	A	A
CHEMBL376708	A	A
CHEMBL376823	A	A
CHEMBL377333	B	B
CHEMBL377516	B	A
CHEMBL378110	A	A
CHEMBL378248	B	B
CHEMBL378420	B	B
CHEMBL378855	B	B
CHEMBL378942	A	A
CHEMBL379193	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL379473	A	A
CHEMBL379858	A	A
CHEMBL379975	B	A
CHEMBL38	B	B
CHEMBL380145	A	A
CHEMBL380578	B	A
CHEMBL380888	B	B
CHEMBL380946	A	A
CHEMBL381551	A	A
CHEMBL381772	B	B
CHEMBL382453	A	A
CHEMBL383104	A	A
CHEMBL383262	B	A
CHEMBL383509	B	A
CHEMBL383824	A	A
CHEMBL383875	B	A
CHEMBL384304	A	A
CHEMBL384356	A	A
CHEMBL384503	A	A
CHEMBL384575	B	A
CHEMBL385190	A	A
CHEMBL385733	A	A
CHEMBL385872	A	A
CHEMBL386960	A	A
CHEMBL387448	A	A
CHEMBL38761	A	B
CHEMBL387831	B	B
CHEMBL387839	B	B
CHEMBL387931	A	B
CHEMBL388037	A	A
CHEMBL388151	B	A
CHEMBL388152	A	B
CHEMBL388365	A	B
CHEMBL388579	B	B
CHEMBL388580	B	B
CHEMBL388971	B	A
CHEMBL389340	A	A
CHEMBL38957	A	A
CHEMBL389575	A	A
CHEMBL389601	B	B
CHEMBL389919	B	A
CHEMBL390023	A	A
CHEMBL390452	A	A
CHEMBL390629	A	A
CHEMBL391172	B	B
CHEMBL391218	B	B
CHEMBL391282	A	B
CHEMBL391587	A	A
CHEMBL391591	B	B
CHEMBL392072	B	A
CHEMBL392123	A	B
CHEMBL392141	B	A
CHEMBL392192	B	B
CHEMBL392306	A	A
CHEMBL392412	B	A
CHEMBL392449	A	A
CHEMBL393447	A	B
CHEMBL393460	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL393468	A	A
CHEMBL393476	B	A
CHEMBL393527	B	A
CHEMBL393662	B	A
CHEMBL393748	B	B
CHEMBL394004	B	A
CHEMBL394395	A	B
CHEMBL394465	A	A
CHEMBL394466	B	B
CHEMBL394547	B	B
CHEMBL394548	A	B
CHEMBL394549	B	A
CHEMBL394608	B	B
CHEMBL394665	A	A
CHEMBL394798	B	A
CHEMBL394888	A	A
CHEMBL395016	A	A
CHEMBL395485	A	A
CHEMBL395681	A	A
CHEMBL395968	A	A
CHEMBL396006	B	A
CHEMBL396007	B	B
CHEMBL396165	A	A
CHEMBL396202	A	A
CHEMBL396444	A	A
CHEMBL396549	A	A
CHEMBL396641	B	A
CHEMBL396898	B	B
CHEMBL397022	A	A
CHEMBL397067	B	B
CHEMBL397104	B	B
CHEMBL397127	A	A
CHEMBL397309	A	A
CHEMBL397549	A	A
CHEMBL397923	A	A
CHEMBL398149	A	A
CHEMBL398170	A	A
CHEMBL398333	A	A
CHEMBL398400	A	A
CHEMBL398649	A	B
CHEMBL398751	B	B
CHEMBL398752	B	B
CHEMBL398785	A	A
CHEMBL398866	A	A
CHEMBL398950	A	A
CHEMBL399042	A	A
CHEMBL399170	A	A
CHEMBL399363	A	A
CHEMBL399365	A	A
CHEMBL399530	A	A
CHEMBL399623	B	A
CHEMBL399754	A	A
CHEMBL399797	A	B
CHEMBL399974	A	B
CHEMBL400085	B	B
CHEMBL400213	A	A
CHEMBL400418	B	B
CHEMBL400419	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL400440	A	A
CHEMBL400441	B	B
CHEMBL400482	A	A
CHEMBL400760	A	A
CHEMBL400858	A	A
CHEMBL400859	A	A
CHEMBL400906	A	A
CHEMBL400919	A	A
CHEMBL400920	A	A
CHEMBL401178	B	A
CHEMBL401448	A	A
CHEMBL401449	A	A
CHEMBL401614	A	A
CHEMBL401751	A	A
CHEMBL402157	A	A
CHEMBL402194	A	A
CHEMBL402246	A	A
CHEMBL402306	A	A
CHEMBL402370	A	A
CHEMBL402381	B	A
CHEMBL402382	A	A
CHEMBL402599	A	A
CHEMBL402712	A	A
CHEMBL402718	A	A
CHEMBL402719	A	A
CHEMBL40275	A	B
CHEMBL402759	A	A
CHEMBL403285	A	A
CHEMBL403466	A	A
CHEMBL403467	A	A
CHEMBL403664	A	B
CHEMBL403715	B	B
CHEMBL404009	B	B
CHEMBL404054	A	A
CHEMBL404332	A	A
CHEMBL404508	A	A
CHEMBL404518	B	A
CHEMBL404630	A	A
CHEMBL404811	A	A
CHEMBL404934	A	A
CHEMBL405714	A	A
CHEMBL405903	B	B
CHEMBL405935	A	A
CHEMBL406207	A	A
CHEMBL406631	A	A
CHEMBL406927	A	A
CHEMBL406943	A	A
CHEMBL407095	A	A
CHEMBL407306	A	A
CHEMBL407420	A	A
CHEMBL407959	A	A
CHEMBL408513	A	A
CHEMBL409	B	A
CHEMBL409017	A	A
CHEMBL409129	B	B
CHEMBL409450	A	B
CHEMBL409493	A	A
CHEMBL409861	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL41092	B	B
CHEMBL411233	A	A
CHEMBL411432	A	A
CHEMBL411460	B	B
CHEMBL411694	A	A
CHEMBL411879	A	B
CHEMBL412083	A	A
CHEMBL412142	B	A
CHEMBL412564	A	A
CHEMBL413188	B	A
CHEMBL413700	A	A
CHEMBL414531	A	A
CHEMBL414574	A	A
CHEMBL415085	A	A
CHEMBL415476	A	A
CHEMBL415735	A	A
CHEMBL415789	A	A
CHEMBL416	B	B
CHEMBL416673	A	A
CHEMBL417922	A	A
CHEMBL418068	B	B
CHEMBL418203	A	A
CHEMBL419886	B	A
CHEMBL420032	A	A
CHEMBL420410	A	A
CHEMBL421934	A	A
CHEMBL423921	A	A
CHEMBL424055	B	B
CHEMBL424318	A	A
CHEMBL424730	A	A
CHEMBL425559	B	B
CHEMBL426181	B	B
CHEMBL42624	B	B
CHEMBL426770	A	A
CHEMBL426818	A	A
CHEMBL426848	B	B
CHEMBL426920	A	A
CHEMBL426929	A	A
CHEMBL427004	B	A
CHEMBL427092	B	A
CHEMBL427170	A	A
CHEMBL427787	A	A
CHEMBL428052	B	A
CHEMBL428060	B	A
CHEMBL428084	A	A
CHEMBL428192	B	B
CHEMBL428208	A	B
CHEMBL428225	A	A
CHEMBL428582	A	A
CHEMBL428623	A	A
CHEMBL428676	B	A
CHEMBL428690	A	A
CHEMBL428921	A	A
CHEMBL429457	B	B
CHEMBL429478	A	A
CHEMBL429636	A	A
CHEMBL429864	A	B
CHEMBL430000	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL430172	B	B
CHEMBL430476	A	A
CHEMBL430606	A	A
CHEMBL430804	A	A
CHEMBL431093	A	A
CHEMBL431181	B	A
CHEMBL431525	A	B
CHEMBL431603	A	A
CHEMBL431922	A	A
CHEMBL431968	B	B
CHEMBL432002	A	A
CHEMBL432137	A	A
CHEMBL432219	A	A
CHEMBL432647	A	A
CHEMBL433007	A	A
CHEMBL433820	B	A
CHEMBL433943	A	A
CHEMBL433959	A	A
CHEMBL434715	B	A
CHEMBL435748	A	A
CHEMBL435951	B	B
CHEMBL436054	A	A
CHEMBL436284	A	A
CHEMBL436624	A	A
CHEMBL437306	B	B
CHEMBL437330	B	A
CHEMBL43750	A	A
CHEMBL438717	A	A
CHEMBL439498	A	A
CHEMBL44	B	B
CHEMBL440614	B	B
CHEMBL441133	A	B
CHEMBL441258	A	A
CHEMBL442392	A	A
CHEMBL442426	A	A
CHEMBL442566	B	B
CHEMBL442661	A	A
CHEMBL442931	B	B
CHEMBL443059	B	B
CHEMBL443114	A	B
CHEMBL443198	B	A
CHEMBL443580	A	A
CHEMBL443684	B	B
CHEMBL443720	A	A
CHEMBL44384	A	A
CHEMBL444004	A	A
CHEMBL444290	B	B
CHEMBL444472	B	B
CHEMBL444562	A	A
CHEMBL444693	A	A
CHEMBL444750	A	A
CHEMBL445092	B	B
CHEMBL445813	A	A
CHEMBL445938	A	A
CHEMBL446076	A	A
CHEMBL446085	A	A
CHEMBL446173	A	A
CHEMBL446521	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL44657	A	B
CHEMBL446930	B	B
CHEMBL447394	B	B
CHEMBL447461	B	B
CHEMBL447545	A	A
CHEMBL447553	A	A
CHEMBL448316	A	A
CHEMBL448327	A	A
CHEMBL448374	B	A
CHEMBL449158	A	A
CHEMBL449447	A	A
CHEMBL449476	B	B
CHEMBL449803	A	A
CHEMBL450115	A	A
CHEMBL450580	A	A
CHEMBL450671	B	B
CHEMBL450708	A	A
CHEMBL450849	A	B
CHEMBL451091	B	B
CHEMBL451147	A	A
CHEMBL451402	A	A
CHEMBL451699	B	B
CHEMBL452048	A	A
CHEMBL452175	A	A
CHEMBL452355	A	A
CHEMBL452480	B	B
CHEMBL452601	A	A
CHEMBL452709	A	A
CHEMBL452903	A	A
CHEMBL452968	B	B
CHEMBL453035	B	A
CHEMBL453082	A	A
CHEMBL453565	A	B
CHEMBL453856	A	A
CHEMBL454188	B	A
CHEMBL454234	A	A
CHEMBL454372	A	A
CHEMBL454428	B	B
CHEMBL454434	A	A
CHEMBL454646	A	A
CHEMBL454710	A	A
CHEMBL45477	B	B
CHEMBL454803	A	A
CHEMBL455005	A	A
CHEMBL455195	A	A
CHEMBL455213	A	A
CHEMBL455441	B	B
CHEMBL455450	A	A
CHEMBL455487	A	A
CHEMBL455550	B	A
CHEMBL455804	A	B
CHEMBL455872	B	B
CHEMBL455888	A	A
CHEMBL456511	A	A
CHEMBL456628	A	B
CHEMBL45669	B	B
CHEMBL456846	A	A
CHEMBL456959	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL456963	A	A
CHEMBL457177	A	A
CHEMBL457376	A	A
CHEMBL457379	B	B
CHEMBL457388	A	A
CHEMBL45742	B	B
CHEMBL457490	B	B
CHEMBL457497	B	B
CHEMBL457538	A	A
CHEMBL457598	B	B
CHEMBL457599	A	A
CHEMBL457826	A	A
CHEMBL457958	B	A
CHEMBL457959	B	A
CHEMBL458249	A	A
CHEMBL45830	B	B
CHEMBL458307	B	B
CHEMBL458372	B	B
CHEMBL458421	A	A
CHEMBL458512	A	A
CHEMBL458573	B	B
CHEMBL458591	B	B
CHEMBL458689	A	A
CHEMBL458691	B	B
CHEMBL458773	B	B
CHEMBL458904	A	B
CHEMBL458905	B	A
CHEMBL458921	B	B
CHEMBL458949	B	B
CHEMBL459359	A	A
CHEMBL459555	B	B
CHEMBL459565	B	B
CHEMBL459625	B	A
CHEMBL459677	A	A
CHEMBL460047	B	A
CHEMBL460635	A	A
CHEMBL460844	A	A
CHEMBL460972	B	B
CHEMBL461260	A	A
CHEMBL461478	A	A
CHEMBL461763	A	A
CHEMBL46181	B	B
CHEMBL46198	B	A
CHEMBL462131	A	A
CHEMBL462653	B	B
CHEMBL462951	A	B
CHEMBL462959	A	A
CHEMBL462976	B	B
CHEMBL462977	A	A
CHEMBL463010	B	B
CHEMBL463140	A	A
CHEMBL463340	A	A
CHEMBL463763	A	A
CHEMBL463898	B	B
CHEMBL463899	B	B
CHEMBL463915	A	B
CHEMBL464104	B	B
CHEMBL464110	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL464377	A	A
CHEMBL464493	A	A
CHEMBL464638	A	B
CHEMBL464639	B	A
CHEMBL464670	A	A
CHEMBL465145	A	A
CHEMBL465693	A	B
CHEMBL465694	B	A
CHEMBL465705	B	B
CHEMBL465813	A	A
CHEMBL465843	A	B
CHEMBL465858	B	B
CHEMBL465886	B	B
CHEMBL465887	B	B
CHEMBL466215	A	A
CHEMBL466514	B	A
CHEMBL466583	B	B
CHEMBL466716	A	A
CHEMBL467	B	B
CHEMBL467094	B	B
CHEMBL467192	B	A
CHEMBL467372	B	B
CHEMBL467620	A	A
CHEMBL46817	A	A
CHEMBL468513	A	A
CHEMBL468568	B	B
CHEMBL468589	B	B
CHEMBL468873	B	B
CHEMBL469085	A	A
CHEMBL469288	A	A
CHEMBL469319	B	A
CHEMBL469321	A	A
CHEMBL469618	B	B
CHEMBL469932	A	A
CHEMBL469991	B	B
CHEMBL470206	B	A
CHEMBL470412	A	A
CHEMBL470413	B	A
CHEMBL470414	A	A
CHEMBL470439	A	B
CHEMBL470843	A	A
CHEMBL470844	A	A
CHEMBL471043	A	A
CHEMBL471070	B	A
CHEMBL471071	B	A
CHEMBL471173	A	A
CHEMBL471494	A	A
CHEMBL471495	A	A
CHEMBL472203	B	A
CHEMBL472345	A	A
CHEMBL472532	A	A
CHEMBL472631	A	A
CHEMBL472940	B	A
CHEMBL473271	A	A
CHEMBL473478	A	A
CHEMBL473484	A	A
CHEMBL47360	A	B
CHEMBL473629	B	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL473630	A	A
CHEMBL474028	A	A
CHEMBL474053	A	A
CHEMBL47426	A	A
CHEMBL474432	A	A
CHEMBL474463	B	A
CHEMBL47461	B	B
CHEMBL474651	A	A
CHEMBL474669	A	A
CHEMBL474843	A	A
CHEMBL475302	A	A
CHEMBL475783	A	A
CHEMBL475857	A	A
CHEMBL475893	B	A
CHEMBL476113	A	B
CHEMBL476431	A	A
CHEMBL476647	A	A
CHEMBL476648	B	B
CHEMBL476907	A	A
CHEMBL477063	A	A
CHEMBL477077	A	A
CHEMBL477259	A	A
CHEMBL477772	B	A
CHEMBL477861	A	A
CHEMBL477862	B	A
CHEMBL477863	A	A
CHEMBL477877	A	A
CHEMBL478140	A	A
CHEMBL478145	A	A
CHEMBL478318	A	A
CHEMBL478414	B	A
CHEMBL478487	A	A
CHEMBL478488	A	A
CHEMBL47854	B	B
CHEMBL478709	A	A
CHEMBL47875	B	B
CHEMBL479088	B	B
CHEMBL479148	A	A
CHEMBL479279	A	A
CHEMBL479718	B	B
CHEMBL480043	A	A
CHEMBL480044	A	A
CHEMBL48010	B	B
CHEMBL480371	B	A
CHEMBL480382	A	A
CHEMBL480383	A	A
CHEMBL480509	B	B
CHEMBL480545	A	A
CHEMBL480623	A	A
CHEMBL48076	B	B
CHEMBL481492	B	A
CHEMBL481510	A	B
CHEMBL481805	A	A
CHEMBL481998	A	A
CHEMBL481999	A	B
CHEMBL482151	B	A
CHEMBL482349	B	B
CHEMBL482486	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL482593	B	B
CHEMBL482918	A	A
CHEMBL482967	A	A
CHEMBL483081	A	A
CHEMBL483083	B	B
CHEMBL48310	A	B
CHEMBL483527	A	A
CHEMBL483528	A	A
CHEMBL48362	B	A
CHEMBL483722	A	A
CHEMBL483728	A	A
CHEMBL483849	B	B
CHEMBL484007	A	A
CHEMBL484032	A	A
CHEMBL484237	B	A
CHEMBL484423	B	B
CHEMBL484441	B	B
CHEMBL48449	A	B
CHEMBL484924	A	A
CHEMBL485115	A	A
CHEMBL485274	A	B
CHEMBL485737	A	A
CHEMBL485924	B	B
CHEMBL485952	A	B
CHEMBL486025	A	B
CHEMBL486054	B	B
CHEMBL486091	A	A
CHEMBL486095	B	B
CHEMBL48614	B	B
CHEMBL486286	A	A
CHEMBL486302	A	A
CHEMBL486344	B	A
CHEMBL486345	B	A
CHEMBL486504	A	A
CHEMBL486711	A	A
CHEMBL486712	A	A
CHEMBL487082	A	A
CHEMBL487253	B	A
CHEMBL487326	A	A
CHEMBL487521	A	A
CHEMBL487730	A	A
CHEMBL487740	B	B
CHEMBL487774	A	A
CHEMBL48802	B	A
CHEMBL488128	A	A
CHEMBL488562	A	A
CHEMBL488955	A	A
CHEMBL489245	A	A
CHEMBL489332	A	A
CHEMBL489629	A	A
CHEMBL489903	A	A
CHEMBL490240	A	A
CHEMBL490508	A	B
CHEMBL491316	A	A
CHEMBL492381	A	A
CHEMBL492595	A	A
CHEMBL492739	B	B
CHEMBL493326	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL493342	A	A
CHEMBL493367	A	A
CHEMBL493512	B	B
CHEMBL493620	A	A
CHEMBL493808	A	A
CHEMBL494804	A	A
CHEMBL495557	A	B
CHEMBL495558	B	B
CHEMBL495727	A	A
CHEMBL495754	B	B
CHEMBL496043	A	A
CHEMBL496076	A	A
CHEMBL496108	A	A
CHEMBL496785	B	B
CHEMBL497306	A	A
CHEMBL497477	A	A
CHEMBL497530	B	B
CHEMBL498107	A	A
CHEMBL498108	A	A
CHEMBL498447	A	A
CHEMBL498629	B	B
CHEMBL498659	A	A
CHEMBL499027	A	A
CHEMBL499091	A	A
CHEMBL499600	B	B
CHEMBL499652	A	A
CHEMBL499726	A	A
CHEMBL499737	A	B
CHEMBL50	A	B
CHEMBL500191	A	A
CHEMBL500334	A	A
CHEMBL500646	B	A
CHEMBL500748	A	A
CHEMBL500865	B	B
CHEMBL500907	A	B
CHEMBL501152	B	B
CHEMBL501696	A	A
CHEMBL501860	B	B
CHEMBL501933	A	B
CHEMBL502124	A	A
CHEMBL502241	A	A
CHEMBL502431	A	A
CHEMBL502849	B	B
CHEMBL503355	B	B
CHEMBL503434	B	B
CHEMBL503737	B	A
CHEMBL503821	A	A
CHEMBL503999	A	A
CHEMBL504012	A	A
CHEMBL504425	B	B
CHEMBL504547	A	A
CHEMBL504590	A	B
CHEMBL504669	A	A
CHEMBL504686	B	A
CHEMBL504859	B	A
CHEMBL505066	A	A
CHEMBL50514	B	B
CHEMBL505199	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL505354	A	B
CHEMBL505474	B	B
CHEMBL505514	B	B
CHEMBL505630	A	A
CHEMBL505650	A	A
CHEMBL505806	A	A
CHEMBL505905	A	A
CHEMBL505932	A	A
CHEMBL506035	A	A
CHEMBL506166	A	B
CHEMBL506283	A	A
CHEMBL506311	A	A
CHEMBL506441	A	A
CHEMBL506674	A	A
CHEMBL506871	B	B
CHEMBL506914	A	A
CHEMBL507167	A	A
CHEMBL507361	A	A
CHEMBL507536	B	B
CHEMBL507545	A	A
CHEMBL507566	A	B
CHEMBL507687	A	B
CHEMBL507761	B	A
CHEMBL507854	A	A
CHEMBL507957	B	B
CHEMBL508179	B	A
CHEMBL508255	A	A
CHEMBL508383	A	A
CHEMBL508506	A	A
CHEMBL508537	B	A
CHEMBL509012	A	A
CHEMBL509021	B	B
CHEMBL509212	B	B
CHEMBL509255	A	A
CHEMBL509507	A	A
CHEMBL509588	B	B
CHEMBL509765	A	A
CHEMBL509772	B	B
CHEMBL509939	A	A
CHEMBL510041	B	B
CHEMBL510139	B	B
CHEMBL510507	A	A
CHEMBL510566	A	A
CHEMBL510650	A	A
CHEMBL510691	B	B
CHEMBL510700	A	A
CHEMBL510778	B	A
CHEMBL510898	B	A
CHEMBL511439	A	A
CHEMBL511491	A	A
CHEMBL511520	A	B
CHEMBL511679	B	B
CHEMBL511981	B	B
CHEMBL512179	A	A
CHEMBL512338	B	B
CHEMBL512489	A	A
CHEMBL512504	B	B
CHEMBL512516	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL513061	A	A
CHEMBL513501	A	A
CHEMBL513767	B	B
CHEMBL513813	A	A
CHEMBL514040	B	A
CHEMBL514105	B	B
CHEMBL514114	A	B
CHEMBL514304	A	A
CHEMBL514419	B	B
CHEMBL514499	A	A
CHEMBL514503	A	A
CHEMBL514634	A	A
CHEMBL514643	B	A
CHEMBL514678	A	A
CHEMBL514709	A	A
CHEMBL514826	A	B
CHEMBL514865	A	A
CHEMBL514900	A	A
CHEMBL514923	A	A
CHEMBL515023	A	A
CHEMBL515153	A	A
CHEMBL515155	B	B
CHEMBL515292	A	A
CHEMBL515341	A	A
CHEMBL515493	A	B
CHEMBL515619	A	B
CHEMBL515631	A	A
CHEMBL515695	B	B
CHEMBL515973	B	A
CHEMBL516155	A	B
CHEMBL516231	A	A
CHEMBL516236	A	A
CHEMBL516314	A	A
CHEMBL516362	A	A
CHEMBL516465	B	B
CHEMBL516878	A	B
CHEMBL516990	B	B
CHEMBL51709	B	B
CHEMBL517115	B	B
CHEMBL517220	A	A
CHEMBL517447	B	B
CHEMBL517459	B	B
CHEMBL517462	A	A
CHEMBL517495	A	B
CHEMBL517619	B	B
CHEMBL517622	B	B
CHEMBL517627	B	B
CHEMBL517644	A	A
CHEMBL517755	A	A
CHEMBL517772	B	B
CHEMBL517853	A	A
CHEMBL51804	B	A
CHEMBL518074	A	A
CHEMBL518165	A	A
CHEMBL518383	A	A
CHEMBL518523	B	B
CHEMBL518855	B	A
CHEMBL519005	A	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL519120	A	B
CHEMBL519286	B	A
CHEMBL519289	B	A
CHEMBL519309	B	B
CHEMBL519375	A	A
CHEMBL519715	A	A
CHEMBL519961	A	A
CHEMBL519981	A	A
CHEMBL520080	A	A
CHEMBL520155	A	A
CHEMBL520284	B	A
CHEMBL520458	A	A
CHEMBL520569	B	A
CHEMBL520601	A	A
CHEMBL521	B	B
CHEMBL521045	B	A
CHEMBL521352	A	A
CHEMBL521360	B	B
CHEMBL521686	B	A
CHEMBL521806	A	A
CHEMBL521851	B	A
CHEMBL521922	A	A
CHEMBL521949	A	A
CHEMBL522393	A	A
CHEMBL522709	A	A
CHEMBL522976	B	B
CHEMBL523067	B	A
CHEMBL523188	A	A
CHEMBL523991	A	A
CHEMBL524170	A	A
CHEMBL524629	B	B
CHEMBL525629	A	B
CHEMBL52569	A	B
CHEMBL525978	A	A
CHEMBL526699	B	B
CHEMBL529177	B	B
CHEMBL529447	A	A
CHEMBL529661	A	A
CHEMBL53004	A	A
CHEMBL53463	A	A
CHEMBL535368	B	A
CHEMBL535637	A	A
CHEMBL536272	A	A
CHEMBL538097	A	B
CHEMBL538175	B	A
CHEMBL538270	A	A
CHEMBL538341	B	A
CHEMBL538364	A	A
CHEMBL538388	B	B
CHEMBL538412	A	A
CHEMBL53856	A	A
CHEMBL538649	B	B
CHEMBL538653	A	B
CHEMBL538712	A	A
CHEMBL538895	A	A
CHEMBL538967	A	A
CHEMBL539146	B	B
CHEMBL539156	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL539380	A	A
CHEMBL539473	A	A
CHEMBL539690	A	A
CHEMBL539907	A	A
CHEMBL539908	B	A
CHEMBL539919	A	A
CHEMBL540433	B	A
CHEMBL540660	A	A
CHEMBL540960	A	A
CHEMBL541008	A	A
CHEMBL541239	A	A
CHEMBL541248	A	A
CHEMBL541414	B	A
CHEMBL541945	A	A
CHEMBL541946	A	A
CHEMBL541998	B	B
CHEMBL542004	A	A
CHEMBL544298	B	B
CHEMBL545295	A	A
CHEMBL54787	A	A
CHEMBL549305	A	A
CHEMBL549368	B	A
CHEMBL549420	B	A
CHEMBL549484	B	B
CHEMBL549760	B	A
CHEMBL549905	A	A
CHEMBL550042	A	A
CHEMBL55013	B	B
CHEMBL550154	A	A
CHEMBL550404	B	A
CHEMBL55047	A	A
CHEMBL550532	A	A
CHEMBL550579	B	A
CHEMBL550754	B	A
CHEMBL550986	A	A
CHEMBL551151	A	A
CHEMBL551302	B	B
CHEMBL551486	A	A
CHEMBL551549	A	A
CHEMBL551793	B	B
CHEMBL551824	B	A
CHEMBL551983	A	B
CHEMBL552017	B	A
CHEMBL552053	A	A
CHEMBL552212	A	A
CHEMBL552395	B	B
CHEMBL552496	B	B
CHEMBL552716	A	B
CHEMBL552717	B	B
CHEMBL552745	B	B
CHEMBL552962	A	A
CHEMBL553025	A	A
CHEMBL553855	A	A
CHEMBL554	B	A
CHEMBL554330	A	A
CHEMBL554331	A	A
CHEMBL554366	B	A
CHEMBL554575	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL554587	B	B
CHEMBL554604	A	A
CHEMBL554605	A	A
CHEMBL554997	A	A
CHEMBL555298	A	A
CHEMBL555367	B	B
CHEMBL555489	A	A
CHEMBL555662	A	A
CHEMBL555885	A	A
CHEMBL555906	A	A
CHEMBL556	B	B
CHEMBL556074	A	A
CHEMBL556332	A	A
CHEMBL556376	A	A
CHEMBL556532	A	A
CHEMBL556936	A	A
CHEMBL556973	A	A
CHEMBL557066	A	A
CHEMBL557340	B	A
CHEMBL557361	A	A
CHEMBL557395	B	A
CHEMBL557462	B	B
CHEMBL557490	A	A
CHEMBL557545	A	A
CHEMBL557743	A	A
CHEMBL557892	A	A
CHEMBL557897	B	B
CHEMBL558113	A	A
CHEMBL55814	B	B
CHEMBL558169	A	A
CHEMBL558299	A	B
CHEMBL558429	B	A
CHEMBL558462	A	A
CHEMBL558566	A	A
CHEMBL558630	A	A
CHEMBL558642	B	A
CHEMBL558741	A	A
CHEMBL558942	A	B
CHEMBL559121	B	A
CHEMBL559344	A	A
CHEMBL559349	A	A
CHEMBL559614	B	B
CHEMBL559658	A	A
CHEMBL559947	B	A
CHEMBL560081	A	A
CHEMBL560141	B	A
CHEMBL560312	B	B
CHEMBL560339	A	A
CHEMBL560526	A	A
CHEMBL560651	A	A
CHEMBL560848	B	B
CHEMBL560854	A	A
CHEMBL561209	A	A
CHEMBL561240	A	A
CHEMBL561248	B	B
CHEMBL561282	A	A
CHEMBL561411	A	A
CHEMBL561426	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL561483	A	A
CHEMBL561629	A	B
CHEMBL561917	A	A
CHEMBL562243	B	B
CHEMBL562660	A	A
CHEMBL562667	A	A
CHEMBL562730	A	A
CHEMBL562744	A	A
CHEMBL562903	A	A
CHEMBL563428	A	A
CHEMBL563477	A	A
CHEMBL563528	A	A
CHEMBL563768	A	A
CHEMBL563813	A	A
CHEMBL563850	B	A
CHEMBL564019	A	A
CHEMBL564240	A	A
CHEMBL564382	A	A
CHEMBL564399	A	A
CHEMBL564618	A	A
CHEMBL564706	B	A
CHEMBL564716	B	A
CHEMBL564906	A	B
CHEMBL564916	B	A
CHEMBL564961	A	A
CHEMBL565010	A	B
CHEMBL565093	B	A
CHEMBL565140	A	A
CHEMBL566812	B	B
CHEMBL567403	B	B
CHEMBL567578	B	B
CHEMBL567636	B	A
CHEMBL567972	B	B
CHEMBL568448	B	A
CHEMBL568586	B	B
CHEMBL569169	B	B
CHEMBL569627	B	B
CHEMBL569640	B	B
CHEMBL570280	B	B
CHEMBL570332	B	B
CHEMBL570349	B	B
CHEMBL570499	B	B
CHEMBL570570	B	B
CHEMBL571058	B	B
CHEMBL571059	B	B
CHEMBL57107	A	A
CHEMBL571272	B	B
CHEMBL571398	A	A
CHEMBL571496	B	B
CHEMBL571668	A	A
CHEMBL571794	B	B
CHEMBL571894	B	B
CHEMBL572129	B	B
CHEMBL572878	A	A
CHEMBL573107	B	A
CHEMBL573148	A	A
CHEMBL573299	A	B
CHEMBL573339	A	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL573525	B	B
CHEMBL573693	B	B
CHEMBL573756	B	B
CHEMBL574206	B	B
CHEMBL574846	B	B
CHEMBL575056	B	B
CHEMBL575448	A	A
CHEMBL575485	B	B
CHEMBL575500	B	A
CHEMBL575519	A	A
CHEMBL575709	B	B
CHEMBL575730	A	B
CHEMBL575793	B	A
CHEMBL575939	B	B
CHEMBL576081	B	B
CHEMBL576167	A	B
CHEMBL576383	A	A
CHEMBL576968	B	B
CHEMBL577152	B	B
CHEMBL577179	B	B
CHEMBL577784	A	A
CHEMBL578835	B	B
CHEMBL578972	A	A
CHEMBL57959	A	A
CHEMBL58	A	B
CHEMBL582848	B	B
CHEMBL582849	B	B
CHEMBL582852	B	B
CHEMBL583323	B	B
CHEMBL583626	A	B
CHEMBL583638	B	B
CHEMBL58389	A	A
CHEMBL584298	B	B
CHEMBL584299	A	B
CHEMBL584512	B	B
CHEMBL585951	A	A
CHEMBL589344	A	B
CHEMBL59001	A	A
CHEMBL590324	B	A
CHEMBL590488	B	A
CHEMBL590522	A	A
CHEMBL590534	B	B
CHEMBL590650	A	A
CHEMBL590703	A	B
CHEMBL590722	B	A
CHEMBL590755	B	A
CHEMBL591222	A	A
CHEMBL591429	B	B
CHEMBL591715	A	A
CHEMBL591918	B	B
CHEMBL592636	A	A
CHEMBL592946	A	A
CHEMBL592992	B	B
CHEMBL593397	A	A
CHEMBL593444	A	A
CHEMBL593683	B	A
CHEMBL593698	A	A
CHEMBL593700	A	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL593712	A	B
CHEMBL593729	B	A
CHEMBL594018	B	A
CHEMBL594189	B	B
CHEMBL594192	B	B
CHEMBL594340	A	A
CHEMBL594349	A	A
CHEMBL594611	B	B
CHEMBL594644	A	B
CHEMBL594713	B	B
CHEMBL594849	B	B
CHEMBL59502	A	A
CHEMBL595023	A	A
CHEMBL595191	B	B
CHEMBL595210	B	B
CHEMBL595433	B	A
CHEMBL595510	A	A
CHEMBL595726	A	A
CHEMBL597230	A	A
CHEMBL597442	B	B
CHEMBL59785	A	A
CHEMBL597999	B	A
CHEMBL598111	A	A
CHEMBL598253	B	A
CHEMBL598874	B	A
CHEMBL598982	B	B
CHEMBL599072	B	A
CHEMBL599073	A	B
CHEMBL599120	B	A
CHEMBL599121	A	A
CHEMBL599339	A	A
CHEMBL599340	A	B
CHEMBL599341	B	A
CHEMBL599431	B	A
CHEMBL599686	A	A
CHEMBL599687	A	A
CHEMBL599688	A	B
CHEMBL600072	B	B
CHEMBL600325	A	B
CHEMBL600449	A	A
CHEMBL600451	B	B
CHEMBL600452	B	B
CHEMBL600453	B	B
CHEMBL600454	A	B
CHEMBL602532	A	B
CHEMBL603199	A	A
CHEMBL603200	B	A
CHEMBL603469	A	A
CHEMBL604044	A	B
CHEMBL604077	B	B
CHEMBL604178	B	A
CHEMBL604266	B	B
CHEMBL605349	B	B
CHEMBL606053	A	A
CHEMBL606259	A	B
CHEMBL606964	A	A
CHEMBL606989	B	A
CHEMBL607196	A	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL607535	B	B
CHEMBL607544	A	A
CHEMBL607867	A	A
CHEMBL608265	A	A
CHEMBL608404	B	B
CHEMBL608533	A	A
CHEMBL608995	A	A
CHEMBL609028	B	B
CHEMBL609580	B	B
CHEMBL609902	B	B
CHEMBL610058	B	B
CHEMBL610461	A	A
CHEMBL611012	A	A
CHEMBL61102	A	A
CHEMBL611083	A	A
CHEMBL611345	B	A
CHEMBL611501	A	B
CHEMBL611977	B	B
CHEMBL61704	A	A
CHEMBL61705	A	A
CHEMBL61790	A	B
CHEMBL6291	A	A
CHEMBL63079	B	A
CHEMBL63174	A	B
CHEMBL63243	A	B
CHEMBL64186	B	A
CHEMBL64758	A	A
CHEMBL65633	A	A
CHEMBL67	A	A
CHEMBL6966	A	B
CHEMBL70257	A	A
CHEMBL70320	A	A
CHEMBL7063	A	A
CHEMBL70713	A	B
CHEMBL71161	B	A
CHEMBL71233	B	A
CHEMBL71851	B	B
CHEMBL72069	A	A
CHEMBL72077	A	A
CHEMBL72184	A	A
CHEMBL72484	B	A
CHEMBL72661	A	A
CHEMBL72754	A	A
CHEMBL72808	B	A
CHEMBL72846	A	A
CHEMBL73080	A	A
CHEMBL73343	A	A
CHEMBL73413	A	A
CHEMBL73485	A	A
CHEMBL73742	A	A
CHEMBL7375	A	A
CHEMBL73751	A	A
CHEMBL73772	A	A
CHEMBL73781	A	A
CHEMBL73794	A	A
CHEMBL73832	B	A
CHEMBL73906	B	B
CHEMBL74289	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL74431	B	B
CHEMBL74590	A	A
CHEMBL74637	A	A
CHEMBL74763	B	A
CHEMBL74817	B	B
CHEMBL74883	A	A
CHEMBL75610	A	A
CHEMBL75690	B	B
CHEMBL75952	A	A
CHEMBL75953	A	A
CHEMBL76326	A	A
CHEMBL76337	A	A
CHEMBL76390	B	A
CHEMBL76464	A	A
CHEMBL76499	B	A
CHEMBL76876	B	B
CHEMBL76921	B	B
CHEMBL77110	B	B
CHEMBL77700	A	B
CHEMBL77809	B	B
CHEMBL78056	A	B
CHEMBL78126	A	A
CHEMBL810	B	B
CHEMBL81131	A	A
CHEMBL81277	A	A
CHEMBL81421	B	A
CHEMBL81820	B	B
CHEMBL82612	A	A
CHEMBL82975	A	B
CHEMBL846	A	B
CHEMBL848	B	B
CHEMBL84903	A	A
CHEMBL85065	A	A
CHEMBL85182	B	B
CHEMBL852	B	B
CHEMBL86689	B	A
CHEMBL86723	B	B
CHEMBL86734	B	B
CHEMBL87205	B	B
CHEMBL87227	B	B
CHEMBL87982	A	A
CHEMBL88345	B	B
CHEMBL88409	A	A
CHEMBL88652	B	B
CHEMBL89123	B	B
CHEMBL89333	A	A
CHEMBL89439	A	B
CHEMBL89464	A	A
CHEMBL89582	B	B
CHEMBL89776	B	B
CHEMBL89935	A	A
CHEMBL89988	B	B
CHEMBL90331	B	B
CHEMBL90334	B	B
CHEMBL90362	A	A
CHEMBL90555	A	A
CHEMBL91382	A	A
CHEMBL92	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL92309	B	B
CHEMBL92495	A	A
CHEMBL92509	A	A
CHEMBL93066	A	A
CHEMBL93100	A	A
CHEMBL93305	A	A
CHEMBL93415	A	A
CHEMBL93483	A	A
CHEMBL93858	A	A
CHEMBL939	B	A
CHEMBL93905	A	A
CHEMBL93939	A	A
CHEMBL9470	A	B
CHEMBL95213	A	B
CHEMBL95313	A	A
CHEMBL95604	A	A
CHEMBL95869	B	B
CHEMBL95960	B	B
CHEMBL96926	A	A
CHEMBL97003	A	A
CHEMBL97201	B	B
CHEMBL97231	A	A
CHEMBL97629	A	A
CHEMBL98	A	A
CHEMBL98350	B	B
CHEMBL98669	A	A
CHEMBL98724	A	A
CHEMBL99	A	A
CHEMBL99456	A	A
CHEMBL99671	B	B
PESQUISA1	B	B
PESQUISA2	B	B
PESQUISA4	A	A
PESQUISA5	A	B
PESQUISA6	B	B
PESQUISA7	B	B
PESQUISA8	B	B
PESQUISA9	B	B
PESQUISA10	B	B
PESQUISA11	A	B
PESQUISA12	B	A
PESQUISA13	A	B
PESQUISA16	B	B
PESQUISA17	B	B
PESQUISA18	B	B
PESQUISA19	A	B
PESQUISA20	B	B
PESQUISA21	B	A
PESQUISA22	A	B
PESQUISA23	A	A
PESQUISA24	B	B
PESQUISA25	B	B
PESQUISA27	B	B
PESQUISA28	B	B
PESQUISA29	B	B
PESQUISA30	B	B
PESQUISA32	B	B
PESQUISA33	B	B

Código	Exp	Prev
PESQUISA34	B	B
PESQUISA35	B	B
PESQUISA36	B	B
PESQUISA37	B	B
PESQUISA38	B	B
PESQUISA39	B	B
PESQUISA40	B	B
PESQUISA41	B	B
PESQUISA42	B	B
PESQUISA43	B	B
PESQUISA44	A	A
PESQUISA45	A	B
PESQUISA46	B	B
PESQUISA47	B	B
PESQUISA49	B	A
PESQUISA50	B	A
PESQUISA51	A	A
PESQUISA52	B	A
PESQUISA53	B	A
PESQUISA54	A	B
PESQUISA58	B	A
PESQUISA59	A	A
PESQUISA60	B	A
PESQUISA61	B	B
PESQUISA62	B	B
PESQUISA63	B	B
PESQUISA64	B	B
PESQUISA65	A	B
PESQUISA66	A	B
PESQUISA67	B	B
PESQUISA68	B	B
PESQUISA70	B	A
PESQUISA71	B	B
PESQUISA72	B	B
PESQUISA73	A	B
PESQUISA75	B	B
PESQUISA76	B	A
PESQUISA78	B	A
PESQUISA80	A	A
PESQUISA82	A	A
PESQUISA83	B	B
PESQUISA85	B	B
PESQUISA86	B	B
PESQUISA87	B	B
PESQUISA88	B	A
PESQUISA89	A	A
PESQUISA91	A	B
PESQUISA111	B	A
PESQUISA112	B	B
PESQUISA115	B	B
PESQUISA131	A	A
PESQUISA133	A	A
PESQUISA134	A	A
PESQUISA138	A	A
PESQUISA143	A	A
PESQUISA144	A	A
PESQUISA146	A	A
PESQUISA148	A	A

Código	Exp	Prev
PESQUISA149	B	B
PESQUISA150	B	B
PESQUISA151	B	B
PESQUISA154	B	B
PESQUISA155	B	B
PESQUISA168	B	B
PESQUISA169	B	B
PESQUISA170	B	B
PESQUISA171	B	B
PESQUISA172	B	B
PESQUISA173	B	B
PESQUISA174	B	B
PESQUISA175	A	B
PESQUISA176	A	A
PESQUISA177	B	A
PESQUISA178	A	A
PESQUISA179	A	B
PESQUISA180	A	B
PESQUISA181	B	B
PESQUISA182	B	B
PESQUISA183	A	A
PESQUISA185	A	A
PESQUISA186	B	B
PESQUISA187	B	B
PESQUISA188	B	B
PESQUISA189	B	B
PESQUISA191	B	B
PESQUISA192	B	B
PESQUISA193	A	B
PESQUISA194	B	A
PESQUISA195	B	B
PESQUISA208	A	A
PESQUISA209	A	A
PESQUISA210	A	A
PESQUISA211	B	B
PESQUISA212	B	B
PESQUISA214	B	B
PESQUISA215	B	B
PESQUISA216	B	B
PESQUISA217	B	B
PESQUISA218	B	B
PESQUISA219	B	B
PESQUISA220	B	B
PESQUISA221	B	B
PESQUISA222	B	B
PESQUISA223	A	B
PESQUISA224	B	A
PESQUISA225	A	A
PESQUISA227	A	A
PESQUISA228	A	B
PESQUISA229	B	B
PESQUISA230	B	B
PESQUISA231	B	B
PESQUISA232	B	B
PESQUISA241	A	A
PESQUISA252	B	A
PESQUISA253	B	B
PESQUISA254	B	B

Código	Exp	Prev
PESQUISA255	A	A
PESQUISA258	A	A
PESQUISA259	A	A
PESQUISA260	B	A
PESQUISA261	A	A
PESQUISA262	B	A
PESQUISA263	A	A
PESQUISA264	A	A
PESQUISA266	A	A
PESQUISA267	A	A
PESQUISA268	A	A
PESQUISA269	A	A
PESQUISA270	B	A
PESQUISA271	A	A
PESQUISA273	A	A
PESQUISA274	B	A
PESQUISA275	A	A
PESQUISA276	A	A
PESQUISA280	A	A
PESQUISA281	A	A
PESQUISA282	A	A
PESQUISA284	A	A
PESQUISA285	A	A
PESQUISA286	B	A
PESQUISA289	A	A
PESQUISA291	A	B
PESQUISA292	B	B
PESQUISA293	A	B
PESQUISA294	B	B
PESQUISA295	B	B
PESQUISA296	B	B
PESQUISA297	B	B
PESQUISA298	B	B
PESQUISA299	B	B
PESQUISA300	B	B
PESQUISA301	B	B
PESQUISA302	B	B
PESQUISA303	A	B
PESQUISA304	B	B
PESQUISA306	A	A
PESQUISA309	A	A
PESQUISA312	A	A
PESQUISA313	A	B
PESQUISA319	B	B
PESQUISA325	A	A
PESQUISA326	A	A
PESQUISA327	A	A
PESQUISA328	A	A
PESQUISA329	B	B
PESQUISA330	B	B
PESQUISA334	B	A
PESQUISA335	B	B
PESQUISA336	B	B
PESQUISA337	B	A
PESQUISA338	A	B
PESQUISA339	A	A
PESQUISA340	A	A
PESQUISA342	B	B

Código	Exp	Prev
PESQUISA343	A	A
PESQUISA344	A	A
PESQUISA346	A	A
PESQUISA348	A	A
PESQUISA349	A	A
PESQUISA352	A	B
PESQUISA353	B	B
PESQUISA354	B	B
PESQUISA355	A	B
PESQUISA356	B	B
PESQUISA357	B	B
PESQUISA358	B	B
PESQUISA359	B	B
PESQUISA360	A	B
PESQUISA361	A	B
PESQUISA362	B	B
PESQUISA363	B	B
PESQUISA364	A	A
PESQUISA365	B	B
PESQUISA366	B	A
PESQUISA367	B	B
PESQUISA368	A	A
PESQUISA369	A	B
PESQUISA371	A	A
PESQUISA372	B	B
PESQUISA373	B	B
PESQUISA374	B	B
PESQUISA375	B	B
PESQUISA376	B	B
PESQUISA377	B	B
PESQUISA378	B	B
PESQUISA379	B	B
PESQUISA380	B	B
PESQUISA381	B	B
PESQUISA382	B	B
PESQUISA383	B	B
PESQUISA384	B	B
PESQUISA385	B	B
PESQUISA386	B	B
PESQUISA388	B	B
PESQUISA389	B	B
PESQUISA390	B	B
PESQUISA392	B	B
PESQUISA394	B	B
PESQUISA395	B	B
PESQUISA396	B	B
PESQUISA397	B	B
PESQUISA398	B	B
PESQUISA399	B	B
PESQUISA400	B	B
PESQUISA401	B	B
PESQUISA402	B	B
PESQUISA403	B	B
PESQUISA404	B	B
PESQUISA405	B	B
PESQUISA406	B	B
PESQUISA407	B	B
PESQUISA408	B	B

Código	Exp	Prev
PESQUISA409	B	B
PESQUISA410	B	B
PESQUISA411	B	B
PESQUISA412	B	B
PESQUISA413	B	B
PESQUISA414	B	B
PESQUISA415	B	B
PESQUISA416	A	B
PESQUISA417	B	A
PESQUISA418	B	B
PESQUISA419	B	B
PESQUISA420	B	B
PESQUISA421	B	B
PESQUISA422	B	B
PESQUISA423	B	B
PESQUISA424	B	B
PESQUISA425	B	B
PESQUISA426	B	B
PESQUISA427	B	B
PESQUISA428	B	B
PESQUISA430	B	B
PESQUISA431	B	B
PESQUISA432	B	B
PESQUISA433	B	B
PESQUISA434	B	B
PESQUISA435	B	B
PESQUISA436	B	B
PESQUISA437	B	B
PESQUISA443	A	A
PESQUISA444	A	A
PESQUISA445	A	A
PESQUISA446	A	A
PESQUISA450	A	A
PESQUISA451	A	A
PESQUISA452	A	A
PESQUISA454	A	A
PESQUISA455	A	A
PESQUISA459	B	B
PESQUISA460	B	B
PESQUISA461	B	B
PESQUISA462	B	B
PESQUISA463	B	B
PESQUISA465	B	B
PESQUISA466	B	B
PESQUISA467	B	B
PESQUISA469	A	B
PESQUISA470	A	A
PESQUISA474	A	B
PESQUISA478	B	A
PESQUISA479	B	B
PESQUISA480	B	B
PESQUISA481	B	B
PESQUISA482	B	B
PESQUISA483	B	B
PESQUISA484	B	B
PESQUISA485	B	B
PESQUISA486	B	B
PESQUISA487	B	B

Código	Exp	Prev
PESQUISA488	B	B
PESQUISA489	A	B
PESQUISA490	B	B
PESQUISA491	B	B
PESQUISA492	B	B
PESQUISA493	B	B
PESQUISA494	B	B
PESQUISA495	B	B
PESQUISA496	B	B
PESQUISA497	B	B
PESQUISA498	B	B
PESQUISA500	B	B
PESQUISA501	B	B
PESQUISA503	B	B
PESQUISA504	A	B
PESQUISA506	B	B
PESQUISA507	B	B
PESQUISA508	A	B
PESQUISA509	B	A
PESQUISA511	B	B
PESQUISA513	B	B
PESQUISA514	B	B
PESQUISA515	B	B
PESQUISA516	B	B
PESQUISA519	B	B
PESQUISA520	B	B
PESQUISA521	A	B
PESQUISA523	A	B
PESQUISA524	A	B
PESQUISA526	B	B
PESQUISA527	B	B
PESQUISA528	B	B
PESQUISA529	B	B
PESQUISA530	B	B
PESQUISA531	B	B
PESQUISA532	B	B
PESQUISA533	B	B
PESQUISA534	B	B
PESQUISA535	B	B
PESQUISA536	B	B
PESQUISA537	B	B
PESQUISA538	B	B
PESQUISA539	A	B
PESQUISA542	A	B
PESQUISA544	A	A
PESQUISA545	A	A
PESQUISA547	A	B
PESQUISA548	B	B
PESQUISA550	B	B
PESQUISA557	B	B
PESQUISA558	B	B
PESQUISA559	B	B
PESQUISA561	A	B
PESQUISA562	B	B
PESQUISA563	B	B
PESQUISA564	B	B
PESQUISA565	B	B
PESQUISA566	B	B

Código	Exp	Prev
PESQUISA569	B	B
PESQUISA570	B	B
PESQUISA571	A	A
PESQUISA572	A	A
PESQUISA575	A	A
PESQUISA576	A	A
PESQUISA578	A	A
PESQUISA581	B	B
PESQUISA583	B	B
PESQUISA585	A	A
PESQUISA587	A	A
PESQUISA589	B	B
PESQUISA590	B	B
PESQUISA592	B	B
PESQUISA593	A	B
PESQUISA595	B	B
PESQUISA597	B	B
PESQUISA599	B	A
PESQUISA601	A	A
PESQUISA602	A	A
PESQUISA603	B	A
PESQUISA604	A	A
PESQUISA605	A	A
PESQUISA612	B	B
PESQUISA613	B	B
PESQUISA614	A	A
PESQUISA615	A	A

ANEXO 7.2 - Previsões para o conjunto de teste do Modelo A – classificação, obtido com a random Forest utilizando os descritores 1D2D

Código	Classe		Código	Exp	Prev	Código	Exp	Prev
	Exp	Prev						
ANTIMARIN454	B	A	CHEMBL1098259	A	A	CHEMBL1214749	A	A
ANTIMARIN11578	B	A	CHEMBL109838	A	A	CHEMBL1215009	B	B
ANTIMARIN11579	B	A	CHEMBL112415	A	A	CHEMBL1215010	B	B
ANTIMARIN28642	B	B	CHEMBL113690	B	B	CHEMBL1215012	B	B
ANTIMARIN30749	A	A	CHEMBL114464	A	A	CHEMBL1215013	B	B
ANTIMARIN33139	B	A	CHEMBL115220	A	B	CHEMBL1215280	B	B
ANTIMARIN50932	A	A	CHEMBL115788	B	B	CHEMBL1215281	B	B
CHEMBL101429	A	A	CHEMBL1161972	A	B	CHEMBL1215346	A	A
CHEMBL101859	A	A	CHEMBL1162137	A	B	CHEMBL1215612	A	A
CHEMBL103322	B	A	CHEMBL1162139	A	B	CHEMBL1215614	A	A
CHEMBL103674	A	A	CHEMBL1163807	A	A	CHEMBL1215675	A	A
CHEMBL104526	A	A	CHEMBL1163887	A	A	CHEMBL1215678	A	A
CHEMBL106112	A	A	CHEMBL1164063	A	A	CHEMBL1223571	B	B
CHEMBL1076252	A	B	CHEMBL1164319	B	B	CHEMBL1223634	B	B
CHEMBL107653	A	A	CHEMBL116438	B	B	CHEMBL1231550	A	A
CHEMBL1077054	A	A	CHEMBL1164440	A	A	CHEMBL1231795	A	A
CHEMBL1077227	A	A	CHEMBL1165774	A	A	CHEMBL1241201	A	A
CHEMBL1077303	A	A	CHEMBL116934	A	A	CHEMBL1241205	A	A
CHEMBL1077337	A	A	CHEMBL1170102	B	B	CHEMBL1241224	A	A
CHEMBL107801	A	A	CHEMBL1170170	B	B	CHEMBL1241228	A	A
CHEMBL1078125	B	B	CHEMBL1170350	B	A	CHEMBL1241230	A	A
CHEMBL1078144	B	B	CHEMBL1170351	B	B	CHEMBL1241565	B	B
CHEMBL1078393	B	A	CHEMBL1170352	B	B	CHEMBL1241845	A	A
CHEMBL1078691	A	A	CHEMBL1170388	B	B	CHEMBL1242729	B	B
CHEMBL1078873	A	A	CHEMBL1171230	B	B	CHEMBL1242734	B	B
CHEMBL1080230	A	A	CHEMBL1171395	B	A	CHEMBL1242825	B	B
CHEMBL1084676	A	A	CHEMBL1171519	B	B	CHEMBL1242958	A	A
CHEMBL1084677	A	A	CHEMBL1171837	A	A	CHEMBL124374	A	A
CHEMBL1085692	A	A	CHEMBL1172323	B	B	CHEMBL1253266	B	B
CHEMBL1085713	B	B	CHEMBL1172325	B	B	CHEMBL1253267	A	B
CHEMBL1089051	A	A	CHEMBL1172340	B	B	CHEMBL1253285	A	A
CHEMBL1089056	A	A	CHEMBL1172358	B	B	CHEMBL1253526	B	B
CHEMBL1089057	A	A	CHEMBL1172515	B	B	CHEMBL1253529	A	A
CHEMBL1089058	A	A	CHEMBL1172516	B	B	CHEMBL1254164	A	A
CHEMBL1089301	A	A	CHEMBL1172541	B	B	CHEMBL1254236	A	A
CHEMBL1089344	A	A	CHEMBL1172669	B	A	CHEMBL1254237	A	A
CHEMBL1089822	A	B	CHEMBL1173055	A	A	CHEMBL1254323	A	A
CHEMBL1090332	A	A	CHEMBL1173151	B	A	CHEMBL1254477	A	A
CHEMBL1090336	A	A	CHEMBL1173178	B	A	CHEMBL1254557	A	A
CHEMBL1090339	A	A	CHEMBL118027	A	A	CHEMBL1254574	A	A
CHEMBL1090874	B	B	CHEMBL1208964	A	A	CHEMBL1254649	B	B
CHEMBL1093033	A	A	CHEMBL1208966	A	A	CHEMBL1257884	A	A
CHEMBL1093052	A	A	CHEMBL1209016	A	A	CHEMBL1257911	A	A
CHEMBL1094040	A	A	CHEMBL1209017	A	A	CHEMBL1257912	A	A
CHEMBL1094598	B	B	CHEMBL1209018	A	A	CHEMBL1258114	A	A
CHEMBL1096222	A	A	CHEMBL1209603	A	A	CHEMBL1258229	A	A
CHEMBL1096223	A	A	CHEMBL1209604	A	A	CHEMBL1269229	A	A
CHEMBL1096224	A	A	CHEMBL1209842	A	A	CHEMBL1269231	B	A
CHEMBL1096226	A	A	CHEMBL1210000	B	B	CHEMBL1269527	A	A
CHEMBL1096228	A	A	CHEMBL1210003	B	B	CHEMBL1269537	A	A
CHEMBL1096230	A	A	CHEMBL1210004	B	B	CHEMBL1271075	B	A
CHEMBL1096263	B	B	CHEMBL1210056	B	B	CHEMBL127532	B	A
CHEMBL1097764	A	A	CHEMBL1214678	A	A	CHEMBL1275625	A	A
			CHEMBL1214747	A	A	CHEMBL1276002	B	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL1276378	B	B
CHEMBL1276431	B	B
CHEMBL1276930	B	B
CHEMBL1276931	B	B
CHEMBL1277016	B	B
CHEMBL1277198	B	B
CHEMBL1277244	B	A
CHEMBL1277315	A	A
CHEMBL1277383	B	A
CHEMBL1277404	B	A
CHEMBL1277405	B	A
CHEMBL1277425	A	A
CHEMBL1277739	A	A
CHEMBL1277827	A	A
CHEMBL1288838	B	B
CHEMBL1289867	B	B
CHEMBL136186	B	B
CHEMBL136985	B	B
CHEMBL138922	B	B
CHEMBL139836	A	A
CHEMBL140013	A	A
CHEMBL140088	A	A
CHEMBL140505	A	A
CHEMBL141087	A	A
CHEMBL141236	A	A
CHEMBL141299	A	A
CHEMBL141502	A	A
CHEMBL143047	A	A
CHEMBL147506	A	A
CHEMBL148669	A	A
CHEMBL149444	A	A
CHEMBL151313	A	A
CHEMBL151546	A	A
CHEMBL1528228	B	B
CHEMBL1535901	B	B
CHEMBL1610049	A	A
CHEMBL1615278	A	A
CHEMBL1619	A	B
CHEMBL1621541	A	A
CHEMBL1622311	A	B
CHEMBL1630874	B	B
CHEMBL1630876	A	A
CHEMBL1630877	A	A
CHEMBL1630880	A	A
CHEMBL1630884	B	B
CHEMBL1631238	B	B
CHEMBL1631241	B	B
CHEMBL1631243	B	A
CHEMBL1631245	A	B
CHEMBL1631913	A	A
CHEMBL1641643	B	B
CHEMBL1641649	A	A
CHEMBL1641651	A	A
CHEMBL1641652	B	B
CHEMBL1643030	A	A
CHEMBL1643032	A	A
CHEMBL1643034	A	A
CHEMBL1643037	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL1643039	A	A
CHEMBL1643055	A	A
CHEMBL1643058	A	A
CHEMBL1643766	A	A
CHEMBL1643767	B	A
CHEMBL1643812	A	A
CHEMBL1643814	A	A
CHEMBL1643816	A	A
CHEMBL1643821	A	A
CHEMBL1643824	A	A
CHEMBL1651416	A	A
CHEMBL1651425	A	A
CHEMBL1651434	B	B
CHEMBL1651439	B	B
CHEMBL1651464	A	A
CHEMBL1651467	A	A
CHEMBL1651469	A	A
CHEMBL1651471	A	A
CHEMBL1651472	A	A
CHEMBL1651477	A	A
CHEMBL1651479	A	A
CHEMBL1651480	A	A
CHEMBL1651488	A	B
CHEMBL1651924	B	A
CHEMBL16571	B	B
CHEMBL167416	A	A
CHEMBL1684602	B	A
CHEMBL1684604	A	A
CHEMBL1684606	A	A
CHEMBL1684607	A	A
CHEMBL1684614	A	A
CHEMBL1688183	A	A
CHEMBL1688190	A	A
CHEMBL1688192	A	A
CHEMBL1688193	A	A
CHEMBL1689412	A	A
CHEMBL1689416	A	A
CHEMBL1689418	A	A
CHEMBL1689422	A	A
CHEMBL1712297	B	B
CHEMBL17362	A	B
CHEMBL1738742	B	B
CHEMBL1738867	A	A
CHEMBL175596	B	A
CHEMBL175749	A	A
CHEMBL1760603	A	A
CHEMBL1760910	A	A
CHEMBL1760912	B	A
CHEMBL1760915	A	A
CHEMBL176181	A	A
CHEMBL1762233	A	B
CHEMBL1766684	B	A
CHEMBL1766690	A	A
CHEMBL1770237	A	A
CHEMBL1770238	A	A
CHEMBL1770241	A	A
CHEMBL1771376	A	A
CHEMBL1775025	B	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL1775028	A	A
CHEMBL1775067	B	B
CHEMBL1775073	B	B
CHEMBL1775215	A	A
CHEMBL1778041	B	B
CHEMBL177916	A	A
CHEMBL1779243	A	A
CHEMBL1782761	A	A
CHEMBL1782768	A	A
CHEMBL1783375	B	B
CHEMBL1783384	B	B
CHEMBL178347	B	A
CHEMBL1784243	B	B
CHEMBL1784244	A	A
CHEMBL179080	A	A
CHEMBL1794070	A	A
CHEMBL1795550	B	B
CHEMBL1795552	B	B
CHEMBL1795555	B	B
CHEMBL1795557	B	B
CHEMBL1795732	A	A
CHEMBL1795733	B	B
CHEMBL1795737	A	B
CHEMBL1795832	A	A
CHEMBL1795834	A	A
CHEMBL1795945	B	B
CHEMBL1795948	B	B
CHEMBL1795958	A	A
CHEMBL1795960	A	A
CHEMBL1795962	A	A
CHEMBL1795964	A	A
CHEMBL1795968	A	A
CHEMBL179716	A	A
CHEMBL179942	B	A
CHEMBL180114	A	A
CHEMBL1801204	A	A
CHEMBL180140	A	B
CHEMBL1806511	A	A
CHEMBL1807791	A	A
CHEMBL1807793	A	A
CHEMBL1807799	A	A
CHEMBL1807801	A	A
CHEMBL1807802	A	A
CHEMBL1807804	A	A
CHEMBL1807809	A	A
CHEMBL1807811	A	A
CHEMBL1808241	B	B
CHEMBL1808244	B	B
CHEMBL1808245	B	B
CHEMBL1808249	B	B
CHEMBL1808251	B	A
CHEMBL1808272	A	B
CHEMBL1808378	A	B
CHEMBL1808627	A	A
CHEMBL1808630	A	A
CHEMBL1808636	A	A
CHEMBL1808638	A	A
CHEMBL1808641	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL1808646	A	A
CHEMBL1808809	A	A
CHEMBL1808810	A	A
CHEMBL1808812	A	A
CHEMBL1808813	A	A
CHEMBL1808815	A	A
CHEMBL1808822	A	A
CHEMBL1808824	A	A
CHEMBL1808829	A	A
CHEMBL1808831	A	A
CHEMBL180885	B	A
CHEMBL181009	A	A
CHEMBL1813976	B	B
CHEMBL1814768	A	B
CHEMBL1814770	A	B
CHEMBL181821	B	A
CHEMBL1818653	A	A
CHEMBL1819139	A	A
CHEMBL1819142	A	A
CHEMBL1819259	A	A
CHEMBL1819261	A	A
CHEMBL1819263	A	A
CHEMBL1819267	A	A
CHEMBL1819270	A	A
CHEMBL1819272	A	A
CHEMBL1819428	A	A
CHEMBL1822488	A	A
CHEMBL1822491	A	A
CHEMBL1822494	A	A
CHEMBL1822642	A	A
CHEMBL1822646	A	A
CHEMBL1822647	A	A
CHEMBL1822649	A	A
CHEMBL1822651	A	A
CHEMBL1822656	A	A
CHEMBL1822657	A	A
CHEMBL1822660	A	A
CHEMBL1825091	A	A
CHEMBL182907	B	A
CHEMBL1829305	A	A
CHEMBL1830416	A	A
CHEMBL1830538	A	A
CHEMBL1830539	A	A
CHEMBL1830541	A	A
CHEMBL1830674	B	A
CHEMBL1830677	B	B
CHEMBL1830680	A	A
CHEMBL183200	A	A
CHEMBL1834207	A	B
CHEMBL1834208	B	B
CHEMBL1834355	A	A
CHEMBL1834466	A	A
CHEMBL1834474	A	A
CHEMBL1834476	A	A
CHEMBL1834480	A	A
CHEMBL1834481	A	A
CHEMBL1835157	B	B
CHEMBL1835376	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL1836819	A	A
CHEMBL1836820	A	A
CHEMBL1836826	A	A
CHEMBL185	B	B
CHEMBL185043	A	A
CHEMBL185781	A	A
CHEMBL186141	B	B
CHEMBL186253	A	A
CHEMBL186356	A	B
CHEMBL187395	A	A
CHEMBL187460	A	B
CHEMBL187738	A	A
CHEMBL188103	A	A
CHEMBL188151	A	A
CHEMBL188918	A	A
CHEMBL189214	A	A
CHEMBL190096	A	A
CHEMBL190200	A	A
CHEMBL190643	A	A
CHEMBL191003	A	A
CHEMBL1910257	B	A
CHEMBL1910258	A	A
CHEMBL1910260	B	B
CHEMBL1910261	B	B
CHEMBL1911254	A	A
CHEMBL1911260	A	A
CHEMBL1911261	A	A
CHEMBL1911264	A	A
CHEMBL191402	A	A
CHEMBL1914686	A	A
CHEMBL1914911	A	B
CHEMBL1915828	A	A
CHEMBL1915830	B	B
CHEMBL1915831	A	A
CHEMBL1915833	A	A
CHEMBL1915834	A	A
CHEMBL1915840	B	A
CHEMBL1915845	B	A
CHEMBL1915855	A	A
CHEMBL1916058	A	A
CHEMBL1916066	A	A
CHEMBL1923077	B	B
CHEMBL1923081	B	B
CHEMBL1926711	B	B
CHEMBL1927074	A	A
CHEMBL1927076	A	A
CHEMBL1927080	A	A
CHEMBL1927617	A	A
CHEMBL1927619	A	A
CHEMBL1927622	B	A
CHEMBL1929099	B	A
CHEMBL1929101	B	A
CHEMBL1929102	B	A
CHEMBL192928	A	A
CHEMBL1929324	B	B
CHEMBL1929467	B	A
CHEMBL1929468	A	A
CHEMBL1929469	B	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL193067	A	A
CHEMBL1933441	A	A
CHEMBL1933449	A	A
CHEMBL1934148	B	A
CHEMBL1934150	B	B
CHEMBL1938426	B	B
CHEMBL1938442	A	A
CHEMBL1938447	A	A
CHEMBL1939316	A	B
CHEMBL1939375	A	A
CHEMBL1939381	A	A
CHEMBL1939409	A	B
CHEMBL1940670	B	B
CHEMBL1944937	A	A
CHEMBL1944939	A	A
CHEMBL1945051	A	A
CHEMBL1945121	A	A
CHEMBL1945123	A	A
CHEMBL1945124	A	A
CHEMBL1947162	A	A
CHEMBL1949780	B	B
CHEMBL1949786	B	B
CHEMBL1950811	B	B
CHEMBL1951577	A	A
CHEMBL1951586	A	A
CHEMBL1952356	B	B
CHEMBL1952359	B	B
CHEMBL1952364	B	B
CHEMBL1952367	B	B
CHEMBL1952368	B	B
CHEMBL1952369	B	B
CHEMBL1952370	B	B
CHEMBL1952372	B	B
CHEMBL1956694	A	A
CHEMBL1956703	A	A
CHEMBL1956705	A	A
CHEMBL1956708	A	A
CHEMBL1957340	B	B
CHEMBL1957348	B	B
CHEMBL1958209	A	A
CHEMBL1958214	A	A
CHEMBL1958215	A	A
CHEMBL196090	B	B
CHEMBL1964261	A	A
CHEMBL2010941	B	B
CHEMBL2010946	B	B
CHEMBL2010947	A	B
CHEMBL2012308	A	B
CHEMBL2012339	B	B
CHEMBL2012340	B	B
CHEMBL2012341	A	B
CHEMBL2012346	B	B
CHEMBL2012349	B	B
CHEMBL2012351	B	B
CHEMBL2012397	A	A
CHEMBL2012399	A	A
CHEMBL2012401	A	A
CHEMBL2012404	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL2012405	A	A
CHEMBL2012408	A	A
CHEMBL2017901	B	B
CHEMBL2018034	B	B
CHEMBL2018037	A	B
CHEMBL2018040	B	B
CHEMBL2018596	B	A
CHEMBL2018608	B	A
CHEMBL2018611	A	A
CHEMBL2018615	A	A
CHEMBL2018616	B	A
CHEMBL2018618	A	A
CHEMBL2018619	A	A
CHEMBL2018623	A	A
CHEMBL2018735	A	A
CHEMBL2018736	A	A
CHEMBL2018970	B	B
CHEMBL2018977	A	B
CHEMBL2018992	B	B
CHEMBL2019062	B	B
CHEMBL2029903	A	A
CHEMBL2029908	A	A
CHEMBL2030971	A	A
CHEMBL2030974	A	A
CHEMBL2030977	A	A
CHEMBL2030980	A	A
CHEMBL2030988	A	A
CHEMBL2030989	A	A
CHEMBL2030991	A	A
CHEMBL2030993	A	A
CHEMBL2035262	A	B
CHEMBL2035263	A	A
CHEMBL2035916	A	A
CHEMBL2037137	A	A
CHEMBL2037140	A	A
CHEMBL2041257	A	A
CHEMBL2041265	B	B
CHEMBL2041275	B	B
CHEMBL2041933	A	A
CHEMBL2042164	B	B
CHEMBL2042166	A	B
CHEMBL2043188	B	A
CHEMBL2043195	A	A
CHEMBL2043197	A	A
CHEMBL204456	A	A
CHEMBL2046701	B	B
CHEMBL2046704	B	B
CHEMBL2046711	B	B
CHEMBL2046712	B	B
CHEMBL2046714	B	B
CHEMBL2046716	B	B
CHEMBL2046718	B	B
CHEMBL2046723	B	B
CHEMBL2046726	B	B
CHEMBL2046730	B	B
CHEMBL2046731	B	B
CHEMBL2046882	B	B
CHEMBL2047610	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL2047612	A	A
CHEMBL2047614	A	A
CHEMBL2047616	A	A
CHEMBL2047619	A	A
CHEMBL2047811	B	B
CHEMBL2047948	A	A
CHEMBL2047957	A	A
CHEMBL2047968	A	A
CHEMBL2047969	A	A
CHEMBL2047972	A	A
CHEMBL204939	A	A
CHEMBL205381	A	A
CHEMBL205546	B	B
CHEMBL205786	A	A
CHEMBL2058010	A	A
CHEMBL2058015	A	A
CHEMBL2058017	A	A
CHEMBL2058023	A	A
CHEMBL2058028	A	A
CHEMBL2062575	A	A
CHEMBL2062576	A	A
CHEMBL2062578	A	A
CHEMBL2062580	A	A
CHEMBL2063156	B	B
CHEMBL2063159	B	B
CHEMBL2063166	B	B
CHEMBL2063317	A	A
CHEMBL2063484	A	A
CHEMBL206693	A	A
CHEMBL2070166	B	B
CHEMBL2070168	B	B
CHEMBL2070172	B	B
CHEMBL2070174	B	B
CHEMBL2070179	B	B
CHEMBL2070183	B	B
CHEMBL2070186	B	B
CHEMBL2070188	B	B
CHEMBL2070547	A	B
CHEMBL2071077	A	A
CHEMBL2071079	A	A
CHEMBL2071086	A	A
CHEMBL2071169	B	B
CHEMBL207833	B	A
CHEMBL208488	A	A
CHEMBL2087008	B	A
CHEMBL2087025	B	B
CHEMBL2088268	B	B
CHEMBL2088661	A	A
CHEMBL2088662	A	A
CHEMBL2088665	A	A
CHEMBL2088666	A	A
CHEMBL2088668	A	A
CHEMBL2088669	A	A
CHEMBL2088670	A	A
CHEMBL2088674	A	A
CHEMBL210765	B	B
CHEMBL211395	A	A
CHEMBL211430	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL213068	A	A
CHEMBL213713	A	A
CHEMBL214211	A	A
CHEMBL2151389	A	A
CHEMBL2151390	A	A
CHEMBL2151396	A	A
CHEMBL2151405	A	A
CHEMBL2151732	B	B
CHEMBL2152978	A	A
CHEMBL2152982	A	A
CHEMBL2152983	A	A
CHEMBL2152987	A	A
CHEMBL2152991	A	A
CHEMBL2152996	A	A
CHEMBL2152997	A	B
CHEMBL2153123	A	A
CHEMBL2153124	A	A
CHEMBL2153126	A	A
CHEMBL2153127	A	A
CHEMBL2153132	A	A
CHEMBL2153136	A	A
CHEMBL2153140	B	B
CHEMBL2153141	A	A
CHEMBL2153142	A	A
CHEMBL2153150	B	A
CHEMBL2153153	A	A
CHEMBL2153154	A	A
CHEMBL2153844	A	B
CHEMBL2153845	B	B
CHEMBL2158143	B	A
CHEMBL2158147	B	B
CHEMBL2159579	A	B
CHEMBL2160080	B	B
CHEMBL2160084	B	A
CHEMBL2160086	B	B
CHEMBL2160087	B	A
CHEMBL2160089	B	A
CHEMBL2160091	A	B
CHEMBL2160092	A	A
CHEMBL2160093	A	A
CHEMBL2160094	A	A
CHEMBL216126	A	A
CHEMBL2163391	A	A
CHEMBL2163394	A	A
CHEMBL2163395	A	A
CHEMBL2163399	A	A
CHEMBL2163403	A	A
CHEMBL2163404	A	A
CHEMBL2163405	A	A
CHEMBL2163409	A	A
CHEMBL2170458	A	A
CHEMBL2170459	A	A
CHEMBL2170462	A	A
CHEMBL2170467	A	A
CHEMBL2170468	A	A
CHEMBL2170471	A	A
CHEMBL2170475	A	A
CHEMBL2170477	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL2170480	A	A
CHEMBL2170482	A	A
CHEMBL2170484	A	A
CHEMBL2170489	A	A
CHEMBL2170493	A	A
CHEMBL2171681	A	A
CHEMBL2171689	A	A
CHEMBL2171838	A	A
CHEMBL2171842	A	A
CHEMBL2172067	A	A
CHEMBL2172069	A	A
CHEMBL2172072	A	A
CHEMBL2172073	A	A
CHEMBL2172084	A	A
CHEMBL2172085	A	A
CHEMBL2172110	A	A
CHEMBL2172111	A	A
CHEMBL2172116	A	A
CHEMBL2172117	A	A
CHEMBL2172224	A	A
CHEMBL217354	A	B
CHEMBL217651	A	A
CHEMBL2178411	A	A
CHEMBL2178560	A	A
CHEMBL2179335	A	A
CHEMBL2179714	A	A
CHEMBL2179715	A	A
CHEMBL2179716	A	A
CHEMBL2179920	A	A
CHEMBL2179924	A	A
CHEMBL2179925	A	A
CHEMBL2179926	A	A
CHEMBL2179933	A	A
CHEMBL2179934	A	A
CHEMBL2179936	A	A
CHEMBL2180558	A	A
CHEMBL2180586	A	A
CHEMBL219899	B	A
CHEMBL2203307	B	B
CHEMBL2204309	A	A
CHEMBL2204310	A	A
CHEMBL2204311	A	A
CHEMBL2205256	B	B
CHEMBL2205263	B	B
CHEMBL2205265	B	B
CHEMBL2205273	B	B
CHEMBL2205276	B	B
CHEMBL220951	A	A
CHEMBL220988	A	A
CHEMBL222828	A	A
CHEMBL223210	A	A
CHEMBL2234707	B	B
CHEMBL2234712	B	B
CHEMBL2234716	B	B
CHEMBL2234719	B	B
CHEMBL223622	A	A
CHEMBL2236355	B	B
CHEMBL2236356	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL2236360	B	B
CHEMBL2236363	B	A
CHEMBL2236365	A	B
CHEMBL2236368	B	B
CHEMBL2236372	B	B
CHEMBL2237957	B	B
CHEMBL2238112	B	B
CHEMBL223892	A	A
CHEMBL225024	B	B
CHEMBL225054	B	B
CHEMBL225249	A	B
CHEMBL2262788	A	A
CHEMBL2262789	A	A
CHEMBL2262795	A	A
CHEMBL2262796	A	A
CHEMBL226607	A	B
CHEMBL2281630	B	B
CHEMBL228210	B	B
CHEMBL2296334	B	B
CHEMBL2296337	B	B
CHEMBL2296636	B	B
CHEMBL2297935	A	A
CHEMBL2297936	A	A
CHEMBL2297938	A	A
CHEMBL2297949	A	A
CHEMBL2298344	B	B
CHEMBL2298476	B	B
CHEMBL230462	A	A
CHEMBL230886	A	A
CHEMBL230987	A	A
CHEMBL2311780	A	A
CHEMBL2311788	A	A
CHEMBL2311789	A	A
CHEMBL2312140	A	A
CHEMBL2312457	A	A
CHEMBL2312465	A	A
CHEMBL2313485	A	A
CHEMBL2313790	A	A
CHEMBL2313792	A	A
CHEMBL2313819	A	A
CHEMBL2313820	A	A
CHEMBL2314525	A	A
CHEMBL2314527	A	A
CHEMBL2314528	A	A
CHEMBL2314531	A	A
CHEMBL2314534	A	A
CHEMBL2314535	A	A
CHEMBL2314537	A	A
CHEMBL2314538	A	A
CHEMBL2314543	A	A
CHEMBL2314549	A	A
CHEMBL2314553	A	A
CHEMBL2314556	A	A
CHEMBL2314557	A	A
CHEMBL2314562	A	A
CHEMBL2314564	A	A
CHEMBL231904	B	B
CHEMBL2323950	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL2323953	A	A
CHEMBL2323956	A	A
CHEMBL2324792	A	A
CHEMBL2324799	A	A
CHEMBL2324803	A	A
CHEMBL2324807	A	A
CHEMBL2324811	A	A
CHEMBL2324814	A	A
CHEMBL232589	A	B
CHEMBL2326909	B	B
CHEMBL232986	B	B
CHEMBL233051	A	A
CHEMBL2331640	A	A
CHEMBL2331879	A	A
CHEMBL2331911	A	A
CHEMBL2331912	A	A
CHEMBL233213	A	A
CHEMBL2333111	B	B
CHEMBL233380	A	A
CHEMBL2334411	A	B
CHEMBL2334412	B	B
CHEMBL2336045	A	A
CHEMBL2337347	A	A
CHEMBL2337350	A	A
CHEMBL2337355	A	A
CHEMBL2337357	A	A
CHEMBL2337877	A	A
CHEMBL233850	B	B
CHEMBL234095	B	B
CHEMBL234245	A	A
CHEMBL2347576	A	A
CHEMBL2347581	B	B
CHEMBL2347589	A	A
CHEMBL2349193	A	A
CHEMBL236389	B	B
CHEMBL236694	A	B
CHEMBL2375478	A	A
CHEMBL2375820	B	B
CHEMBL2375823	B	B
CHEMBL2375825	B	B
CHEMBL2375834	B	B
CHEMBL2375840	A	B
CHEMBL2376660	A	A
CHEMBL2376661	A	A
CHEMBL2376668	A	A
CHEMBL2376674	A	A
CHEMBL2376680	A	A
CHEMBL2376819	B	B
CHEMBL2376821	B	B
CHEMBL2376823	B	B
CHEMBL2376825	B	B
CHEMBL2377279	B	B
CHEMBL2377285	A	B
CHEMBL2380361	A	A
CHEMBL2380362	A	A
CHEMBL2381868	B	B
CHEMBL2381872	A	A
CHEMBL2381874	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL2385212	B	B
CHEMBL238568	A	A
CHEMBL238569	A	A
CHEMBL2385955	A	A
CHEMBL2385958	A	A
CHEMBL2386344	A	A
CHEMBL2386346	A	B
CHEMBL2386347	A	A
CHEMBL2386521	B	B
CHEMBL2386523	B	B
CHEMBL2386524	B	B
CHEMBL2387099	B	A
CHEMBL2387101	A	A
CHEMBL2387105	A	A
CHEMBL2387106	B	A
CHEMBL238837	B	A
CHEMBL238842	A	A
CHEMBL2390998	A	A
CHEMBL2391001	A	A
CHEMBL2391002	B	A
CHEMBL2391006	A	A
CHEMBL2391208	A	A
CHEMBL2391213	A	A
CHEMBL2391406	B	B
CHEMBL2391410	B	B
CHEMBL2391413	B	B
CHEMBL2391421	B	B
CHEMBL2391459	A	A
CHEMBL2391471	A	A
CHEMBL2391694	B	B
CHEMBL2391695	B	B
CHEMBL2391729	A	B
CHEMBL2391735	B	B
CHEMBL2391766	A	A
CHEMBL2391768	A	A
CHEMBL239268	A	B
CHEMBL2396878	A	A
CHEMBL2396880	A	A
CHEMBL2396881	A	A
CHEMBL239884	A	A
CHEMBL2402730	A	A
CHEMBL2402735	A	A
CHEMBL2402950	A	A
CHEMBL2402992	A	A
CHEMBL2403086	A	A
CHEMBL2403101	A	B
CHEMBL2403471	A	A
CHEMBL2403472	A	A
CHEMBL2403474	A	A
CHEMBL240747	A	A
CHEMBL2407521	B	B
CHEMBL2407527	B	B
CHEMBL2407530	B	B
CHEMBL2407563	A	A
CHEMBL2407571	A	A
CHEMBL2407576	A	A
CHEMBL2407736	B	A
CHEMBL2408692	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL2408693	A	A
CHEMBL2408695	A	A
CHEMBL240915	A	A
CHEMBL2409183	A	A
CHEMBL2409184	A	A
CHEMBL240954	B	B
CHEMBL2413416	A	A
CHEMBL2414906	A	A
CHEMBL2414939	B	A
CHEMBL2414942	B	A
CHEMBL2414955	A	B
CHEMBL241550	A	A
CHEMBL241799	A	A
CHEMBL2419257	A	A
CHEMBL2419841	A	B
CHEMBL2419844	B	B
CHEMBL2420604	B	B
CHEMBL2420695	A	A
CHEMBL242556	A	A
CHEMBL2425562	A	A
CHEMBL2425651	B	A
CHEMBL242772	A	A
CHEMBL242815	A	A
CHEMBL2430833	A	A
CHEMBL2435074	A	A
CHEMBL2435142	A	A
CHEMBL2436238	B	B
CHEMBL2436251	B	B
CHEMBL2436257	B	B
CHEMBL243669	A	A
CHEMBL2441118	B	B
CHEMBL2441119	B	B
CHEMBL244142	A	A
CHEMBL2441607	A	A
CHEMBL2441612	A	A
CHEMBL2442124	B	A
CHEMBL2442692	A	A
CHEMBL2442698	A	A
CHEMBL2442792	B	A
CHEMBL2442795	A	A
CHEMBL2442798	A	A
CHEMBL2442799	A	B
CHEMBL2442813	A	A
CHEMBL2442816	A	A
CHEMBL2442824	B	A
CHEMBL244322	A	A
CHEMBL244368	B	B
CHEMBL244727	A	A
CHEMBL244900	A	A
CHEMBL244970	A	A
CHEMBL245333	A	A
CHEMBL245574	A	A
CHEMBL246180	A	A
CHEMBL247382	A	A
CHEMBL248590	A	A
CHEMBL248787	A	A
CHEMBL250005	A	A
CHEMBL250096	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL251011	A	A
CHEMBL251145	A	A
CHEMBL251146	A	A
CHEMBL251206	A	A
CHEMBL251819	A	A
CHEMBL251974	A	A
CHEMBL252202	B	B
CHEMBL253190	A	A
CHEMBL253291	A	B
CHEMBL253911	A	A
CHEMBL254309	A	A
CHEMBL254359	A	A
CHEMBL254979	A	A
CHEMBL255718	A	A
CHEMBL256115	A	A
CHEMBL256117	A	A
CHEMBL256189	A	A
CHEMBL256279	A	A
CHEMBL256401	A	A
CHEMBL256558	A	A
CHEMBL258039	A	A
CHEMBL25981	B	A
CHEMBL260216	A	A
CHEMBL260493	A	A
CHEMBL260559	A	A
CHEMBL260738	A	A
CHEMBL260792	B	B
CHEMBL261735	A	A
CHEMBL264224	A	A
CHEMBL26518	A	A
CHEMBL268423	A	A
CHEMBL268507	A	A
CHEMBL270149	A	A
CHEMBL271020	A	A
CHEMBL271645	A	A
CHEMBL271848	A	A
CHEMBL271862	A	A
CHEMBL272006	A	A
CHEMBL27275	A	A
CHEMBL27556	A	A
CHEMBL27867	A	A
CHEMBL282006	A	A
CHEMBL282436	A	A
CHEMBL28280	A	A
CHEMBL28315	A	A
CHEMBL28377	A	A
CHEMBL285839	A	A
CHEMBL286750	A	A
CHEMBL286751	A	A
CHEMBL289601	A	A
CHEMBL291402	A	A
CHEMBL292021	A	A
CHEMBL295173	B	A
CHEMBL298734	A	A
CHEMBL3039593	A	A
CHEMBL304081	A	A
CHEMBL304291	A	A
CHEMBL306748	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL306856	A	A
CHEMBL307152	A	A
CHEMBL307630	A	A
CHEMBL308252	A	A
CHEMBL308440	A	A
CHEMBL3085270	A	A
CHEMBL3085434	B	B
CHEMBL3086064	A	A
CHEMBL3086066	A	A
CHEMBL3086067	A	A
CHEMBL3086069	A	A
CHEMBL3086073	A	A
CHEMBL3086440	A	A
CHEMBL3086441	A	A
CHEMBL3087383	B	B
CHEMBL3087983	B	A
CHEMBL3092026	A	A
CHEMBL3092030	A	A
CHEMBL3092177	A	A
CHEMBL3092180	A	A
CHEMBL3092183	A	A
CHEMBL3092184	A	A
CHEMBL3092188	A	A
CHEMBL3092193	A	A
CHEMBL3092607	A	A
CHEMBL3093062	A	A
CHEMBL3093073	A	A
CHEMBL3093078	A	A
CHEMBL3093273	B	B
CHEMBL3093409	B	B
CHEMBL3093410	B	B
CHEMBL3093510	A	A
CHEMBL3093545	A	A
CHEMBL3098354	B	B
CHEMBL3098357	B	B
CHEMBL3099243	A	A
CHEMBL310245	B	B
CHEMBL3102874	A	A
CHEMBL3103331	A	A
CHEMBL3103346	A	B
CHEMBL3104250	A	A
CHEMBL3104273	A	A
CHEMBL3104276	A	A
CHEMBL3104278	A	A
CHEMBL3104285	A	A
CHEMBL3104287	A	A
CHEMBL3104807	A	B
CHEMBL3104844	A	A
CHEMBL3105504	B	B
CHEMBL3105505	B	B
CHEMBL3112595	A	B
CHEMBL3113146	B	B
CHEMBL3113289	A	A
CHEMBL3115966	B	B
CHEMBL3115967	B	B
CHEMBL3125803	B	B
CHEMBL3125808	B	B
CHEMBL3125811	B	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL3125813	B	B
CHEMBL3125815	B	B
CHEMBL3126067	B	B
CHEMBL3126068	B	B
CHEMBL3126069	B	B
CHEMBL3126080	A	A
CHEMBL3126866	B	B
CHEMBL3126869	B	B
CHEMBL3126870	B	B
CHEMBL3126871	B	B
CHEMBL3126903	B	B
CHEMBL3127379	A	A
CHEMBL3134159	B	B
CHEMBL3134163	A	B
CHEMBL3134164	A	B
CHEMBL3134518	A	A
CHEMBL3134526	A	A
CHEMBL3134528	A	A
CHEMBL3134531	A	A
CHEMBL3134534	A	A
CHEMBL3134536	A	A
CHEMBL3134537	A	A
CHEMBL3134543	A	A
CHEMBL3134547	A	A
CHEMBL3134548	A	A
CHEMBL3134551	A	A
CHEMBL3134552	A	A
CHEMBL3134557	A	A
CHEMBL3134562	A	A
CHEMBL3134563	A	A
CHEMBL3134565	A	A
CHEMBL3134566	A	A
CHEMBL3134581	A	A
CHEMBL315115	A	A
CHEMBL321083	A	A
CHEMBL3215861	A	A
CHEMBL3218077	A	A
CHEMBL3218080	A	A
CHEMBL3218088	A	A
CHEMBL3218091	A	A
CHEMBL3218093	A	A
CHEMBL3218101	A	A
CHEMBL3218105	A	A
CHEMBL3218106	A	A
CHEMBL3218272	A	A
CHEMBL3218387	B	B
CHEMBL3218711	A	A
CHEMBL3218712	A	A
CHEMBL3219596	A	A
CHEMBL3220340	A	A
CHEMBL3220937	A	B
CHEMBL322172	A	A
CHEMBL3233705	A	A
CHEMBL3234753	A	A
CHEMBL3235610	B	B
CHEMBL3235613	B	B
CHEMBL3235615	B	B
CHEMBL3235790	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL3236357	A	A
CHEMBL3237165	A	A
CHEMBL3237185	A	A
CHEMBL3237187	A	A
CHEMBL3237868	A	A
CHEMBL3237872	A	A
CHEMBL3262505	B	A
CHEMBL3262722	A	A
CHEMBL3262724	A	A
CHEMBL326961	A	A
CHEMBL3288973	A	A
CHEMBL3291268	A	A
CHEMBL3291272	A	A
CHEMBL3297988	B	B
CHEMBL3297994	B	B
CHEMBL3297997	B	B
CHEMBL3298076	B	B
CHEMBL3298129	B	B
CHEMBL3298395	B	B
CHEMBL3298488	B	B
CHEMBL3298638	B	A
CHEMBL3298720	A	A
CHEMBL3298722	A	A
CHEMBL3298724	A	A
CHEMBL333985	A	A
CHEMBL340393	A	A
CHEMBL343068	A	A
CHEMBL343557	A	A
CHEMBL345312	A	A
CHEMBL346414	A	A
CHEMBL347987	A	A
CHEMBL353658	A	A
CHEMBL354100	A	A
CHEMBL356615	A	A
CHEMBL357770	A	A
CHEMBL358059	A	A
CHEMBL358525	A	A
CHEMBL360644	A	A
CHEMBL361590	B	A
CHEMBL362666	A	A
CHEMBL362852	A	A
CHEMBL363160	A	A
CHEMBL365090	A	A
CHEMBL365156	A	A
CHEMBL375206	A	A
CHEMBL385266	A	A
CHEMBL385373	A	A
CHEMBL385907	A	A
CHEMBL387313	A	A
CHEMBL388434	B	A
CHEMBL392510	A	B
CHEMBL392743	A	A
CHEMBL393462	A	A
CHEMBL393512	B	B
CHEMBL395392	A	A
CHEMBL396203	A	A
CHEMBL396473	A	A
CHEMBL397797	A	B

Código	Exp	Prev
CHEMBL398092	A	A
CHEMBL398394	A	A
CHEMBL398989	A	A
CHEMBL399336	A	A
CHEMBL400568	A	A
CHEMBL400569	A	A
CHEMBL400749	A	A
CHEMBL401544	A	A
CHEMBL401875	A	A
CHEMBL401945	A	A
CHEMBL402548	A	B
CHEMBL403465	A	A
CHEMBL403516	A	A
CHEMBL404116	A	A
CHEMBL405463	A	A
CHEMBL406705	A	A
CHEMBL406707	A	A
CHEMBL407249	A	A
CHEMBL409494	A	A
CHEMBL409795	A	A
CHEMBL412014	A	B
CHEMBL412832	A	A
CHEMBL415091	A	A
CHEMBL420559	A	A
CHEMBL420560	A	A
CHEMBL421087	A	A
CHEMBL425181	A	A
CHEMBL428278	A	A
CHEMBL428647	A	A
CHEMBL429831	A	A
CHEMBL431875	A	A
CHEMBL431876	A	A
CHEMBL433590	A	A
CHEMBL433680	A	B
CHEMBL438369	A	A
CHEMBL441018	A	A
CHEMBL44166	A	B
CHEMBL442016	A	A
CHEMBL442358	A	A
CHEMBL445422	A	A
CHEMBL445955	A	A
CHEMBL446079	A	A
CHEMBL446112	A	B
CHEMBL447964	A	A
CHEMBL448144	A	A
CHEMBL448779	A	A
CHEMBL45004	A	A
CHEMBL450755	A	A
CHEMBL452602	A	A
CHEMBL454645	A	A
CHEMBL455194	A	A
CHEMBL456075	A	A
CHEMBL456626	A	A
CHEMBL456627	A	A
CHEMBL457312	A	A
CHEMBL458692	B	A
CHEMBL459400	B	B
CHEMBL460843	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL461477	A	A
CHEMBL463119	A	B
CHEMBL463339	A	A
CHEMBL463488	A	A
CHEMBL463579	A	A
CHEMBL463580	A	A
CHEMBL463639	A	A
CHEMBL464379	A	A
CHEMBL465349	A	A
CHEMBL468454	A	A
CHEMBL468488	A	A
CHEMBL470603	A	A
CHEMBL470718	A	A
CHEMBL471041	A	A
CHEMBL471042	A	A
CHEMBL471169	B	A
CHEMBL472533	A	A
CHEMBL473475	A	A
CHEMBL473479	A	A
CHEMBL474029	A	A
CHEMBL474054	A	A
CHEMBL474890	A	A
CHEMBL475215	A	A
CHEMBL475616	A	A
CHEMBL475692	A	A
CHEMBL47665	B	B
CHEMBL477064	A	A
CHEMBL477073	A	A
CHEMBL477963	A	A
CHEMBL478319	A	A
CHEMBL481820	A	A
CHEMBL483254	A	A
CHEMBL487328	A	A
CHEMBL488771	A	A
CHEMBL493809	A	A
CHEMBL498106	A	A
CHEMBL498271	A	A
CHEMBL499648	A	A
CHEMBL499940	A	A
CHEMBL499943	A	A
CHEMBL503664	B	B
CHEMBL505068	A	A
CHEMBL505872	A	A
CHEMBL505961	A	A
CHEMBL50637	A	B
CHEMBL507170	A	A
CHEMBL508307	A	A
CHEMBL510578	A	A
CHEMBL511618	A	A
CHEMBL513045	A	A
CHEMBL513097	A	B
CHEMBL514162	A	A
CHEMBL514234	A	A
CHEMBL514968	A	A
CHEMBL515978	A	A
CHEMBL516110	A	A
CHEMBL51628	A	B
CHEMBL519983	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL520037	A	A
CHEMBL523493	A	A
CHEMBL530335	A	A
CHEMBL535	A	A
CHEMBL536535	A	A
CHEMBL538623	A	A
CHEMBL538707	A	A
CHEMBL539188	A	A
CHEMBL539842	A	A
CHEMBL540927	A	A
CHEMBL541416	A	A
CHEMBL545274	A	A
CHEMBL54611	A	A
CHEMBL551109	A	A
CHEMBL551139	A	A
CHEMBL552534	A	A
CHEMBL554122	A	B
CHEMBL555490	A	A
CHEMBL555509	A	A
CHEMBL556688	A	A
CHEMBL556767	A	B
CHEMBL557581	A	A
CHEMBL558112	A	A
CHEMBL558586	A	A
CHEMBL559202	A	A
CHEMBL561602	A	A
CHEMBL561604	A	A
CHEMBL562940	A	A
CHEMBL563406	A	A
CHEMBL564077	A	B
CHEMBL564876	A	A
CHEMBL569641	B	B
CHEMBL582850	B	B
CHEMBL58984	A	A
CHEMBL592872	A	A
CHEMBL594032	B	B
CHEMBL600656	A	B
CHEMBL601587	A	A
CHEMBL604278	B	B
CHEMBL607580	A	A
CHEMBL62253	A	A
CHEMBL64742	A	A
CHEMBL67655	A	A
CHEMBL72076	A	A
CHEMBL72607	A	A
CHEMBL73090	A	A
CHEMBL73718	A	A
CHEMBL73764	A	A
CHEMBL73767	A	A
CHEMBL75368	A	A
CHEMBL75984	A	A
CHEMBL76332	A	A
CHEMBL86411	B	B
CHEMBL88803	B	B
CHEMBL89418	A	B
CHEMBL89615	B	B
CHEMBL92953	A	A
CHEMBL93073	A	A

Código	Exp	Prev
CHEMBL93477	A	A
CHEMBL9416	A	A
CHEMBL94657	A	A
CHEMBL9514	A	A
CHEMBL95273	A	A
CHEMBL97560	A	B
CHEMBL97636	A	B
CHEMBL99216	A	A
CHEMBL99398	A	A
CHEMBL9941	A	A
PESQUISA26	B	B
PESQUISA31	B	B
PESQUISA48	B	B
PESQUISA55	A	A
PESQUISA56	A	A
PESQUISA57	A	B
PESQUISA69	B	B
PESQUISA74	B	A
PESQUISA79	A	A
PESQUISA81	A	A
PESQUISA84	B	B
PESQUISA90	A	A
PESQUISA113	B	B
PESQUISA114	B	B
PESQUISA132	A	A
PESQUISA136	A	A
PESQUISA145	A	A
PESQUISA152	B	B
PESQUISA153	B	B

Código	Exp	Prev
PESQUISA184	A	A
PESQUISA213	B	B
PESQUISA226	A	A
PESQUISA256	A	A
PESQUISA257	A	A
PESQUISA265	B	A
PESQUISA272	A	A
PESQUISA277	A	A
PESQUISA278	A	A
PESQUISA279	A	A
PESQUISA283	A	A
PESQUISA290	A	A
PESQUISA305	A	A
PESQUISA307	A	A
PESQUISA308	A	A
PESQUISA310	A	A
PESQUISA311	A	A
PESQUISA341	A	B
PESQUISA345	A	A
PESQUISA347	A	B
PESQUISA351	A	B
PESQUISA370	A	B
PESQUISA387	B	B
PESQUISA391	B	B
PESQUISA429	B	B
PESQUISA447	A	A
PESQUISA448	A	A
PESQUISA449	A	A
PESQUISA453	A	A

Código	Exp	Prev
PESQUISA471	A	A
PESQUISA472	A	B
PESQUISA473	A	A
PESQUISA499	B	B
PESQUISA510	B	B
PESQUISA512	B	B
PESQUISA517	B	B
PESQUISA518	B	B
PESQUISA522	A	A
PESQUISA525	B	A
PESQUISA540	A	B
PESQUISA541	A	B
PESQUISA543	A	A
PESQUISA546	A	B
PESQUISA560	B	B
PESQUISA567	B	A
PESQUISA568	B	B
PESQUISA573	A	A
PESQUISA574	A	A
PESQUISA580	B	B
PESQUISA582	B	B
PESQUISA584	B	B
PESQUISA594	B	A
PESQUISA596	B	B
PESQUISA600	B	A
PESQUISA607	A	A
PESQUISA647	A	A

ANEXO 7.3- Previsões para o conjunto de treino do Modelo A – regressão, obtido com
a *random Forest* utilizando os fingerprints PubChem

conjunto treino	pIC ₅₀		Código	Exp	Prev	Código	Exp	Prev
Código	Exp	Prev						
ANTIMARIN8518	5,9	6,3	CHEMBL1085716	5,4	5,6	CHEMBL114053	7,5	7,1
ANTIMARIN11358	8,0	6,7	CHEMBL1085718	5,4	5,6	CHEMBL11475	5,9	5,9
ANTIMARIN28643	5,8	6,0	CHEMBL1085895	8,0	7,5	CHEMBL115706	6,7	7,1
ANTIMARIN30662	6,1	5,9	CHEMBL1086409	6,7	7,9	CHEMBL1159657	8,9	8,8
ANTIMARIN51166	5,5	6,0	CHEMBL1086410	8,3	7,5	CHEMBL116081	6,8	6,8
CHEMBL101477	8,0	7,0	CHEMBL1088740	6,1	6,5	CHEMBL1162993	5,2	5,6
CHEMBL102888	6,0	5,9	CHEMBL1088928	5,0	5,4	CHEMBL1163553	5,6	5,6
CHEMBL103054	6,0	6,2	CHEMBL1088949	7,4	7,3	CHEMBL1163806	5,4	5,6
CHEMBL103334	5,7	6,2	CHEMBL1089050	6,4	6,3	CHEMBL1163886	5,4	5,8
CHEMBL104148	8,0	7,3	CHEMBL1089343	8,3	7,7	CHEMBL1163973	5,7	5,9
CHEMBL104408	5,9	6,0	CHEMBL1089359	7,6	8,1	CHEMBL1164335	5,3	5,6
CHEMBL104941	6,4	6,0	CHEMBL1089393	5,9	6,3	CHEMBL1164552	6,0	6,7
CHEMBL105442	5,2	5,8	CHEMBL1089700	9,0	7,5	CHEMBL1164847	5,8	6,0
CHEMBL106389	8,5	7,5	CHEMBL1089701	6,9	7,3	CHEMBL116510	7,2	7,1
CHEMBL106439	6,4	6,0	CHEMBL1090330	5,1	5,3	CHEMBL1165102	5,5	5,7
CHEMBL1075789	7,1	6,9	CHEMBL1090333	5,2	5,2	CHEMBL1165443	5,4	5,7
CHEMBL1076825	5,7	5,6	CHEMBL1090335	5,1	5,3	CHEMBL1165580	5,6	5,6
CHEMBL1076840	5,8	5,6	CHEMBL1090337	5,5	5,4	CHEMBL116582	7,6	7,3
CHEMBL1077080	5,1	6,0	CHEMBL1090338	5,5	5,5	CHEMBL116619	6,6	6,9
CHEMBL1077204	7,5	7,6	CHEMBL1090340	5,5	5,5	CHEMBL116646	7,2	7,1
CHEMBL1077259	5,2	5,9	CHEMBL1090672	5,8	5,5	CHEMBL116647	7,0	7,3
CHEMBL1077357	5,7	6,5	CHEMBL1090872	5,4	5,7	CHEMBL1169759	5,2	5,9
CHEMBL1077383	8,2	6,8	CHEMBL1091192	5,7	5,7	CHEMBL1169841	5,1	5,7
CHEMBL1077389	6,0	6,4	CHEMBL1092159	6,8	6,2	CHEMBL1169843	5,7	5,3
CHEMBL1077604	5,1	6,2	CHEMBL1093051	6,5	6,8	CHEMBL1171583	5,4	6,3
CHEMBL1078204	5,2	5,5	CHEMBL1093053	8,4	7,5	CHEMBL117259	7,3	6,9
CHEMBL1078221	5,4	5,5	CHEMBL1093087	7,6	7,5	CHEMBL1173655	5,4	6,0
CHEMBL1078572	6,9	6,4	CHEMBL1093088	7,6	6,9	CHEMBL1173731	6,4	6,3
CHEMBL1078573	5,8	6,5	CHEMBL1093335	6,8	8,4	CHEMBL117473	7,0	7,1
CHEMBL1078690	7,4	6,8	CHEMBL1093351	8,3	8,3	CHEMBL117593	7,1	7,2
CHEMBL1078692	6,5	7,1	CHEMBL1093362	7,4	7,1	CHEMBL117647	6,7	6,9
CHEMBL1078774	7,7	6,7	CHEMBL1094041	8,2	7,2	CHEMBL117712	7,3	7,1
CHEMBL1078893	6,6	6,1	CHEMBL1094042	9,0	7,9	CHEMBL117866	6,4	7,0
CHEMBL1078894	6,0	6,3	CHEMBL1094304	5,4	5,4	CHEMBL117939	7,2	7,0
CHEMBL1078998	7,7	6,6	CHEMBL1094408	7,6	7,0	CHEMBL1180	6,2	5,7
CHEMBL1079127	6,1	6,2	CHEMBL109480	6,8	6,5	CHEMBL119106	7,0	7,1
CHEMBL1079130	6,0	6,3	CHEMBL109527	6,1	6,0	CHEMBL1201182	5,5	6,5
CHEMBL1079328	5,2	6,1	CHEMBL1096002	7,7	7,6	CHEMBL1208892	7,8	6,9
CHEMBL1080762	6,0	6,6	CHEMBL1096003	9,0	7,5	CHEMBL1208893	6,7	7,4
CHEMBL1081673	7,3	6,5	CHEMBL1096225	8,4	8,3	CHEMBL1208965	7,4	6,6
CHEMBL1081854	6,7	6,3	CHEMBL1096227	8,2	8,5	CHEMBL1209015	7,7	7,1
CHEMBL1082248	8,5	7,6	CHEMBL1096229	8,3	8,5	CHEMBL1209757	5,4	6,4
CHEMBL1082249	8,2	7,6	CHEMBL1096231	8,6	8,5	CHEMBL1209758	6,6	6,8
CHEMBL1083086	6,2	5,9	CHEMBL1096232	9,0	8,8	CHEMBL1209759	7,5	7,0
CHEMBL1083439	5,8	6,1	CHEMBL1096233	8,7	8,5	CHEMBL1209841	7,1	7,1
CHEMBL1083517	7,5	7,5	CHEMBL1096234	8,8	8,7	CHEMBL1209843	7,3	7,3
CHEMBL1083521	6,2	6,8	CHEMBL1096235	8,2	8,5	CHEMBL1214676	7,0	6,8
CHEMBL1083836	8,1	7,6	CHEMBL1096236	8,7	8,6	CHEMBL1214677	7,7	6,6
CHEMBL1084115	6,9	7,0	CHEMBL1096237	8,7	8,8	CHEMBL1214679	7,1	7,1
CHEMBL1084116	6,1	6,9	CHEMBL1096238	9,0	8,7	CHEMBL1214746	7,0	7,1
CHEMBL1084143	8,4	7,6	CHEMBL1096239	8,6	8,8	CHEMBL1214748	6,9	6,8
CHEMBL1084342	5,9	6,0	CHEMBL1096240	8,0	8,1	CHEMBL1214750	7,1	7,1
CHEMBL1084391	5,8	6,8	CHEMBL1096241	6,1	6,8	CHEMBL1214827	7,1	7,1
CHEMBL1084431	7,6	6,7	CHEMBL1096242	7,8	7,8	CHEMBL1215218	5,4	6,0
CHEMBL1084624	5,5	6,2	CHEMBL1097104	5,3	6,1	CHEMBL1215348	6,0	5,8
CHEMBL1084678	7,6	7,9	CHEMBL1098258	7,2	6,7	CHEMBL1215349	5,6	6,1
CHEMBL1084935	7,6	7,8	CHEMBL111146	6,5	6,3	CHEMBL1215467	7,5	7,0
CHEMBL108551	6,8	6,3	CHEMBL111172	5,6	5,8	CHEMBL1215468	5,6	7,2
CHEMBL1085666	8,4	7,4	CHEMBL111733	5,6	5,9	CHEMBL1215539	6,6	6,7
			CHEMBL112944	6,4	6,4	CHEMBL1215540	6,7	7,0

Código	Exp	Prev
CHEMBL1215541	7,1	7,1
CHEMBL1215542	6,5	6,8
CHEMBL1215543	5,5	6,5
CHEMBL1215611	7,5	7,0
CHEMBL1215613	7,0	7,2
CHEMBL1215676	7,5	7,0
CHEMBL1215677	7,7	7,4
CHEMBL1215741	7,6	7,3
CHEMBL1215742	7,0	7,1
CHEMBL1215743	7,1	7,5
CHEMBL1215744	7,8	7,3
CHEMBL1215745	6,5	7,3
CHEMBL1221446	5,4	6,4
CHEMBL1221447	6,9	6,5
CHEMBL1221448	5,7	6,1
CHEMBL1221600	6,4	6,4
CHEMBL1224775	5,0	6,5
CHEMBL1230201	7,1	7,4
CHEMBL1230607	6,8	6,2
CHEMBL1233002	7,5	6,5
CHEMBL1236095	6,8	7,0
CHEMBL124072	6,4	6,3
CHEMBL1241214	5,4	5,8
CHEMBL1241229	5,5	5,6
CHEMBL1241232	5,1	5,8
CHEMBL1241754	5,5	5,9
CHEMBL1241846	5,1	5,8
CHEMBL1241930	5,3	5,8
CHEMBL1242450	5,2	5,7
CHEMBL1242451	5,8	6,0
CHEMBL1242547	5,7	5,9
CHEMBL1242637	5,0	6,1
CHEMBL1242745	7,6	7,6
CHEMBL1242821	5,6	5,8
CHEMBL1242822	6,1	5,7
CHEMBL124373	8,5	8,2
CHEMBL124477	7,6	6,7
CHEMBL124620	5,6	5,9
CHEMBL125082	8,3	8,4
CHEMBL1253209	5,1	5,6
CHEMBL1253265	5,2	5,4
CHEMBL1253268	5,1	5,6
CHEMBL1253360	6,9	6,5
CHEMBL1253523	5,0	6,1
CHEMBL1253527	5,5	5,6
CHEMBL1253528	5,5	5,5
CHEMBL1253717	6,0	6,4
CHEMBL1253718	6,5	6,2
CHEMBL1253719	6,5	6,2
CHEMBL125393	7,7	6,7
CHEMBL1253978	5,6	5,9
CHEMBL125401	6,3	6,1
CHEMBL1254071	5,5	6,2
CHEMBL1254142	5,6	5,5
CHEMBL1254396	5,5	5,6
CHEMBL1254397	5,2	5,7
CHEMBL1254478	5,1	5,9
CHEMBL1254631	5,3	5,6
CHEMBL1254632	5,1	5,9
CHEMBL1255103	6,8	6,2
CHEMBL1256130	5,3	5,3
CHEMBL1257179	7,5	7,3
CHEMBL1257180	7,9	7,2

Código	Exp	Prev
CHEMBL1257296	7,7	7,3
CHEMBL125750	8,7	8,2
CHEMBL1257995	5,7	7,2
CHEMBL1258115	6,7	7,5
CHEMBL1258346	7,4	7,4
CHEMBL1258347	6,1	7,1
CHEMBL1258568	6,5	6,9
CHEMBL1258569	7,5	6,8
CHEMBL1258680	6,8	7,3
CHEMBL1258793	7,4	7,0
CHEMBL1258794	6,6	6,5
CHEMBL1258912	7,1	6,5
CHEMBL1258913	7,7	7,0
CHEMBL1258947	5,3	5,4
CHEMBL126087	5,7	6,1
CHEMBL126545	5,5	6,4
CHEMBL126922	5,1	6,0
CHEMBL1269228	7,1	7,0
CHEMBL1269230	5,2	6,2
CHEMBL1269232	5,2	6,6
CHEMBL1269234	7,2	7,4
CHEMBL1269235	6,2	5,8
CHEMBL1269237	5,2	6,9
CHEMBL1269521	5,6	5,5
CHEMBL1269524	5,5	5,5
CHEMBL1269535	5,6	5,5
CHEMBL1269536	5,4	5,6
CHEMBL1269812	7,5	6,0
CHEMBL1270230	5,7	5,9
CHEMBL1271866	6,1	5,9
CHEMBL1272140	7,4	7,2
CHEMBL1275974	6,2	5,5
CHEMBL1275975	5,1	6,1
CHEMBL1276844	5,6	5,8
CHEMBL1277038	5,3	5,4
CHEMBL1277039	5,3	5,5
CHEMBL1277128	5,5	5,4
CHEMBL1277129	5,4	5,5
CHEMBL1277220	5,4	5,6
CHEMBL1277221	5,4	5,6
CHEMBL1277243	5,9	5,9
CHEMBL1277245	5,7	5,8
CHEMBL1277293	5,1	5,7
CHEMBL1277316	5,4	5,5
CHEMBL1277334	5,6	5,9
CHEMBL1277336	7,3	5,7
CHEMBL1277424	5,6	6,5
CHEMBL1277473	5,3	5,6
CHEMBL1277517	6,0	6,4
CHEMBL1277644	5,1	5,8
CHEMBL1277738	5,2	5,7
CHEMBL1277826	5,9	6,0
CHEMBL1277908	5,2	6,1
CHEMBL1278187	5,3	6,0
CHEMBL127852	6,3	5,8
CHEMBL127997	6,5	5,8
CHEMBL1287817	5,5	5,7
CHEMBL1288405	5,7	5,9
CHEMBL1288830	6,2	5,7
CHEMBL1288831	5,2	6,3
CHEMBL1363219	5,3	5,8
CHEMBL138662	5,2	5,4
CHEMBL139653	6,7	6,3

Código	Exp	Prev
CHEMBL139657	9,2	8,7
CHEMBL140000	6,7	5,7
CHEMBL140014	7,5	6,0
CHEMBL140530	6,8	7,4
CHEMBL140566	7,8	7,9
CHEMBL140811	7,0	7,1
CHEMBL140899	6,8	6,3
CHEMBL140900	6,8	7,4
CHEMBL140952	9,0	8,9
CHEMBL1413473	5,9	5,6
CHEMBL141689	5,5	5,6
CHEMBL142120	7,4	7,4
CHEMBL142918	9,7	8,7
CHEMBL142931	6,7	6,7
CHEMBL142992	8,2	7,9
CHEMBL143179	6,3	6,8
CHEMBL143255	7,8	7,5
CHEMBL143283	7,5	7,3
CHEMBL143329	7,8	6,6
CHEMBL1443272	6,1	6,9
CHEMBL1443379	5,1	6,1
CHEMBL146035	5,9	6,2
CHEMBL1462900	5,2	6,3
CHEMBL147350	8,7	8,4
CHEMBL148313	5,4	5,5
CHEMBL148638	7,4	6,8
CHEMBL148968	5,4	5,9
CHEMBL148995	7,1	6,9
CHEMBL149096	7,5	7,0
CHEMBL149352	5,7	5,9
CHEMBL149450	6,9	6,7
CHEMBL149834	7,2	7,0
CHEMBL150016	6,1	6,5
CHEMBL150072	6,6	6,3
CHEMBL150607	9,2	6,4
CHEMBL150867	6,4	7,2
CHEMBL1512579	5,8	5,8
CHEMBL151336	6,8	6,0
CHEMBL151831	7,5	6,4
CHEMBL151840	8,6	8,3
CHEMBL1533728	5,6	5,6
CHEMBL154716	6,7	5,8
CHEMBL155405	8,5	6,4
CHEMBL155693	7,3	6,6
CHEMBL1563	6,3	6,9
CHEMBL1566492	7,6	7,6
CHEMBL159	8,5	7,2
CHEMBL16063	5,2	5,7
CHEMBL1614701	5,5	6,8
CHEMBL1615165	5,1	6,2
CHEMBL162423	5,8	5,7
CHEMBL16294	5,1	5,8
CHEMBL1629726	5,8	5,6
CHEMBL1630875	5,3	5,5
CHEMBL1630878	5,7	5,6
CHEMBL1630879	5,9	5,6
CHEMBL1630881	5,5	5,7
CHEMBL1630882	5,4	5,7
CHEMBL1631246	5,1	5,8
CHEMBL1631910	6,2	6,3
CHEMBL1631911	6,2	6,3
CHEMBL1631912	6,5	6,2
CHEMBL1631914	6,2	6,2

Código	Exp	Prev
CHEMBL1631915	6,2	6,2
CHEMBL1631916	6,2	6,2
CHEMBL1631917	6,3	6,1
CHEMBL1631918	6,1	6,2
CHEMBL1641624	6,5	6,1
CHEMBL1641644	5,2	5,6
CHEMBL1641648	5,1	5,4
CHEMBL1641650	5,3	5,3
CHEMBL1643027	6,5	5,9
CHEMBL1643031	5,5	6,0
CHEMBL1643038	7,4	6,0
CHEMBL1643040	6,0	6,3
CHEMBL1643041	6,0	6,1
CHEMBL1643044	6,1	6,2
CHEMBL1643045	6,2	6,5
CHEMBL1643048	6,1	6,0
CHEMBL1643051	5,9	6,1
CHEMBL1643054	6,2	5,9
CHEMBL1643765	7,9	7,9
CHEMBL1643807	6,2	6,1
CHEMBL1643808	6,1	6,0
CHEMBL1643809	6,3	6,0
CHEMBL1643810	5,9	6,3
CHEMBL1643811	6,1	6,3
CHEMBL1643813	5,3	6,1
CHEMBL1643815	6,0	6,1
CHEMBL1643817	6,2	6,0
CHEMBL1643823	6,6	6,4
CHEMBL1643825	6,2	6,4
CHEMBL1643826	6,6	6,4
CHEMBL1643903	7,6	6,7
CHEMBL1644987	7,5	7,5
CHEMBL165020	9,0	6,7
CHEMBL1651415	7,7	7,6
CHEMBL1651417	8,4	8,2
CHEMBL1651418	8,7	8,0
CHEMBL1651419	7,0	8,1
CHEMBL1651420	7,0	7,9
CHEMBL1651421	7,9	8,2
CHEMBL1651422	7,8	8,5
CHEMBL1651423	6,7	7,2
CHEMBL1651429	6,3	8,3
CHEMBL1651437	5,2	6,1
CHEMBL1651440	5,0	5,9
CHEMBL1651461	5,8	5,9
CHEMBL1651462	6,3	6,0
CHEMBL1651463	8,6	7,5
CHEMBL1651465	8,7	7,8
CHEMBL1651466	8,4	7,2
CHEMBL1651470	6,6	5,8
CHEMBL1651473	6,1	5,7
CHEMBL1651476	5,9	6,0
CHEMBL1651478	5,9	5,8
CHEMBL1651483	5,9	6,2
CHEMBL1651485	5,6	5,7
CHEMBL1651487	5,4	6,3
CHEMBL1651489	6,4	6,2
CHEMBL1651490	6,0	6,0
CHEMBL1651915	5,4	5,9
CHEMBL1651917	5,6	5,7
CHEMBL1651918	5,7	5,8
CHEMBL1652013	5,1	6,1
CHEMBL1652176	6,3	6,1

Código	Exp	Prev
CHEMBL1652382	6,0	5,5
CHEMBL1652383	5,8	5,6
CHEMBL1652384	5,1	5,7
CHEMBL1652385	6,1	5,8
CHEMBL1652386	5,6	5,5
CHEMBL1652387	5,1	5,5
CHEMBL166221	6,6	7,8
CHEMBL1668229	5,8	6,0
CHEMBL1668233	5,9	6,0
CHEMBL1684593	6,1	6,0
CHEMBL1684594	6,1	6,0
CHEMBL1684595	5,5	5,6
CHEMBL1684596	5,5	5,6
CHEMBL1684603	5,3	5,5
CHEMBL1684605	6,1	6,0
CHEMBL1684609	5,4	5,5
CHEMBL1684612	5,4	5,5
CHEMBL1684613	5,7	5,6
CHEMBL1684615	5,9	5,4
CHEMBL1684616	5,7	5,5
CHEMBL1684984	6,7	6,1
CHEMBL1688184	7,5	6,9
CHEMBL1688185	6,5	6,0
CHEMBL1688186	7,0	6,5
CHEMBL1688187	6,4	6,7
CHEMBL1688188	6,3	5,8
CHEMBL1688189	6,8	6,8
CHEMBL1688191	7,2	6,7
CHEMBL1688195	5,1	6,1
CHEMBL1689413	5,1	5,2
CHEMBL1689414	5,2	5,2
CHEMBL1689415	5,1	5,3
CHEMBL1689417	5,2	5,3
CHEMBL1689419	5,7	5,6
CHEMBL1689420	5,3	5,2
CHEMBL1689421	5,3	5,3
CHEMBL1689424	6,0	5,8
CHEMBL16958	5,8	6,0
CHEMBL17199	5,7	5,6
CHEMBL17329	6,1	5,7
CHEMBL17347	5,0	5,7
CHEMBL1738703	7,0	7,4
CHEMBL1738728	7,2	6,6
CHEMBL1739368	6,2	5,8
CHEMBL174820	7,0	5,9
CHEMBL17497	5,7	5,6
CHEMBL1751	6,6	6,1
CHEMBL175431	7,4	5,9
CHEMBL175441	5,5	6,1
CHEMBL175897	5,4	7,0
CHEMBL1760911	5,6	6,0
CHEMBL1760913	5,3	5,8
CHEMBL1760914	6,2	5,8
CHEMBL176131	5,4	5,8
CHEMBL176435	6,3	5,7
CHEMBL1766683	5,2	5,5
CHEMBL1766685	5,1	5,5
CHEMBL1766688	5,1	5,4
CHEMBL1766689	5,1	5,3
CHEMBL1766692	5,0	5,3
CHEMBL1766693	5,1	5,6
CHEMBL1770234	5,7	5,7
CHEMBL1770235	5,7	5,7

Código	Exp	Prev
CHEMBL1770236	5,9	5,6
CHEMBL1770239	5,2	5,6
CHEMBL1770240	5,2	5,6
CHEMBL1773418	5,8	6,3
CHEMBL1773419	6,8	6,2
CHEMBL1773420	7,0	6,2
CHEMBL1773899	7,6	7,4
CHEMBL1775022	5,3	5,5
CHEMBL1775023	5,6	5,4
CHEMBL1775024	5,6	5,4
CHEMBL1775030	5,3	5,5
CHEMBL1775213	6,9	6,1
CHEMBL1775214	6,7	5,8
CHEMBL1778194	6,5	7,2
CHEMBL1779239	5,5	5,5
CHEMBL1779240	5,2	5,5
CHEMBL1779241	5,3	5,6
CHEMBL1779242	5,4	5,7
CHEMBL1779531	7,5	7,2
CHEMBL1782082	5,0	7,0
CHEMBL1782760	7,1	7,4
CHEMBL1782763	8,7	6,7
CHEMBL1782766	6,6	7,4
CHEMBL178395	5,6	5,8
CHEMBL1784242	5,2	5,8
CHEMBL179029	5,7	6,3
CHEMBL1794067	7,1	6,7
CHEMBL1794068	7,5	7,2
CHEMBL1794069	7,5	7,4
CHEMBL1795731	6,2	6,0
CHEMBL1795734	5,2	6,1
CHEMBL1795736	5,9	5,6
CHEMBL1795833	5,1	5,4
CHEMBL1795959	5,5	5,5
CHEMBL1795961	5,4	5,3
CHEMBL1795963	5,6	5,3
CHEMBL1795965	5,3	5,5
CHEMBL1795966	5,3	5,6
CHEMBL1795967	5,6	5,6
CHEMBL1795969	5,5	5,4
CHEMBL179749	6,4	5,9
CHEMBL180005	5,4	5,4
CHEMBL180216	5,4	6,0
CHEMBL180244	5,1	5,2
CHEMBL1807790	7,5	7,2
CHEMBL1807792	7,3	7,3
CHEMBL1807794	7,1	7,3
CHEMBL1807795	7,5	7,3
CHEMBL1807796	7,6	7,1
CHEMBL1807797	7,6	7,4
CHEMBL1807798	6,8	7,1
CHEMBL1807800	7,3	7,2
CHEMBL1807803	7,4	7,4
CHEMBL1807805	7,5	7,3
CHEMBL1807806	7,5	7,3
CHEMBL1807807	7,6	7,3
CHEMBL1807808	7,1	7,5
CHEMBL1807810	7,4	7,4
CHEMBL1807812	7,4	7,3
CHEMBL1807813	7,3	7,3
CHEMBL180796	5,2	5,5
CHEMBL1808622	5,2	6,0
CHEMBL1808624	6,1	5,7

Código	Exp	Prev
CHEMBL1808625	6,7	6,4
CHEMBL1808629	6,0	5,9
CHEMBL1808631	6,1	5,9
CHEMBL1808634	5,1	6,2
CHEMBL1808635	5,8	5,9
CHEMBL1808637	5,7	5,9
CHEMBL1808639	5,7	5,9
CHEMBL1808640	6,0	6,0
CHEMBL1808642	6,0	6,1
CHEMBL1808643	6,0	6,0
CHEMBL1808644	6,7	6,9
CHEMBL1808645	6,3	7,3
CHEMBL1808672	5,0	5,5
CHEMBL1808673	5,4	5,4
CHEMBL1808674	5,5	5,9
CHEMBL1808803	9,8	9,4
CHEMBL1808804	7,3	6,5
CHEMBL1808805	8,6	9,2
CHEMBL1808806	6,2	6,8
CHEMBL1808807	9,3	8,9
CHEMBL1808808	9,3	9,7
CHEMBL1808811	6,7	6,5
CHEMBL1808814	6,5	6,8
CHEMBL1808816	6,8	6,6
CHEMBL1808817	6,3	6,5
CHEMBL1808819	9,4	9,3
CHEMBL1808820	9,4	9,5
CHEMBL1808821	9,9	9,3
CHEMBL1808823	9,9	9,7
CHEMBL1808825	10,1	9,8
CHEMBL1808826	10,3	9,6
CHEMBL1808827	6,2	6,5
CHEMBL1808828	6,3	6,7
CHEMBL1808830	9,2	9,5
CHEMBL180889	5,4	5,4
CHEMBL180895	5,3	5,2
CHEMBL181061	5,1	5,2
CHEMBL181150	5,1	5,3
CHEMBL1813144	6,3	7,0
CHEMBL181459	5,6	5,8
CHEMBL1814767	7,5	6,7
CHEMBL1814769	6,4	7,1
CHEMBL1818541	5,2	5,5
CHEMBL1818652	5,3	5,4
CHEMBL1818654	5,1	5,4
CHEMBL1819137	8,2	7,9
CHEMBL1819138	8,0	7,5
CHEMBL1819140	5,9	6,7
CHEMBL1819141	8,2	7,8
CHEMBL1819143	6,2	6,4
CHEMBL1819255	7,9	7,3
CHEMBL1819258	9,0	7,0
CHEMBL1819260	8,7	8,0
CHEMBL1819266	6,9	6,8
CHEMBL1819268	6,7	6,8
CHEMBL1819269	7,7	7,5
CHEMBL1819271	7,9	7,7
CHEMBL1819273	9,0	8,4
CHEMBL1819274	9,0	8,3
CHEMBL1819275	8,9	8,1
CHEMBL1819375	5,3	5,8
CHEMBL1819379	6,2	5,9
CHEMBL1821761	7,1	6,7

Código	Exp	Prev
CHEMBL1822486	7,0	6,8
CHEMBL1822487	6,4	6,5
CHEMBL1822489	6,3	6,9
CHEMBL1822490	7,1	6,6
CHEMBL1822492	6,4	6,8
CHEMBL1822493	5,7	7,0
CHEMBL1822495	6,8	6,8
CHEMBL182260	5,3	6,3
CHEMBL1822637	7,8	6,4
CHEMBL1822638	7,6	7,1
CHEMBL1822639	7,0	7,3
CHEMBL1822640	7,6	7,0
CHEMBL1822641	6,7	6,7
CHEMBL1822643	5,6	7,5
CHEMBL1822644	5,8	7,0
CHEMBL1822645	6,2	6,9
CHEMBL1822648	7,5	7,4
CHEMBL1822650	8,0	8,0
CHEMBL1822652	8,0	8,2
CHEMBL1822653	8,0	8,0
CHEMBL1822654	8,2	8,0
CHEMBL1822655	8,1	7,9
CHEMBL1822658	8,3	8,1
CHEMBL1822659	8,3	8,1
CHEMBL1822661	8,0	8,1
CHEMBL1822979	5,3	5,4
CHEMBL1822980	5,2	5,5
CHEMBL1822981	5,1	5,5
CHEMBL1822982	5,3	5,4
CHEMBL1825089	6,8	6,9
CHEMBL1825090	6,8	6,8
CHEMBL1825092	6,6	6,9
CHEMBL1825093	7,2	6,6
CHEMBL1825095	7,0	6,7
CHEMBL1828648	5,9	6,5
CHEMBL1828920	6,1	6,1
CHEMBL1829304	7,2	5,9
CHEMBL1830396	6,5	6,6
CHEMBL1830397	6,1	6,5
CHEMBL1830420	6,6	6,4
CHEMBL1830422	6,7	6,5
CHEMBL1830424	6,5	6,3
CHEMBL1830536	6,2	6,5
CHEMBL1830537	6,6	6,5
CHEMBL1830540	6,6	6,3
CHEMBL1830669	5,5	5,5
CHEMBL1830670	5,5	5,6
CHEMBL1830671	5,4	5,5
CHEMBL1830672	5,3	5,6
CHEMBL1830673	5,6	5,5
CHEMBL1830681	5,2	5,7
CHEMBL1833978	7,4	7,1
CHEMBL1834096	6,3	6,4
CHEMBL1834353	7,2	8,1
CHEMBL1834354	7,6	7,9
CHEMBL1834356	8,7	6,9
CHEMBL1834357	7,3	7,2
CHEMBL1834358	7,3	7,2
CHEMBL1834359	6,4	7,4
CHEMBL1834360	7,4	7,6
CHEMBL1834361	6,4	7,4
CHEMBL1834461	6,7	6,9
CHEMBL1834462	7,0	6,7

Código	Exp	Prev
CHEMBL1834463	6,7	6,7
CHEMBL1834464	6,6	6,8
CHEMBL1834465	6,6	6,5
CHEMBL1834467	6,6	6,6
CHEMBL1834468	6,8	6,8
CHEMBL1834469	7,0	6,8
CHEMBL1834470	6,7	6,7
CHEMBL1834471	6,7	6,7
CHEMBL1834472	7,1	6,8
CHEMBL1834473	6,8	6,9
CHEMBL1834475	6,6	6,8
CHEMBL1834477	7,1	6,8
CHEMBL1834478	6,6	6,6
CHEMBL1834479	6,8	6,9
CHEMBL1834482	6,7	6,8
CHEMBL18351	7,6	5,8
CHEMBL1836655	7,4	7,5
CHEMBL1836656	6,2	7,9
CHEMBL1836657	9,3	7,4
CHEMBL1836795	8,5	8,4
CHEMBL1836817	8,7	8,5
CHEMBL1836818	8,7	8,4
CHEMBL1836821	7,4	7,7
CHEMBL1836822	7,4	7,6
CHEMBL1836823	7,2	7,7
CHEMBL1836824	7,5	7,6
CHEMBL1836825	7,5	7,6
CHEMBL183950	6,6	7,2
CHEMBL185255	7,1	6,5
CHEMBL185633	6,6	6,4
CHEMBL186004	8,5	6,7
CHEMBL186157	6,2	6,0
CHEMBL186830	6,9	7,1
CHEMBL187414	7,2	6,6
CHEMBL187433	6,3	6,4
CHEMBL187522	6,4	6,5
CHEMBL187666	6,3	5,8
CHEMBL187816	6,2	5,7
CHEMBL187984	6,9	6,4
CHEMBL188005	7,2	7,0
CHEMBL188251	5,3	6,2
CHEMBL188587	7,7	6,3
CHEMBL188650	7,0	6,3
CHEMBL188863	6,3	6,2
CHEMBL189937	6,7	6,3
CHEMBL189963	5,3	6,5
CHEMBL190091	5,4	6,3
CHEMBL190171	5,4	6,0
CHEMBL190252	6,7	6,5
CHEMBL190460	7,0	6,3
CHEMBL190636	6,3	6,5
CHEMBL190789	6,5	6,6
CHEMBL190887	5,5	5,6
CHEMBL1910158	6,7	5,5
CHEMBL1910254	5,1	5,9
CHEMBL1911253	7,2	6,6
CHEMBL1911255	6,7	5,8
CHEMBL1911256	6,7	6,7
CHEMBL1911257	7,2	6,6
CHEMBL1911258	7,2	6,7
CHEMBL1911259	6,7	6,7
CHEMBL1911262	6,5	6,4
CHEMBL1911263	6,3	6,3

Código	Exp	Prev
CHEMBL1911265	6,5	6,7
CHEMBL1911267	5,3	7,1
CHEMBL1911381	5,3	6,7
CHEMBL191144	5,9	6,1
CHEMBL191312	6,2	6,3
CHEMBL191334	5,8	5,4
CHEMBL1914473	7,5	6,8
CHEMBL1914687	5,3	5,5
CHEMBL1914689	5,0	5,6
CHEMBL1915825	7,7	7,5
CHEMBL1915826	7,0	7,7
CHEMBL1915827	8,0	7,4
CHEMBL1915829	7,4	7,6
CHEMBL1915832	6,5	6,9
CHEMBL1915835	6,0	6,8
CHEMBL1915836	8,6	7,9
CHEMBL1915837	8,9	7,5
CHEMBL1915838	8,7	7,9
CHEMBL1915844	6,3	6,8
CHEMBL1915849	7,7	6,8
CHEMBL1915850	6,0	7,1
CHEMBL1915852	7,9	7,0
CHEMBL1915853	7,5	7,4
CHEMBL1915854	6,4	7,0
CHEMBL1916059	6,3	6,8
CHEMBL1916060	6,9	6,6
CHEMBL1916062	7,8	7,4
CHEMBL1916063	7,7	7,4
CHEMBL1916064	7,3	7,1
CHEMBL1916065	7,5	6,9
CHEMBL1916067	7,4	6,6
CHEMBL1916068	7,1	6,9
CHEMBL1916069	7,4	7,0
CHEMBL1916070	7,0	7,2
CHEMBL1916071	7,0	7,6
CHEMBL1916072	7,0	7,2
CHEMBL1916073	7,4	7,1
CHEMBL1916075	7,7	7,1
CHEMBL1916076	7,8	7,5
CHEMBL1916077	7,7	7,5
CHEMBL1917878	7,5	6,7
CHEMBL191816	5,7	6,0
CHEMBL191834	5,9	6,2
CHEMBL192046	6,8	6,4
CHEMBL192264	5,8	5,9
CHEMBL1922717	5,3	5,7
CHEMBL1922718	5,4	6,2
CHEMBL1922719	5,5	5,6
CHEMBL1922720	5,5	6,1
CHEMBL192281	7,5	7,0
CHEMBL1923075	5,0	5,7
CHEMBL1923078	5,1	5,9
CHEMBL1923336	5,9	5,7
CHEMBL192575	5,5	6,0
CHEMBL1927071	7,7	6,5
CHEMBL1927072	5,7	7,2
CHEMBL1927073	7,7	6,7
CHEMBL1927075	6,6	6,9
CHEMBL1927077	7,0	6,8
CHEMBL1927078	6,8	7,0
CHEMBL1927079	6,7	6,9
CHEMBL1927610	6,2	6,1
CHEMBL1927611	5,7	6,3

Código	Exp	Prev
CHEMBL1927612	5,8	6,2
CHEMBL1927613	6,7	6,0
CHEMBL1927614	6,8	5,9
CHEMBL1927615	5,9	6,1
CHEMBL1927616	5,2	6,3
CHEMBL1927618	6,4	6,0
CHEMBL1927620	5,9	5,8
CHEMBL1927621	6,2	5,9
CHEMBL1928291	5,1	5,7
CHEMBL1928311	5,1	5,9
CHEMBL1928541	7,6	6,2
CHEMBL1929098	6,1	6,5
CHEMBL1929100	7,4	6,6
CHEMBL1929103	5,2	6,7
CHEMBL1929104	8,1	6,9
CHEMBL1929105	7,4	7,1
CHEMBL1929106	7,8	7,0
CHEMBL1929335	5,2	5,3
CHEMBL1929336	5,1	5,3
CHEMBL192945	6,1	6,5
CHEMBL1929466	5,0	5,4
CHEMBL1929470	5,0	5,4
CHEMBL1929471	5,2	5,3
CHEMBL1933071	5,1	5,8
CHEMBL1933425	5,0	5,6
CHEMBL1933426	5,0	5,6
CHEMBL1933427	5,8	5,9
CHEMBL1933437	5,1	5,5
CHEMBL1933576	6,3	6,9
CHEMBL1933582	7,5	6,7
CHEMBL1934147	5,0	6,0
CHEMBL1938429	5,8	6,1
CHEMBL1938430	6,6	5,7
CHEMBL1938431	5,2	6,0
CHEMBL1938432	5,7	5,7
CHEMBL1938433	6,3	6,1
CHEMBL1938434	5,7	5,9
CHEMBL1938436	5,2	5,6
CHEMBL1938438	5,5	5,4
CHEMBL1938439	5,1	5,7
CHEMBL1938440	5,3	5,5
CHEMBL1938441	6,1	5,9
CHEMBL1938445	5,5	6,1
CHEMBL1938448	5,5	6,0
CHEMBL1939317	5,2	5,7
CHEMBL1939318	5,4	5,5
CHEMBL1939369	6,3	6,3
CHEMBL1939371	5,3	5,6
CHEMBL1939372	5,4	5,6
CHEMBL1939373	5,8	5,5
CHEMBL1939374	6,1	5,7
CHEMBL1939376	5,5	6,0
CHEMBL1939377	5,4	5,5
CHEMBL1939378	5,4	5,5
CHEMBL1939379	6,8	6,2
CHEMBL1939380	6,4	6,3
CHEMBL1939382	6,2	6,4
CHEMBL1939383	6,2	6,4
CHEMBL1939384	6,2	6,3
CHEMBL1939385	6,1	6,3
CHEMBL1939407	5,3	5,8
CHEMBL1939408	5,9	5,8
CHEMBL1944698	7,1	5,9

Código	Exp	Prev
CHEMBL1944701	5,8	6,3
CHEMBL1944935	5,3	5,2
CHEMBL1944936	5,0	5,3
CHEMBL1944940	5,2	5,3
CHEMBL1944942	5,2	5,2
CHEMBL1945119	5,2	5,4
CHEMBL1945120	5,2	5,5
CHEMBL1945122	5,4	5,6
CHEMBL1945232	5,4	5,3
CHEMBL1945233	5,2	5,4
CHEMBL1945234	5,6	5,3
CHEMBL1945439	5,7	5,2
CHEMBL1945441	5,1	5,5
CHEMBL1945442	5,4	5,4
CHEMBL1945443	5,4	5,5
CHEMBL1945569	6,4	6,3
CHEMBL1949778	5,8	5,3
CHEMBL1949781	5,3	5,5
CHEMBL1949782	5,1	5,6
CHEMBL1950812	6,1	5,8
CHEMBL1951576	8,1	7,2
CHEMBL1951578	8,2	7,4
CHEMBL1951579	8,2	7,3
CHEMBL1951582	7,4	6,7
CHEMBL1952362	5,1	5,6
CHEMBL1956069	6,0	5,9
CHEMBL1956070	5,4	6,0
CHEMBL1956190	6,1	6,4
CHEMBL1956693	5,0	5,6
CHEMBL1956696	5,0	5,2
CHEMBL1956697	5,1	5,2
CHEMBL1956702	5,0	5,3
CHEMBL1957458	6,3	6,2
CHEMBL1957459	6,3	6,3
CHEMBL1957463	6,3	6,1
CHEMBL1957464	6,4	6,3
CHEMBL1958021	5,8	5,7
CHEMBL1958034	5,6	5,7
CHEMBL1958212	5,9	5,8
CHEMBL1958213	5,7	5,9
CHEMBL1958216	5,9	5,8
CHEMBL1958221	5,4	5,8
CHEMBL195891	5,4	6,1
CHEMBL1964262	7,3	6,7
CHEMBL1964263	7,8	7,1
CHEMBL1964264	7,8	7,4
CHEMBL1964265	7,9	7,4
CHEMBL196950	5,2	6,1
CHEMBL1972860	7,4	6,0
CHEMBL198350	5,4	5,9
CHEMBL2000089	8,7	6,0
CHEMBL200280	9,7	8,6
CHEMBL200306	8,7	8,9
CHEMBL200726	7,0	5,9
CHEMBL200808	8,5	8,9
CHEMBL200899	10,5	8,4
CHEMBL2010943	5,0	5,9
CHEMBL2011161	5,1	6,1
CHEMBL2011667	5,1	5,5
CHEMBL2012309	6,5	6,9
CHEMBL2012335	5,3	6,0
CHEMBL2012398	6,6	7,0
CHEMBL2012400	6,9	6,5

Código	Exp	Prev
CHEMBL2012402	7,1	6,9
CHEMBL2012403	7,2	6,8
CHEMBL2012406	6,9	7,1
CHEMBL2012407	7,0	7,1
CHEMBL2012409	7,7	7,0
CHEMBL2012410	8,0	7,2
CHEMBL2012411	8,0	7,2
CHEMBL2012412	8,1	7,5
CHEMBL2012413	6,8	7,5
CHEMBL2012414	7,2	7,7
CHEMBL2012415	7,6	7,7
CHEMBL2012925	7,4	7,2
CHEMBL2012926	7,5	7,2
CHEMBL2012927	6,9	7,1
CHEMBL2012930	6,9	7,1
CHEMBL2012931	6,9	7,2
CHEMBL2012933	7,5	6,4
CHEMBL2012934	6,7	6,6
CHEMBL2013119	7,1	6,2
CHEMBL2018594	5,9	5,8
CHEMBL2018595	5,7	5,8
CHEMBL2018597	5,8	5,8
CHEMBL2018598	5,9	5,8
CHEMBL2018604	5,7	5,8
CHEMBL2018605	5,8	5,7
CHEMBL2018606	5,2	5,5
CHEMBL2018609	5,3	5,5
CHEMBL2018610	5,3	5,8
CHEMBL2018612	5,7	5,8
CHEMBL2018613	5,6	5,8
CHEMBL2018614	5,8	5,7
CHEMBL2018617	5,7	5,8
CHEMBL2018624	5,4	5,9
CHEMBL2018625	5,5	5,9
CHEMBL2018626	6,0	5,7
CHEMBL2018726	6,2	5,8
CHEMBL2018727	5,8	5,8
CHEMBL2018728	5,9	5,9
CHEMBL2018729	5,8	5,9
CHEMBL2018730	5,2	5,5
CHEMBL2018731	5,2	5,5
CHEMBL2018732	5,9	5,8
CHEMBL2018733	5,8	5,5
CHEMBL2018734	6,1	5,7
CHEMBL2018737	5,3	5,7
CHEMBL2018738	5,3	5,4
CHEMBL2018739	5,3	5,4
CHEMBL2018877	5,3	5,8
CHEMBL2021461	5,5	5,3
CHEMBL2021469	5,5	5,3
CHEMBL2022560	8,3	7,4
CHEMBL2022561	6,4	8,7
CHEMBL2022562	9,5	7,7
CHEMBL2022563	6,5	6,9
CHEMBL2022564	8,8	8,9
CHEMBL2022566	8,8	8,9
CHEMBL2024572	6,5	6,1
CHEMBL202671	5,3	5,5
CHEMBL202721	5,7	5,8
CHEMBL2029900	8,4	7,0
CHEMBL2029901	7,4	7,0
CHEMBL2029902	6,5	6,9
CHEMBL2029904	6,7	7,4

Código	Exp	Prev
CHEMBL2029905	7,1	6,9
CHEMBL2029906	6,9	7,0
CHEMBL2029910	8,3	6,8
CHEMBL2029911	7,0	6,9
CHEMBL2029912	7,0	7,3
CHEMBL2029913	6,2	7,3
CHEMBL2029914	7,0	6,8
CHEMBL2030972	5,3	5,4
CHEMBL2030973	5,9	5,9
CHEMBL2030975	5,6	5,6
CHEMBL2030976	5,4	5,6
CHEMBL2030978	6,1	5,8
CHEMBL2030979	5,6	5,7
CHEMBL2030981	5,2	5,7
CHEMBL2030982	5,8	5,8
CHEMBL2030983	6,0	5,8
CHEMBL2030984	5,7	5,5
CHEMBL2030985	5,5	5,6
CHEMBL2030986	5,4	5,4
CHEMBL2030987	5,9	5,8
CHEMBL2030990	5,5	5,9
CHEMBL2030992	6,0	5,9
CHEMBL203296	5,2	5,4
CHEMBL2035264	5,3	5,5
CHEMBL2035267	5,9	5,9
CHEMBL2035268	5,7	5,6
CHEMBL2035269	5,6	5,7
CHEMBL2035906	5,4	5,5
CHEMBL2035907	5,6	5,4
CHEMBL2035915	5,3	5,8
CHEMBL2035926	5,3	5,9
CHEMBL2037060	5,4	5,9
CHEMBL2037061	5,0	5,4
CHEMBL2037062	5,0	5,4
CHEMBL2037071	6,3	6,2
CHEMBL2037072	6,2	5,9
CHEMBL2037073	6,0	6,3
CHEMBL2037139	6,5	6,2
CHEMBL2037141	6,4	6,2
CHEMBL2041121	5,3	5,2
CHEMBL2041123	5,1	5,5
CHEMBL2041129	5,7	5,2
CHEMBL2041130	5,2	5,3
CHEMBL2041259	5,1	5,6
CHEMBL2041262	5,1	5,3
CHEMBL2041263	5,1	5,2
CHEMBL2041268	5,0	5,2
CHEMBL2041276	5,0	5,3
CHEMBL2041283	5,3	5,4
CHEMBL2042167	5,1	6,4
CHEMBL2043184	5,1	5,2
CHEMBL2043187	5,4	5,1
CHEMBL2043189	5,1	5,2
CHEMBL2043190	5,1	5,2
CHEMBL2043193	5,3	5,2
CHEMBL2043194	5,1	5,3
CHEMBL2043196	5,1	5,3
CHEMBL2043198	5,2	5,3
CHEMBL2043199	5,4	5,3
CHEMBL204454	5,6	5,4
CHEMBL2047606	5,1	5,5
CHEMBL2047607	5,1	5,4
CHEMBL2047608	5,0	5,8

Código	Exp	Prev
CHEMBL2047609	5,7	5,6
CHEMBL2047611	5,8	5,4
CHEMBL2047615	5,1	5,5
CHEMBL2047617	6,1	6,0
CHEMBL2047618	6,2	5,9
CHEMBL2047620	6,0	6,0
CHEMBL2047943	7,6	6,1
CHEMBL2047946	5,5	6,8
CHEMBL2047950	6,9	6,3
CHEMBL2047951	6,2	6,7
CHEMBL2047952	6,3	7,2
CHEMBL2047955	7,5	6,9
CHEMBL2047956	7,2	6,9
CHEMBL2047958	7,1	7,3
CHEMBL2047959	8,0	7,3
CHEMBL2047960	7,7	7,5
CHEMBL2047961	7,8	7,0
CHEMBL2047962	7,8	7,5
CHEMBL2047963	7,7	7,5
CHEMBL2047964	7,6	7,3
CHEMBL2047966	7,6	7,4
CHEMBL2047967	7,2	7,3
CHEMBL2047970	7,3	7,4
CHEMBL2047971	7,3	7,3
CHEMBL2048078	7,3	7,5
CHEMBL2048079	7,1	7,1
CHEMBL2048080	7,2	7,5
CHEMBL2048081	7,8	7,3
CHEMBL2048082	7,3	7,4
CHEMBL2048601	5,3	6,4
CHEMBL2048605	6,9	6,1
CHEMBL204940	5,1	5,5
CHEMBL205625	5,2	5,3
CHEMBL2057434	5,2	5,4
CHEMBL2057715	5,9	6,6
CHEMBL2058006	6,1	6,3
CHEMBL2058008	6,2	6,6
CHEMBL2058009	6,5	6,4
CHEMBL2058013	5,8	5,8
CHEMBL2058018	5,9	6,1
CHEMBL2058019	6,7	6,5
CHEMBL2058020	6,6	6,5
CHEMBL2058021	6,7	6,4
CHEMBL2058022	6,6	6,3
CHEMBL2058024	6,8	6,4
CHEMBL2058029	5,3	5,5
CHEMBL2058030	5,3	5,4
CHEMBL2059300	6,1	6,5
CHEMBL2059435	6,7	6,3
CHEMBL205954	5,2	5,8
CHEMBL2062563	7,7	7,4
CHEMBL2062571	7,2	7,3
CHEMBL2062572	6,7	6,7
CHEMBL2062573	6,3	6,4
CHEMBL2062574	6,1	6,7
CHEMBL2062577	7,5	7,6
CHEMBL2062579	7,1	6,5
CHEMBL2062581	7,1	6,7
CHEMBL2062582	6,3	6,7
CHEMBL2062583	6,7	6,4
CHEMBL2062585	5,5	6,7
CHEMBL2063314	6,1	6,8
CHEMBL2063315	7,4	6,4

Código	Exp	Prev
CHEMBL2063316	6,0	6,9
CHEMBL2063486	5,7	6,1
CHEMBL2063487	5,8	6,0
CHEMBL2063489	6,2	5,7
CHEMBL206827	5,2	5,5
CHEMBL2071078	5,7	5,7
CHEMBL2071080	5,7	5,8
CHEMBL2071081	5,5	5,9
CHEMBL2071082	5,7	5,7
CHEMBL2071083	5,6	5,8
CHEMBL2071084	5,8	5,7
CHEMBL2071085	6,0	5,9
CHEMBL2071087	6,0	5,9
CHEMBL2071088	5,7	6,0
CHEMBL2071089	5,7	6,0
CHEMBL2071090	6,0	5,9
CHEMBL2071091	5,9	6,0
CHEMBL2071166	6,4	6,0
CHEMBL2071167	5,7	5,7
CHEMBL2071168	5,5	5,8
CHEMBL2071170	6,0	6,0
CHEMBL207307	5,1	5,6
CHEMBL207734	5,4	5,6
CHEMBL207757	5,1	5,6
CHEMBL208239	5,5	5,5
CHEMBL2087023	5,8	6,3
CHEMBL2087138	5,4	5,8
CHEMBL2087602	5,0	6,1
CHEMBL2088657	5,3	5,5
CHEMBL2088658	5,3	5,5
CHEMBL2088660	5,7	5,5
CHEMBL2088663	5,3	5,6
CHEMBL2088664	5,4	5,6
CHEMBL2088667	5,4	5,6
CHEMBL2088671	5,4	5,5
CHEMBL2088672	5,3	5,5
CHEMBL2088673	5,4	5,5
CHEMBL2088675	5,3	5,7
CHEMBL2088677	5,7	5,4
CHEMBL2089142	9,0	6,2
CHEMBL209234	7,2	6,3
CHEMBL2093953	7,5	5,9
CHEMBL209850	5,3	6,1
CHEMBL210722	7,3	6,0
CHEMBL2107358	7,1	6,0
CHEMBL210806	7,1	6,1
CHEMBL211045	5,3	5,7
CHEMBL211624	5,7	6,0
CHEMBL211625	6,4	6,1
CHEMBL213604	5,7	6,3
CHEMBL2138601	6,3	6,5
CHEMBL2140523	6,1	6,3
CHEMBL2146520	7,0	6,6
CHEMBL2146926	9,1	8,5
CHEMBL215086	6,3	6,5
CHEMBL2151384	5,2	5,3
CHEMBL2151385	5,1	5,4
CHEMBL2151397	5,4	5,3
CHEMBL2151398	5,2	5,4
CHEMBL2151402	5,7	5,5
CHEMBL2152975	5,4	5,4
CHEMBL2152979	5,1	5,4
CHEMBL2152980	5,3	5,3

Código	Exp	Prev
CHEMBL2152981	5,2	5,3
CHEMBL2152984	5,1	5,3
CHEMBL2152986	5,2	5,3
CHEMBL2152990	5,7	5,9
CHEMBL2152992	5,9	5,8
CHEMBL2152994	6,3	5,9
CHEMBL2152995	6,1	5,9
CHEMBL2152998	5,9	5,8
CHEMBL2153122	5,7	5,6
CHEMBL2153125	5,9	5,7
CHEMBL2153128	5,6	5,8
CHEMBL2153129	5,8	5,9
CHEMBL2153130	5,1	5,8
CHEMBL2153131	6,5	6,2
CHEMBL2153133	6,9	6,3
CHEMBL2153134	6,8	6,0
CHEMBL2153135	7,0	6,4
CHEMBL2153137	5,5	5,6
CHEMBL2153138	5,7	5,5
CHEMBL2153139	5,4	5,5
CHEMBL2153143	5,2	5,6
CHEMBL2153145	5,3	5,6
CHEMBL2153146	5,6	5,4
CHEMBL2153149	5,3	5,7
CHEMBL2153151	5,9	6,3
CHEMBL2153155	6,3	6,3
CHEMBL2153156	5,6	5,9
CHEMBL2158139	5,6	5,5
CHEMBL2158140	5,6	5,7
CHEMBL2158141	5,3	5,8
CHEMBL2158148	5,2	5,7
CHEMBL2158149	5,5	5,6
CHEMBL2158151	5,5	5,5
CHEMBL2158152	5,1	5,6
CHEMBL2160081	5,4	5,6
CHEMBL2160095	5,9	5,5
CHEMBL2160096	5,6	5,7
CHEMBL2163363	6,2	6,0
CHEMBL2163387	9,0	8,2
CHEMBL2163388	9,0	8,1
CHEMBL2163389	8,5	8,2
CHEMBL2163390	8,4	7,8
CHEMBL2163392	7,7	8,3
CHEMBL2163393	8,4	8,3
CHEMBL2163396	6,6	7,1
CHEMBL2163397	7,9	8,2
CHEMBL2163398	8,5	8,1
CHEMBL2163400	8,5	7,7
CHEMBL2163401	8,0	8,0
CHEMBL2163402	7,8	8,5
CHEMBL2163406	7,1	7,5
CHEMBL2163407	8,3	8,1
CHEMBL2163408	8,5	8,0
CHEMBL2163410	7,5	7,9
CHEMBL2163411	8,0	7,7
CHEMBL2163412	8,6	7,9
CHEMBL2163413	7,3	7,1
CHEMBL2164968	6,2	6,0
CHEMBL216641	7,2	6,2
CHEMBL216691	8,3	7,1
CHEMBL2170456	6,4	6,0
CHEMBL2170457	5,3	6,1
CHEMBL2170461	6,0	6,0

Código	Exp	Prev
CHEMBL2170463	7,2	6,6
CHEMBL2170465	6,1	6,1
CHEMBL2170466	6,1	6,1
CHEMBL2170469	6,4	6,2
CHEMBL2170470	6,3	6,2
CHEMBL2170473	6,6	6,2
CHEMBL2170474	5,9	6,0
CHEMBL2170476	5,8	6,2
CHEMBL2170478	6,1	6,1
CHEMBL2170479	7,0	6,0
CHEMBL2170481	5,9	6,1
CHEMBL2170483	5,4	6,2
CHEMBL2170485	6,2	6,2
CHEMBL2170486	6,1	6,2
CHEMBL2170487	6,3	6,1
CHEMBL2170488	6,0	6,2
CHEMBL2170490	5,8	6,3
CHEMBL2170491	6,6	6,1
CHEMBL2170494	5,6	6,3
CHEMBL217089	8,3	6,5
CHEMBL2171679	7,5	7,0
CHEMBL2171687	6,6	6,6
CHEMBL2171688	7,1	6,7
CHEMBL2171830	8,7	6,9
CHEMBL2171839	6,6	6,8
CHEMBL2171840	7,0	6,6
CHEMBL2171841	6,0	6,9
CHEMBL2171843	6,4	6,9
CHEMBL2172076	7,6	6,8
CHEMBL2172087	7,7	7,8
CHEMBL2172088	7,3	7,7
CHEMBL2172089	6,6	7,2
CHEMBL2172091	7,6	7,7
CHEMBL2172108	6,4	6,5
CHEMBL2172109	7,6	7,1
CHEMBL2172112	7,5	7,2
CHEMBL2172113	7,8	7,5
CHEMBL2172114	7,9	7,7
CHEMBL2172115	7,7	7,5
CHEMBL2172118	7,3	7,3
CHEMBL2172121	7,4	7,6
CHEMBL2172122	7,9	7,7
CHEMBL2172125	6,4	7,2
CHEMBL2172220	7,5	7,1
CHEMBL217443	5,4	5,7
CHEMBL217537	5,3	5,5
CHEMBL2177118	5,6	5,9
CHEMBL217716	6,2	6,3
CHEMBL2178352	5,5	6,5
CHEMBL2178399	6,9	5,9
CHEMBL2178403	5,9	6,1
CHEMBL2178404	6,0	6,3
CHEMBL2178405	5,7	6,0
CHEMBL2178407	6,1	5,8
CHEMBL2178408	5,2	6,0
CHEMBL2178409	6,0	5,5
CHEMBL2178410	5,7	5,9
CHEMBL2178414	5,9	5,8
CHEMBL2178415	5,6	6,0
CHEMBL2178416	6,1	5,8
CHEMBL2178417	5,7	5,9
CHEMBL2178418	5,6	6,2
CHEMBL2178419	5,9	6,1

Código	Exp	Prev	Código	Exp	Prev	Código	Exp	Prev
CHEMBL2179334	8,6	8,4	CHEMBL2234293	5,1	6,0	CHEMBL2314524	7,3	6,7
CHEMBL2179336	8,1	8,1	CHEMBL223486	6,4	6,6	CHEMBL2314526	6,3	6,8
CHEMBL2179337	8,7	7,8	CHEMBL223534	6,4	6,4	CHEMBL2314529	7,1	7,2
CHEMBL2179338	7,4	8,2	CHEMBL223535	5,5	6,4	CHEMBL2314530	7,0	6,9
CHEMBL2179339	8,3	6,8	CHEMBL2236366	5,4	5,6	CHEMBL2314532	8,1	7,8
CHEMBL2179340	8,3	8,1	CHEMBL2236367	5,8	5,5	CHEMBL2314533	9,1	7,7
CHEMBL2179341	7,6	7,2	CHEMBL223730	6,6	6,2	CHEMBL2314536	8,2	7,9
CHEMBL2179342	8,3	7,2	CHEMBL223812	7,5	7,3	CHEMBL2314539	7,7	8,3
CHEMBL2179343	8,6	7,9	CHEMBL225016	7,5	6,7	CHEMBL2314540	8,3	8,1
CHEMBL2179344	7,7	7,3	CHEMBL2262783	5,3	5,2	CHEMBL2314541	8,1	8,0
CHEMBL2179345	8,9	8,3	CHEMBL2262784	5,5	5,6	CHEMBL2314542	8,3	8,5
CHEMBL2179713	8,7	8,3	CHEMBL2262787	5,4	6,0	CHEMBL2314544	8,2	8,5
CHEMBL2179717	8,3	7,8	CHEMBL2262792	5,6	5,5	CHEMBL2314545	8,3	8,5
CHEMBL2179919	6,1	7,3	CHEMBL2262793	5,1	5,6	CHEMBL2314546	8,1	8,7
CHEMBL2179921	6,1	6,9	CHEMBL2262794	5,6	5,6	CHEMBL2314547	8,7	8,4
CHEMBL2179922	6,1	6,8	CHEMBL2281943	5,1	6,1	CHEMBL2314548	9,1	8,3
CHEMBL2179923	6,1	7,6	CHEMBL228286	8,1	7,4	CHEMBL2314550	8,1	8,3
CHEMBL2179927	7,2	7,8	CHEMBL229453	5,9	5,7	CHEMBL2314551	8,2	8,2
CHEMBL2179928	9,1	8,1	CHEMBL2296500	5,4	5,4	CHEMBL2314552	8,3	8,3
CHEMBL2179929	7,2	6,4	CHEMBL2296501	5,6	5,4	CHEMBL2314554	8,2	8,5
CHEMBL2179930	6,2	7,1	CHEMBL2297932	6,2	6,1	CHEMBL2314555	7,7	8,1
CHEMBL2179931	7,2	7,3	CHEMBL2297933	6,2	6,3	CHEMBL2314558	8,6	8,1
CHEMBL2179932	7,2	7,2	CHEMBL2297934	6,1	6,3	CHEMBL2314559	8,2	8,3
CHEMBL2179935	7,2	7,0	CHEMBL2297937	6,1	6,2	CHEMBL2314560	8,3	8,4
CHEMBL2179938	6,2	7,2	CHEMBL2297939	6,2	6,2	CHEMBL2314561	8,4	8,4
CHEMBL2179939	7,2	7,0	CHEMBL2297946	6,1	6,2	CHEMBL2314563	5,3	7,7
CHEMBL2179940	8,1	7,3	CHEMBL2297947	6,5	6,2	CHEMBL2314565	6,0	7,1
CHEMBL2179941	8,1	7,3	CHEMBL2297948	6,7	6,1	CHEMBL2314566	6,3	8,5
CHEMBL2179942	9,1	7,5	CHEMBL2297950	6,3	6,2	CHEMBL2314567	9,2	8,0
CHEMBL2179943	7,3	7,5	CHEMBL230354	6,0	5,6	CHEMBL2315423	5,3	6,3
CHEMBL2179944	8,1	7,2	CHEMBL2304286	8,0	7,1	CHEMBL2323951	5,3	6,2
CHEMBL218534	6,9	6,3	CHEMBL230568	5,1	6,0	CHEMBL2323952	5,5	6,0
CHEMBL219676	7,6	6,6	CHEMBL230674	5,6	5,8	CHEMBL2323954	6,1	5,7
CHEMBL219729	6,1	6,0	CHEMBL230779	5,7	6,0	CHEMBL2323955	5,2	5,8
CHEMBL219983	6,4	6,4	CHEMBL230868	6,0	5,5	CHEMBL2323957	5,2	6,1
CHEMBL220391	5,9	5,9	CHEMBL2311569	8,1	7,7	CHEMBL2324791	6,4	6,3
CHEMBL2204300	6,9	7,0	CHEMBL2311779	8,2	6,7	CHEMBL2324793	7,0	7,0
CHEMBL2204302	7,1	7,5	CHEMBL2311781	7,1	7,4	CHEMBL2324794	7,7	6,9
CHEMBL2204303	6,9	7,1	CHEMBL2311782	7,1	6,7	CHEMBL2324795	7,0	7,3
CHEMBL2204304	6,6	6,7	CHEMBL2311783	6,4	7,7	CHEMBL2324796	5,9	6,7
CHEMBL2204305	9,0	6,6	CHEMBL2311784	6,2	7,0	CHEMBL2324797	5,9	6,4
CHEMBL2204306	8,5	7,3	CHEMBL2311785	6,1	7,6	CHEMBL2324798	5,9	6,4
CHEMBL2204308	7,9	7,8	CHEMBL2311786	5,1	6,9	CHEMBL2324802	6,5	6,4
CHEMBL220444	5,4	6,7	CHEMBL2311787	7,1	5,9	CHEMBL2324804	7,0	6,5
CHEMBL2205662	5,2	5,9	CHEMBL2311790	6,4	6,7	CHEMBL2324805	8,0	6,8
CHEMBL2205734	8,5	5,9	CHEMBL2311791	7,0	6,4	CHEMBL2324806	6,6	7,6
CHEMBL220694	6,4	6,7	CHEMBL2312458	6,7	6,6	CHEMBL2324808	7,0	6,7
CHEMBL2208243	5,2	6,1	CHEMBL2312460	6,5	6,6	CHEMBL2324809	5,9	6,4
CHEMBL2208244	5,4	5,9	CHEMBL2312461	6,6	6,6	CHEMBL2324810	6,3	6,4
CHEMBL2208245	6,6	5,4	CHEMBL2312462	6,6	6,6	CHEMBL2324812	7,0	7,1
CHEMBL220890	6,5	6,4	CHEMBL2312463	6,6	6,6	CHEMBL2324813	7,5	6,9
CHEMBL221224	7,4	6,5	CHEMBL2312464	6,5	6,6	CHEMBL2326912	5,1	5,8
CHEMBL221628	7,0	6,2	CHEMBL2312466	6,7	6,6	CHEMBL232977	8,4	8,8
CHEMBL222076	6,3	6,5	CHEMBL2312757	5,9	5,8	CHEMBL232985	6,1	5,6
CHEMBL222088	7,5	7,3	CHEMBL2312758	5,2	5,5	CHEMBL232987	5,1	5,6
CHEMBL222244	6,2	6,4	CHEMBL2312760	5,7	5,4	CHEMBL233013	8,5	7,2
CHEMBL222377	7,5	7,4	CHEMBL2312762	5,4	5,8	CHEMBL233014	6,2	7,5
CHEMBL222419	7,6	6,2	CHEMBL2313462	6,2	6,5	CHEMBL2331641	5,2	5,8
CHEMBL222686	7,5	7,4	CHEMBL2313489	7,2	6,6	CHEMBL233188	7,1	7,2
CHEMBL222819	7,0	6,1	CHEMBL2313787	6,8	6,4	CHEMBL2331882	5,7	5,7
CHEMBL222892	5,5	6,5	CHEMBL2313795	7,0	6,4	CHEMBL2331884	5,2	5,6
CHEMBL223086	5,3	5,9	CHEMBL2313797	6,3	6,6	CHEMBL2331885	5,0	5,6
CHEMBL223147	7,2	6,3	CHEMBL2313806	6,7	6,3	CHEMBL2331888	5,2	5,6

Código	Exp	Prev
CHEMBL2331891	5,6	5,8
CHEMBL2331892	5,5	5,7
CHEMBL2331893	5,4	5,6
CHEMBL2331894	5,9	5,6
CHEMBL2331895	5,7	5,7
CHEMBL2331896	5,4	5,4
CHEMBL2331906	5,7	5,6
CHEMBL2331909	5,9	5,5
CHEMBL233192	7,2	8,0
CHEMBL233205	5,8	6,0
CHEMBL233208	6,4	6,0
CHEMBL233209	5,5	6,1
CHEMBL233224	5,5	6,4
CHEMBL233225	5,8	6,3
CHEMBL2332418	6,1	6,2
CHEMBL2333520	8,0	7,6
CHEMBL2333522	7,7	7,7
CHEMBL2333523	7,8	7,1
CHEMBL2333525	7,7	7,6
CHEMBL2334413	5,1	5,9
CHEMBL2334966	5,3	6,0
CHEMBL2335635	5,6	5,6
CHEMBL2335636	5,0	5,8
CHEMBL2336015	5,9	5,9
CHEMBL2336017	5,6	5,9
CHEMBL233604	5,1	5,6
CHEMBL2336043	5,3	6,1
CHEMBL2337351	7,0	6,6
CHEMBL2337354	6,1	6,8
CHEMBL2337356	6,4	6,6
CHEMBL234244	7,3	7,3
CHEMBL234299	5,4	5,7
CHEMBL234300	5,4	5,2
CHEMBL234443	5,4	6,0
CHEMBL234451	6,4	6,3
CHEMBL234452	7,1	6,1
CHEMBL234624	6,5	6,3
CHEMBL234625	6,4	6,3
CHEMBL234626	6,3	6,4
CHEMBL2347574	5,4	5,5
CHEMBL2347575	5,7	5,5
CHEMBL2347577	5,7	5,5
CHEMBL2347578	5,3	5,6
CHEMBL2347585	5,0	5,8
CHEMBL2347590	6,1	7,0
CHEMBL2347592	7,3	6,4
CHEMBL2348153	5,9	5,9
CHEMBL2348735	5,4	5,8
CHEMBL234888	9,2	8,5
CHEMBL2349190	5,1	6,3
CHEMBL2349194	5,3	5,6
CHEMBL234941	5,2	5,2
CHEMBL235191	5,4	5,8
CHEMBL235210	6,4	6,0
CHEMBL235552	5,6	5,6
CHEMBL235842	6,3	5,8
CHEMBL235934	5,7	6,2
CHEMBL2363137	5,4	6,1
CHEMBL236387	5,7	5,6
CHEMBL236425	6,7	5,8
CHEMBL236763	5,1	5,9
CHEMBL236764	5,1	5,9
CHEMBL2375372	5,4	6,3

Código	Exp	Prev
CHEMBL2375474	5,3	5,5
CHEMBL2375476	5,5	5,6
CHEMBL2375477	5,1	5,6
CHEMBL2375552	5,3	5,4
CHEMBL2375827	5,1	5,9
CHEMBL2375839	5,4	6,8
CHEMBL2376662	6,3	5,7
CHEMBL2376663	6,8	6,5
CHEMBL2376664	6,4	6,5
CHEMBL2376665	7,0	6,4
CHEMBL2376666	6,7	6,3
CHEMBL2376667	5,5	6,1
CHEMBL2376673	5,6	5,9
CHEMBL2376675	5,9	6,1
CHEMBL2376676	5,5	6,1
CHEMBL2376684	5,6	5,5
CHEMBL2376686	5,1	5,8
CHEMBL2377277	5,2	5,3
CHEMBL2377284	5,1	5,7
CHEMBL2377290	5,3	5,6
CHEMBL2377291	5,3	5,5
CHEMBL2377292	5,2	5,3
CHEMBL2377293	5,1	5,3
CHEMBL2380328	5,5	5,2
CHEMBL2380352	5,3	5,8
CHEMBL2380353	5,6	5,5
CHEMBL2380355	5,6	5,5
CHEMBL2380357	5,6	5,5
CHEMBL2380358	5,4	5,7
CHEMBL2380359	5,3	5,6
CHEMBL2380360	5,9	5,6
CHEMBL2381870	5,1	5,2
CHEMBL2381871	5,2	5,2
CHEMBL2381873	5,1	5,2
CHEMBL2381875	5,3	5,3
CHEMBL2381876	5,2	5,3
CHEMBL2381877	5,2	5,2
CHEMBL2381878	5,1	5,2
CHEMBL2381879	5,2	5,2
CHEMBL2381881	5,3	5,7
CHEMBL2381883	5,0	5,2
CHEMBL2381884	5,0	5,4
CHEMBL2381886	5,2	5,3
CHEMBL2385517	5,8	5,8
CHEMBL2385518	6,6	6,0
CHEMBL2385521	6,2	6,1
CHEMBL2385523	5,4	5,9
CHEMBL2385954	5,7	6,3
CHEMBL2385956	5,6	6,3
CHEMBL2385957	6,0	6,2
CHEMBL238608	5,2	5,6
CHEMBL2386169	5,9	6,2
CHEMBL238623	5,0	5,3
CHEMBL2386343	6,2	6,1
CHEMBL2386345	6,1	6,1
CHEMBL2386348	6,3	6,1
CHEMBL2386349	6,2	6,2
CHEMBL2386350	6,2	6,2
CHEMBL2386526	5,2	6,1
CHEMBL2387089	5,2	5,3
CHEMBL2387090	5,5	5,3
CHEMBL2387092	5,3	5,4
CHEMBL2387093	5,1	5,6

Código	Exp	Prev
CHEMBL2387094	5,3	5,4
CHEMBL2387095	5,3	5,5
CHEMBL2387098	5,2	5,8
CHEMBL2387100	5,1	5,6
CHEMBL2387102	5,4	5,3
CHEMBL2387103	5,2	5,6
CHEMBL2387104	5,6	5,4
CHEMBL2387107	5,4	5,3
CHEMBL2387108	5,1	5,3
CHEMBL2387109	5,3	5,3
CHEMBL238840	5,1	5,2
CHEMBL238841	5,5	5,4
CHEMBL2390991	6,5	6,0
CHEMBL2390992	5,7	5,8
CHEMBL2390993	5,7	5,9
CHEMBL2390994	5,8	5,8
CHEMBL2390995	6,1	6,3
CHEMBL2390996	6,7	6,1
CHEMBL2390997	5,2	6,1
CHEMBL2390999	6,3	6,1
CHEMBL2391000	6,3	6,1
CHEMBL2391003	5,9	5,9
CHEMBL2391004	6,0	6,1
CHEMBL2391005	6,1	6,1
CHEMBL2391007	6,1	6,0
CHEMBL2391204	7,0	7,2
CHEMBL2391205	7,5	7,2
CHEMBL2391207	7,7	6,7
CHEMBL2391209	7,5	6,8
CHEMBL2391210	6,6	6,7
CHEMBL2391212	7,7	7,1
CHEMBL2391214	7,3	7,1
CHEMBL2391216	6,2	7,4
CHEMBL2391217	7,2	6,8
CHEMBL2391218	6,7	7,1
CHEMBL2391219	7,7	6,6
CHEMBL2391221	6,1	7,0
CHEMBL2391222	6,2	6,8
CHEMBL2391454	5,4	5,5
CHEMBL2391455	5,4	5,5
CHEMBL2391456	5,6	5,4
CHEMBL2391457	5,4	5,4
CHEMBL2391458	5,7	5,4
CHEMBL2391460	5,3	5,4
CHEMBL2391461	5,4	5,2
CHEMBL2391462	5,5	5,6
CHEMBL2391463	5,3	5,5
CHEMBL2391464	5,1	5,4
CHEMBL2391466	5,5	5,6
CHEMBL2391467	5,5	5,7
CHEMBL2391470	5,3	5,3
CHEMBL2391473	5,0	5,5
CHEMBL2391474	5,2	5,5
CHEMBL2391760	5,7	5,4
CHEMBL2391761	5,7	5,7
CHEMBL2391763	5,0	5,7
CHEMBL2391764	5,7	5,7
CHEMBL2391765	6,0	5,6
CHEMBL2391767	5,9	5,6
CHEMBL2391769	5,5	5,5
CHEMBL239267	5,4	5,2
CHEMBL239269	5,2	5,3
CHEMBL239445	5,2	5,2

Código	Exp	Prev
CHEMBL239625	6,3	5,6
CHEMBL2396674	7,0	6,4
CHEMBL2396876	6,0	5,7
CHEMBL2396877	5,3	5,5
CHEMBL2396879	5,5	5,7
CHEMBL2396882	5,6	5,8
CHEMBL2396883	7,0	5,8
CHEMBL2396884	5,8	6,1
CHEMBL2396885	6,2	5,9
CHEMBL2396888	5,1	5,8
CHEMBL2396889	5,1	5,9
CHEMBL239689	5,1	5,4
CHEMBL2397713	5,0	5,6
CHEMBL2398657	7,2	6,3
CHEMBL2402573	5,5	6,8
CHEMBL2402729	5,8	6,8
CHEMBL2402731	7,0	6,9
CHEMBL2402733	6,9	6,7
CHEMBL2402734	7,4	6,9
CHEMBL2402736	6,7	7,0
CHEMBL2402737	8,0	7,0
CHEMBL2402945	5,4	6,2
CHEMBL2402947	6,5	5,5
CHEMBL2402948	5,6	6,0
CHEMBL2402952	6,1	6,1
CHEMBL2402953	6,0	6,1
CHEMBL2402954	6,4	5,9
CHEMBL2402976	8,3	7,3
CHEMBL2402989	7,1	6,6
CHEMBL2403083	6,3	6,2
CHEMBL2403084	6,9	6,0
CHEMBL2403085	6,0	6,5
CHEMBL2403087	6,5	6,2
CHEMBL2403088	6,5	6,5
CHEMBL2403093	7,1	6,0
CHEMBL2403464	7,0	6,3
CHEMBL2403466	6,3	6,1
CHEMBL2403467	6,2	6,3
CHEMBL2403468	6,3	6,0
CHEMBL2403469	5,6	6,3
CHEMBL2403470	6,3	5,6
CHEMBL2403473	5,3	5,9
CHEMBL2403475	5,5	5,7
CHEMBL2403476	6,1	6,0
CHEMBL2403477	5,8	6,0
CHEMBL2403478	5,9	6,0
CHEMBL2403479	7,2	6,2
CHEMBL2403481	5,9	6,0
CHEMBL2403795	5,1	5,4
CHEMBL2403796	5,3	5,5
CHEMBL2407564	7,7	7,1
CHEMBL2407567	8,2	6,7
CHEMBL2407568	6,7	7,1
CHEMBL2407569	7,0	7,0
CHEMBL2407570	7,3	6,8
CHEMBL2407572	6,3	6,7
CHEMBL2407575	6,3	6,4
CHEMBL2407685	5,6	6,3
CHEMBL2407686	5,7	6,2
CHEMBL2407717	5,7	5,8
CHEMBL2407720	5,7	5,8
CHEMBL2407737	5,4	6,3
CHEMBL2408688	5,2	6,0

Código	Exp	Prev
CHEMBL2408689	6,1	5,5
CHEMBL2408690	5,2	5,9
CHEMBL2408691	5,7	5,6
CHEMBL2408694	5,8	5,7
CHEMBL2408696	6,3	5,7
CHEMBL2408818	5,4	6,0
CHEMBL2408819	5,7	5,9
CHEMBL2408820	5,8	5,8
CHEMBL2409173	8,4	8,0
CHEMBL2409175	8,7	8,0
CHEMBL2409177	8,5	8,2
CHEMBL2409178	8,7	8,3
CHEMBL2409179	8,7	8,3
CHEMBL2409181	7,5	7,9
CHEMBL2409182	8,1	7,8
CHEMBL2409195	7,6	7,8
CHEMBL2409196	7,7	7,9
CHEMBL2409197	8,2	8,0
CHEMBL2409198	8,5	8,0
CHEMBL241129	5,3	6,1
CHEMBL241161	5,5	5,3
CHEMBL241337	6,2	6,1
CHEMBL241338	6,2	6,2
CHEMBL2413417	5,9	5,8
CHEMBL2414904	5,1	5,9
CHEMBL2414908	5,2	5,9
CHEMBL2414937	7,0	5,8
CHEMBL2414941	5,8	6,2
CHEMBL2414951	6,5	5,9
CHEMBL2414953	5,0	6,2
CHEMBL2414954	5,6	5,4
CHEMBL241549	6,4	6,1
CHEMBL241551	6,1	6,2
CHEMBL241592	5,6	5,4
CHEMBL241757	6,2	6,2
CHEMBL2417583	6,3	7,3
CHEMBL241759	6,1	6,2
CHEMBL241781	5,3	5,4
CHEMBL241800	5,4	5,5
CHEMBL2419005	5,4	5,6
CHEMBL2419009	5,4	5,6
CHEMBL2419260	5,1	6,1
CHEMBL2419842	5,0	5,5
CHEMBL2420603	7,6	7,8
CHEMBL2420608	6,8	7,6
CHEMBL2420629	8,7	6,3
CHEMBL2420696	7,6	7,8
CHEMBL2420697	9,1	7,4
CHEMBL2420698	7,4	7,1
CHEMBL2420699	7,1	7,3
CHEMBL242135	5,3	6,0
CHEMBL242533	6,4	6,0
CHEMBL2425559	5,3	5,8
CHEMBL2425560	5,2	5,9
CHEMBL2425561	5,8	5,7
CHEMBL242557	5,9	5,8
CHEMBL242558	6,1	5,8
CHEMBL2425584	5,8	5,7
CHEMBL2425652	6,1	5,9
CHEMBL2425654	5,9	6,1
CHEMBL2425655	5,6	6,4
CHEMBL242770	5,7	6,0
CHEMBL242771	5,8	6,1

Código	Exp	Prev
CHEMBL242814	7,7	7,0
CHEMBL243034	7,6	7,2
CHEMBL243035	6,4	7,2
CHEMBL2430831	5,3	5,4
CHEMBL2430832	5,5	5,4
CHEMBL2430834	5,4	5,8
CHEMBL2430835	5,6	5,6
CHEMBL2430836	5,4	5,5
CHEMBL243446	5,2	5,6
CHEMBL2434970	5,1	5,3
CHEMBL2435055	5,0	5,4
CHEMBL2435060	5,0	5,3
CHEMBL2435063	5,1	5,2
CHEMBL2435065	5,1	5,3
CHEMBL2435072	5,1	5,4
CHEMBL2435073	5,1	5,4
CHEMBL2435076	5,1	5,2
CHEMBL2435082	5,3	5,7
CHEMBL2435083	5,3	5,4
CHEMBL2435143	5,1	5,5
CHEMBL2435333	6,1	7,1
CHEMBL243595	6,0	5,9
CHEMBL243684	5,6	5,5
CHEMBL2437089	5,4	5,5
CHEMBL243806	5,7	6,1
CHEMBL243930	5,3	6,0
CHEMBL244140	5,5	5,8
CHEMBL244141	5,8	5,6
CHEMBL2441605	9,1	8,4
CHEMBL2441606	8,5	8,4
CHEMBL2441608	8,5	8,5
CHEMBL2441610	9,2	9,0
CHEMBL2441611	9,2	9,0
CHEMBL2442691	5,4	5,3
CHEMBL2442694	6,3	5,8
CHEMBL2442695	6,0	6,0
CHEMBL2442696	5,4	5,5
CHEMBL2442697	5,5	5,4
CHEMBL2442790	5,1	5,6
CHEMBL2442791	5,3	5,3
CHEMBL2442794	5,3	5,4
CHEMBL2442797	5,3	5,3
CHEMBL2442800	5,3	5,4
CHEMBL2442801	5,5	5,4
CHEMBL2442814	5,1	5,3
CHEMBL2442815	5,2	5,6
CHEMBL2442817	5,2	5,3
CHEMBL2442822	5,1	5,3
CHEMBL2442823	5,3	5,2
CHEMBL2442825	5,0	5,9
CHEMBL2442827	5,0	5,4
CHEMBL2442828	5,3	5,3
CHEMBL2442829	5,2	5,6
CHEMBL244711	5,8	6,0
CHEMBL244712	6,1	5,8
CHEMBL2448099	7,3	7,0
CHEMBL244899	5,6	5,8
CHEMBL244901	6,3	5,7
CHEMBL244944	5,5	6,7
CHEMBL244969	8,0	7,5
CHEMBL245364	6,6	5,9
CHEMBL245376	5,8	6,1
CHEMBL245749	5,9	6,3

Código	Exp	Prev	Código	Exp	Prev	Código	Exp	Prev
CHEMBL245770	6,1	6,3	CHEMBL254311	6,7	6,4	CHEMBL275497	6,5	6,0
CHEMBL245932	6,1	5,8	CHEMBL254360	6,1	6,1	CHEMBL276625	7,5	6,9
CHEMBL245966	5,6	6,2	CHEMBL254367	5,6	6,2	CHEMBL277008	7,5	6,4
CHEMBL245967	6,7	5,9	CHEMBL254519	6,7	6,6	CHEMBL277077	6,0	5,8
CHEMBL246167	5,5	6,2	CHEMBL255255	5,3	6,0	CHEMBL277351	5,4	6,4
CHEMBL246383	5,4	5,9	CHEMBL255933	6,0	6,2	CHEMBL278315	7,5	6,6
CHEMBL247183	7,0	6,1	CHEMBL255990	5,7	6,6	CHEMBL27891	5,1	6,2
CHEMBL247184	5,9	6,4	CHEMBL256322	6,7	6,0	CHEMBL27897	7,0	8,0
CHEMBL247384	6,3	6,3	CHEMBL256496	7,2	5,8	CHEMBL27898	7,9	7,6
CHEMBL247501	6,4	6,3	CHEMBL256711	5,7	6,1	CHEMBL278986	5,4	5,6
CHEMBL248712	7,0	6,8	CHEMBL257219	6,9	6,9	CHEMBL280099	6,8	6,1
CHEMBL248713	7,0	6,8	CHEMBL257631	6,0	6,3	CHEMBL280740	9,0	8,7
CHEMBL248718	5,7	6,0	CHEMBL257632	6,1	6,2	CHEMBL280867	5,5	6,3
CHEMBL248796	6,6	6,1	CHEMBL257736	6,5	6,9	CHEMBL281500	6,2	6,4
CHEMBL248797	6,2	6,3	CHEMBL257831	6,1	5,9	CHEMBL28217	9,0	9,0
CHEMBL248798	5,1	6,2	CHEMBL257835	6,3	6,2	CHEMBL282810	8,0	7,8
CHEMBL248891	8,0	7,4	CHEMBL258040	5,9	6,0	CHEMBL283439	5,0	5,9
CHEMBL248909	5,6	6,0	CHEMBL258176	6,6	6,1	CHEMBL283931	5,4	5,7
CHEMBL248998	6,5	6,3	CHEMBL258297	5,7	6,3	CHEMBL286749	9,2	8,7
CHEMBL249095	8,5	7,3	CHEMBL258844	5,1	6,5	CHEMBL287633	8,2	9,0
CHEMBL249096	7,2	7,3	CHEMBL259084	6,2	6,1	CHEMBL288441	5,7	6,6
CHEMBL249198	6,3	6,2	CHEMBL259631	5,7	6,9	CHEMBL289228	5,3	5,9
CHEMBL249302	6,5	7,3	CHEMBL260200	6,3	6,3	CHEMBL289277	5,2	5,3
CHEMBL249303	7,5	6,6	CHEMBL260256	5,5	6,6	CHEMBL292520	7,2	7,0
CHEMBL249304	6,4	6,6	CHEMBL260530	6,0	6,0	CHEMBL292873	7,5	7,8
CHEMBL249484	5,5	6,3	CHEMBL260574	6,5	6,2	CHEMBL293157	5,5	6,0
CHEMBL249500	6,4	6,7	CHEMBL260655	5,0	5,7	CHEMBL293834	7,2	6,6
CHEMBL249519	6,4	7,5	CHEMBL260740	5,2	5,8	CHEMBL293898	5,6	5,9
CHEMBL249687	5,1	5,8	CHEMBL260772	7,4	6,1	CHEMBL296411	5,2	6,4
CHEMBL250095	5,1	5,9	CHEMBL260864	5,7	5,9	CHEMBL296468	6,3	6,1
CHEMBL251009	6,0	6,0	CHEMBL261301	6,5	6,2	CHEMBL296567	5,4	5,5
CHEMBL251010	6,1	5,8	CHEMBL26158	5,1	6,3	CHEMBL29711	5,0	5,5
CHEMBL251012	6,6	6,2	CHEMBL261720	7,7	5,9	CHEMBL297570	6,3	5,9
CHEMBL251144	6,8	6,2	CHEMBL261834	7,1	7,7	CHEMBL301515	5,8	5,8
CHEMBL251249	5,5	5,7	CHEMBL262328	5,8	6,5	CHEMBL302234	6,3	5,8
CHEMBL251336	6,2	6,4	CHEMBL263042	5,2	5,8	CHEMBL302389	6,3	6,9
CHEMBL251337	6,4	6,2	CHEMBL263624	12,0	6,6	CHEMBL302854	5,6	6,0
CHEMBL251338	6,4	6,2	CHEMBL264565	8,1	8,9	CHEMBL303470	8,8	8,6
CHEMBL251406	5,1	6,0	CHEMBL264661	5,8	5,9	CHEMBL3037931	9,3	8,7
CHEMBL251544	5,9	6,2	CHEMBL264685	5,5	5,9	CHEMBL304428	6,2	6,0
CHEMBL251546	6,0	6,3	CHEMBL264961	6,4	6,3	CHEMBL306034	5,7	5,7
CHEMBL251673	5,5	6,9	CHEMBL265446	5,1	5,8	CHEMBL306047	5,8	5,8
CHEMBL251739	7,3	6,4	CHEMBL265607	7,6	6,7	CHEMBL306114	5,4	5,6
CHEMBL251740	6,7	7,4	CHEMBL265903	5,5	6,2	CHEMBL306367	5,3	5,6
CHEMBL251756	6,4	6,1	CHEMBL267616	7,4	6,3	CHEMBL306501	5,7	5,9
CHEMBL251757	6,1	6,2	CHEMBL268368	6,1	5,8	CHEMBL306611	5,7	5,8
CHEMBL252164	6,8	6,7	CHEMBL26844	5,5	5,7	CHEMBL307007	5,3	5,6
CHEMBL252572	6,6	6,4	CHEMBL268840	5,5	5,9	CHEMBL307150	5,7	5,5
CHEMBL252574	6,6	6,4	CHEMBL269908	7,0	5,8	CHEMBL307219	6,0	5,8
CHEMBL252778	6,6	6,4	CHEMBL269937	6,1	6,3	CHEMBL307920	9,0	8,7
CHEMBL252858	5,3	6,0	CHEMBL270097	6,5	6,1	CHEMBL308099	6,2	6,1
CHEMBL252980	6,4	6,5	CHEMBL270686	7,2	6,0	CHEMBL308116	5,7	5,5
CHEMBL252981	6,5	6,5	CHEMBL270935	5,2	5,6	CHEMBL308479	5,5	5,6
CHEMBL252982	6,2	6,5	CHEMBL271100	6,2	6,0	CHEMBL308541	6,2	5,5
CHEMBL253178	8,0	6,8	CHEMBL271308	5,7	6,3	CHEMBL308594	5,9	5,8
CHEMBL253191	5,8	6,5	CHEMBL271651	6,0	6,1	CHEMBL3086062	5,9	6,5
CHEMBL253910	6,2	5,9	CHEMBL271652	6,4	6,1	CHEMBL3086063	6,5	6,6
CHEMBL253912	6,1	6,0	CHEMBL272052	6,1	6,0	CHEMBL3086065	8,4	7,2
CHEMBL254110	6,5	6,0	CHEMBL272240	6,1	6,0	CHEMBL3086068	7,5	7,4
CHEMBL254111	6,7	6,5	CHEMBL272401	6,2	6,1	CHEMBL3086070	6,8	7,6
CHEMBL254112	6,4	6,3	CHEMBL273319	5,4	5,6	CHEMBL3086071	7,2	7,7
CHEMBL254165	6,4	6,0	CHEMBL273619	7,6	7,4	CHEMBL3086072	7,0	7,6
CHEMBL254219	6,1	6,3	CHEMBL275380	5,3	5,7	CHEMBL3086074	7,4	7,3

Código	Exp	Prev
CHEMBL3086075	7,4	7,3
CHEMBL3086076	6,8	7,1
CHEMBL3086078	8,1	7,2
CHEMBL3086425	6,4	6,4
CHEMBL3086438	6,5	6,3
CHEMBL3086439	6,4	6,4
CHEMBL3086566	6,7	6,5
CHEMBL3086567	6,4	6,6
CHEMBL3087981	5,1	5,7
CHEMBL3087984	5,8	5,9
CHEMBL3087985	6,1	5,9
CHEMBL3087989	5,3	5,8
CHEMBL3087991	6,4	5,7
CHEMBL3087993	5,0	5,8
CHEMBL308979	6,4	6,1
CHEMBL3092025	5,7	6,3
CHEMBL3092028	5,1	6,2
CHEMBL3092029	5,1	6,2
CHEMBL3092035	6,1	5,9
CHEMBL3092036	5,2	6,3
CHEMBL3092037	5,8	6,1
CHEMBL3092039	6,1	6,0
CHEMBL3092176	8,0	6,9
CHEMBL3092178	8,1	7,5
CHEMBL3092179	7,7	7,4
CHEMBL3092181	7,6	7,3
CHEMBL3092182	7,0	7,5
CHEMBL3092185	7,7	7,2
CHEMBL3092186	7,1	7,4
CHEMBL3092187	6,9	7,4
CHEMBL3092189	7,6	7,5
CHEMBL3092190	6,3	7,7
CHEMBL3092191	8,0	7,2
CHEMBL3092192	7,7	7,4
CHEMBL3092194	6,7	7,3
CHEMBL3092195	7,8	6,9
CHEMBL3092196	6,8	7,4
CHEMBL3093058	6,1	6,1
CHEMBL3093059	5,9	6,2
CHEMBL3093063	5,8	6,1
CHEMBL3093064	6,2	6,0
CHEMBL3093065	6,2	6,0
CHEMBL3093069	5,6	6,5
CHEMBL3093070	6,4	6,0
CHEMBL3093071	5,2	6,2
CHEMBL3093072	6,8	6,1
CHEMBL3093074	7,1	6,3
CHEMBL3093075	6,1	6,8
CHEMBL3093509	5,5	6,2
CHEMBL3093514	5,7	5,6
CHEMBL3093515	5,8	5,5
CHEMBL3093524	5,3	5,7
CHEMBL3093526	5,4	5,5
CHEMBL3093533	5,8	5,6
CHEMBL3094228	7,4	6,4
CHEMBL3099242	5,3	5,6
CHEMBL3099244	5,5	5,4
CHEMBL3099245	5,2	5,6
CHEMBL310260	5,4	5,8
CHEMBL3103323	7,2	6,8
CHEMBL3103324	6,4	6,4
CHEMBL3103330	8,5	7,6
CHEMBL3103332	7,9	6,9

Código	Exp	Prev
CHEMBL3103347	7,7	7,7
CHEMBL3103348	7,9	7,5
CHEMBL3103349	8,0	7,5
CHEMBL3104272	6,9	6,5
CHEMBL3104274	6,6	6,7
CHEMBL3104275	6,5	6,4
CHEMBL3104277	7,1	6,4
CHEMBL3104279	5,9	6,5
CHEMBL3104280	7,3	7,0
CHEMBL3104281	7,5	6,8
CHEMBL3104282	5,2	6,9
CHEMBL3104283	6,8	6,8
CHEMBL3104284	6,8	6,8
CHEMBL3104286	6,5	6,4
CHEMBL3104288	6,6	6,8
CHEMBL3104289	7,0	6,7
CHEMBL3104808	5,1	5,7
CHEMBL3104840	5,2	5,6
CHEMBL3104843	5,7	5,6
CHEMBL3104876	6,0	6,0
CHEMBL3104878	6,0	6,0
CHEMBL310491	5,5	5,8
CHEMBL3105512	5,2	5,7
CHEMBL3105514	5,3	5,7
CHEMBL3105515	5,3	5,7
CHEMBL3105516	5,4	5,6
CHEMBL3105586	6,7	5,6
CHEMBL310737	9,3	8,8
CHEMBL3109937	6,1	6,0
CHEMBL3109938	6,0	6,2
CHEMBL3113129	5,1	5,6
CHEMBL3113140	5,1	5,6
CHEMBL3113148	5,1	6,2
CHEMBL3113275	5,3	5,2
CHEMBL3113277	5,0	5,2
CHEMBL3113279	5,1	5,4
CHEMBL3113281	5,3	5,2
CHEMBL3113283	5,1	5,3
CHEMBL3113284	5,5	5,7
CHEMBL3113285	5,1	5,1
CHEMBL3113287	5,2	5,1
CHEMBL3113288	5,1	5,3
CHEMBL3113290	5,1	5,2
CHEMBL3114420	5,1	5,6
CHEMBL3114423	5,5	5,5
CHEMBL3114580	5,4	6,4
CHEMBL3114583	5,2	5,7
CHEMBL3114585	5,2	5,5
CHEMBL3114586	5,2	5,7
CHEMBL3114588	6,3	5,3
CHEMBL3114589	6,5	5,7
CHEMBL311636	6,7	5,7
CHEMBL311851	6,1	6,1
CHEMBL311907	6,3	7,4
CHEMBL3120215	5,3	6,1
CHEMBL312292	6,0	5,8
CHEMBL3125702	8,0	6,6
CHEMBL3126056	5,1	5,7
CHEMBL3126057	5,9	5,7
CHEMBL3126058	5,4	5,4
CHEMBL3126062	5,6	5,3
CHEMBL3126063	5,0	5,6
CHEMBL3126064	5,3	5,7

Código	Exp	Prev
CHEMBL3126076	5,5	5,7
CHEMBL3126077	5,7	5,5
CHEMBL3126079	5,3	5,5
CHEMBL3126081	6,0	5,7
CHEMBL3126082	5,5	5,6
CHEMBL3126899	6,6	7,3
CHEMBL3126905	6,7	6,6
CHEMBL3126907	7,0	6,3
CHEMBL3126908	7,4	7,0
CHEMBL3126911	6,3	6,9
CHEMBL3126915	5,3	7,0
CHEMBL3127047	5,4	7,0
CHEMBL3127049	8,0	7,2
CHEMBL3127050	7,4	7,2
CHEMBL3127055	7,5	6,4
CHEMBL3127058	6,6	7,1
CHEMBL3127065	7,4	7,0
CHEMBL3127066	7,0	6,9
CHEMBL3127067	7,1	6,9
CHEMBL3127068	6,9	6,8
CHEMBL3127378	5,4	5,7
CHEMBL3127380	5,2	5,7
CHEMBL3127620	7,9	7,3
CHEMBL3134161	5,2	5,5
CHEMBL3134162	5,3	5,5
CHEMBL3134517	7,6	8,6
CHEMBL3134519	9,0	8,5
CHEMBL3134523	7,9	8,6
CHEMBL3134524	6,8	8,4
CHEMBL3134527	8,6	8,1
CHEMBL3134529	8,9	8,0
CHEMBL3134530	9,5	8,3
CHEMBL3134532	8,1	7,7
CHEMBL3134533	7,5	8,1
CHEMBL3134535	8,1	8,4
CHEMBL3134538	6,7	7,4
CHEMBL3134539	7,4	8,3
CHEMBL3134540	7,3	7,2
CHEMBL3134541	7,4	7,2
CHEMBL3134542	7,4	7,3
CHEMBL3134544	8,2	8,1
CHEMBL3134545	8,1	8,1
CHEMBL3134546	8,4	8,1
CHEMBL3134549	7,0	7,8
CHEMBL3134550	8,1	8,1
CHEMBL3134553	7,5	7,5
CHEMBL3134554	8,1	7,9
CHEMBL3134555	8,1	8,1
CHEMBL3134556	8,2	8,1
CHEMBL3134558	8,9	8,3
CHEMBL3134559	7,5	8,6
CHEMBL3134560	8,9	8,5
CHEMBL3134561	8,9	8,6
CHEMBL3134564	5,3	7,9
CHEMBL3134567	7,4	7,5
CHEMBL3134568	7,4	7,4
CHEMBL3134569	7,4	7,4
CHEMBL3134570	7,5	7,3
CHEMBL3134583	5,2	5,7
CHEMBL314523	6,1	5,9
CHEMBL314854	5,3	6,3
CHEMBL315888	8,7	8,5
CHEMBL317190	7,7	7,7

Código	Exp	Prev
CHEMBL317814	6,0	6,0
CHEMBL318076	6,1	6,2
CHEMBL318529	6,3	6,0
CHEMBL318599	6,1	5,8
CHEMBL320229	5,9	6,2
CHEMBL320304	5,3	6,1
CHEMBL321063	6,0	6,0
CHEMBL321235	6,0	6,0
CHEMBL321299	7,0	7,7
CHEMBL321541	8,4	7,7
CHEMBL3216230	6,8	6,5
CHEMBL3216673	6,6	6,5
CHEMBL3218072	8,8	7,8
CHEMBL3218073	8,1	7,7
CHEMBL3218074	8,1	7,7
CHEMBL3218075	7,6	7,9
CHEMBL3218076	7,4	7,9
CHEMBL3218078	8,9	8,1
CHEMBL3218079	8,8	8,3
CHEMBL3218081	8,3	8,5
CHEMBL3218082	8,1	8,5
CHEMBL3218083	7,6	8,0
CHEMBL3218084	8,8	8,2
CHEMBL3218085	8,1	8,2
CHEMBL3218086	7,2	7,8
CHEMBL3218087	8,2	8,3
CHEMBL3218089	7,0	8,3
CHEMBL3218090	8,4	7,2
CHEMBL3218092	7,5	7,5
CHEMBL3218094	8,2	7,4
CHEMBL3218095	8,2	7,8
CHEMBL3218096	6,8	7,7
CHEMBL3218097	8,8	7,3
CHEMBL3218098	6,8	8,1
CHEMBL3218099	7,2	7,5
CHEMBL3218100	6,3	7,5
CHEMBL3218102	5,4	7,4
CHEMBL3218103	6,7	7,9
CHEMBL3218104	8,1	7,5
CHEMBL3218107	8,1	7,6
CHEMBL3218108	7,4	7,4
CHEMBL3218109	7,3	7,2
CHEMBL3218110	6,8	7,7
CHEMBL3218261	5,2	5,5
CHEMBL3218262	5,7	5,2
CHEMBL3218263	5,5	5,4
CHEMBL3218264	5,6	5,5
CHEMBL3218269	5,1	5,4
CHEMBL3218270	5,0	5,4
CHEMBL3218271	5,2	5,4
CHEMBL3218273	5,7	5,7
CHEMBL3218706	7,3	6,4
CHEMBL3218707	6,0	6,0
CHEMBL3218708	6,0	6,0
CHEMBL3218709	5,6	6,1
CHEMBL3218710	6,4	6,0
CHEMBL3218948	6,5	6,7
CHEMBL3218949	6,4	6,7
CHEMBL3218950	6,9	6,6
CHEMBL3218951	6,8	6,5
CHEMBL3218952	6,0	5,8
CHEMBL3218954	5,5	6,1
CHEMBL321907	5,9	6,3

Código	Exp	Prev
CHEMBL3219597	6,0	6,2
CHEMBL3220331	5,4	6,5
CHEMBL3220332	6,2	6,2
CHEMBL3220333	6,6	6,1
CHEMBL3220334	6,7	6,1
CHEMBL3220335	5,7	6,1
CHEMBL3220336	6,3	5,8
CHEMBL3220338	5,1	6,1
CHEMBL3220339	6,5	5,9
CHEMBL3220341	6,2	5,7
CHEMBL322146	6,6	6,5
CHEMBL3233687	6,4	6,3
CHEMBL3233696	6,2	6,3
CHEMBL3233698	6,3	6,3
CHEMBL3233703	6,4	6,3
CHEMBL3233708	6,2	6,4
CHEMBL3233749	5,1	5,7
CHEMBL3234200	8,9	8,8
CHEMBL3234201	8,7	8,9
CHEMBL3234202	9,2	8,8
CHEMBL3234423	5,3	5,3
CHEMBL3234427	5,2	5,4
CHEMBL3234428	5,2	5,4
CHEMBL3234752	5,9	6,1
CHEMBL3234828	5,9	5,7
CHEMBL3235463	6,2	5,7
CHEMBL3235464	5,9	5,8
CHEMBL3235787	5,7	5,9
CHEMBL3235788	5,6	6,0
CHEMBL3235789	5,6	6,2
CHEMBL3235791	6,2	5,9
CHEMBL3235792	5,9	5,9
CHEMBL3235856	5,6	6,0
CHEMBL3235857	5,9	5,7
CHEMBL3235858	5,5	5,8
CHEMBL3237164	5,8	5,9
CHEMBL3237166	6,2	6,0
CHEMBL3237168	5,6	6,0
CHEMBL3237169	5,8	6,1
CHEMBL3237172	6,2	5,9
CHEMBL3237174	6,0	6,1
CHEMBL3237176	5,9	6,1
CHEMBL3237181	5,8	6,1
CHEMBL3237184	6,0	5,9
CHEMBL3237188	5,9	5,9
CHEMBL323781	8,0	7,6
CHEMBL3237860	5,7	6,0
CHEMBL3237862	7,3	7,3
CHEMBL3237863	7,5	7,2
CHEMBL3237864	7,4	7,3
CHEMBL3237865	7,2	7,1
CHEMBL3237866	7,0	7,2
CHEMBL3237867	7,2	7,1
CHEMBL3237869	7,2	6,9
CHEMBL3237870	7,3	6,9
CHEMBL3237873	6,9	7,1
CHEMBL3237874	7,1	6,1
CHEMBL323813	7,2	6,7
CHEMBL323908	6,3	6,9
CHEMBL324612	6,7	6,9
CHEMBL325023	7,9	7,3
CHEMBL325453	6,9	7,1
CHEMBL325654	6,3	6,3

Código	Exp	Prev
CHEMBL3260161	5,2	5,5
CHEMBL3260164	5,8	5,4
CHEMBL3260167	5,2	5,4
CHEMBL3260168	5,2	5,4
CHEMBL3260169	5,1	5,6
CHEMBL3260172	5,7	5,5
CHEMBL3260358	8,1	6,3
CHEMBL326082	5,4	6,0
CHEMBL3262493	5,8	5,3
CHEMBL3262494	5,1	5,5
CHEMBL3262495	5,2	5,4
CHEMBL3262496	5,5	5,8
CHEMBL3262497	5,5	5,8
CHEMBL3262498	6,7	5,5
CHEMBL3262503	5,4	5,7
CHEMBL3262504	5,7	5,6
CHEMBL3262509	5,1	5,3
CHEMBL3262511	5,0	5,7
CHEMBL3262723	6,0	6,3
CHEMBL3262727	6,4	6,2
CHEMBL3262728	6,0	6,4
CHEMBL3263195	5,3	6,1
CHEMBL3263994	6,0	6,7
CHEMBL326828	7,7	6,5
CHEMBL326903	5,8	5,8
CHEMBL327212	7,8	7,8
CHEMBL327400	8,8	8,6
CHEMBL327610	8,7	8,6
CHEMBL327856	8,7	8,8
CHEMBL327924	5,3	5,9
CHEMBL328071	6,1	6,8
CHEMBL328103	8,0	8,1
CHEMBL328679	8,8	8,6
CHEMBL3289003	5,2	5,9
CHEMBL3289006	5,2	5,7
CHEMBL3290498	5,2	6,3
CHEMBL3291067	6,2	7,1
CHEMBL3291068	6,0	6,6
CHEMBL3291290	5,7	6,1
CHEMBL3291291	5,5	6,1
CHEMBL329745	6,0	6,0
CHEMBL3298356	5,2	6,0
CHEMBL3298492	5,1	5,6
CHEMBL3298643	5,4	5,2
CHEMBL3298644	5,0	5,2
CHEMBL3298645	5,0	5,2
CHEMBL3298721	5,1	5,3
CHEMBL3298723	5,2	5,4
CHEMBL3298725	5,7	5,4
CHEMBL3298726	5,6	5,4
CHEMBL3298959	7,1	6,7
CHEMBL3299069	5,1	5,8
CHEMBL329993	8,6	7,1
CHEMBL330015	8,7	8,7
CHEMBL330056	8,7	8,5
CHEMBL330201	5,7	5,6
CHEMBL330407	6,6	7,3
CHEMBL332575	5,2	5,6
CHEMBL332712	7,3	7,0
CHEMBL334285	6,2	7,2
CHEMBL334658	8,8	8,9
CHEMBL335812	7,3	7,3
CHEMBL335838	9,0	6,9

Código	Exp	Prev
CHEMBL336674	6,4	7,7
CHEMBL338264	6,0	6,1
CHEMBL338604	8,4	8,1
CHEMBL339948	6,1	5,9
CHEMBL340884	8,7	8,3
CHEMBL341035	6,2	5,7
CHEMBL341110	5,2	5,9
CHEMBL341601	8,0	6,7
CHEMBL341914	8,9	8,8
CHEMBL341915	8,9	8,7
CHEMBL341926	9,0	8,8
CHEMBL342474	7,2	6,2
CHEMBL342862	8,8	8,9
CHEMBL343042	8,8	9,0
CHEMBL343091	6,8	7,5
CHEMBL343096	8,9	8,8
CHEMBL343118	8,7	8,5
CHEMBL343823	7,3	7,1
CHEMBL344227	7,5	7,3
CHEMBL344443	8,6	8,5
CHEMBL344664	9,2	8,9
CHEMBL345525	7,8	7,2
CHEMBL346164	7,2	6,6
CHEMBL346184	7,4	6,9
CHEMBL346435	8,8	9,0
CHEMBL346445	6,8	6,0
CHEMBL347994	9,0	8,8
CHEMBL348438	6,4	5,8
CHEMBL353629	5,2	5,6
CHEMBL354586	8,9	8,1
CHEMBL356066	7,7	7,1
CHEMBL356208	6,2	6,0
CHEMBL356728	7,2	6,9
CHEMBL357231	8,2	7,3
CHEMBL357268	6,2	5,8
CHEMBL358102	7,6	7,1
CHEMBL359200	6,5	7,0
CHEMBL359475	5,1	5,3
CHEMBL360902	5,1	5,3
CHEMBL361030	5,6	6,3
CHEMBL361900	6,7	6,4
CHEMBL362075	6,2	6,3
CHEMBL362087	7,7	6,5
CHEMBL362109	7,3	6,8
CHEMBL362121	6,5	6,6
CHEMBL362560	6,0	7,1
CHEMBL362756	7,5	6,8
CHEMBL363130	6,9	6,1
CHEMBL363174	6,5	6,4
CHEMBL363202	5,1	5,9
CHEMBL363607	6,1	5,6
CHEMBL363679	6,4	6,9
CHEMBL363857	6,2	6,3
CHEMBL364001	6,3	6,2
CHEMBL364226	5,7	5,8
CHEMBL364927	6,0	6,5
CHEMBL364965	6,1	5,8
CHEMBL365713	6,5	6,0
CHEMBL366209	5,0	5,8
CHEMBL368902	5,2	5,2
CHEMBL369135	5,4	5,2
CHEMBL370237	6,5	6,4
CHEMBL370698	5,3	6,7

Código	Exp	Prev
CHEMBL370721	8,0	6,8
CHEMBL371405	7,5	6,9
CHEMBL371910	5,6	6,2
CHEMBL371949	5,8	6,4
CHEMBL372123	7,5	9,1
CHEMBL373382	6,1	6,5
CHEMBL373396	5,3	6,1
CHEMBL373826	6,0	6,9
CHEMBL373834	5,2	5,7
CHEMBL374240	6,4	6,6
CHEMBL374520	6,6	6,2
CHEMBL374568	6,6	6,7
CHEMBL375062	5,3	6,0
CHEMBL375269	5,1	5,6
CHEMBL375578	6,5	6,3
CHEMBL376532	7,5	7,0
CHEMBL376628	7,2	6,3
CHEMBL376708	7,1	6,6
CHEMBL376823	6,1	6,4
CHEMBL378110	7,8	6,5
CHEMBL378942	5,7	6,1
CHEMBL379473	5,8	6,5
CHEMBL379858	5,3	6,1
CHEMBL380145	5,2	5,3
CHEMBL380946	6,9	5,8
CHEMBL381551	5,2	5,3
CHEMBL382453	5,5	6,9
CHEMBL383104	6,0	6,1
CHEMBL383824	5,9	6,9
CHEMBL384304	7,1	6,1
CHEMBL384356	5,3	5,5
CHEMBL384503	6,2	5,9
CHEMBL385190	5,6	6,2
CHEMBL385733	6,5	5,9
CHEMBL385872	7,0	6,4
CHEMBL386960	5,5	6,9
CHEMBL387448	5,7	5,6
CHEMBL38761	5,6	5,5
CHEMBL387931	6,1	5,8
CHEMBL388037	6,2	5,5
CHEMBL388152	5,9	5,9
CHEMBL388365	5,7	6,0
CHEMBL389340	7,3	7,7
CHEMBL38957	9,3	6,1
CHEMBL389575	6,2	7,7
CHEMBL390023	5,0	5,8
CHEMBL390452	6,4	5,8
CHEMBL390629	6,4	5,8
CHEMBL391282	5,1	5,6
CHEMBL391587	9,3	8,7
CHEMBL392123	5,9	5,5
CHEMBL392306	5,9	6,0
CHEMBL392449	6,4	6,2
CHEMBL393447	5,3	5,7
CHEMBL393460	6,1	6,0
CHEMBL393468	5,4	5,1
CHEMBL394395	5,1	5,3
CHEMBL394465	6,7	6,3
CHEMBL394548	5,0	5,5
CHEMBL394665	7,5	8,5
CHEMBL394888	5,9	6,2
CHEMBL395016	5,0	5,8
CHEMBL395485	5,6	5,8

Código	Exp	Prev
CHEMBL395681	6,3	5,6
CHEMBL395968	6,0	6,0
CHEMBL396165	5,6	6,1
CHEMBL396202	7,6	7,0
CHEMBL396444	6,0	5,7
CHEMBL396549	6,1	5,8
CHEMBL397022	5,6	5,7
CHEMBL397127	5,3	5,9
CHEMBL397309	5,4	6,2
CHEMBL397549	5,5	5,9
CHEMBL397923	5,9	6,5
CHEMBL398149	5,6	7,2
CHEMBL398170	5,7	6,1
CHEMBL398333	6,2	6,1
CHEMBL398400	8,4	7,4
CHEMBL398649	5,4	5,8
CHEMBL398785	7,7	7,1
CHEMBL398866	6,4	6,0
CHEMBL398950	6,2	6,3
CHEMBL399042	5,1	7,3
CHEMBL399170	6,4	6,6
CHEMBL399363	5,1	5,7
CHEMBL399365	5,0	6,2
CHEMBL399530	5,2	5,9
CHEMBL399754	6,2	6,5
CHEMBL399797	6,2	5,8
CHEMBL399974	6,7	6,1
CHEMBL400213	6,2	6,2
CHEMBL400419	6,5	6,1
CHEMBL400440	5,1	5,3
CHEMBL400482	6,2	6,3
CHEMBL400760	6,6	6,0
CHEMBL400858	5,8	7,5
CHEMBL400859	7,7	7,0
CHEMBL400906	7,3	6,9
CHEMBL400919	6,7	6,3
CHEMBL400920	6,3	6,3
CHEMBL401448	6,0	6,2
CHEMBL401449	6,4	6,1
CHEMBL401614	7,1	6,7
CHEMBL401751	6,2	6,0
CHEMBL402157	5,9	5,8
CHEMBL402194	5,4	5,8
CHEMBL402246	6,9	6,5
CHEMBL402306	6,6	6,5
CHEMBL402370	5,9	5,7
CHEMBL402382	5,3	5,9
CHEMBL402599	6,4	6,0
CHEMBL402712	5,0	6,1
CHEMBL402718	5,6	6,2
CHEMBL402719	6,0	6,0
CHEMBL40275	5,1	5,7
CHEMBL402759	6,7	5,8
CHEMBL403285	6,5	6,1
CHEMBL403466	6,5	6,2
CHEMBL403467	6,7	6,3
CHEMBL403664	5,5	7,2
CHEMBL404054	6,2	6,1
CHEMBL404332	7,0	6,0
CHEMBL404508	6,5	6,3
CHEMBL404630	6,6	5,7
CHEMBL404811	5,1	5,6
CHEMBL404934	8,6	8,8

Código	Exp	Prev	Código	Exp	Prev	Código	Exp	Prev
CHEMBL405714	6,0	6,1	CHEMBL432219	7,0	6,0	CHEMBL455487	5,9	5,9
CHEMBL405935	5,6	7,9	CHEMBL432647	8,6	8,5	CHEMBL455804	5,5	5,9
CHEMBL406207	5,8	6,0	CHEMBL433007	8,8	8,7	CHEMBL455888	6,7	6,4
CHEMBL406631	5,9	5,8	CHEMBL433943	6,2	6,4	CHEMBL456511	5,7	5,3
CHEMBL406927	5,4	6,2	CHEMBL433959	5,8	6,1	CHEMBL456628	5,5	5,2
CHEMBL406943	5,9	5,8	CHEMBL435748	6,5	6,6	CHEMBL456846	5,0	5,7
CHEMBL407095	5,3	5,6	CHEMBL436054	8,6	8,5	CHEMBL456963	6,3	6,5
CHEMBL407306	7,4	7,3	CHEMBL436284	6,7	6,3	CHEMBL457177	6,5	6,5
CHEMBL407420	5,9	6,2	CHEMBL436624	8,7	6,0	CHEMBL457376	5,5	5,6
CHEMBL407959	6,3	6,0	CHEMBL43750	8,0	5,8	CHEMBL457388	6,5	6,6
CHEMBL408513	6,2	5,9	CHEMBL438717	9,1	8,8	CHEMBL457538	7,2	6,0
CHEMBL409017	7,8	7,7	CHEMBL439498	5,4	6,9	CHEMBL457599	5,8	6,0
CHEMBL409450	5,3	5,9	CHEMBL441133	5,6	6,0	CHEMBL457826	5,8	5,9
CHEMBL409493	6,4	6,3	CHEMBL441258	5,6	5,6	CHEMBL458249	5,1	5,5
CHEMBL409861	5,8	5,7	CHEMBL442392	5,8	5,9	CHEMBL458421	7,8	6,5
CHEMBL411233	8,2	7,4	CHEMBL442426	6,0	6,0	CHEMBL458512	7,2	7,0
CHEMBL411432	7,6	7,3	CHEMBL442661	5,5	5,7	CHEMBL458689	5,5	5,4
CHEMBL411694	7,8	7,3	CHEMBL443114	5,4	5,7	CHEMBL458904	6,0	6,5
CHEMBL411879	5,1	5,9	CHEMBL443580	7,8	8,6	CHEMBL459359	5,6	6,0
CHEMBL412083	6,4	6,3	CHEMBL443720	6,6	6,4	CHEMBL459677	5,7	5,6
CHEMBL412564	8,7	8,5	CHEMBL44384	8,5	8,5	CHEMBL460635	5,3	5,3
CHEMBL413700	7,8	7,7	CHEMBL444004	6,3	6,4	CHEMBL460844	5,3	5,3
CHEMBL414531	7,6	6,2	CHEMBL444562	6,6	6,3	CHEMBL461260	5,2	5,3
CHEMBL414574	6,8	7,5	CHEMBL444693	6,4	6,4	CHEMBL461478	5,4	5,2
CHEMBL415085	5,3	6,2	CHEMBL444750	7,5	6,6	CHEMBL461763	5,7	5,9
CHEMBL415476	9,0	8,8	CHEMBL445813	7,1	6,8	CHEMBL462131	6,3	5,7
CHEMBL415735	6,1	6,0	CHEMBL445938	6,4	5,8	CHEMBL462951	5,5	5,9
CHEMBL415789	6,1	6,0	CHEMBL446076	5,2	5,5	CHEMBL462959	5,0	6,0
CHEMBL416673	6,9	6,6	CHEMBL446085	7,7	8,9	CHEMBL462977	5,8	5,8
CHEMBL417922	6,4	6,6	CHEMBL446173	8,9	8,2	CHEMBL463140	5,6	5,8
CHEMBL418203	6,3	6,8	CHEMBL44657	5,3	6,9	CHEMBL463340	6,6	5,9
CHEMBL420032	6,1	8,1	CHEMBL447545	6,2	6,8	CHEMBL463763	8,0	6,2
CHEMBL420410	8,5	8,9	CHEMBL447553	6,5	6,4	CHEMBL463915	5,0	5,5
CHEMBL421934	6,9	7,3	CHEMBL448316	6,0	6,7	CHEMBL464110	5,5	5,7
CHEMBL423921	8,9	9,0	CHEMBL448327	8,5	6,4	CHEMBL464377	6,2	6,7
CHEMBL424318	6,6	6,2	CHEMBL449158	7,3	6,3	CHEMBL464493	8,0	6,0
CHEMBL424730	8,4	7,8	CHEMBL449447	6,6	6,9	CHEMBL464638	5,2	5,3
CHEMBL426770	5,4	6,9	CHEMBL449803	6,1	5,7	CHEMBL464670	6,3	6,4
CHEMBL426818	6,5	6,2	CHEMBL450115	7,1	6,0	CHEMBL465145	5,6	5,9
CHEMBL426920	5,3	6,2	CHEMBL450580	8,3	7,1	CHEMBL465693	5,1	5,7
CHEMBL426929	7,5	6,4	CHEMBL450708	7,2	7,4	CHEMBL465813	6,6	6,0
CHEMBL427170	6,0	6,2	CHEMBL450849	5,0	6,4	CHEMBL465843	5,2	5,4
CHEMBL427787	7,7	6,3	CHEMBL451147	8,0	7,5	CHEMBL466215	6,1	6,2
CHEMBL428084	5,5	6,5	CHEMBL451402	9,2	8,8	CHEMBL466716	5,3	5,6
CHEMBL428208	5,2	5,3	CHEMBL452048	7,2	6,4	CHEMBL467620	5,2	5,5
CHEMBL428225	5,7	6,3	CHEMBL452175	8,5	8,0	CHEMBL46817	6,9	6,2
CHEMBL428582	5,5	6,1	CHEMBL452355	6,1	5,7	CHEMBL468513	6,2	6,2
CHEMBL428623	8,0	8,2	CHEMBL452601	6,1	5,9	CHEMBL469085	5,9	5,9
CHEMBL428690	7,7	6,0	CHEMBL452709	9,4	7,2	CHEMBL469288	5,9	5,9
CHEMBL428921	5,5	6,0	CHEMBL452903	5,9	7,3	CHEMBL469321	5,1	6,0
CHEMBL429478	7,3	6,8	CHEMBL453082	6,3	6,0	CHEMBL469932	6,6	6,4
CHEMBL429636	5,2	5,4	CHEMBL453565	6,0	6,6	CHEMBL470412	5,5	5,8
CHEMBL429864	6,0	5,2	CHEMBL453856	6,5	5,9	CHEMBL470414	5,4	6,0
CHEMBL430000	6,1	7,6	CHEMBL454234	5,9	5,7	CHEMBL470439	5,3	5,7
CHEMBL430476	8,2	8,5	CHEMBL454372	7,6	7,4	CHEMBL470843	5,4	6,3
CHEMBL430606	6,0	5,9	CHEMBL454434	6,4	6,0	CHEMBL470844	5,4	5,6
CHEMBL430804	8,2	8,4	CHEMBL454646	6,6	5,8	CHEMBL471043	5,8	5,7
CHEMBL431093	8,2	8,5	CHEMBL454710	6,1	6,6	CHEMBL471173	6,3	6,1
CHEMBL431525	5,6	5,4	CHEMBL454803	6,6	6,4	CHEMBL471494	5,4	5,5
CHEMBL431603	9,1	8,9	CHEMBL455005	5,6	6,3	CHEMBL471495	5,2	5,6
CHEMBL431922	8,8	8,7	CHEMBL455195	6,2	6,2	CHEMBL472345	5,3	5,9
CHEMBL432002	8,2	7,4	CHEMBL455213	11,5	7,4	CHEMBL472532	5,3	5,7
CHEMBL432137	8,1	8,7	CHEMBL455450	5,5	6,1	CHEMBL472631	5,7	5,9

Código	Exp	Prev
CHEMBL473271	6,3	6,7
CHEMBL473478	6,6	6,4
CHEMBL473484	7,0	6,6
CHEMBL47360	5,6	5,6
CHEMBL473630	5,5	5,9
CHEMBL474028	6,0	5,7
CHEMBL474053	5,9	5,9
CHEMBL47426	7,7	6,4
CHEMBL474432	5,1	6,3
CHEMBL474651	5,3	5,8
CHEMBL474669	7,7	7,4
CHEMBL474843	5,9	6,0
CHEMBL475302	6,5	6,7
CHEMBL475783	5,6	5,9
CHEMBL475857	6,0	5,6
CHEMBL476113	5,6	5,6
CHEMBL476431	5,5	6,3
CHEMBL476647	6,3	6,7
CHEMBL476907	5,7	5,7
CHEMBL477063	5,9	6,4
CHEMBL477077	5,3	5,9
CHEMBL477259	6,8	6,3
CHEMBL477861	6,2	5,8
CHEMBL477863	6,2	6,2
CHEMBL477877	6,4	6,2
CHEMBL478140	6,3	6,6
CHEMBL478145	5,3	5,3
CHEMBL478318	5,7	5,6
CHEMBL478487	5,2	6,0
CHEMBL478488	6,4	5,6
CHEMBL478709	5,9	5,6
CHEMBL479148	5,1	5,6
CHEMBL479279	6,7	6,4
CHEMBL480043	7,0	6,6
CHEMBL480044	6,5	6,7
CHEMBL480382	5,8	5,8
CHEMBL480383	5,8	5,9
CHEMBL480545	5,8	6,0
CHEMBL480623	7,2	6,2
CHEMBL481510	5,4	6,0
CHEMBL481805	6,5	6,4
CHEMBL481998	7,0	6,5
CHEMBL481999	5,4	6,5
CHEMBL482486	6,0	5,8
CHEMBL482918	5,8	5,9
CHEMBL482967	6,5	6,3
CHEMBL483081	6,0	6,0
CHEMBL48310	5,3	6,1
CHEMBL483527	5,2	5,7
CHEMBL483528	5,5	5,8
CHEMBL483722	6,0	5,9
CHEMBL483728	6,1	5,6
CHEMBL484007	5,7	6,0
CHEMBL484032	6,4	6,4
CHEMBL48449	5,0	5,7
CHEMBL484924	5,5	5,6
CHEMBL485115	6,2	5,7
CHEMBL485274	5,4	5,3
CHEMBL485737	5,7	6,1
CHEMBL485952	6,0	5,5
CHEMBL486025	5,2	5,9
CHEMBL486091	5,9	5,8
CHEMBL486286	5,5	5,5

Código	Exp	Prev
CHEMBL486302	5,6	5,6
CHEMBL486504	7,0	6,3
CHEMBL486711	6,0	5,8
CHEMBL486712	6,0	5,7
CHEMBL487082	5,6	6,0
CHEMBL487326	5,6	5,8
CHEMBL487521	5,6	5,8
CHEMBL487730	5,8	5,9
CHEMBL487774	6,3	5,4
CHEMBL488128	5,7	5,9
CHEMBL488562	5,7	5,9
CHEMBL488955	5,6	5,6
CHEMBL489245	5,7	6,1
CHEMBL489332	7,0	6,5
CHEMBL489629	6,3	6,2
CHEMBL489903	5,9	6,5
CHEMBL490240	6,1	6,3
CHEMBL490508	8,4	6,5
CHEMBL491316	6,7	6,4
CHEMBL492381	9,6	8,9
CHEMBL492595	6,4	7,4
CHEMBL493326	6,5	6,8
CHEMBL493342	9,4	9,4
CHEMBL493367	8,4	9,3
CHEMBL493620	6,2	7,2
CHEMBL493808	6,7	6,3
CHEMBL494804	6,7	6,0
CHEMBL495557	5,5	6,2
CHEMBL495727	7,9	6,9
CHEMBL496043	5,0	5,8
CHEMBL496076	5,1	5,9
CHEMBL496108	5,6	5,6
CHEMBL497306	7,3	6,3
CHEMBL497477	7,2	6,7
CHEMBL498107	7,4	6,7
CHEMBL498108	7,5	6,8
CHEMBL498447	5,6	7,2
CHEMBL498659	6,9	6,5
CHEMBL499027	6,1	6,2
CHEMBL499091	5,3	7,5
CHEMBL499652	6,3	7,1
CHEMBL499726	5,5	5,7
CHEMBL499737	5,1	7,0
CHEMBL50	5,2	5,8
CHEMBL500191	5,2	5,3
CHEMBL500334	6,2	7,5
CHEMBL500748	5,7	7,4
CHEMBL500907	5,8	6,4
CHEMBL501696	8,2	8,1
CHEMBL501933	5,2	6,2
CHEMBL502124	6,7	5,8
CHEMBL502241	5,6	6,4
CHEMBL502431	5,2	5,3
CHEMBL503821	7,6	7,2
CHEMBL503999	5,1	6,3
CHEMBL504012	5,3	5,5
CHEMBL504547	6,3	6,1
CHEMBL504590	5,7	5,5
CHEMBL504669	5,8	5,6
CHEMBL505066	5,1	5,4
CHEMBL505199	5,6	5,7
CHEMBL505354	5,1	5,7
CHEMBL505630	7,2	7,4

Código	Exp	Prev
CHEMBL505650	7,7	7,7
CHEMBL505806	5,6	5,8
CHEMBL505905	7,1	6,3
CHEMBL505932	6,6	6,9
CHEMBL506035	6,6	6,3
CHEMBL506166	5,1	5,6
CHEMBL506283	7,7	7,7
CHEMBL506311	6,7	7,1
CHEMBL506441	6,1	6,1
CHEMBL506674	7,0	6,7
CHEMBL506914	8,3	8,8
CHEMBL507167	6,6	6,4
CHEMBL507361	6,7	5,8
CHEMBL507545	6,4	6,1
CHEMBL507566	5,0	5,5
CHEMBL507687	5,3	6,1
CHEMBL507854	6,4	5,5
CHEMBL508255	7,6	8,9
CHEMBL508383	7,0	6,9
CHEMBL508506	5,8	6,0
CHEMBL509012	6,1	6,2
CHEMBL509255	5,9	6,5
CHEMBL509507	7,1	7,0
CHEMBL509765	6,3	7,1
CHEMBL509939	9,3	8,7
CHEMBL510507	8,3	6,8
CHEMBL510566	5,4	6,1
CHEMBL510650	8,5	6,0
CHEMBL510700	5,1	5,9
CHEMBL511439	6,7	6,2
CHEMBL511491	5,2	5,4
CHEMBL511520	5,2	5,9
CHEMBL512179	5,6	5,5
CHEMBL512489	6,0	6,6
CHEMBL512516	6,2	6,2
CHEMBL513061	6,5	6,5
CHEMBL513501	5,5	5,4
CHEMBL513813	5,2	5,6
CHEMBL514114	5,1	5,3
CHEMBL514304	7,1	6,4
CHEMBL514499	6,2	5,6
CHEMBL514503	6,9	6,6
CHEMBL514634	5,6	5,8
CHEMBL514678	6,8	6,0
CHEMBL514709	5,1	5,5
CHEMBL514826	5,5	6,0
CHEMBL514865	5,1	5,5
CHEMBL514900	5,6	5,9
CHEMBL514923	7,5	6,1
CHEMBL515023	5,1	5,7
CHEMBL515153	6,2	5,9
CHEMBL515292	6,5	6,7
CHEMBL515341	5,4	6,1
CHEMBL515493	5,9	5,8
CHEMBL515619	5,4	5,5
CHEMBL515631	6,4	6,4
CHEMBL516155	5,5	5,6
CHEMBL516231	6,2	6,1
CHEMBL516236	7,0	6,7
CHEMBL516314	5,4	6,0
CHEMBL516362	5,1	6,0
CHEMBL516878	5,2	5,6
CHEMBL517220	5,4	5,5

Código	Exp	Prev
CHEMBL517462	6,2	6,4
CHEMBL517495	5,1	5,6
CHEMBL517644	5,7	5,8
CHEMBL517755	6,7	6,4
CHEMBL517853	6,4	6,6
CHEMBL518074	5,5	6,1
CHEMBL518165	5,7	5,9
CHEMBL518383	5,9	6,0
CHEMBL519005	6,0	6,4
CHEMBL519120	5,8	6,0
CHEMBL519375	5,1	5,7
CHEMBL519715	5,3	5,7
CHEMBL519961	5,5	5,8
CHEMBL519981	5,3	6,0
CHEMBL520080	5,5	5,7
CHEMBL520155	6,8	6,2
CHEMBL520458	5,9	5,9
CHEMBL520601	6,1	6,3
CHEMBL521352	5,3	6,0
CHEMBL521806	6,0	7,0
CHEMBL521922	6,3	6,2
CHEMBL521949	6,1	6,1
CHEMBL522393	5,5	5,6
CHEMBL522709	6,3	6,3
CHEMBL523188	9,4	9,2
CHEMBL523991	6,1	6,1
CHEMBL524170	10,4	9,1
CHEMBL525629	5,2	5,3
CHEMBL52569	5,1	5,6
CHEMBL525978	6,4	6,6
CHEMBL529447	7,4	6,3
CHEMBL529661	5,6	5,9
CHEMBL53004	8,9	7,0
CHEMBL53463	6,7	6,7
CHEMBL535637	5,6	6,0
CHEMBL536272	6,9	6,2
CHEMBL538097	5,6	6,1
CHEMBL538270	5,8	6,0
CHEMBL538364	5,6	6,3
CHEMBL538412	5,7	6,0
CHEMBL53856	5,9	5,8
CHEMBL538653	5,7	5,8
CHEMBL538712	6,2	6,3
CHEMBL538895	5,1	6,2
CHEMBL538967	6,0	6,0
CHEMBL539156	6,4	5,8
CHEMBL539380	6,9	6,4
CHEMBL539473	8,7	7,6
CHEMBL539690	7,6	7,6
CHEMBL539907	5,3	5,7
CHEMBL539919	8,1	8,0
CHEMBL540660	6,2	6,4
CHEMBL540960	5,9	6,6
CHEMBL541008	7,3	7,6
CHEMBL541239	5,6	5,8
CHEMBL541248	7,4	7,7
CHEMBL541945	7,6	7,7
CHEMBL541946	8,0	7,9
CHEMBL542004	6,4	5,9
CHEMBL545295	6,3	6,4
CHEMBL54787	7,1	6,7
CHEMBL549305	6,0	5,9
CHEMBL549905	6,9	7,4

Código	Exp	Prev
CHEMBL550042	6,1	6,0
CHEMBL550154	6,1	6,0
CHEMBL55047	6,8	6,7
CHEMBL550532	6,4	5,6
CHEMBL550986	6,2	5,6
CHEMBL551151	6,6	5,7
CHEMBL551486	6,1	6,1
CHEMBL551549	5,4	6,1
CHEMBL551983	5,3	5,6
CHEMBL552053	5,2	5,9
CHEMBL552212	6,4	6,3
CHEMBL552716	6,0	6,0
CHEMBL552962	7,6	7,6
CHEMBL553025	7,8	7,7
CHEMBL553855	6,5	5,9
CHEMBL554330	7,5	7,7
CHEMBL554331	7,5	7,4
CHEMBL554575	8,5	7,9
CHEMBL554604	8,0	7,9
CHEMBL554605	7,5	7,5
CHEMBL554997	6,5	5,8
CHEMBL555298	7,0	7,7
CHEMBL555489	7,5	7,7
CHEMBL555662	6,0	6,4
CHEMBL555885	8,2	7,9
CHEMBL555906	5,8	6,1
CHEMBL556074	8,2	7,6
CHEMBL556332	6,5	6,1
CHEMBL556376	7,6	7,4
CHEMBL556532	5,8	6,1
CHEMBL556936	7,8	7,9
CHEMBL556973	6,6	6,4
CHEMBL557066	6,3	5,9
CHEMBL557361	6,8	6,4
CHEMBL557490	8,0	7,9
CHEMBL557545	8,5	7,7
CHEMBL557743	7,5	7,8
CHEMBL557892	7,3	6,2
CHEMBL558113	5,7	5,4
CHEMBL558169	6,4	6,5
CHEMBL558299	5,8	6,1
CHEMBL558462	5,8	5,5
CHEMBL558566	6,5	6,5
CHEMBL558630	6,9	6,2
CHEMBL558741	7,7	7,7
CHEMBL558942	7,8	6,9
CHEMBL559344	7,4	8,0
CHEMBL559349	6,7	6,4
CHEMBL559658	5,1	6,3
CHEMBL560081	5,7	5,9
CHEMBL560339	6,0	6,1
CHEMBL560526	5,2	7,7
CHEMBL560651	6,4	5,9
CHEMBL560854	6,1	6,1
CHEMBL561209	6,7	5,8
CHEMBL561240	6,1	6,3
CHEMBL561282	5,2	5,9
CHEMBL561411	5,4	6,1
CHEMBL561483	6,4	5,9
CHEMBL561629	5,8	6,7
CHEMBL561917	5,6	6,2
CHEMBL562660	5,1	5,7
CHEMBL562667	6,7	7,0

Código	Exp	Prev
CHEMBL562730	6,3	6,4
CHEMBL562744	6,8	5,9
CHEMBL562903	7,1	6,3
CHEMBL563428	5,7	6,6
CHEMBL563477	5,2	5,5
CHEMBL563528	5,5	5,9
CHEMBL563768	7,8	7,8
CHEMBL563813	5,5	5,8
CHEMBL564019	6,4	6,0
CHEMBL564240	6,6	5,7
CHEMBL564382	5,6	7,4
CHEMBL564399	5,5	6,1
CHEMBL564618	6,4	5,8
CHEMBL564906	6,6	6,3
CHEMBL564961	6,1	5,6
CHEMBL565010	5,4	5,6
CHEMBL565140	5,8	6,3
CHEMBL57107	6,0	6,0
CHEMBL571398	5,2	5,8
CHEMBL571668	7,2	6,1
CHEMBL572878	5,4	6,4
CHEMBL573148	5,5	7,3
CHEMBL573299	5,2	5,7
CHEMBL573339	6,0	6,3
CHEMBL575448	5,5	7,3
CHEMBL575519	5,9	5,7
CHEMBL575730	6,2	5,9
CHEMBL576167	5,5	5,6
CHEMBL576383	7,3	6,7
CHEMBL577784	5,3	6,2
CHEMBL578972	5,6	6,5
CHEMBL57959	7,4	6,7
CHEMBL58	5,1	6,0
CHEMBL583626	5,2	5,6
CHEMBL58389	7,5	7,2
CHEMBL584299	5,0	5,5
CHEMBL585951	6,8	6,3
CHEMBL589344	5,4	5,4
CHEMBL59001	7,3	6,8
CHEMBL590522	5,2	5,7
CHEMBL590650	5,0	5,4
CHEMBL590703	5,2	5,5
CHEMBL591222	5,1	5,9
CHEMBL591715	6,7	6,1
CHEMBL592636	6,0	6,0
CHEMBL592946	5,5	6,1
CHEMBL593397	6,5	6,5
CHEMBL593444	6,5	6,7
CHEMBL593698	5,7	5,6
CHEMBL593700	5,3	5,9
CHEMBL593712	5,0	5,4
CHEMBL594340	6,6	6,3
CHEMBL594349	6,9	6,5
CHEMBL594644	6,7	5,4
CHEMBL59502	6,9	6,8
CHEMBL595023	6,4	6,1
CHEMBL595510	5,6	5,8
CHEMBL595726	6,8	6,1
CHEMBL597230	5,8	6,0
CHEMBL59785	6,6	5,7
CHEMBL598111	6,0	5,9
CHEMBL599073	5,5	5,9
CHEMBL599121	5,7	5,9

Código	Exp	Prev
CHEMBL599339	5,5	6,1
CHEMBL599340	5,5	5,8
CHEMBL599686	5,8	6,3
CHEMBL599687	6,1	5,9
CHEMBL599688	5,5	6,1
CHEMBL600325	7,2	5,9
CHEMBL600449	5,6	6,0
CHEMBL600454	5,1	5,9
CHEMBL602532	5,2	5,3
CHEMBL603199	6,3	6,3
CHEMBL603469	6,9	6,1
CHEMBL604044	5,7	5,8
CHEMBL606053	9,3	8,8
CHEMBL606259	5,7	5,9
CHEMBL606964	5,5	6,3
CHEMBL607196	5,1	5,7
CHEMBL607544	5,7	6,1
CHEMBL607867	6,0	5,8
CHEMBL608265	5,8	5,5
CHEMBL608533	6,6	6,3
CHEMBL608995	6,0	6,4
CHEMBL610461	6,5	6,1
CHEMBL611012	6,0	6,0
CHEMBL61102	6,4	6,7
CHEMBL611083	5,7	5,8
CHEMBL611501	5,0	5,3
CHEMBL61704	7,1	6,4
CHEMBL61705	7,7	7,6
CHEMBL61790	5,8	5,8
CHEMBL6291	6,1	5,8
CHEMBL63174	6,1	6,2
CHEMBL63243	5,0	5,5
CHEMBL64758	5,7	5,8
CHEMBL65633	6,0	6,7
CHEMBL67	8,2	6,8
CHEMBL6966	7,7	6,6
CHEMBL70257	8,3	8,6
CHEMBL70320	8,2	8,4
CHEMBL7063	7,3	6,5
CHEMBL70713	5,7	5,9
CHEMBL72069	5,9	5,8
CHEMBL72077	5,8	5,8
CHEMBL72184	7,8	7,8
CHEMBL72661	5,6	6,0
CHEMBL72754	5,9	5,8
CHEMBL72846	8,2	8,5
CHEMBL73080	5,3	5,9
CHEMBL73343	5,8	5,7
CHEMBL73413	5,5	6,0
CHEMBL73485	5,8	5,7
CHEMBL73742	5,9	5,8
CHEMBL7375	8,0	5,7
CHEMBL73751	5,8	5,6
CHEMBL73772	5,5	5,9
CHEMBL73781	5,8	5,9
CHEMBL73794	5,9	5,8
CHEMBL74289	6,0	5,5
CHEMBL74590	5,6	6,0
CHEMBL74637	6,8	6,0
CHEMBL74883	5,7	5,9
CHEMBL75610	5,4	6,0
CHEMBL75952	5,6	6,0
CHEMBL75953	5,2	5,8

Código	Exp	Prev
CHEMBL76326	6,8	6,0
CHEMBL76337	6,1	6,4
CHEMBL76464	6,3	5,6
CHEMBL77700	5,6	5,8
CHEMBL78056	5,1	6,0
CHEMBL78126	6,5	6,7
CHEMBL81131	6,5	7,6
CHEMBL81277	6,4	6,4
CHEMBL82612	6,4	7,1
CHEMBL82975	5,3	5,8
CHEMBL846	11,0	7,3
CHEMBL84903	7,8	6,3
CHEMBL85065	7,7	6,5
CHEMBL87982	6,3	7,1
CHEMBL88409	6,5	6,1
CHEMBL89333	5,8	6,0
CHEMBL89439	5,2	6,1
CHEMBL89464	5,1	6,1
CHEMBL89935	9,0	8,7
CHEMBL90362	8,6	8,8
CHEMBL90555	8,2	7,5
CHEMBL91382	6,9	5,9
CHEMBL92	7,3	8,3
CHEMBL92495	5,9	5,9
CHEMBL92509	8,8	8,8
CHEMBL93066	8,5	8,7
CHEMBL93100	8,2	8,5
CHEMBL93305	8,5	8,7
CHEMBL93415	8,8	8,9
CHEMBL93483	8,3	8,5
CHEMBL93858	8,4	8,3
CHEMBL93905	6,4	8,4
CHEMBL93939	9,0	8,7
CHEMBL9470	6,6	5,9
CHEMBL95213	5,2	5,6
CHEMBL95313	5,3	5,9
CHEMBL95604	6,0	6,1
CHEMBL96926	9,0	6,6
CHEMBL97003	5,3	5,8
CHEMBL97231	5,2	5,8
CHEMBL97629	6,0	6,1
CHEMBL98	6,5	5,8
CHEMBL98669	6,7	6,0
CHEMBL98724	5,4	6,2
CHEMBL99	7,4	5,8
CHEMBL99456	6,2	5,5
PESQUISA4	5,2	5,9
PESQUISA5	5,0	5,4
PESQUISA11	5,5	6,1
PESQUISA13	5,2	6,8
PESQUISA19	5,0	5,5
PESQUISA22	5,2	5,6
PESQUISA23	5,2	5,4
PESQUISA44	5,1	5,1
PESQUISA45	5,1	5,1
PESQUISA51	5,2	5,1
PESQUISA54	5,0	5,3
PESQUISA59	5,1	5,6
PESQUISA65	5,5	5,5
PESQUISA66	5,5	5,7
PESQUISA73	5,2	5,9
PESQUISA80	5,6	6,1
PESQUISA82	6,1	5,9

Código	Exp	Prev
PESQUISA89	5,5	6,0
PESQUISA91	7,0	6,3
PESQUISA131	8,0	7,4
PESQUISA133	7,2	7,2
PESQUISA134	7,2	7,2
PESQUISA138	7,0	7,3
PESQUISA143	8,0	7,4
PESQUISA144	7,3	7,7
PESQUISA146	7,6	7,4
PESQUISA148	7,7	7,3
PESQUISA175	6,0	6,1
PESQUISA176	6,1	6,1
PESQUISA178	5,9	5,9
PESQUISA179	6,0	5,9
PESQUISA180	6,1	6,0
PESQUISA183	5,9	6,0
PESQUISA185	6,2	6,0
PESQUISA193	6,1	5,9
PESQUISA208	5,2	5,8
PESQUISA209	5,1	5,4
PESQUISA210	5,5	5,3
PESQUISA223	5,1	5,8
PESQUISA225	5,1	6,1
PESQUISA227	5,1	5,9
PESQUISA228	7,7	5,7
PESQUISA241	6,3	6,4
PESQUISA255	7,3	7,2
PESQUISA258	6,1	6,2
PESQUISA259	5,3	6,2
PESQUISA261	5,5	5,8
PESQUISA263	5,4	5,9
PESQUISA264	6,0	5,8
PESQUISA266	6,5	6,2
PESQUISA267	6,8	6,2
PESQUISA268	5,5	6,1
PESQUISA269	6,2	6,7
PESQUISA271	7,4	6,2
PESQUISA273	5,9	6,9
PESQUISA275	6,3	5,8
PESQUISA276	6,1	5,8
PESQUISA280	5,5	5,9
PESQUISA281	5,3	5,8
PESQUISA282	5,9	5,5
PESQUISA284	5,2	6,0
PESQUISA285	5,0	6,0
PESQUISA289	7,4	6,9
PESQUISA291	5,3	5,5
PESQUISA293	5,3	5,7
PESQUISA303	5,0	5,9
PESQUISA306	5,7	6,3
PESQUISA309	6,1	6,1
PESQUISA312	5,7	6,2
PESQUISA313	6,0	6,7
PESQUISA325	5,9	6,0
PESQUISA326	6,2	6,1
PESQUISA327	5,3	6,2
PESQUISA328	6,3	5,9
PESQUISA338	5,0	5,8
PESQUISA339	5,2	6,3
PESQUISA340	5,5	6,1
PESQUISA343	5,5	5,6
PESQUISA344	5,6	5,5
PESQUISA346	5,8	5,4

Código	Exp	Prev
PESQUISA348	5,3	5,5
PESQUISA349	5,3	5,6
PESQUISA352	5,2	5,5
PESQUISA355	5,8	5,9
PESQUISA360	5,7	6,2
PESQUISA361	5,7	5,8
PESQUISA364	8,7	6,6
PESQUISA368	5,8	5,4
PESQUISA369	5,1	5,6
PESQUISA371	5,6	5,5
PESQUISA416	5,0	5,8
PESQUISA443	6,9	5,9
PESQUISA444	5,8	5,7
PESQUISA445	5,7	5,6
PESQUISA446	5,6	5,7
PESQUISA450	5,4	5,8
PESQUISA451	5,6	6,1

Código	Exp	Prev
PESQUISA452	5,8	5,6
PESQUISA454	5,4	5,8
PESQUISA455	5,5	6,0
PESQUISA469	5,1	5,5
PESQUISA470	5,5	6,1
PESQUISA474	5,4	5,5
PESQUISA489	5,5	5,5
PESQUISA504	5,1	5,8
PESQUISA508	5,3	6,0
PESQUISA521	5,2	5,6
PESQUISA523	5,2	5,8
PESQUISA524	5,1	5,6
PESQUISA539	5,3	5,7
PESQUISA542	5,3	5,4
PESQUISA544	5,6	6,7
PESQUISA545	6,2	6,3
PESQUISA547	5,2	5,6

Código	Exp	Prev
PESQUISA561	5,3	5,5
PESQUISA571	5,3	5,4
PESQUISA572	5,5	5,4
PESQUISA575	5,6	5,6
PESQUISA576	5,4	5,5
PESQUISA578	5,4	6,0
PESQUISA585	6,5	6,1
PESQUISA587	5,4	6,5
PESQUISA593	5,2	5,6
PESQUISA601	5,6	5,3
PESQUISA602	5,4	5,3
PESQUISA604	5,1	5,4
PESQUISA605	5,2	5,4
PESQUISA614	5,9	5,8
PESQUISA615	5,7	5,8

**ANEXO 7.4 – Previsões para o conjunto de teste do Modelo A – regressão, obtido com
a *random Forest* utilizando os *fingerprints* PubChem**

conjunto teste		pIC ₅₀		Código	Exp	Prev	Código	Exp	Prev
Código	Exp	Prev	Exp						
ANTIMARIN30749	5,3	6,0	CHEMBL1173055	5,1	6,2	CHEMBL141236	7,5	7,1	
ANTIMARIN50932	6,1	6,2	CHEMBL118027	6,1	6,9	CHEMBL141299	8,9	8,8	
CHEMBL101429	8,2	7,7	CHEMBL1208964	8,0	7,1	CHEMBL141502	7,5	7,5	
CHEMBL101859	8,8	7,7	CHEMBL1208966	8,2	7,1	CHEMBL143047	6,3	6,2	
CHEMBL103674	5,5	6,0	CHEMBL1209016	7,8	7,3	CHEMBL147506	6,1	6,2	
CHEMBL104526	6,2	5,9	CHEMBL1209017	7,8	7,3	CHEMBL148669	6,9	7,2	
CHEMBL106112	6,3	6,0	CHEMBL1209018	7,8	7,3	CHEMBL149444	6,0	5,9	
CHEMBL1076252	9,3	5,7	CHEMBL1209603	6,0	6,2	CHEMBL151313	6,7	6,3	
CHEMBL107653	6,5	6,2	CHEMBL1209604	5,7	6,2	CHEMBL151546	6,9	6,8	
CHEMBL1077054	5,2	5,5	CHEMBL1209842	7,7	7,3	CHEMBL1610049	5,2	5,7	
CHEMBL1077227	8,3	7,6	CHEMBL1214678	7,5	7,2	CHEMBL1615278	7,9	7,4	
CHEMBL1077303	5,1	6,3	CHEMBL1214747	7,3	6,9	CHEMBL1619	5,0	6,2	
CHEMBL1077337	5,8	6,3	CHEMBL1214749	7,2	7,0	CHEMBL1621541	5,1	6,0	
CHEMBL107801	7,2	7,5	CHEMBL1215346	5,4	5,8	CHEMBL1622311	5,2	5,8	
CHEMBL1078691	7,5	7,2	CHEMBL1215612	7,1	7,1	CHEMBL1630876	5,4	5,6	
CHEMBL1078873	5,2	6,4	CHEMBL1215614	7,6	7,1	CHEMBL1630877	5,6	5,6	
CHEMBL1080230	5,2	6,9	CHEMBL1215675	6,7	7,2	CHEMBL1630880	5,5	5,6	
CHEMBL1084676	7,0	7,6	CHEMBL1215678	7,7	6,6	CHEMBL1631245	5,0	5,8	
CHEMBL1084677	7,9	7,9	CHEMBL1231550	5,7	6,1	CHEMBL1631913	6,3	6,2	
CHEMBL1085692	7,8	7,7	CHEMBL1231795	6,7	6,0	CHEMBL1641649	5,0	5,3	
CHEMBL1089051	5,7	6,3	CHEMBL1241201	5,7	5,9	CHEMBL1641651	5,1	5,3	
CHEMBL1089056	6,6	6,3	CHEMBL1241205	5,7	5,6	CHEMBL1643030	5,6	5,8	
CHEMBL1089057	6,6	6,6	CHEMBL1241224	5,1	5,6	CHEMBL1643032	5,5	5,8	
CHEMBL1089058	5,5	6,5	CHEMBL1241228	5,5	5,6	CHEMBL1643034	5,9	5,9	
CHEMBL1089301	6,3	7,3	CHEMBL1241230	5,2	5,5	CHEMBL1643037	5,9	6,3	
CHEMBL1089344	8,5	7,9	CHEMBL1241845	5,1	6,0	CHEMBL1643039	6,4	6,4	
CHEMBL1089822	5,5	5,4	CHEMBL1242958	7,4	6,7	CHEMBL1643055	6,2	6,0	
CHEMBL1090332	5,2	5,2	CHEMBL124374	8,8	8,3	CHEMBL1643058	6,0	5,9	
CHEMBL1090336	5,3	5,5	CHEMBL1253267	5,4	5,6	CHEMBL1643766	6,0	8,0	
CHEMBL1090339	5,5	5,4	CHEMBL1253285	7,1	5,5	CHEMBL1643812	6,4	5,8	
CHEMBL1093033	9,1	7,8	CHEMBL1253529	5,7	5,6	CHEMBL1643814	6,4	5,9	
CHEMBL1093052	8,0	7,4	CHEMBL1254164	5,9	5,8	CHEMBL1643816	5,6	5,9	
CHEMBL1094040	7,6	7,0	CHEMBL1254236	5,1	5,5	CHEMBL1643821	6,6	6,4	
CHEMBL1096222	6,4	7,3	CHEMBL1254237	5,7	5,8	CHEMBL1643824	6,5	6,3	
CHEMBL1096223	6,1	7,3	CHEMBL1254323	6,0	5,9	CHEMBL1651416	8,2	8,0	
CHEMBL1096224	8,1	8,4	CHEMBL1254477	5,4	5,6	CHEMBL1651425	8,2	7,7	
CHEMBL1096226	8,7	8,5	CHEMBL1254557	5,2	6,1	CHEMBL1651464	6,9	7,7	
CHEMBL1096228	9,0	8,5	CHEMBL1254574	5,1	6,1	CHEMBL1651467	7,9	7,8	
CHEMBL1096230	8,3	8,5	CHEMBL1257884	7,0	7,2	CHEMBL1651469	6,2	5,7	
CHEMBL1097764	5,2	5,4	CHEMBL1257911	6,0	6,0	CHEMBL1651471	5,6	5,9	
CHEMBL1098259	6,3	6,8	CHEMBL1257912	6,3	6,1	CHEMBL1651472	7,2	6,2	
CHEMBL109838	6,2	6,3	CHEMBL1258114	6,1	6,5	CHEMBL1651477	5,8	6,1	
CHEMBL112415	6,5	6,1	CHEMBL1258229	5,9	7,2	CHEMBL1651479	6,2	5,8	
CHEMBL114464	8,1	7,5	CHEMBL1269229	6,2	7,1	CHEMBL1651480	5,4	6,0	
CHEMBL115220	7,1	6,0	CHEMBL1269527	5,3	5,5	CHEMBL1651488	5,3	5,9	
CHEMBL1161972	5,5	6,0	CHEMBL1269537	5,3	5,5	CHEMBL167416	9,7	8,7	
CHEMBL1162137	5,4	5,7	CHEMBL1275625	7,2	6,3	CHEMBL1684604	5,2	5,6	
CHEMBL1162139	5,9	5,7	CHEMBL1277315	5,6	5,4	CHEMBL1684606	5,9	6,1	
CHEMBL1163807	5,5	6,0	CHEMBL1277425	5,2	6,2	CHEMBL1684607	6,3	5,6	
CHEMBL1163887	5,6	5,5	CHEMBL1277739	5,2	5,6	CHEMBL1684614	6,0	5,6	
CHEMBL1164063	6,2	5,9	CHEMBL1277827	5,5	5,5	CHEMBL1688183	7,4	6,9	
CHEMBL1164440	5,3	5,8	CHEMBL139836	7,0	7,4	CHEMBL1688190	6,4	6,0	
CHEMBL1165774	5,2	6,0	CHEMBL140013	7,5	6,9	CHEMBL1689416	5,2	5,3	
CHEMBL1171837	6,7	6,1	CHEMBL141087	7,4	6,9	CHEMBL1688192	6,2	6,1	
CHEMBL116934	7,5	7,3	CHEMBL140088	7,7	7,9	CHEMBL1688193	6,7	6,1	
			CHEMBL140505	6,8	6,5	CHEMBL1689412	5,2	5,3	

Código	Exp	Prev
CHEMBL1689418	5,2	5,3
CHEMBL1689422	5,2	5,4
CHEMBL17362	5,0	5,3
CHEMBL1738867	6,4	7,1
CHEMBL175749	5,7	5,9
CHEMBL1760603	6,8	7,3
CHEMBL1760910	5,5	5,8
CHEMBL1760915	6,5	5,9
CHEMBL176181	5,5	6,7
CHEMBL1762233	6,5	5,9
CHEMBL1766690	5,2	5,5
CHEMBL1770237	5,1	5,8
CHEMBL1770238	5,3	5,4
CHEMBL1770241	5,3	5,5
CHEMBL1771376	8,5	6,6
CHEMBL1775028	5,6	5,4
CHEMBL1775215	6,8	6,3
CHEMBL177916	7,5	7,3
CHEMBL1779243	5,1	5,6
CHEMBL1782761	6,9	7,0
CHEMBL1782768	6,5	7,1
CHEMBL1784244	5,5	5,7
CHEMBL179080	7,5	7,3
CHEMBL1794070	8,0	7,5
CHEMBL1795732	6,2	6,0
CHEMBL1795737	6,2	5,7
CHEMBL1795832	5,0	5,5
CHEMBL1795834	5,7	5,4
CHEMBL1795958	5,2	5,4
CHEMBL1795960	5,1	5,5
CHEMBL1795962	5,5	5,4
CHEMBL1795964	5,2	5,5
CHEMBL1795968	5,6	5,7
CHEMBL179716	5,4	5,6
CHEMBL180114	5,4	5,6
CHEMBL1801204	5,8	5,8
CHEMBL180140	6,0	5,5
CHEMBL1806511	7,3	7,4
CHEMBL1807791	7,6	7,5
CHEMBL1807793	7,6	7,5
CHEMBL1807799	6,7	7,4
CHEMBL1807801	7,4	7,3
CHEMBL1807802	7,3	7,3
CHEMBL1807804	7,2	7,4
CHEMBL1807809	7,6	7,4
CHEMBL1807811	7,3	7,4
CHEMBL1808272	5,8	6,1
CHEMBL1808378	5,2	6,0
CHEMBL1808627	5,5	5,9
CHEMBL1808630	5,5	5,9
CHEMBL1808636	5,8	5,9
CHEMBL1808638	5,6	5,8
CHEMBL1808641	5,9	6,0
CHEMBL1808646	5,7	6,0
CHEMBL1808813	6,4	6,6
CHEMBL1808809	6,7	6,4
CHEMBL1808810	6,6	6,6
CHEMBL1808812	6,6	6,6

Código	Exp	Prev
CHEMBL1808815	6,5	6,7
CHEMBL1808822	10,3	9,9
CHEMBL1808824	10,2	9,9
CHEMBL1808829	10,3	9,3
CHEMBL1808831	8,6	9,4
CHEMBL181009	5,3	5,2
CHEMBL1814768	8,0	6,8
CHEMBL1814770	6,7	6,7
CHEMBL1818653	5,4	5,3
CHEMBL1819139	6,1	7,2
CHEMBL1819142	5,9	7,2
CHEMBL1819259	6,5	6,6
CHEMBL1819261	8,4	7,4
CHEMBL1819263	6,8	7,0
CHEMBL1819267	8,5	7,4
CHEMBL1819270	8,3	7,8
CHEMBL1819272	8,5	7,5
CHEMBL1819428	5,0	6,0
CHEMBL1822488	6,3	7,8
CHEMBL1822491	6,4	6,5
CHEMBL1822494	6,4	6,6
CHEMBL1822642	7,6	7,1
CHEMBL1822646	5,3	6,8
CHEMBL1822647	8,4	8,1
CHEMBL1822649	8,0	8,2
CHEMBL1822651	7,6	8,1
CHEMBL1822656	8,4	8,1
CHEMBL1822657	8,2	8,1
CHEMBL1822660	8,2	8,2
CHEMBL1825091	7,1	6,9
CHEMBL1829305	7,3	6,7
CHEMBL1830416	6,0	6,4
CHEMBL1830538	6,0	6,3
CHEMBL1830539	6,4	6,3
CHEMBL1830541	6,5	6,3
CHEMBL1830680	5,2	5,5
CHEMBL183200	7,0	6,0
CHEMBL1834207	6,1	6,0
CHEMBL1834355	8,3	7,2
CHEMBL1834466	7,2	6,9
CHEMBL1834474	6,7	6,8
CHEMBL1834476	6,5	6,6
CHEMBL1834480	6,9	6,9
CHEMBL1834481	6,6	6,8
CHEMBL1836819	7,4	7,6
CHEMBL1836820	7,4	7,6
CHEMBL1836826	7,3	7,5
CHEMBL185043	9,1	7,4
CHEMBL185781	6,9	6,9
CHEMBL186253	7,4	7,0
CHEMBL186356	6,4	5,6
CHEMBL187395	6,6	6,4
CHEMBL187460	5,3	5,6
CHEMBL187738	10,2	7,3
CHEMBL189214	6,9	7,2
CHEMBL188103	9,1	7,5
CHEMBL188151	5,7	6,2
CHEMBL188918	7,5	6,2

Código	Exp	Prev
CHEMBL190096	6,1	6,3
CHEMBL190200	5,9	6,4
CHEMBL190643	5,7	6,6
CHEMBL191003	6,6	5,8
CHEMBL1910258	5,0	5,5
CHEMBL1911254	5,3	6,5
CHEMBL1911260	7,2	6,7
CHEMBL1911261	7,2	6,5
CHEMBL1911264	6,3	6,3
CHEMBL191402	5,7	5,9
CHEMBL1914686	5,6	5,4
CHEMBL1914911	5,1	5,7
CHEMBL1915828	6,9	6,8
CHEMBL1915831	7,6	6,7
CHEMBL1915833	7,8	6,5
CHEMBL1915834	8,9	6,5
CHEMBL1915855	6,7	6,7
CHEMBL1916058	7,1	6,3
CHEMBL1916066	7,3	6,8
CHEMBL1927074	7,4	7,0
CHEMBL1927076	6,9	6,9
CHEMBL1927080	7,7	6,8
CHEMBL1927617	5,1	6,0
CHEMBL1927619	6,5	6,1
CHEMBL192928	5,7	5,9
CHEMBL1929468	5,2	5,3
CHEMBL193067	5,3	5,6
CHEMBL1933441	5,0	5,5
CHEMBL1933449	5,2	5,9
CHEMBL1938442	6,5	5,9
CHEMBL1938447	5,6	6,0
CHEMBL1939316	5,4	5,8
CHEMBL1939375	5,6	5,9
CHEMBL1939381	6,6	6,4
CHEMBL1939409	5,5	5,6
CHEMBL1944937	5,4	5,2
CHEMBL1944939	5,2	5,3
CHEMBL1945051	6,3	6,4
CHEMBL1945121	5,3	5,4
CHEMBL1945123	5,2	5,4
CHEMBL1945124	5,3	5,4
CHEMBL1947162	6,9	6,4
CHEMBL1951577	8,1	7,9
CHEMBL1951586	6,7	7,6
CHEMBL1956694	5,1	5,3
CHEMBL1956703	5,3	5,6
CHEMBL1956705	5,0	5,4
CHEMBL1956708	5,0	5,5
CHEMBL1958209	5,7	5,7
CHEMBL1958214	5,7	5,8
CHEMBL1958215	6,2	5,8
CHEMBL1964261	7,5	7,3
CHEMBL2010947	5,3	5,7
CHEMBL2012308	6,0	6,6
CHEMBL2012401	7,0	6,7
CHEMBL2012341	5,1	5,7
CHEMBL2012397	6,6	6,6
CHEMBL2012399	6,9	6,6

Código	Exp	Prev
CHEMBL2012404	6,8	7,4
CHEMBL2012405	6,8	7,3
CHEMBL2012408	7,3	7,4
CHEMBL2018037	7,0	6,1
CHEMBL2018611	5,5	5,7
CHEMBL2018615	5,9	5,7
CHEMBL2018618	5,6	5,7
CHEMBL2018619	5,9	5,7
CHEMBL2018623	6,0	5,7
CHEMBL2018735	5,7	5,7
CHEMBL2018736	5,2	5,6
CHEMBL2018977	5,1	5,6
CHEMBL2029903	7,2	7,3
CHEMBL2029908	7,2	7,2
CHEMBL2030971	5,5	5,5
CHEMBL2030974	6,2	6,0
CHEMBL2030977	5,3	5,4
CHEMBL2030980	5,4	5,6
CHEMBL2030988	6,4	5,9
CHEMBL2030989	5,7	5,8
CHEMBL2030991	5,4	5,6
CHEMBL2030993	6,4	6,0
CHEMBL2035262	5,5	5,4
CHEMBL2035263	6,7	5,5
CHEMBL2035916	5,4	5,5
CHEMBL2037137	6,0	6,2
CHEMBL2037140	5,8	6,1
CHEMBL2041257	6,2	5,4
CHEMBL2041933	5,8	6,0
CHEMBL2042166	5,2	5,9
CHEMBL2043195	5,0	5,3
CHEMBL2043197	5,2	5,3
CHEMBL204456	5,2	5,5
CHEMBL2047610	5,8	5,7
CHEMBL2047612	5,7	5,7
CHEMBL2047614	5,1	5,3
CHEMBL2047616	5,0	5,5
CHEMBL2047619	6,2	5,9
CHEMBL2047948	6,1	6,5
CHEMBL2047957	6,3	6,7
CHEMBL2047968	7,7	7,4
CHEMBL2047969	7,2	7,4
CHEMBL2047972	7,4	7,4
CHEMBL204939	5,1	5,4
CHEMBL205381	5,1	5,3
CHEMBL205786	6,6	6,3
CHEMBL2058010	5,7	6,0
CHEMBL2058015	6,7	6,2
CHEMBL2058017	6,0	6,3
CHEMBL2058023	6,2	6,6
CHEMBL2058028	5,1	5,5
CHEMBL2062575	5,9	6,5
CHEMBL2062576	6,1	6,4
CHEMBL2062578	6,1	6,6
CHEMBL206693	5,3	5,3
CHEMBL2062580	7,6	6,7
CHEMBL2063317	5,8	6,6
CHEMBL2063484	6,1	5,9

Código	Exp	Prev
CHEMBL2070547	5,1	5,8
CHEMBL2071077	5,2	5,7
CHEMBL2071079	5,5	5,7
CHEMBL2071086	6,4	5,9
CHEMBL208488	5,3	5,5
CHEMBL2088661	5,4	5,6
CHEMBL2088662	5,7	5,6
CHEMBL2088665	5,7	5,5
CHEMBL2088666	5,3	5,5
CHEMBL2088668	5,3	5,6
CHEMBL2088669	5,2	5,5
CHEMBL2088670	5,7	5,5
CHEMBL2088674	5,4	5,6
CHEMBL211395	5,7	6,4
CHEMBL211430	5,4	5,7
CHEMBL213068	6,0	5,8
CHEMBL213713	6,7	6,5
CHEMBL214211	5,3	6,0
CHEMBL2151389	5,5	5,3
CHEMBL2151390	5,7	5,3
CHEMBL2151396	5,0	5,6
CHEMBL2151405	5,8	5,8
CHEMBL2152978	5,6	5,4
CHEMBL2152982	5,1	5,2
CHEMBL2152983	5,2	5,2
CHEMBL2152987	5,0	5,3
CHEMBL2152991	5,2	5,4
CHEMBL2152996	5,6	5,9
CHEMBL2152997	5,2	5,9
CHEMBL2153123	5,6	5,7
CHEMBL2153124	5,5	5,9
CHEMBL2153126	5,8	5,8
CHEMBL2153127	5,7	5,8
CHEMBL2153132	5,1	6,3
CHEMBL2153136	5,8	6,0
CHEMBL2153141	5,5	5,5
CHEMBL2153142	5,0	5,5
CHEMBL2153153	5,9	6,2
CHEMBL2153154	6,3	6,1
CHEMBL2153844	7,7	5,8
CHEMBL2159579	5,1	5,7
CHEMBL2160091	6,2	5,4
CHEMBL2160092	6,0	5,4
CHEMBL2160093	5,7	5,5
CHEMBL2160094	5,9	5,5
CHEMBL216126	5,8	5,9
CHEMBL2163391	7,0	7,8
CHEMBL2163394	8,6	7,5
CHEMBL2163395	8,9	7,5
CHEMBL2163399	7,7	7,8
CHEMBL2163403	8,7	8,2
CHEMBL2163404	8,9	8,5
CHEMBL2163405	6,6	7,3
CHEMBL2163409	7,7	7,8
CHEMBL2170467	6,2	6,1
CHEMBL2170458	5,6	6,0
CHEMBL2170459	7,0	5,9
CHEMBL2170462	6,1	6,0

Código	Exp	Prev
CHEMBL2170468	5,9	6,2
CHEMBL2170471	6,2	6,3
CHEMBL2170475	6,1	6,0
CHEMBL2170477	6,7	6,1
CHEMBL2170480	6,7	6,4
CHEMBL2170482	6,6	6,2
CHEMBL2170484	7,7	6,4
CHEMBL2170489	6,6	6,1
CHEMBL2170493	5,9	6,1
CHEMBL2171681	7,1	7,4
CHEMBL2171689	6,0	6,9
CHEMBL2171838	6,8	7,1
CHEMBL2171842	5,8	6,7
CHEMBL2172067	6,0	6,2
CHEMBL2172069	7,9	6,4
CHEMBL2172072	7,9	6,2
CHEMBL2172073	7,9	6,6
CHEMBL2172084	7,1	7,4
CHEMBL2172085	7,6	7,5
CHEMBL2172110	6,8	7,4
CHEMBL2172111	6,7	7,1
CHEMBL2172116	6,3	6,8
CHEMBL2172117	7,4	6,6
CHEMBL2172224	7,5	6,7
CHEMBL217354	7,3	6,1
CHEMBL217651	6,2	6,1
CHEMBL2178411	5,4	5,9
CHEMBL2178560	5,4	5,9
CHEMBL2179335	8,7	8,5
CHEMBL2179714	8,1	8,0
CHEMBL2179715	8,3	7,9
CHEMBL2179716	7,7	7,5
CHEMBL2179920	6,1	6,4
CHEMBL2179924	7,1	6,9
CHEMBL2179925	7,1	7,1
CHEMBL2179926	6,7	7,0
CHEMBL2179933	7,3	7,6
CHEMBL2179934	7,1	7,2
CHEMBL2179936	6,2	6,7
CHEMBL2180558	5,1	6,4
CHEMBL2180586	5,4	6,2
CHEMBL2204309	6,6	6,4
CHEMBL2204310	7,4	6,8
CHEMBL2204311	9,1	7,9
CHEMBL220951	6,4	6,7
CHEMBL220988	5,9	6,4
CHEMBL222828	5,4	5,7
CHEMBL223210	7,5	6,8
CHEMBL223622	6,4	6,5
CHEMBL2236365	5,4	5,7
CHEMBL223892	7,4	6,7
CHEMBL225249	5,0	5,5
CHEMBL2262788	5,5	5,6
CHEMBL2262789	5,6	5,7
CHEMBL2297935	5,3	6,0
CHEMBL2262795	5,7	5,6
CHEMBL2262796	5,2	5,2
CHEMBL226607	5,2	5,4

Código	Exp	Prev
CHEMBL2297936	5,5	6,0
CHEMBL2297938	6,1	6,1
CHEMBL2297949	6,3	6,2
CHEMBL230462	5,3	6,3
CHEMBL230886	6,1	6,1
CHEMBL230987	5,8	5,9
CHEMBL2311780	6,2	7,2
CHEMBL2311788	6,2	6,6
CHEMBL2311789	7,2	6,8
CHEMBL2312140	8,3	6,1
CHEMBL2312457	6,7	6,6
CHEMBL2312465	7,1	6,6
CHEMBL2313485	6,8	6,3
CHEMBL2313790	7,8	6,5
CHEMBL2313792	7,2	6,6
CHEMBL2313819	7,1	6,4
CHEMBL2313820	7,2	6,5
CHEMBL2314525	6,3	7,2
CHEMBL2314527	6,2	6,6
CHEMBL2314528	6,2	6,6
CHEMBL2314531	7,1	7,0
CHEMBL2314534	9,1	8,0
CHEMBL2314535	8,6	8,0
CHEMBL2314537	9,1	8,0
CHEMBL2314538	8,3	8,0
CHEMBL2314543	8,4	8,7
CHEMBL2314549	9,1	8,4
CHEMBL2314553	8,3	8,1
CHEMBL2314556	7,4	8,3
CHEMBL2314557	7,2	8,4
CHEMBL2314562	8,1	8,0
CHEMBL2314564	7,2	6,6
CHEMBL2323950	6,2	5,9
CHEMBL2323953	5,7	6,0
CHEMBL2323956	5,7	5,7
CHEMBL2324792	5,7	6,3
CHEMBL2324799	7,7	6,8
CHEMBL2324803	6,3	6,5
CHEMBL2324807	6,7	7,2
CHEMBL2324811	5,6	7,0
CHEMBL2324814	7,4	6,5
CHEMBL232589	5,6	5,3
CHEMBL233051	5,7	6,1
CHEMBL2331640	5,4	5,5
CHEMBL2331879	5,1	5,5
CHEMBL2331911	6,0	5,9
CHEMBL2331912	5,8	5,9
CHEMBL233213	5,4	6,3
CHEMBL233380	6,6	6,0
CHEMBL2334411	5,0	5,5
CHEMBL2336045	5,2	5,6
CHEMBL2337347	7,2	6,7
CHEMBL2337350	6,6	6,7
CHEMBL2337355	6,7	6,6
CHEMBL2347576	5,7	5,5
CHEMBL2337357	7,0	6,6
CHEMBL2337877	6,0	5,9
CHEMBL234245	7,5	7,7

Código	Exp	Prev
CHEMBL2347589	7,2	6,7
CHEMBL2349193	5,6	5,8
CHEMBL236694	5,3	5,8
CHEMBL2375478	5,3	5,4
CHEMBL2375840	7,0	5,9
CHEMBL2376660	5,3	6,2
CHEMBL2376661	6,5	6,0
CHEMBL2376668	5,5	5,7
CHEMBL2376674	5,7	6,1
CHEMBL2376680	5,5	6,1
CHEMBL2377285	5,0	5,4
CHEMBL2380361	5,6	5,6
CHEMBL2380362	5,1	6,2
CHEMBL2381872	5,3	5,2
CHEMBL2381874	5,3	5,3
CHEMBL238568	6,5	6,0
CHEMBL238569	5,7	5,9
CHEMBL2385955	5,9	6,0
CHEMBL2385958	5,6	6,1
CHEMBL2386344	5,9	6,1
CHEMBL2386346	6,3	6,3
CHEMBL2386347	6,0	6,3
CHEMBL2387101	5,3	5,3
CHEMBL2387105	5,3	5,3
CHEMBL238842	5,6	5,3
CHEMBL2390998	6,1	5,9
CHEMBL2391001	6,3	6,2
CHEMBL2391006	6,0	6,1
CHEMBL2391208	7,7	7,1
CHEMBL2391213	6,4	7,2
CHEMBL2391459	5,5	5,5
CHEMBL2391471	5,5	5,3
CHEMBL2391729	5,4	6,3
CHEMBL2391766	5,5	5,8
CHEMBL2391768	5,6	5,5
CHEMBL239268	5,5	5,2
CHEMBL2396878	5,2	5,4
CHEMBL2396880	6,5	6,3
CHEMBL2396881	5,4	6,4
CHEMBL239884	5,5	5,3
CHEMBL2402730	6,4	6,8
CHEMBL2402735	6,9	6,9
CHEMBL2402950	6,1	5,9
CHEMBL2402992	8,3	7,2
CHEMBL2403086	6,2	6,3
CHEMBL2403101	6,2	5,8
CHEMBL2403471	6,1	5,9
CHEMBL2403472	6,5	5,6
CHEMBL2403474	6,5	5,6
CHEMBL240747	5,2	6,5
CHEMBL2407563	7,2	6,2
CHEMBL2407571	6,5	7,0
CHEMBL2407576	6,6	6,0
CHEMBL2408692	6,3	5,8
CHEMBL2409183	8,5	6,3
CHEMBL2408693	6,0	5,7
CHEMBL2408695	6,0	5,8
CHEMBL240915	6,2	6,2

Código	Exp	Prev
CHEMBL2409184	8,0	6,4
CHEMBL2413416	5,7	5,8
CHEMBL2414906	5,0	5,5
CHEMBL2414955	6,3	6,0
CHEMBL241550	6,0	6,2
CHEMBL241799	5,5	5,5
CHEMBL2419257	5,3	5,5
CHEMBL2419841	5,3	5,6
CHEMBL2420695	8,4	7,8
CHEMBL242556	5,8	5,8
CHEMBL2425562	5,7	5,7
CHEMBL242772	6,5	6,1
CHEMBL242815	7,2	7,7
CHEMBL2430833	5,3	5,4
CHEMBL2435074	5,2	5,6
CHEMBL2435142	5,2	5,3
CHEMBL243669	6,5	6,2
CHEMBL244142	5,1	5,9
CHEMBL2441607	9,3	8,2
CHEMBL2441612	9,1	8,6
CHEMBL2442692	5,3	5,4
CHEMBL2442698	5,9	5,5
CHEMBL2442795	5,2	5,4
CHEMBL2442798	5,2	5,4
CHEMBL2442799	5,1	5,9
CHEMBL2442813	5,1	5,4
CHEMBL2442816	5,6	5,2
CHEMBL244322	5,9	5,9
CHEMBL244727	5,3	5,6
CHEMBL244900	5,7	5,8
CHEMBL244970	9,0	7,9
CHEMBL245333	6,0	5,7
CHEMBL245574	5,5	6,3
CHEMBL246180	5,6	5,6
CHEMBL247382	5,6	6,4
CHEMBL248590	6,4	6,4
CHEMBL248787	6,4	6,3
CHEMBL250005	6,5	6,4
CHEMBL250096	5,3	6,1
CHEMBL251011	6,7	6,4
CHEMBL251145	6,3	6,4
CHEMBL251146	6,7	6,3
CHEMBL251206	5,3	5,6
CHEMBL251819	6,3	5,9
CHEMBL251974	5,2	5,6
CHEMBL253190	6,4	6,8
CHEMBL253291	5,2	6,1
CHEMBL253911	6,5	6,3
CHEMBL254309	6,7	6,2
CHEMBL254359	5,1	5,9
CHEMBL254979	6,5	6,2
CHEMBL255718	5,2	6,0
CHEMBL256115	6,7	6,4
CHEMBL256117	6,8	6,4
CHEMBL256558	5,8	6,1
CHEMBL256189	6,5	6,6
CHEMBL256279	7,7	6,8
CHEMBL256401	6,7	6,9

Código	Exp	Prev
CHEMBL258039	6,7	6,0
CHEMBL260216	6,3	5,5
CHEMBL260493	5,8	5,9
CHEMBL260559	6,2	6,3
CHEMBL260738	5,2	6,3
CHEMBL261735	6,5	6,2
CHEMBL264224	9,5	7,2
CHEMBL26518	5,2	5,6
CHEMBL268423	5,7	5,9
CHEMBL268507	6,2	6,1
CHEMBL270149	6,2	6,1
CHEMBL271020	6,6	6,6
CHEMBL271645	6,7	6,7
CHEMBL271848	6,6	6,7
CHEMBL271862	7,0	6,3
CHEMBL272006	5,1	5,4
CHEMBL27275	6,4	6,6
CHEMBL27556	6,2	5,6
CHEMBL27867	8,6	9,0
CHEMBL282006	7,6	6,4
CHEMBL282436	6,9	6,7
CHEMBL28280	5,0	5,6
CHEMBL28315	9,5	8,9
CHEMBL28377	5,6	5,9
CHEMBL285839	8,4	7,4
CHEMBL286750	7,3	7,6
CHEMBL286751	7,5	9,0
CHEMBL289601	8,4	6,2
CHEMBL291402	5,6	6,0
CHEMBL292021	5,3	6,0
CHEMBL298734	7,2	6,1
CHEMBL3039593	7,1	7,1
CHEMBL304081	8,3	8,2
CHEMBL304291	8,7	8,5
CHEMBL306748	6,1	6,0
CHEMBL306856	5,9	5,8
CHEMBL307152	6,0	6,2
CHEMBL307630	5,7	5,8
CHEMBL308252	5,7	5,9
CHEMBL308440	8,4	8,2
CHEMBL3085270	5,0	6,7
CHEMBL3086064	7,4	7,4
CHEMBL3086066	7,9	7,4
CHEMBL3086067	5,3	6,5
CHEMBL3086069	7,4	7,5
CHEMBL3086073	7,6	7,4
CHEMBL3086440	6,3	6,4
CHEMBL3086441	7,6	6,5
CHEMBL3092026	5,8	6,1
CHEMBL3092030	6,1	6,1
CHEMBL3092177	6,5	7,0
CHEMBL3092180	6,9	7,6
CHEMBL3092183	6,0	7,3
CHEMBL3092184	6,2	7,3
CHEMBL3093062	6,1	6,0
CHEMBL3092188	6,7	7,3
CHEMBL3092193	7,5	7,4
CHEMBL3092607	7,7	6,4

Código	Exp	Prev
CHEMBL3093073	6,9	6,5
CHEMBL3093078	6,9	6,4
CHEMBL3093510	5,1	5,8
CHEMBL3093545	5,6	5,7
CHEMBL3099243	5,4	5,4
CHEMBL3102874	5,1	6,1
CHEMBL3103331	7,9	7,3
CHEMBL3103346	7,7	7,2
CHEMBL3104250	6,2	6,2
CHEMBL3104273	6,5	6,6
CHEMBL3104276	6,9	6,4
CHEMBL3104278	6,9	6,8
CHEMBL3104285	7,1	6,7
CHEMBL3104287	6,5	6,6
CHEMBL3104807	5,3	5,4
CHEMBL3104844	5,5	5,6
CHEMBL3112595	5,1	5,8
CHEMBL3113289	5,2	5,1
CHEMBL3126080	6,0	5,7
CHEMBL3127379	5,3	5,5
CHEMBL3134163	5,1	5,4
CHEMBL3134164	5,0	5,4
CHEMBL3134518	7,6	8,6
CHEMBL3134526	8,2	8,2
CHEMBL3134528	9,0	8,7
CHEMBL3134531	9,5	7,9
CHEMBL3134534	9,3	7,9
CHEMBL3134536	7,6	7,8
CHEMBL3134537	6,9	7,2
CHEMBL3134543	8,0	8,1
CHEMBL3134547	8,7	8,1
CHEMBL3134548	6,8	8,2
CHEMBL3134551	8,2	8,1
CHEMBL3134552	7,5	8,1
CHEMBL3134557	8,0	7,7
CHEMBL3134562	5,7	8,1
CHEMBL3134563	7,6	8,2
CHEMBL3134565	7,3	6,7
CHEMBL3134566	7,4	6,7
CHEMBL3134581	5,8	5,9
CHEMBL315115	8,7	8,5
CHEMBL32083	5,7	5,8
CHEMBL3215861	6,3	6,3
CHEMBL3218077	8,1	7,8
CHEMBL3218080	8,8	8,5
CHEMBL3218088	7,3	8,1
CHEMBL3218091	8,2	7,6
CHEMBL3218093	9,1	8,0
CHEMBL3218101	5,2	6,6
CHEMBL3218105	8,1	7,8
CHEMBL3218106	8,1	7,8
CHEMBL3218272	5,6	5,6
CHEMBL3218711	5,8	6,0
CHEMBL3218712	6,8	6,6
CHEMBL322172	6,0	6,1
CHEMBL3219596	5,4	6,4
CHEMBL3220340	7,2	5,9
CHEMBL3220937	5,2	5,8

Código	Exp	Prev
CHEMBL3233705	6,7	6,3
CHEMBL3234753	5,9	6,3
CHEMBL3235790	5,6	6,0
CHEMBL3236357	8,0	7,1
CHEMBL3237165	5,7	5,9
CHEMBL3237185	5,6	5,9
CHEMBL3237187	6,1	5,9
CHEMBL3237868	6,9	7,0
CHEMBL3237872	5,6	6,6
CHEMBL3262722	5,6	6,4
CHEMBL3262724	5,5	6,1
CHEMBL326961	7,7	7,2
CHEMBL3288973	5,1	5,4
CHEMBL3291268	5,7	5,9
CHEMBL3291272	5,9	6,1
CHEMBL3298720	5,1	5,2
CHEMBL3298722	5,1	5,4
CHEMBL3298724	5,5	5,4
CHEMBL333985	5,7	6,6
CHEMBL340393	7,3	6,3
CHEMBL343068	7,3	6,1
CHEMBL343557	8,0	7,6
CHEMBL345312	6,2	6,3
CHEMBL346414	5,5	5,4
CHEMBL347987	8,7	8,8
CHEMBL353658	5,6	5,7
CHEMBL354100	8,7	9,0
CHEMBL356615	6,2	6,4
CHEMBL357770	7,7	7,3
CHEMBL358059	7,4	7,2
CHEMBL358525	7,0	6,9
CHEMBL360644	7,1	7,1
CHEMBL362666	5,2	5,2
CHEMBL362852	5,0	5,2
CHEMBL363160	7,3	6,5
CHEMBL365090	5,9	7,2
CHEMBL365156	6,1	5,9
CHEMBL375206	8,1	6,2
CHEMBL385266	7,3	6,6
CHEMBL385373	5,2	6,1
CHEMBL385907	5,4	5,4
CHEMBL387313	5,5	6,4
CHEMBL392510	6,6	5,7
CHEMBL392743	7,1	6,5
CHEMBL393462	5,8	6,0
CHEMBL395392	5,6	6,5
CHEMBL396203	7,7	7,7
CHEMBL396473	6,6	5,9
CHEMBL397797	5,1	5,2
CHEMBL398092	5,5	5,6
CHEMBL398394	6,2	5,9
CHEMBL398989	5,6	6,0
CHEMBL399336	7,4	6,4
CHEMBL400568	6,6	7,0
CHEMBL401875	5,6	5,9
CHEMBL400569	6,3	6,6
CHEMBL400749	6,5	7,0
CHEMBL401544	6,4	6,6

Código	Exp	Prev
CHEMBL401945	6,8	6,7
CHEMBL402548	7,5	6,6
CHEMBL403465	6,5	6,4
CHEMBL403516	5,0	6,1
CHEMBL404116	6,0	5,8
CHEMBL405463	6,5	6,9
CHEMBL406705	6,1	7,3
CHEMBL406707	7,8	8,8
CHEMBL407249	9,2	8,6
CHEMBL409494	6,5	6,3
CHEMBL409795	5,7	5,9
CHEMBL412014	5,8	5,8
CHEMBL412832	8,7	8,8
CHEMBL415091	6,4	6,0
CHEMBL420559	8,7	8,3
CHEMBL420560	9,1	8,7
CHEMBL421087	5,2	5,5
CHEMBL425181	6,1	6,5
CHEMBL428278	7,3	8,0
CHEMBL428647	7,2	8,5
CHEMBL429831	5,4	5,4
CHEMBL431875	8,9	8,7
CHEMBL431876	8,6	8,8
CHEMBL433590	6,8	6,3
CHEMBL433680	9,0	7,6
CHEMBL438369	7,5	7,5
CHEMBL441018	10,6	7,2
CHEMBL44166	5,4	5,4
CHEMBL442016	6,5	5,9
CHEMBL442358	7,4	7,7
CHEMBL445422	6,3	6,8
CHEMBL445955	6,3	5,9
CHEMBL446079	8,7	6,9
CHEMBL446112	7,3	6,2
CHEMBL447964	5,5	5,6
CHEMBL448144	9,2	8,9
CHEMBL448779	5,1	6,4
CHEMBL45004	8,7	8,6
CHEMBL450755	8,7	6,8
CHEMBL452602	6,9	6,0
CHEMBL454645	6,4	5,9
CHEMBL455194	5,8	6,1
CHEMBL456075	5,6	6,2
CHEMBL456626	5,6	5,4
CHEMBL456627	5,3	5,7
CHEMBL457312	5,3	6,2
CHEMBL460843	5,2	5,7
CHEMBL461477	5,3	5,3
CHEMBL463119	5,1	5,8
CHEMBL463339	6,1	6,2
CHEMBL463488	5,7	5,8
CHEMBL463579	5,5	6,1
CHEMBL463580	5,4	5,9
CHEMBL463639	5,2	6,0
CHEMBL468488	7,8	7,6
CHEMBL464379	6,5	6,2
CHEMBL465349	5,7	5,8
CHEMBL468454	8,2	6,7

Código	Exp	Prev
CHEMBL470603	5,4	5,7
CHEMBL470718	5,7	6,1
CHEMBL471041	5,6	5,7
CHEMBL471042	5,9	5,8
CHEMBL472533	5,5	5,7
CHEMBL473475	6,0	6,5
CHEMBL473479	7,2	6,7
CHEMBL474029	5,6	6,0
CHEMBL474054	5,7	5,8
CHEMBL474890	7,1	6,7
CHEMBL475215	5,3	5,8
CHEMBL475616	5,5	5,8
CHEMBL475692	6,9	6,6
CHEMBL477064	6,1	6,2
CHEMBL477073	5,7	5,7
CHEMBL477963	5,2	5,8
CHEMBL478319	5,4	5,4
CHEMBL481820	5,5	6,1
CHEMBL483254	7,3	8,0
CHEMBL487328	5,9	5,7
CHEMBL488771	8,2	6,3
CHEMBL493809	6,6	6,2
CHEMBL498106	6,1	6,6
CHEMBL498271	8,7	6,9
CHEMBL499648	5,8	6,1
CHEMBL499940	6,5	6,1
CHEMBL499943	7,5	6,8
CHEMBL505068	6,6	6,4
CHEMBL505872	6,6	5,9
CHEMBL505961	6,2	6,2
CHEMBL50637	6,1	6,1
CHEMBL507170	5,7	6,0
CHEMBL508307	6,2	6,3
CHEMBL510578	5,7	6,1
CHEMBL511618	6,9	6,3
CHEMBL513045	5,5	6,0
CHEMBL513097	5,7	5,8
CHEMBL514162	5,9	6,5
CHEMBL514234	5,4	5,5
CHEMBL514968	5,6	6,0
CHEMBL515978	5,4	5,4
CHEMBL516110	6,2	6,3
CHEMBL51628	5,1	5,7
CHEMBL519983	5,8	5,7
CHEMBL520037	5,4	5,7
CHEMBL523493	5,8	6,4
CHEMBL530335	5,7	6,0
CHEMBL535	5,3	5,6
CHEMBL536535	6,1	5,8
CHEMBL538623	7,7	7,0
CHEMBL538707	6,0	6,6
CHEMBL539188	7,5	7,8
CHEMBL539842	5,5	6,4
CHEMBL540927	7,5	7,5
CHEMBL551109	6,2	6,0
CHEMBL541416	5,6	6,5
CHEMBL545274	5,6	6,4
CHEMBL54611	6,8	6,4

Código	Exp	Prev
CHEMBL551139	5,2	5,8
CHEMBL552534	8,0	8,1
CHEMBL554122	5,2	5,8
CHEMBL555490	7,0	7,7
CHEMBL555509	8,0	8,0
CHEMBL556688	6,0	6,3
CHEMBL556767	5,1	6,0
CHEMBL557581	7,0	6,4
CHEMBL558112	6,5	6,1
CHEMBL558586	6,7	6,5
CHEMBL559202	5,7	6,4
CHEMBL561602	5,1	5,5
CHEMBL561604	5,9	5,7
CHEMBL562940	7,4	7,5
CHEMBL563406	6,0	6,2
CHEMBL564077	5,4	6,0
CHEMBL564876	6,2	5,7
CHEMBL58984	6,7	6,8
CHEMBL592872	5,1	5,8
CHEMBL600656	5,6	5,4
CHEMBL601587	5,0	6,4
CHEMBL607580	6,0	5,8
CHEMBL62253	6,1	5,9
CHEMBL64742	5,7	6,0
CHEMBL67655	5,0	5,7
CHEMBL72076	6,8	5,7
CHEMBL72607	5,5	5,9
CHEMBL73090	5,4	5,5
CHEMBL73718	5,8	5,9
CHEMBL73764	5,9	6,2
CHEMBL73767	5,4	5,8
CHEMBL75368	6,7	5,9
CHEMBL75984	5,5	5,5
CHEMBL76332	5,1	5,4
CHEMBL89418	5,1	5,6
CHEMBL92953	8,3	8,5
CHEMBL93073	9,0	8,5
CHEMBL93477	9,0	8,9
CHEMBL9416	6,5	6,2
CHEMBL94657	8,3	7,8
CHEMBL9514	6,8	6,0
CHEMBL95273	5,8	5,6
CHEMBL97560	5,2	5,7
CHEMBL97636	5,0	5,4
CHEMBL99216	5,4	6,1
CHEMBL99398	6,0	5,9
CHEMBL9941	7,6	7,2
PESQUISA55	5,1	5,2
PESQUISA56	5,5	5,2
PESQUISA57	5,3	5,2
PESQUISA79	5,4	5,9
PESQUISA81	5,7	5,8
PESQUISA90	7,8	6,5
PESQUISA132	8,1	7,1
PESQUISA226	5,5	6,5
PESQUISA136	7,3	6,9
PESQUISA145	7,7	7,5
PESQUISA184	6,1	6,0

Código	Exp	Prev
PESQUISA256	5,2	6,6
PESQUISA257	5,5	5,8
PESQUISA272	5,4	6,3
PESQUISA277	5,0	5,8
PESQUISA278	5,2	5,9
PESQUISA279	5,6	5,9
PESQUISA283	6,1	5,8
PESQUISA290	8,3	7,0
PESQUISA305	5,5	6,0
PESQUISA310	5,6	6,1
PESQUISA307	5,3	6,0
PESQUISA308	5,7	6,0

Código	Exp	Prev
PESQUISA311	5,8	6,2
PESQUISA341	5,0	5,7
PESQUISA345	5,7	5,6
PESQUISA347	5,3	5,5
PESQUISA351	5,2	5,6
PESQUISA370	5,9	5,5
PESQUISA447	5,8	5,7
PESQUISA448	5,4	5,8
PESQUISA449	5,6	5,6
PESQUISA453	5,4	5,6
PESQUISA472	5,3	5,5
PESQUISA471	5,4	5,8

Código	Exp	Prev
PESQUISA473	5,4	5,5
PESQUISA522	5,3	5,8
PESQUISA540	5,6	5,4
PESQUISA541	5,5	5,3
PESQUISA543	5,3	5,3
PESQUISA546	5,1	5,5
PESQUISA573	5,3	5,4
PESQUISA574	5,4	5,5
PESQUISA607	5,1	5,5
PESQUISA647	5,2	5,4

ANEXO 7.5 – Quantidade de compostos nos diferentes intervalos de pIC₅₀ para oito dos *fingerprints* PubChem mais relevantes da *random Forest* para a regressão

C(-C)(~C)(~H)(~N)		
pIC ₅₀	Ausente	Presente
5	721	172
5,5	542	122
6	446	160
6,5	274	96
7	181	151
7,5	137	96
8	59	101
8,5	34	80
9	17	38
9,5	3	4
>10	3	4
≥4 anéis aromáticos		
pIC ₅₀	Ausente	Presente
5	672	221
5,5	473	191
6	418	188
6,5	251	119
7	266	66
7,5	185	48
8	124	36
8,5	94	20
9	40	15
9,5	3	4
>10	4	3
≥1 anel saturado ou aromático de tamanho 6 contendo um heteroátomo		
pIC ₅₀	Ausente	Presente
5	458	435
5,5	353	311
6	267	339
6,5	148	222
7	156	176
7,5	103	130
8	78	82
8,5	82	32
9	28	27
9,5	3	4
>10	2	5
≥8 N		
pIC ₅₀	Ausente	Presente
5	591	302
5,5	423	241
6	317	289
6,5	172	198
7	177	155
7,5	151	82
8	100	60
8,5	82	32
9	30	25
9,5	2	5
>10	2	5

O-H		
pIC ₅₀	Ausente	Presente
5	548	345
5,5	419	245
6	365	241
6,5	220	150
7	188	144
7,5	121	112
8	62	98
8,5	40	74
9	3	52
9,5	1	6
>10	0	7
Nc1cc(N)ccc1		
pIC ₅₀	Ausente	Presente
5	879	14
5,5	645	19
6	586	20
6,5	352	18
7	309	23
7,5	220	13
8	153	7
8,5	100	14
9	53	2
9,5	6	1
>10	6	1
OC1CC(O)CC1		
pIC ₅₀	Ausente	Presente
5	892	1
5,5	664	2
6	606	2
6,5	368	5
7	330	5
7,5	228	4
8	155	1
8,5	110	0
9	54	0
9,5	7	0
>10	7	0
Cc1ccc(C)cc1		
pIC ₅₀	Ausente	Presente
5	770	123
5,5	498	166
6	433	173
6,5	275	95
7	280	52
7,5	206	27
8	144	16
8,5	105	9
9	44	11
9,5	4	3
>10	5	2

ANEXO 7.6 - Descrição das espécies dos extratos provenientes de actinobactérias de sedimentos marinhos utilizados na base de dados do Modelo B

Código de estirpe	Descrição
PTM-001	<i>Streptomyces thinghirensis</i>
PTM-004	<i>Micromonospora echinofusca</i>
PTM-005	<i>Streptomyces xiamenensis</i>
PTM-007	<i>Streptomyces sp.</i>
PTM-012	<i>Actinomadura glauciflava</i>
PTM-015	<i>Streptomyces cyaneofuscatus</i>
PTM-019	<i>Streptomyces cheonanensis</i>
PTM-026	<i>Salinispora pacifica</i>
PTM-029	<i>Streptomyces aculeolatus</i>
PTM-034	<i>Streptomyces krainskii</i>
PTM-036	<i>Streptomyces microflavus</i>
PTM-044	<i>Salinispora pacifica</i>
PTM-046	<i>Streptomyces aurantiogriseus</i>
PTM-060	<i>Salinispora pacifica</i>
PTM-063	<i>Streptomyces akiyoshiensis</i>
PTM-078	<i>Salinispora pacifica</i>
PTM-081	<i>Streptomyces aculeolatus</i>
PTM-085	<i>Streptomyces caelestis</i>
PTM-093	<i>Salinispora pacifica</i>
PTM-096	<i>Salinispora pacifica</i>
PTM-099	<i>Salinispora arenicola</i>
PTM-105	<i>Micromonospora chiyaphumensis</i>
PTM-106	<i>Streptomyces griseoplanus</i>
PTM-114	<i>Salinispora pacifica</i>
PTM-115	<i>Salinispora pacifica</i>
PTM-126	<i>Streptomyces ambofaciens</i>
PTM-128	<i>Micromonospora aurantiaca</i>
PTM-227	<i>Salinispora pacifica</i>
PTM-276	<i>Actinomadura rifamycini</i>
PTM-277	<i>Streptomyces flocculus</i>
PTM-278	<i>Streptomyces rubiginosohelvolus</i>
PTM-279	<i>Streptomyces qinglanensis</i>
PTM-280	<i>Micromonospora sp.</i>
PTM-281	<i>Streptomyces sp.</i>
PTM-282	<i>Micromonospora sp.</i>
PTM-284	<i>Micromonospora sp.</i>
PTM-285	<i>Brevibacterium iodinum</i>
PTM-287	<i>Streptomyces xinghaiensis</i>
PTM-289	<i>Streptomyces glomeroaurantiacus</i>
PTM-290	<i>Salinispora pacifica</i>
PTM-291	<i>Salinispora pacifica</i>
PTM-292	<i>Actinomadura fulvescens</i>
PTM-304	<i>Streptomyces cavourensis</i>
PTM-325	<i>Salinispora pacifica</i>
PTM-346	<i>Streptomyces aculeolatus</i>
PTM-360	<i>Salinispora pacifica</i>
PTM-366	<i>Streptomyces microflavus</i>
PTM-392	<i>Streptomyces flavogriseus</i>
PTM-397	<i>Salinispora pacifica</i>
PTM-420	<i>Streptomyces aculeolatus</i>

ANEXO 7.7 - Previsões para o conjunto de treino do Modelo B, obtido com a *random Forest* utilizando os desvios químicos de 0,1 ppm para o espectro ^1H e 0,5 ppm para o ^{13}C , na coluna esquerda encontram-se os extratos na coluna direita as frações

Código	IC ₅₀ (µg/mL)	Classe	
		Exp	Prev
PTM-4	--	I	I
PTM-5	--	I	I
PTM-7	--	I	I
PTM-12	--	I	I
PTM-15	6	A	A
PTM-19	8,68	A	A
PTM-26	--	I	I
PTM-29	--	I	A
PTM-34	9,7	A	A
PTM-36	59,05	A	A
PTM-46	1,32	A	A
PTM-60	--	I	I
PTM-63	13,99	A	A
PTM-78	--	I	I
PTM-85	32,5	A	A
PTM-93	--	I	I
PTM-96	--	I	I
PTM-106	9,98	A	A
PTM-126	18,02	A	A
PTM-128	40,22	A	I
PTM-227	--	I	I
PTM-277	--	I	I
PTM-279	--	I	I
PTM-280	--	I	I
PTM-282	--	I	A
PTM-287	--	I	A
PTM-289	--	I	I
PTM-291	--	I	I
PTM-292	--	I	I
PTM-304	0,65	A	I
PTM-325	--	I	I
PTM-346	--	I	A
PTM-360	--	I	I
PTM-392	8,5	A	I
PTM-420	--	I	I

Código	IC ₅₀ (µg/mL)	Exp	Prev
PTM-29_F3	32,5	A	A
PTM-29_F4	17,6	A	I
PTM-29_F5	3,5	A	A
PTM-29_F7	--	I	I
PTM-81_F2+F3	4,33	A	A
PTM-81_F4	10,11	A	A
PTM-81_F7	--	I	A
PTM-93_F2	--	I	I
PTM-93_F4	--	I	A
PTM-93_F5	--	I	I
PTM-93_F6	9,8	A	I
PTM-93_F7	--	I	I
PTM-93_F8	--	I	I
PTM-99_F3	--	I	I
PTM-99_F4	--	I	I
PTM-99_F5	--	I	A
PTM-99_F6	--	I	A
PTM-99_F7	--	I	I
PTM-99_F8	--	I	A
PTM-105_F2	--	I	I
PTM-105_F5	93,89	A	I
PTM-105_F6	--	I	I
PTM-105_F9	--	I	A
PTM-128_F2	--	I	I
PTM-128_F3	--	I	I
PTM-128_F5	--	I	A
PTM-128_F6	--	I	I
PTM-128_F7	--	I	I
PTM-128_F8	1,5	A	I
PTM-128_F9	0,19	A	A
PTM-346_F3	--	I	I
PTM-346_F4	--	I	I
PTM-346_F5	57,81	A	A
PTM-346_F6	13,55	A	A
PTM-346_F8+F9	--	I	A
PTM-420_F2+F3	14,39	A	A
PTM-420_F5	2,95	A	A
PTM-420_F7	--	I	A
PTM-420_F8+F9	--	I	I

ANEXO 7.8 – Previsões para o conjunto de teste do Modelo B, obtido com a *random Forest* utilizando os desvios químicos de 0,1 ppm para o espectro ^1H e 0,5 ppm para o ^{13}C

Código	IC ₅₀ (µg/mL)	Classe		Probabilidade de ser classificado como ativo
		Exp	Prev	
PTM-1	--	I	I	0,10
PTM-44	--	I	A	0,56
PTM-81	19,55	A	A	0,54
PTM-99	4,94	A	I	0,07
PTM-105	7,9	A	A	0,56
PTM-114	--	I	I	0,20
PTM-115	--	I	I	0,24
PTM-276	--	I	I	0,39
PTM-278	--	I	I	0,49
PTM-281	--	I	I	0,16
PTM-284	--	I	A	0,67
PTM-285	--	I	I	0,40
PTM-290	--	I	I	0,24
PTM-366	24,98	A	A	0,60
PTM-397	--	I	I	0,14
PTM-29_F2	3,5	A	I	0,22
PTM-29_F6	101,2	A	I	0,34
PTM-29_F8	--	I	I	0,40
PTM-81_F5+F6	6,81	A	A	0,79
PTM-81_F8+F9	--	I	A	0,81
PTM-93_F3	--	I	I	0,32
PTM-99_F2	--	I	I	0,17
PTM-105_F3	--	I	I	0,08
PTM-105_F4	--	I	I	0,29
PTM-105_F7	--	I	I	0,31
PTM-105_F8	--	I	I	0,42
PTM-128_F4	--	I	I	0,27
PTM-346_F2	--	I	A	0,52
PTM-346_F7	--	I	A	0,52
PTM-420_F4	13,36	A	A	0,56
PTM-420_F6	14,77	A	A	0,69
PTM-128_F8+F9_F5	--	I	A	0,73
PTM-128_F8+F9_F7	--	I	A	0,64
PTM-128_F8+F9_F15	--	I	A	0,71
PTM-128_F8+F9_F31	--	I	A	0,60
PTM-128_F8+F9_F37	--	I	A	0,57