

Table S1. Evaluating parameters values obtained in the common-test set mode

COX-2 (common-test set mode)										
ML method	inactives selection	ExtFP			KlekFP			MACCSFP		
		recall	precision	MCC	recall	precision	MCC	recall	precision	MCC
Naïve Bayes	ZINC_random	0.95	0.97	0.92	0.98	0.93	0.91	0.98	0.95	0.93
	ZINC_diverse	0.99	0.79	0.75	0.98	0.88	0.86	0.97	0.88	0.85
	MDDR_random	0.94	0.99	0.93	0.98	0.91	0.89	0.97	0.92	0.89
	MDDR_diverse	0.93	0.99	0.92	0.98	0.93	0.91	0.97	0.89	0.86
	DUD_random	1	0.56	0.37	0.99	0.91	0.9	1	0.81	0.8
	DUD_diverse	0.99	0.66	0.58	0.99	0.97	0.96	0.99	0.85	0.83
SMO	ZINC_random	1	1	1	0.99	1	0.99	0.99	1	0.99
	ZINC_diverse	1	0.54	0.33	0.99	1	0.99	0.99	0.95	0.94
	MDDR_random	1	1	1	0.99	1	0.99	0.98	1	0.98
	MDDR_diverse	1	1	1	0.99	1	0.99	0.99	1	0.98
	DUD_random	1	0.52	0.29	0.99	1	0.99	1	0.85	0.85
	DUD_diverse	1	0.54	0.33	0.99	1	0.99	1	0.93	0.92
Ibk	ZINC_random	1	0.99	0.99	0.95	0.99	0.94	0.97	0.99	0.96
	ZINC_diverse	1	0.77	0.75	0.93	0.98	0.91	0.98	0.88	0.85
	MDDR_random	0.99	0.99	0.98	0.92	0.99	0.91	0.96	0.97	0.94
	MDDR_diverse	0.98	0.98	0.96	0.91	0.99	0.91	0.97	0.91	0.88
	DUD_random	1	0.74	0.71	0.94	1	0.94	0.99	0.94	0.93
	DUD_diverse	1	0.77	0.75	0.91	1	0.92	0.99	0.93	0.92
Decorate	ZINC_random	1	1	0.99	0.98	1	0.98	0.99	1	0.99
	ZINC_diverse	1	0.61	0.49	0.97	1	0.97	0.97	0.98	0.96
	MDDR_random	1	1	0.99	0.99	1	0.99	0.99	1	0.99
	MDDR_diverse	0.99	1	0.99	0.98	1	0.98	0.99	1	0.99
	DUD_random	1	0.66	0.57	0.98	1	0.98	1	0.61	0.49
	DUD_diverse	1	0.57	0.42	0.98	1	0.98	0.99	0.82	0.8
Hyperpipes	ZINC_random	1	0.97	0.97	1	0.86	0.85	1	0.63	0.53
	ZINC_diverse	1	0.88	0.87	1	0.76	0.74	0.99	0.62	0.51
	MDDR_random	1	0.97	0.97	1	0.84	0.83	1	0.63	0.53
	MDDR_diverse	1	0.97	0.97	1	0.81	0.79	1	0.63	0.53
	DUD_random	1	0.87	0.87	1	0.73	0.7	1	0.58	0.44
	DUD_diverse	1	0.88	0.87	1	0.77	0.75	1	0.6	0.48
J48	ZINC_random	0.99	0.96	0.95	0.96	0.99	0.95	0.99	1	0.98
	ZINC_diverse	1	0.83	0.82	0.96	1	0.97	0.97	0.99	0.96
	MDDR_random	0.99	0.98	0.97	0.98	1	0.98	0.99	1	0.99
	MDDR_diverse	0.97	0.99	0.96	0.96	1	0.96	0.98	1	0.98
	DUD_random	1	0.71	0.66	0.96	0.99	0.96	1	0.6	0.48
	DUD_diverse	1	0.53	0.32	0.96	1	0.97	1	0.87	0.86
Random Forest	ZINC_random	0.99	0.99	0.99	0.98	1	0.98	0.99	1	0.99
	ZINC_diverse	1	0.75	0.72	0.97	0.98	0.95	0.98	0.92	0.91
	MDDR_random	0.99	1	0.99	0.97	1	0.97	0.98	1	0.98
	MDDR_diverse	0.98	1	0.98	0.98	0.99	0.97	0.99	0.97	0.95
	DUD_random	1	0.61	0.5	0.99	1	0.98	1	0.71	0.67
	DUD_diverse	1	0.75	0.72	0.97	1	0.97	1	0.9	0.89

M ₁ (common-test set mode)										
ML method	inactives selection	ExtFP			KlekFP			MACCSFP		
		recall	precision	MCC	recall	precision	MCC	recall	precision	MCC
Naïve Bayes	ZINC_random	0.67	0.9	0.59	0.81	0.95	0.78	0.87	0.77	0.64
	ZINC_diverse	0.7	0.67	0.37	0.91	0.66	0.5	0.85	0.68	0.49
	MDDR_random	0.74	0.65	0.44	0.87	0.86	0.76	0.76	0.82	0.64
	MDDR_diverse	0.96	0.54	0.28	0.89	0.8	0.69	0.89	0.64	0.46
	DUD_random	0.93	0.65	0.5	0.9	0.8	0.7	0.9	0.72	0.58
	DUD_diverse	0.76	0.86	0.65	0.91	0.79	0.69	0.84	0.73	0.56
SMO	ZINC_random	0.93	0.97	0.89	0.95	0.93	0.88	0.96	0.81	0.76
	ZINC_diverse	0.98	0.68	0.68	0.98	0.6	0.46	0.96	0.66	0.54
	MDDR_random	0.9	0.96	0.84	0.94	0.95	0.9	0.91	0.92	0.85
	MDDR_diverse	1	0.48	0.06	0.96	0.71	0.63	0.95	0.53	0.24
	DUD_random	0.98	0.74	0.68	0.96	0.86	0.82	0.94	0.81	0.74
	DUD_diverse	0.96	0.73	0.65	0.94	0.79	0.72	0.93	0.79	0.71
Ibk	ZINC_random	0.99	0.84	0.83	0.98	0.81	0.78	0.99	0.75	0.71
	ZINC_diverse	0.99	0.58	0.61	0.99	0.62	0.51	0.99	0.57	0.41
	MDDR_random	0.97	0.43	0.55	0.93	0.9	0.84	0.94	0.87	0.83
	MDDR_diverse	1	0.51	0.24	0.97	0.66	0.56	0.99	0.55	0.37
	DUD_random	0.96	0.84	0.79	0.98	0.78	0.74	0.98	0.75	0.69
	DUD_diverse	0.96	0.71	0.63	0.98	0.75	0.69	0.98	0.7	0.62
Decorate	ZINC_random	0.77	0.86	0.64	0.92	0.93	0.86	0.94	0.78	0.7
	ZINC_diverse	0.7	0.67	0.37	0.97	0.64	0.53	0.95	0.63	0.48
	MDDR_random	0.78	0.77	0.42	0.89	0.95	0.86	0.88	0.93	0.83
	MDDR_diverse	1	0.48	0.07	0.92	0.79	0.7	0.94	0.53	0.26
	DUD_random	0.96	0.71	0.62	0.93	0.84	0.77	0.93	0.78	0.69
	DUD_diverse	0.95	0.71	0.62	0.94	0.82	0.75	0.9	0.8	0.69
Hyperpipes	ZINC_random	0.99	0.49	0.54	0.86	0.77	0.63	0.99	0.49	0.13
	ZINC_diverse	0.98	0.49	0.53	0.91	0.67	0.52	0.99	0.49	0.13
	MDDR_random	0.98	0.37	0.08	0.93	0.7	0.62	0.99	0.48	0.28
	MDDR_diverse	0.98	0.49	0.08	0.87	0.7	0.54	0.98	0.49	0.12
	DUD_random	0.99	0.49	0.1	0.89	0.66	0.49	0.99	0.49	0.1
	DUD_diverse	0.98	0.49	0.08	0.92	0.69	0.57	0.99	0.49	0.13
J48	ZINC_random	0.85	0.86	0.7	0.89	0.89	0.79	0.92	0.75	0.64
	ZINC_diverse	0.92	0.59	0.54	0.96	0.62	0.48	0.93	0.74	0.64
	MDDR_random	0.86	0.85	0.65	0.87	0.93	0.83	0.85	0.89	0.77
	MDDR_diverse	0.99	0.49	0.13	0.9	0.76	0.65	0.94	0.5	0.12
	DUD_random	0.89	0.7	0.55	0.89	0.78	0.66	0.89	0.77	0.65
	DUD_diverse	0.9	0.7	0.56	0.9	0.81	0.7	0.86	0.79	0.66
Random Forest	ZINC_random	0.93	0.97	0.9	0.94	0.95	0.89	0.97	0.82	0.78
	ZINC_diverse	0.97	0.7	0.68	0.98	0.69	0.61	0.99	0.68	0.61
	MDDR_random	0.91	0.96	0.85	0.91	0.97	0.89	0.9	0.96	0.88
	MDDR_diverse	1	0.49	0.11	0.96	0.77	0.7	0.96	0.58	0.4
	DUD_random	0.97	0.77	0.72	0.96	0.87	0.82	0.95	0.84	0.79
	DUD_diverse	0.96	0.77	0.71	0.96	0.86	0.82	0.94	0.85	0.78

HIV PR (common-test set mode)										
ML method	inactives selection	ExtFP			KlekFP			MACCSFP		
		recall	precision	MCC	recall	precision	MCC	recall	precision	MCC
Naïve Bayes	ZINC_random	0.91	0.96	0.89	0.93	0.93	0.87	0.85	0.88	0.76
	ZINC_diverse	0.98	0.61	0.51	0.96	0.67	0.59	0.96	0.66	0.57
	MDDR_random	0.85	0.97	0.84	0.86	0.92	0.81	0.76	0.83	0.63
	MDDR_diverse	0.92	0.91	0.84	0.92	0.73	0.64	0.89	0.7	0.58
	DUD_random	0.98	0.59	0.37	0.96	0.72	0.64	0.99	0.54	0.35
	DUD_diverse	0.99	0.49	0.23	0.92	0.79	0.71	0.95	0.6	0.45
SMO	ZINC_random	0.99	0.97	0.97	0.98	0.97	0.96	0.95	0.95	0.91
	ZINC_diverse	1	0.48	0.21	0.99	0.79	0.77	0.99	0.63	0.55
	MDDR_random	0.95	0.97	0.92	0.96	0.94	0.91	0.89	0.88	0.78
	MDDR_diverse	0.97	0.87	0.84	0.97	0.85	0.82	0.95	0.79	0.74
	DUD_random	0.99	0.61	0.38	0.99	0.76	0.68	1	0.54	0.34
	DUD_diverse	1	0.47	0.14	0.97	0.91	0.88	0.99	0.65	0.59
Ibk	ZINC_random	0.99	0.96	0.95	0.98	0.94	0.93	0.97	0.87	0.85
	ZINC_diverse	1	0.56	0.43	0.99	0.8	0.78	1	0.58	0.48
	MDDR_random	0.98	0.92	0.91	0.97	0.89	0.87	0.96	0.74	0.69
	MDDR_diverse	0.99	0.83	0.83	0.98	0.84	0.82	0.98	0.62	0.52
	DUD_random	0.99	0.68	0.58	0.99	0.84	0.81	0.99	0.63	0.54
	DUD_diverse	1	0.56	0.43	0.98	0.92	0.91	0.99	0.65	0.59
Decorate	ZINC_random	0.95	0.97	0.92	0.95	0.96	0.92	0.91	0.94	0.87
	ZINC_diverse	1	0.48	0.2	0.98	0.81	0.79	0.99	0.65	0.58
	MDDR_random	0.91	0.97	0.89	0.93	0.96	0.9	0.88	0.88	0.78
	MDDR_diverse	0.97	0.94	0.91	0.96	0.88	0.84	0.93	0.78	0.7
	DUD_random	0.99	0.62	0.42	0.97	0.78	0.68	1	0.52	0.31
	DUD_diverse	0.99	0.55	0.39	0.96	0.91	0.88	1	0.54	0.38
Hyperpipes	ZINC_random	1	0.46	0.1	0.74	0.74	0.64	0.99	0.51	0.29
	ZINC_diverse	1	0.46	0.06	0.95	0.64	0.53	0.98	0.51	0.28
	MDDR_random	1	0.47	0.11	0.86	0.7	0.55	0.98	0.51	0.28
	MDDR_diverse	1	0.47	0.11	0.89	0.67	0.52	0.98	0.51	0.28
	DUD_random	0.98	0.51	0.2	0.97	0.56	0.4	1	0.49	0.22
	DUD_diverse	1	0.46	0.06	0.94	0.64	0.51	0.99	0.51	0.3
J48	ZINC_random	0.93	0.9	0.84	0.94	0.94	0.88	0.88	0.9	0.8
	ZINC_diverse	1	0.46	0.09	0.95	0.83	0.79	0.98	0.68	0.61
	MDDR_random	0.86	0.91	0.79	0.9	0.94	0.86	0.84	0.82	0.68
	MDDR_diverse	0.92	0.8	0.72	0.94	0.86	0.81	0.95	0.67	0.58
	DUD_random	0.98	0.64	0.48	0.94	0.76	0.64	0.99	0.49	0.24
	DUD_diverse	0.99	0.61	0.52	0.94	0.91	0.86	0.98	0.56	0.41
Random Forest	ZINC_random	0.95	0.99	0.95	0.97	0.99	0.96	0.95	0.97	0.93
	ZINC_diverse	1	0.56	0.44	0.98	0.85	0.84	1	0.66	0.6
	MDDR_random	0.9	1	0.91	0.95	1	0.95	0.92	0.95	0.88
	MDDR_diverse	0.97	0.97	0.95	0.96	0.92	0.89	0.97	0.8	0.77
	DUD_random	0.99	0.64	0.47	0.98	0.82	0.75	1	0.53	0.34
	DUD_diverse	1	0.51	0.29	0.96	0.99	0.96	0.99	0.59	0.48

metalloproteinase (common-test set mode)										
ML method	inactives selection	ExtFP			KlekFP			MACCSFP		
		recall	precision	MCC	recall	precision	MCC	recall	precision	MCC
Naïve Bayes	ZINC_random	0.82	0.94	0.79	0.87	0.87	0.76	0.76	0.83	0.64
	ZINC_diverse	0.97	0.47	0.15	0.95	0.57	0.42	0.95	0.63	0.53
	MDDR_random	0.83	0.93	0.79	0.87	0.86	0.76	0.76	0.82	0.64
	MDDR_diverse	0.89	0.72	0.62	0.92	0.62	0.49	0.88	0.66	0.52
	DUD_random	1	0.45	0.1	0.88	0.79	0.69	0.99	0.57	0.46
	DUD_diverse	0.99	0.46	0.12	0.89	0.8	0.71	0.96	0.62	0.52
SMO	ZINC_random	0.91	0.97	0.9	0.94	0.95	0.9	0.91	0.93	0.85
	ZINC_diverse	1	0.45	0.07	0.97	0.67	0.61	0.98	0.59	0.49
	MDDR_random	0.92	0.97	0.9	0.94	0.95	0.9	0.91	0.92	0.85
	MDDR_diverse	0.93	0.83	0.77	0.95	0.74	0.68	0.93	0.7	0.61
	DUD_random	1	0.45	0.04	0.95	0.89	0.86	0.98	0.59	0.48
	DUD_diverse	1	0.45	0.06	0.95	0.92	0.88	0.98	0.64	0.56
Ibk	ZINC_random	0.93	0.9	0.85	0.93	0.91	0.85	0.94	0.88	0.83
	ZINC_diverse	0.99	0.48	0.21	0.97	0.69	0.64	0.99	0.57	0.47
	MDDR_random	0.94	0.89	0.84	0.93	0.9	0.84	0.94	0.87	0.83
	MDDR_diverse	0.95	0.64	0.55	0.94	0.75	0.69	0.97	0.61	0.52
	DUD_random	0.99	0.47	0.18	0.94	0.88	0.84	0.98	0.73	0.69
	DUD_diverse	0.99	0.47	0.18	0.94	0.88	0.84	0.99	0.69	0.65
Decorate	ZINC_random	0.87	0.94	0.84	0.9	0.95	0.86	0.88	0.94	0.84
	ZINC_diverse	1	0.45	0.04	0.95	0.76	0.71	0.96	0.6	0.49
	MDDR_random	0.89	0.94	0.85	0.89	0.95	0.86	0.88	0.93	0.83
	MDDR_diverse	0.91	0.66	0.54	0.92	0.85	0.79	0.94	0.74	0.67
	DUD_random	1	0.45	0.04	0.9	0.9	0.82	0.99	0.51	0.31
	DUD_diverse	1	0.45	0.09	0.92	0.94	0.88	1	0.55	0.44
Hyperpipes	ZINC_random	1	0.45	0.04	0.93	0.71	0.62	0.99	0.49	0.28
	ZINC_diverse	0.99	0.45	0	0.98	0.59	0.49	0.98	0.49	0.25
	MDDR_random	1	0.44	0.04	0.93	0.7	0.62	0.99	0.48	0.28
	MDDR_diverse	0.99	0.45	0.04	0.88	0.61	0.44	0.98	0.49	0.25
	DUD_random	1	0.45	0	0.97	0.63	0.54	0.99	0.49	0.27
	DUD_diverse	0.99	0.45	0	0.95	0.66	0.57	0.99	0.49	0.27
J48	ZINC_random	0.82	0.82	0.68	0.87	0.93	0.82	0.84	0.89	0.76
	ZINC_diverse	0.99	0.46	0.15	0.94	0.73	0.67	0.94	0.63	0.52
	MDDR_random	0.81	0.81	0.66	0.87	0.93	0.83	0.85	0.89	0.77
	MDDR_diverse	0.87	0.64	0.49	0.92	0.8	0.73	0.89	0.7	0.59
	DUD_random	0.99	0.47	0.17	0.88	0.9	0.81	0.96	0.52	0.32
	DUD_diverse	0.99	0.48	0.23	0.9	0.91	0.83	0.97	0.54	0.38
Random Forest	ZINC_random	0.87	0.99	0.88	0.9	0.97	0.89	0.9	0.97	0.88
	ZINC_diverse	0.99	0.46	0.13	0.96	0.71	0.65	0.98	0.62	0.55
	MDDR_random	0.88	0.99	0.88	0.91	0.97	0.89	0.9	0.96	0.88
	MDDR_diverse	0.91	0.88	0.81	0.96	0.78	0.74	0.95	0.77	0.72
	DUD_random	1	0.45	0.09	0.92	0.93	0.87	0.99	0.56	0.44
	DUD_diverse	1	0.45	0.12	0.93	0.97	0.9	1	0.61	0.54

5-HT _{1A} (common-test set mode)										
ML method	inactives selection	ExtFP			KlekFP			MACCSFP		
		recall	precision	MCC	recall	precision	MCC	recall	precision	MCC
Naïve Bayes	ZINC_random	0.86	0.86	0.74	0.88	0.9	0.79	0.87	0.79	0.67
	ZINC_diverse	0.99	0.49	0.19	0.95	0.57	0.4	0.92	0.61	0.44
	MDDR_random	0.88	0.6	0.4	0.89	0.83	0.73	0.83	0.74	0.58
	MDDR_diverse	0.94	0.66	0.56	0.93	0.64	0.51	0.92	0.63	0.49
	DUD_random	1	0.47	0.11	0.91	0.68	0.56	0.95	0.55	0.36
	DUD_diverse	1	0.47	0.12	0.91	0.64	0.5	0.95	0.59	0.43
SMO	ZINC_random	0.95	0.95	0.91	0.94	0.92	0.87	0.93	0.92	0.86
	ZINC_diverse	1	0.47	0.11	0.96	0.66	0.57	0.99	0.58	0.46
	MDDR_random	0.92	0.91	0.84	0.92	0.88	0.8	0.84	0.78	0.64
	MDDR_diverse	0.95	0.81	0.76	0.94	0.72	0.65	0.92	0.7	0.59
	DUD_random	1	0.47	0.08	0.95	0.86	0.81	1	0.56	0.44
	DUD_diverse	1	0.47	0.1	0.94	0.84	0.78	0.99	0.6	0.5
Ibk	ZINC_random	0.96	0.86	0.83	0.95	0.84	0.8	0.96	0.85	0.81
	ZINC_diverse	1	0.51	0.28	0.97	0.66	0.58	1	0.56	0.43
	MDDR_random	0.97	0.71	0.64	0.94	0.76	0.69	0.94	0.73	0.65
	MDDR_diverse	0.97	0.62	0.52	0.94	0.71	0.63	0.97	0.62	0.52
	DUD_random	1	0.5	0.25	0.96	0.77	0.72	0.98	0.66	0.59
	DUD_diverse	1	0.5	0.27	0.94	0.78	0.71	0.99	0.63	0.56
Decorate	ZINC_random	0.87	0.92	0.81	0.9	0.92	0.84	0.92	0.94	0.86
	ZINC_diverse	1	0.47	0.11	0.96	0.67	0.58	0.99	0.6	0.5
	MDDR_random	0.86	0.88	0.76	0.89	0.88	0.79	0.85	0.83	0.7
	MDDR_diverse	0.93	0.72	0.63	0.94	0.76	0.69	0.88	0.74	0.61
	DUD_random	1	0.47	0.09	0.94	0.82	0.77	1	0.51	0.3
	DUD_diverse	1	0.47	0.1	0.9	0.83	0.74	1	0.54	0.38
Hyperpipes	ZINC_random	1	0.5	0.25	0.87	0.81	0.69	0.99	0.52	0.31
	ZINC_diverse	1	0.48	0.19	0.91	0.7	0.59	0.99	0.52	0.32
	MDDR_random	1	0.5	0.25	0.84	0.78	0.63	0.99	0.52	0.31
	MDDR_diverse	1	0.5	0.25	0.87	0.72	0.58	0.99	0.52	0.31
	DUD_random	1	0.48	0.19	0.91	0.68	0.56	1	0.52	0.31
	DUD_diverse	1	0.48	0.19	0.9	0.72	0.6	1	0.52	0.31
J48	ZINC_random	0.81	0.84	0.68	0.87	0.89	0.78	0.88	0.91	0.81
	ZINC_diverse	0.99	0.47	0.08	0.92	0.65	0.51	0.99	0.63	0.54
	MDDR_random	0.77	0.75	0.54	0.86	0.85	0.73	0.82	0.77	0.6
	MDDR_diverse	0.85	0.71	0.55	0.9	0.68	0.55	0.89	0.68	0.54
	DUD_random	0.99	0.48	0.14	0.88	0.81	0.71	0.99	0.51	0.29
	DUD_diverse	1	0.47	0.13	0.94	0.75	0.67	1	0.52	0.32
Random Forest	ZINC_random	0.88	0.98	0.87	0.92	0.95	0.88	0.94	0.95	0.89
	ZINC_diverse	1	0.48	0.17	0.97	0.69	0.62	0.99	0.65	0.59
	MDDR_random	0.86	0.96	0.83	0.91	0.93	0.85	0.88	0.9	0.8
	MDDR_diverse	0.94	0.81	0.76	0.95	0.78	0.73	0.94	0.77	0.7
	DUD_random	1	0.47	0.12	0.94	0.85	0.8	0.99	0.57	0.43
	DUD_diverse	1	0.48	0.15	0.94	0.87	0.81	0.99	0.6	0.49

Table S2. Evaluating parameters values obtained in the various-test set mode

COX-2 (various-test sets mode)										
ML method	inactives selection	ExtFP			KlekFP			MACCSFP		
		recall	precision	MCC	recall	precision	MCC	recall	precision	MCC
Naïve Bayes	ZINC_random	0.95	0.96	0.92	0.98	0.92	0.9	0.98	0.95	0.93
	ZINC_diverse	0.99	0.78	0.75	0.98	0.94	0.92	0.97	0.95	0.92
	MDDR_random	0.93	0.93	0.87	0.98	0.87	0.85	0.97	0.94	0.9
	MDDR_diverse	0.93	0.91	0.85	0.98	0.92	0.9	0.97	0.92	0.88
	DUD_random	1	1	0.99	0.99	0.92	0.91	1	1	1
	DUD_diverse	0.99	1	0.99	0.99	0.96	0.92	0.99	0.99	0.97
SMO	ZINC_random	1	1	1	0.99	1	0.99	0.99	1	0.98
	ZINC_diverse	1	0.7	0.65	0.99	1	0.99	0.99	0.95	0.94
	MDDR_random	1	1	1	0.99	1	0.99	0.98	1	0.98
	MDDR_diverse	1	1	1	0.99	1	0.99	0.99	1	0.99
	DUD_random	1	1	1	0.99	1	0.99	1	1	1
	DUD_diverse	1	1	1	0.99	1	0.98	1	1	1
Ibk	ZINC_random	1	0.99	0.99	0.95	0.99	0.94	0.97	0.98	0.96
	ZINC_diverse	1	0.77	0.75	0.93	0.99	0.92	0.98	0.92	0.9
	MDDR_random	0.99	0.97	0.96	0.92	0.99	0.91	0.96	0.97	0.93
	MDDR_diverse	0.99	0.95	0.95	0.91	0.99	0.91	0.97	0.93	0.91
	DUD_random	1	1	1	0.94	0.99	0.94	0.99	1	0.99
	DUD_diverse	1	1	1	0.92	0.99	0.88	0.99	0.99	0.97
Decorate	ZINC_random	1	1	0.99	0.98	1	0.98	0.99	1	0.99
	ZINC_diverse	1	0.7	0.65	0.97	1	0.97	0.97	0.99	0.97
	MDDR_random	1	0.99	0.99	0.99	1	0.99	0.99	1	0.98
	MDDR_diverse	0.99	0.99	0.98	0.98	1	0.98	0.99	1	0.99
	DUD_random	1	1	1	0.98	1	0.98	1	0.99	0.99
	DUD_diverse	1	1	1	0.98	1	0.97	1	0.99	0.98
Hyperpipes	ZINC_random	1	0.97	0.97	1	0.86	0.85	1	0.63	0.53
	ZINC_diverse	1	0.87	0.86	1	0.73	0.69	0.99	0.73	0.68
	MDDR_random	1	0.95	0.95	1	0.81	0.8	1	0.64	0.55
	MDDR_diverse	1	0.98	0.98	1	0.72	0.68	1	0.68	0.62
	DUD_random	1	1	1	1	0.85	0.84	1	0.99	0.99
	DUD_diverse	1	1	1	1	0.81	0.67	1	0.96	0.94
J48	ZINC_random	0.99	0.96	0.95	0.96	0.99	0.95	0.99	1	0.98
	ZINC_diverse	1	0.78	0.75	0.96	1	0.97	0.97	0.97	0.94
	MDDR_random	0.99	0.98	0.97	0.98	1	0.97	0.99	0.99	0.98
	MDDR_diverse	0.98	0.97	0.95	0.96	1	0.96	0.98	1	0.98
	DUD_random	0.99	0.99	0.99	0.96	1	0.96	1	0.99	0.99
	DUD_diverse	0.99	0.99	0.97	0.97	1	0.96	0.99	0.97	0.95
Random Forest	ZINC_random	1	1	0.99	0.98	1	0.98	0.99	1	0.99
	ZINC_diverse	1	0.82	0.8	0.97	1	0.97	0.98	0.97	0.95
	MDDR_random	0.99	0.99	0.99	0.97	1	0.97	0.98	1	0.98
	MDDR_diverse	0.99	0.99	0.99	0.98	0.99	0.97	0.99	0.98	0.97
	DUD_random	1	1	1	0.98	1	0.98	1	1	1
	DUD_diverse	1	1	1	0.98	0.99	0.96	1	0.99	0.98

M ₁ (various-test sets mode)										
ML method	inactives selection	ExtFP			KlekFP			MACCSFP		
		recall	precision	MCC	recall	precision	MCC	recall	precision	MCC
Naïve Bayes	ZINC_random	0.66	0.89	0.57	0.81	0.91	0.73	0.78	0.88	0.66
	ZINC_diverse	0.74	0.91	0.66	0.91	0.9	0.82	0.85	0.97	0.84
	MDDR_random	0.74	0.79	0.53	0.8	0.87	0.67	0.76	0.79	0.55
	MDDR_diverse	0.62	0.83	0.45	0.89	0.88	0.77	0.85	0.78	0.63
	DUD_random	0.92	0.91	0.84	0.9	0.91	0.82	0.9	0.78	0.67
	DUD_diverse	0.76	0.93	0.72	0.91	0.88	0.79	0.84	0.74	0.57
SMO	ZINC_random	0.93	0.97	0.9	0.91	0.96	0.87	0.9	0.95	0.85
	ZINC_diverse	0.98	1	0.98	0.98	0.92	0.9	0.96	0.95	0.92
	MDDR_random	0.9	0.95	0.85	0.93	0.91	0.83	0.84	0.89	0.74
	MDDR_diverse	0.94	0.93	0.87	0.95	0.9	0.85	0.9	0.86	0.76
	DUD_random	0.98	0.95	0.93	0.96	0.94	0.9	0.94	0.92	0.87
	DUD_diverse	0.96	0.88	0.84	0.94	0.91	0.85	0.93	0.86	0.79
Ibk	ZINC_random	0.98	0.85	0.83	0.98	0.82	0.81	0.97	0.87	0.84
	ZINC_diverse	0.99	0.94	0.93	0.99	0.79	0.76	0.99	0.82	0.8
	MDDR_random	0.97	0.76	0.73	0.9	0.83	0.74	0.94	0.82	0.76
	MDDR_diverse	0.94	0.78	0.72	0.97	0.79	0.77	0.98	0.76	0.76
	DUD_random	0.96	0.96	0.92	0.98	0.9	0.87	0.98	0.89	0.87
	DUD_diverse	0.96	0.89	0.85	0.98	0.86	0.84	0.98	0.82	0.78
Decorate	ZINC_random	0.77	0.85	0.62	0.81	0.96	0.78	0.81	0.84	0.64
	ZINC_diverse	0.74	0.91	0.66	0.97	0.92	0.89	0.95	0.93	0.88
	MDDR_random	0.78	0.77	0.56	0.8	0.87	0.67	0.76	0.79	0.55
	MDDR_diverse	0.62	0.83	0.45	0.89	0.88	0.77	0.85	0.78	0.63
	DUD_random	0.96	0.94	0.9	0.93	0.94	0.87	0.93	0.91	0.85
	DUD_diverse	0.95	0.86	0.8	0.94	0.92	0.86	0.9	0.87	0.77
Hyperpipes	ZINC_random	0.99	0.49	0.6	0.86	0.79	0.65	0.99	0.49	0.55
	ZINC_diverse	0.99	0.81	0.8	0.91	0.78	0.68	0.99	0.79	0.77
	MDDR_random	0.98	0.52	0.56	0.84	0.81	0.65	0.98	0.57	0.6
	MDDR_diverse	0.98	0.57	0.6	0.87	0.72	0.59	0.98	0.64	0.66
	DUD_random	0.99	0.58	0.43	0.89	0.73	0.59	0.99	0.59	0.44
	DUD_diverse	0.98	0.58	0.42	0.92	0.71	0.58	0.99	0.6	0.46
J48	ZINC_random	0.85	0.86	0.71	0.88	0.92	0.8	0.88	0.91	0.79
	ZINC_diverse	0.94	0.81	0.75	0.96	0.9	0.87	0.93	0.88	0.82
	MDDR_random	0.86	0.83	0.69	0.87	0.85	0.72	0.85	0.84	0.69
	MDDR_diverse	0.89	0.74	0.63	0.91	0.86	0.76	0.78	0.79	0.57
	DUD_random	0.89	0.89	0.79	0.9	0.92	0.83	0.9	0.89	0.79
	DUD_diverse	0.9	0.81	0.7	0.9	0.9	0.8	0.86	0.85	0.72
Random Forest	ZINC_random	0.93	0.97	0.63	0.94	0.96	0.9	0.92	0.96	0.88
	ZINC_diverse	0.97	1	0.97	0.98	0.93	0.91	0.99	0.96	0.95
	MDDR_random	0.91	0.95	0.86	0.94	0.9	0.84	0.89	0.9	0.79
	MDDR_diverse	0.91	0.93	0.84	0.95	0.9	0.85	0.93	0.87	0.8
	DUD_random	0.97	0.97	0.94	0.96	0.95	0.91	0.95	0.94	0.89
	DUD_diverse	0.96	0.91	0.88	0.96	0.93	0.9	0.94	0.9	0.84

HIV PR (various-test sets mode)										
ML method	inactives selection	ExtFP			KlekFP			MACCSFP		
		recall	precision	MCC	recall	precision	MCC	recall	precision	MCC
Naïve Bayes	ZINC_random	0.91	0.97	0.89	0.93	0.92	0.86	0.85	0.87	0.75
	ZINC_diverse	0.98	0.75	0.72	0.96	0.93	0.89	0.96	0.89	0.85
	MDDR_random	0.85	0.87	0.74	0.86	0.84	0.72	0.76	0.82	0.63
	MDDR_diverse	0.92	0.84	0.76	0.92	0.86	0.79	0.89	0.86	0.76
	DUD_random	0.99	1	0.99	0.94	0.93	0.88	0.98	0.97	0.96
	DUD_diverse	0.99	0.99	0.98	0.92	0.91	0.84	0.95	0.94	0.9
SMO	ZINC_random	0.99	0.97	0.97	0.98	0.97	0.96	0.95	0.94	0.9
	ZINC_diverse	1	0.64	0.58	0.99	0.97	0.96	0.99	0.86	0.86
	MDDR_random	0.95	0.93	0.88	0.96	0.92	0.88	0.89	0.87	0.78
	MDDR_diverse	0.97	0.95	0.93	0.97	0.93	0.9	0.95	0.9	0.86
	DUD_random	1	1	1	0.98	0.98	0.97	0.99	0.98	0.98
	DUD_diverse	1	1	1	0.97	0.98	0.95	0.99	0.98	0.97
Ibk	ZINC_random	0.99	0.96	0.95	0.98	0.94	0.92	0.97	0.87	0.85
	ZINC_diverse	1	0.71	0.68	0.99	0.94	0.94	1	0.83	0.83
	MDDR_random	0.98	0.87	0.85	0.97	0.88	0.86	0.96	0.79	0.75
	MDDR_diverse	0.99	0.89	0.88	0.98	0.93	0.91	0.98	0.81	0.79
	DUD_random	1	1	1	0.98	0.97	0.96	0.99	0.98	0.98
	DUD_diverse	1	1	1	0.98	0.96	0.94	0.99	0.96	0.95
Decorate	ZINC_random	0.95	0.97	0.92	0.95	0.96	0.92	0.91	0.94	0.87
	ZINC_diverse	1	0.49	0.25	0.98	0.98	0.96	0.99	0.87	0.86
	MDDR_random	0.91	0.93	0.85	0.93	0.93	0.86	0.88	0.89	0.79
	MDDR_diverse	0.97	0.94	0.91	0.96	0.92	0.89	0.93	0.91	0.85
	DUD_random	1	1	1	0.96	0.97	0.94	0.99	0.98	0.98
	DUD_diverse	0.99	1	1	0.96	0.97	0.94	1	0.96	0.96
Hyperpipes	ZINC_random	1	0.46	0.1	0.91	0.74	0.64	0.99	0.51	0.29
	ZINC_diverse	1	0.51	0.32	0.95	0.87	0.82	0.98	0.79	0.77
	MDDR_random	1	0.47	0.14	0.86	0.76	0.63	0.98	0.55	0.38
	MDDR_diverse	1	0.52	0.33	0.89	0.78	0.68	0.98	0.63	0.55
	DUD_random	1	1	1	0.96	0.79	0.74	1	0.98	0.98
	DUD_diverse	1	1	1	0.94	0.76	0.69	0.99	0.94	0.94
J48	ZINC_random	0.93	0.9	0.84	0.94	0.94	0.88	0.88	0.9	0.8
	ZINC_diverse	1	0.53	0.37	0.95	0.97	0.93	0.98	0.87	0.85
	MDDR_random	0.86	0.84	0.72	0.9	0.9	0.82	0.84	0.84	0.71
	MDDR_diverse	0.92	0.85	0.77	0.94	0.9	0.85	0.95	0.83	0.79
	DUD_random	0.99	0.99	0.99	0.94	0.96	0.91	0.99	0.98	0.98
	DUD_diverse	0.99	0.99	0.98	0.94	0.96	0.92	0.98	0.97	0.95
Random Forest	ZINC_random	0.95	0.99	0.95	0.97	0.99	0.96	0.95	0.97	0.93
	ZINC_diverse	1	0.77	0.76	0.98	0.98	0.96	1	0.92	0.92
	MDDR_random	0.9	0.98	0.89	0.95	0.96	0.92	0.92	0.93	0.86
	MDDR_diverse	0.97	0.98	0.95	0.96	0.96	0.93	0.97	0.94	0.91
	DUD_random	1	1	1	0.97	0.98	0.96	1	0.99	0.98
	DUD_diverse	1	1	1	0.96	0.99	0.96	0.99	0.97	0.97

metalloproteinase (various-test sets mode)										
ML method	inactives selection	ExtFP			KlekFP			MACCSFP		
		recall	precision	MCC	recall	precision	MCC	recall	precision	MCC
Naïve Bayes	ZINC_random	0.82	0.92	0.78	0.87	0.88	0.77	0.76	0.81	0.62
	ZINC_diverse	0.97	0.66	0.6	0.95	0.91	0.87	0.95	0.9	0.86
	MDDR_random	0.84	0.73	0.58	0.87	0.86	0.75	0.74	0.81	0.61
	MDDR_diverse	0.89	0.93	0.84	0.92	0.86	0.79	0.88	0.85	0.75
	DUD_random	1	0.99	0.99	0.88	0.87	0.77	0.99	0.95	0.95
	DUD_diverse	0.99	1	0.98	0.89	0.88	0.79	0.96	0.86	0.83
SMO	ZINC_random	0.91	0.96	0.89	0.94	0.96	0.92	0.91	0.92	0.85
	ZINC_diverse	1	0.58	0.49	0.97	0.97	0.95	0.98	0.93	0.92
	MDDR_random	0.88	0.92	0.82	0.9	0.92	0.84	0.83	0.87	0.73
	MDDR_diverse	0.93	0.95	0.89	0.95	0.94	0.9	0.93	0.9	0.84
	DUD_random	1	1	1	0.95	0.96	0.92	0.99	0.97	0.96
	DUD_diverse	1	1	1	0.95	0.95	0.91	0.98	0.91	0.9
Ibk	ZINC_random	0.93	0.9	0.85	0.93	0.91	0.85	0.94	0.88	0.83
	ZINC_diverse	0.99	0.69	0.65	0.97	0.94	0.92	0.99	0.85	0.85
	MDDR_random	0.94	0.79	0.74	0.93	0.87	0.82	0.94	0.81	0.76
	MDDR_diverse	0.95	0.85	0.81	0.94	0.92	0.87	0.97	0.81	0.79
	DUD_random	1	1	1	0.93	0.94	0.89	0.98	0.97	0.95
	DUD_diverse	0.99	1	0.99	0.94	0.91	0.87	0.99	0.92	0.91
Decorate	ZINC_random	0.87	0.94	0.84	0.9	0.96	0.87	0.88	0.94	0.84
	ZINC_diverse	1	0.49	0.27	0.95	0.96	0.93	0.96	0.9	0.87
	MDDR_random	0.81	0.92	0.77	0.87	0.94	0.84	0.86	0.89	0.77
	MDDR_diverse	0.91	0.92	0.85	0.92	0.96	0.89	0.94	0.91	0.86
	DUD_random	0.94	1	0.95	0.91	0.96	0.88	0.99	0.96	0.96
	DUD_diverse	1	1	1	0.92	0.97	0.91	1	0.89	0.89
Hyperpipes	ZINC_random	1	0.45	0.04	0.93	0.71	0.62	0.99	0.49	0.28
	ZINC_diverse	0.99	0.49	0.28	0.98	0.87	0.86	0.98	0.77	0.74
	MDDR_random	0.99	0.46	0.16	0.84	0.72	0.58	0.98	0.56	0.43
	MDDR_diverse	0.99	0.51	0.32	0.88	0.73	0.62	0.98	0.62	0.54
	DUD_random	1	1	0.99	0.96	0.73	0.68	1	0.47	0.22
	DUD_diverse	0.99	0.98	0.98	0.95	0.74	0.69	0.99	0.51	0.32
J48	ZINC_random	0.82	0.83	0.68	0.87	0.93	0.83	0.84	0.89	0.76
	ZINC_diverse	0.99	0.65	0.59	0.94	0.96	0.91	0.94	0.89	0.84
	MDDR_random	0.76	0.77	0.58	0.83	0.91	0.77	0.83	0.84	0.7
	MDDR_diverse	0.87	0.86	0.76	0.92	0.91	0.85	0.89	0.87	0.78
	DUD_random	1	0.99	0.99	0.88	0.94	0.85	0.97	0.96	0.93
	DUD_diverse	0.99	0.99	0.98	0.9	0.93	0.84	0.97	0.87	0.85
Random Forest	ZINC_random	0.87	0.99	0.88	0.9	0.98	0.89	0.9	0.96	0.87
	ZINC_diverse	0.99	0.7	0.67	0.96	0.96	0.93	0.98	0.93	0.91
	MDDR_random	0.82	0.97	0.82	0.9	0.95	0.87	0.88	0.92	0.82
	MDDR_diverse	0.91	0.98	0.91	0.96	0.93	0.9	0.95	0.93	0.89
	DUD_random	1	1	1	0.92	0.98	0.91	1	0.97	0.96
	DUD_diverse	1	1	1	0.93	0.98	0.92	1	0.91	0.91

5-HT _{1A} (various-test sets mode)										
ML method	inactives selection	ExtFP			KlekFP			MACCSFP		
		recall	precision	MCC	recall	precision	MCC	recall	precision	MCC
Naïve Bayes	ZINC_random	0.86	0.86	0.74	0.88	0.91	0.8	0.87	0.8	0.68
	ZINC_diverse	0.99	0.65	0.59	0.95	0.89	0.85	0.92	0.84	0.76
	MDDR_random	0.88	0.7	0.57	0.89	0.81	0.71	0.83	0.72	0.55
	MDDR_diverse	0.94	0.86	0.81	0.93	0.84	0.77	0.92	0.72	0.62
	DUD_random	1	0.99	0.99	0.91	0.85	0.77	0.95	0.97	0.93
	DUD_diverse	1	0.98	0.98	0.91	0.82	0.73	0.95	0.92	0.88
SMO	ZINC_random	0.95	0.95	0.91	0.94	0.94	0.89	0.93	0.93	0.87
	ZINC_diverse	1	0.58	0.48	0.96	0.95	0.92	0.99	0.84	0.83
	MDDR_random	0.92	0.9	0.83	0.92	0.88	0.81	0.84	0.84	0.71
	MDDR_diverse	0.95	0.93	0.89	0.94	0.9	0.85	0.92	0.83	0.76
	DUD_random	1	1	1	0.94	0.94	0.89	1	0.99	0.99
	DUD_diverse	1	1	1	0.94	0.92	0.87	0.99	0.95	0.94
Ibk	ZINC_random	0.96	0.88	0.84	0.95	0.84	0.8	0.96	0.85	0.81
	ZINC_diverse	1	0.69	0.65	0.97	0.9	0.87	1	0.75	0.73
	MDDR_random	0.97	0.77	0.73	0.94	0.79	0.73	0.94	0.76	0.69
	MDDR_diverse	0.97	0.8	0.76	0.94	0.86	0.81	0.97	0.75	0.71
	DUD_random	1	1	1	0.95	0.91	0.86	0.98	0.98	0.97
	DUD_diverse	1	1	1	0.94	0.87	0.81	0.99	0.92	0.92
Decorate	ZINC_random	0.87	0.91	0.81	0.9	0.93	0.84	0.92	0.94	0.86
	ZINC_diverse	1	0.5	0.25	0.96	0.96	0.92	0.99	0.83	0.82
	MDDR_random	0.86	0.87	0.75	0.89	0.88	0.78	0.85	0.85	0.72
	MDDR_diverse	0.93	0.87	0.81	0.94	0.91	0.85	0.88	0.82	0.71
	DUD_random	1	1	1	0.93	0.93	0.87	1	0.99	0.99
	DUD_diverse	1	1	1	0.9	0.92	0.84	1	0.91	0.92
Hyperpipes	ZINC_random	1	0.5	0.25	0.87	0.81	0.69	0.99	0.52	0.31
	ZINC_diverse	1	0.59	0.49	0.91	0.84	0.76	0.99	0.82	0.81
	MDDR_random	1	0.52	0.32	0.84	0.82	0.68	0.99	0.56	0.42
	MDDR_diverse	1	0.6	0.51	0.87	0.79	0.67	0.99	0.64	0.57
	DUD_random	1	1	1	0.9	0.8	0.71	1	0.96	0.96
	DUD_diverse	1	1	1	0.9	0.79	0.69	1	0.89	0.89
J48	ZINC_random	0.81	0.83	0.67	0.87	0.9	0.78	0.88	0.91	0.81
	ZINC_diverse	0.99	0.47	0.1	0.92	0.92	0.86	0.99	0.82	0.8
	MDDR_random	0.77	0.77	0.57	0.86	0.85	0.73	0.82	0.81	0.65
	MDDR_diverse	0.85	0.8	0.67	0.9	0.83	0.74	0.89	0.81	0.71
	DUD_random	0.99	0.99	0.99	0.91	0.9	0.82	0.99	0.99	0.98
	DUD_diverse	1	0.99	0.98	0.94	0.92	0.87	1	0.91	0.91
Random Forest	ZINC_random	0.88	0.98	0.88	0.92	0.96	0.89	0.94	0.95	0.9
	ZINC_diverse	1	0.65	0.59	0.97	0.95	0.92	0.99	0.87	0.86
	MDDR_random	0.86	0.95	0.83	0.91	0.91	0.83	0.88	0.9	0.8
	MDDR_diverse	0.94	0.95	0.9	0.95	0.94	0.9	0.94	0.88	0.83
	DUD_random	1	1	1	0.94	0.95	0.9	0.99	0.99	0.99
	DUD_diverse	1	1	1	0.94	0.94	0.89	0.99	0.95	0.94

Table S3. Standard deviation of evaluating parameters values.

Standard deviation (common-test set mode)										
ML method	inactives selection	ExtFP			KlekFP			MACCSFP		
		recall	precision	MCC	recall	precision	MCC	recall	precision	MCC
COX-2	Naïve Bayes	0.03	0.187	0.23	0.006	0.029	0.032	0.013	0.05	0.047
	SMO	0	0.255	0.376	0.003	0	0.003	0.007	0.058	0.054
	Ibk	0.006	0.122	0.133	0.015	0.007	0.016	0.012	0.041	0.039
	Decorate	0.002	0.212	0.277	0.005	0	0.005	0.009	0.16	0.2
	Hyperpipes	0.001	0.053	0.055	0	0.049	0.06	0.004	0.019	0.038
	J48	0.011	0.182	0.256	0.006	0.005	0.009	0.01	0.158	0.2
	Random Forest	0.007	0.168	0.203	0.007	0.008	0.011	0.007	0.107	0.119
M ₁	Naïve Bayes	0.121	0.137	0.135	0.039	0.097	0.099	0.05	0.064	0.073
	SMO	0.037	0.184	0.298	0.014	0.132	0.167	0.019	0.139	0.219
	Ibk	0.016	0.173	0.212	0.02	0.101	0.129	0.02	0.12	0.179
	Decorate	0.123	0.125	0.221	0.025	0.11	0.124	0.026	0.139	0.206
	Hyperpipes	0.003	0.05	0.233	0.028	0.039	0.056	0.004	0.003	0.064
	J48	0.052	0.144	0.203	0.031	0.111	0.125	0.036	0.13	0.232
	Random Forest	0.031	0.18	0.284	0.025	0.106	0.111	0.03	0.135	0.175
HIV PR	Naïve Bayes	0.055	0.215	0.281	0.036	0.108	0.107	0.083	0.131	0.14
	SMO	0.019	0.235	0.377	0.014	0.086	0.102	0.04	0.158	0.2
	Ibk	0.006	0.179	0.239	0.006	0.055	0.057	0.016	0.109	0.138
	Decorate	0.035	0.229	0.32	0.017	0.077	0.09	0.05	0.178	0.222
	Hyperpipes	0.005	0.018	0.05	0.084	0.062	0.079	0.007	0.007	0.029
	J48	0.053	0.178	0.279	0.019	0.07	0.089	0.063	0.154	0.203
	Random Forest	0.038	0.233	0.3	0.012	0.075	0.084	0.033	0.187	0.231
metalloproteinase	Naïve Bayes	0.08	0.235	0.343	0.03	0.126	0.146	0.101	0.108	0.071
	SMO	0.045	0.265	0.438	0.011	0.118	0.125	0.036	0.159	0.169
	Ibk	0.028	0.209	0.324	0.015	0.091	0.094	0.024	0.13	0.152
	Decorate	0.06	0.24	0.392	0.023	0.076	0.064	0.052	0.189	0.218
	Hyperpipes	0.002	0.003	0.02	0.035	0.046	0.071	0.008	0.003	0.012
	J48	0.087	0.171	0.245	0.026	0.082	0.068	0.057	0.164	0.189
	Random Forest	0.061	0.276	0.407	0.026	0.115	0.104	0.045	0.18	0.186
5-HT _{1A}	Naïve Bayes	0.062	0.156	0.26	0.027	0.126	0.15	0.047	0.092	0.112
	SMO	0.035	0.235	0.407	0.015	0.1	0.115	0.062	0.139	0.157
	Ibk	0.019	0.148	0.237	0.011	0.061	0.077	0.022	0.099	0.127
	Decorate	0.067	0.214	0.352	0.028	0.09	0.09	0.067	0.171	0.209
	Hyperpipes	0.001	0.008	0.033	0.028	0.049	0.047	0.001	0.002	0.004
	J48	0.101	0.165	0.266	0.031	0.097	0.105	0.075	0.153	0.192
	Random Forest	0.064	0.248	0.371	0.02	0.096	0.095	0.045	0.159	0.178

Standard deviation (various-test sets mode)										
ML method	inactives selection	ExtFP			KlekFP			MACCSFP		
		recall	precision	MCC	recall	precision	MCC	recall	precision	MCC
COX-2	Naïve Bayes	0.029	0.082	0.094	0.006	0.028	0.027	0.013	0.032	0.041
	SMO	0	0.123	0.144	0.003	0	0.004	0.008	0.02	0.022
	Ibk	0.004	0.087	0.096	0.013	0.003	0.022	0.011	0.033	0.035
	Decorate	0.003	0.119	0.139	0.005	0	0.006	0.009	0.005	0.009
	Hyperpipes	0.001	0.05	0.051	0	0.059	0.085	0.004	0.162	0.199
	J48	0.006	0.083	0.089	0.006	0.006	0.008	0.009	0.013	0.02
	Random Forest	0.003	0.074	0.078	0.006	0.003	0.009	0.007	0.013	0.016
M ₁	Naïve Bayes	0.105	0.053	0.138	0.052	0.017	0.058	0.05	0.086	0.103
	SMO	0.03	0.041	0.054	0.025	0.023	0.029	0.042	0.042	0.068
	Ibk	0.018	0.085	0.091	0.032	0.041	0.05	0.016	0.046	0.045
	Decorate	0.131	0.059	0.163	0.071	0.032	0.082	0.072	0.064	0.132
	Hyperpipes	0.002	0.114	0.139	0.029	0.043	0.04	0.002	0.102	0.125
	J48	0.032	0.051	0.055	0.033	0.031	0.052	0.05	0.045	0.093
	Random Forest	0.029	0.031	0.121	0.015	0.023	0.031	0.032	0.036	0.061
HIV PR	Naïve Bayes	0.058	0.1	0.123	0.034	0.038	0.066	0.082	0.056	0.12
	SMO	0.02	0.138	0.16	0.013	0.026	0.035	0.04	0.052	0.076
	Ibk	0.006	0.11	0.12	0.006	0.033	0.036	0.015	0.079	0.091
	Decorate	0.036	0.196	0.284	0.017	0.025	0.036	0.05	0.045	0.073
	Hyperpipes	0.001	0.263	0.412	0.038	0.044	0.072	0.007	0.202	0.289
	J48	0.054	0.169	0.226	0.019	0.031	0.043	0.063	0.063	0.104
	Random Forest	0.039	0.089	0.09	0.01	0.013	0.019	0.033	0.027	0.045
metalloproteinase	Naïve Bayes	0.077	0.142	0.179	0.031	0.021	0.041	0.105	0.056	0.135
	SMO	0.052	0.161	0.189	0.023	0.02	0.038	0.061	0.035	0.081
	Ibk	0.029	0.122	0.138	0.016	0.026	0.035	0.025	0.063	0.075
	Decorate	0.074	0.195	0.265	0.028	0.009	0.031	0.058	0.032	0.06
	Hyperpipes	0.002	0.266	0.418	0.053	0.061	0.099	0.008	0.111	0.194
	J48	0.103	0.131	0.184	0.036	0.02	0.044	0.062	0.041	0.081
	Random Forest	0.077	0.119	0.125	0.027	0.018	0.021	0.052	0.023	0.048
5-HT _{1A}	Naïve Bayes	0.062	0.141	0.184	0.027	0.039	0.049	0.047	0.104	0.148
	SMO	0.035	0.157	0.195	0.014	0.029	0.04	0.062	0.068	0.108
	Ibk	0.019	0.127	0.146	0.011	0.043	0.052	0.022	0.098	0.115
	Decorate	0.067	0.187	0.273	0.027	0.025	0.045	0.067	0.067	0.109
	Hyperpipes	0.001	0.235	0.331	0.028	0.02	0.034	0.003	0.184	0.265
	J48	0.101	0.191	0.327	0.031	0.04	0.06	0.075	0.074	0.122
	Random Forest	0.064	0.136	0.152	0.02	0.019	0.031	0.045	0.049	0.071