



Supporting Information

© Copyright Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 69451 Weinheim, 2007

Supporting Information

Prediction of Tyrosinase Inhibition Spectra for Chemicals Using Novel Atom-Based Bilinear Indices.

Yovani Marrero Ponce, Mahmud Tareq Hassan Khan, Gerardo M. Casañola

Martín, Arjumand Ather, Mukhlis N. Sultankhodzhaev, Francisco Torrens and
Richard Rotondo.

Table of Contents

Table 1. Structures of Compounds Selected From the Literature for Developing the QSAR Models.....	2
Table 2. Results of the Classification of Active Compounds in the Training Set by the Use of LDA-QSAR Models Developed Using non-Stochastic Total and Local Bilinear Indices Calculated with Different Weighting Scheme.....	17
Table 3. Results of the Classification of Active Compounds in the Training Set by the Use of LDA-QSAR Models Developed Using Stochastic Total and Local Bilinear Indices Calculated with Different Weighting Scheme.....	23
Table 4. Results of the Classification of Inactive Compounds in the Training Set by the Use of LDA-QSAR Models Developed Using non-Stochastic Total and Local Bilinear Indices Calculated with Different Weighting Scheme.....	31
Table 5. Results of the Classification of Inactive Compounds in the Training Set by the Use of LDA-QSAR Models Developed Using Stochastic Total and Local Bilinear Indices Calculated with Different Weighting Scheme.....	41
Table 6. Results of the Classification of Active Compounds in the Test Set by the Use of LDA-QSAR Models Developed Using non-Stochastic Total and Local Bilinear Indices Calculated with Different Weighting Scheme.....	51
Table 7. Results of the Classification of Active Compounds in the Test Set by the Use of LDA-QSAR Models Developed Using Stochastic Total and Local Quadratic Indices Calculated with Different Weighting Scheme.....	54
Table 8. Results of the Classification of Inactive Compounds in the Test Set by the Use of LDA-QSAR Models Developed Using non-Stochastic Total and Local Bilinear Indices Calculated with Different Weighting Scheme.....	57
Table 9. Results of the Classification of Inactive Compounds in the Test Set by the Use of LDA-QSAR Models Developed Using Stochastic Total and Local Bilinear Indices Calculated with Different Weighting Scheme.....	61
Table 10. Structures of the Compounds Used in Virtual Screening.....	65
Table 11. Results of the Classification of Compounds in the Virtual Screening Set.	69

Table 1. Structures of Compounds Selected From the Literature for Developing the QSAR Models.

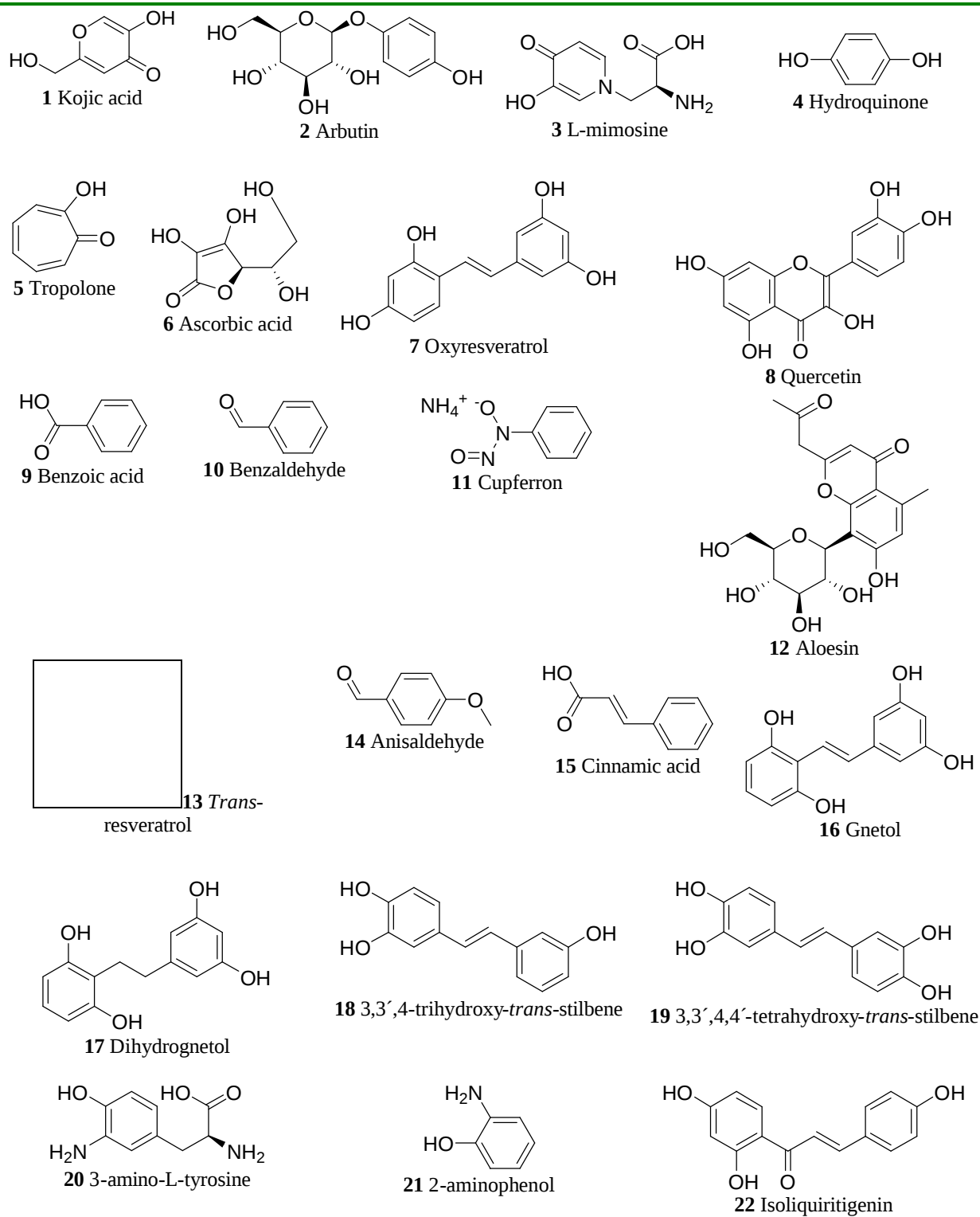


Table 1. Cont.

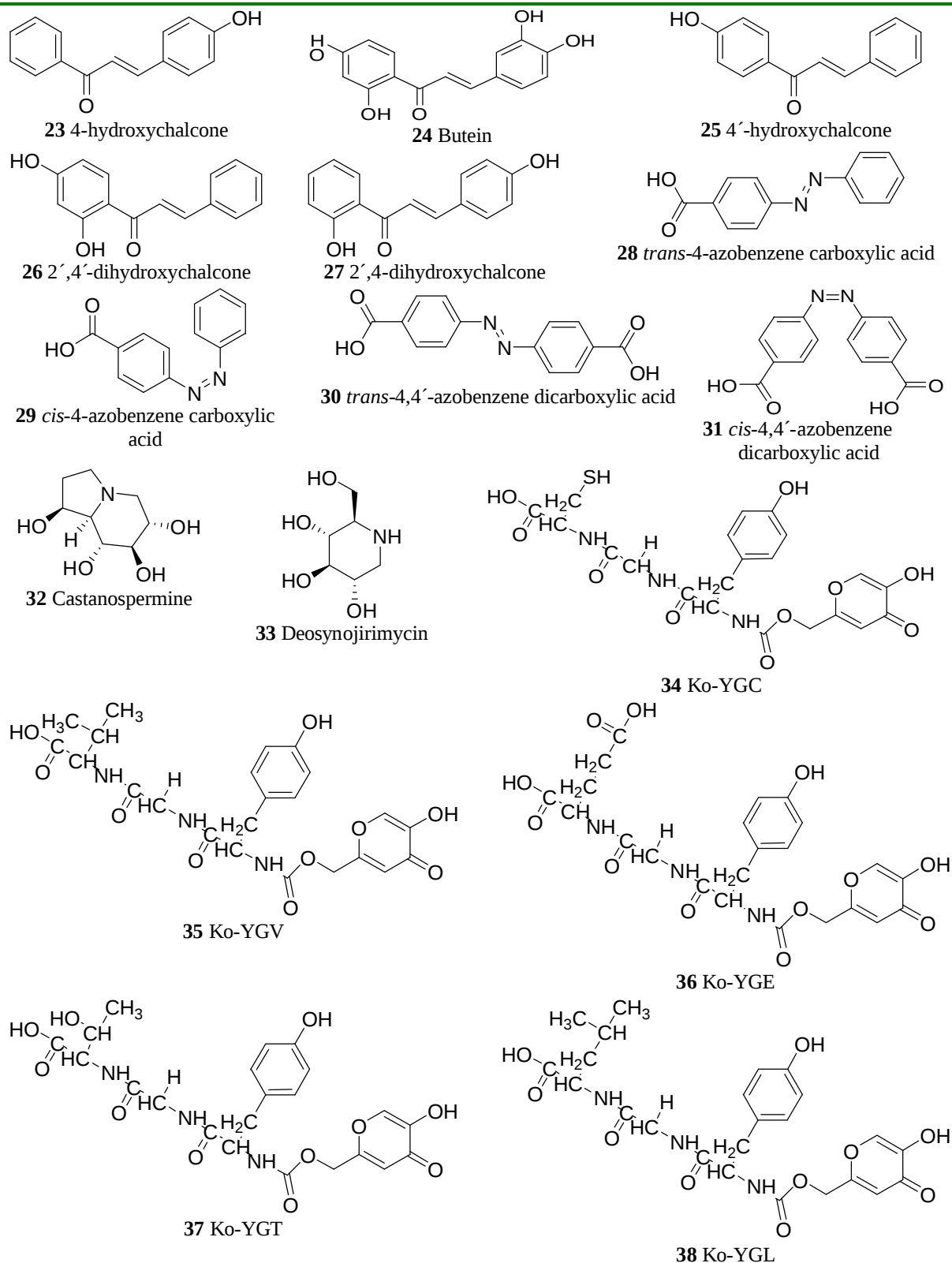


Table 1. Cont.

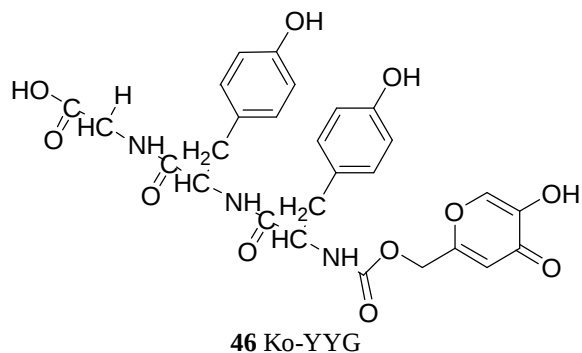
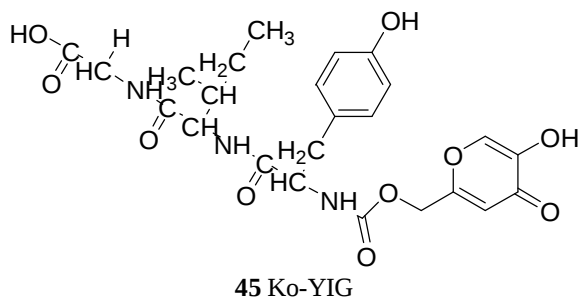
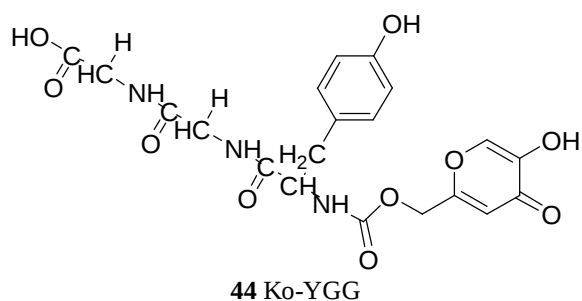
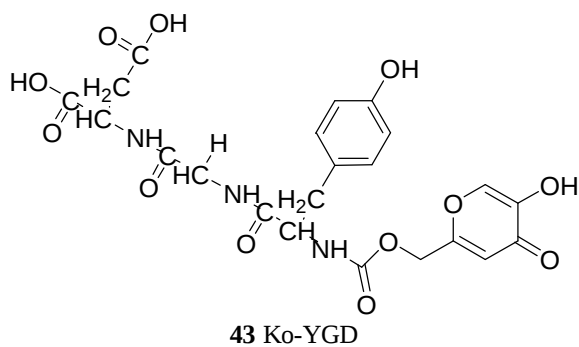
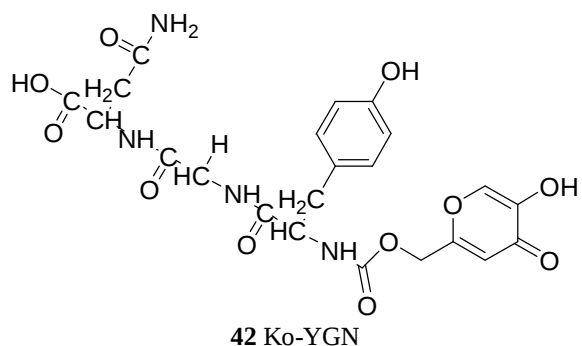
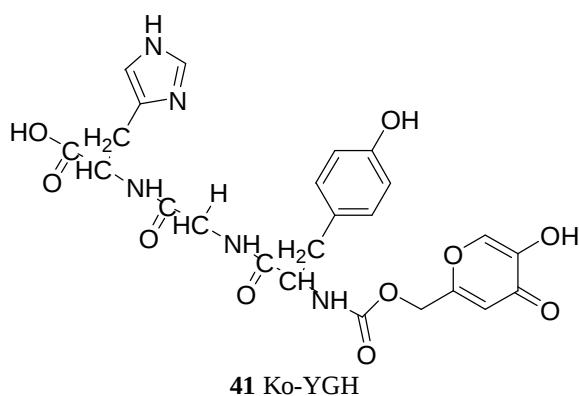
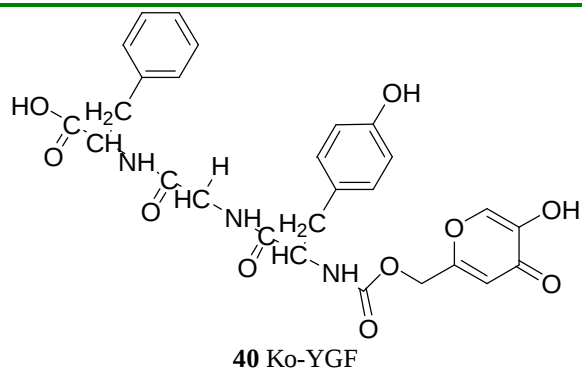
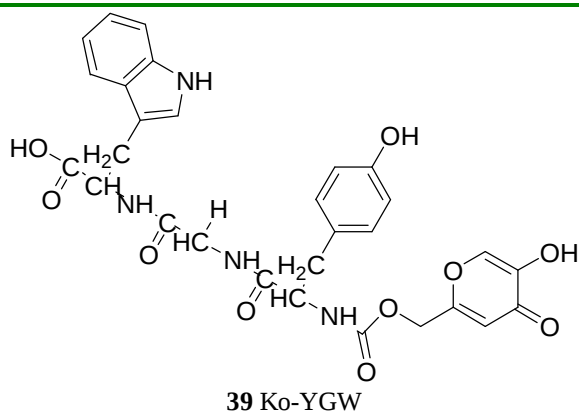


Table 1. Cont.

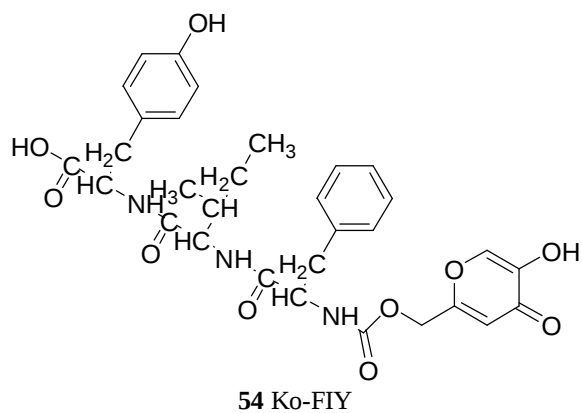
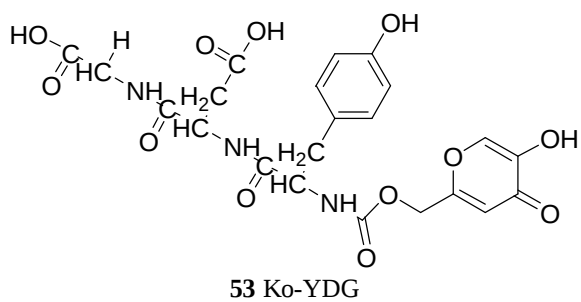
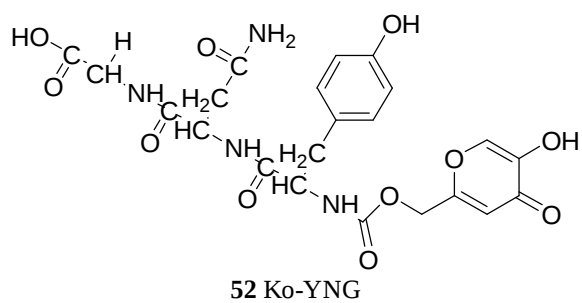
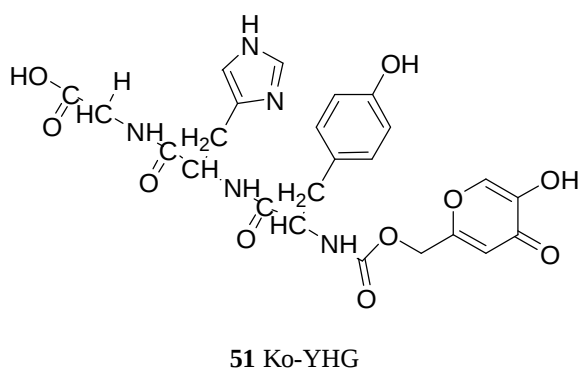
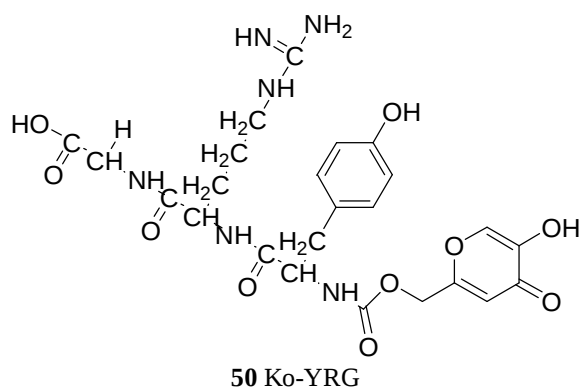
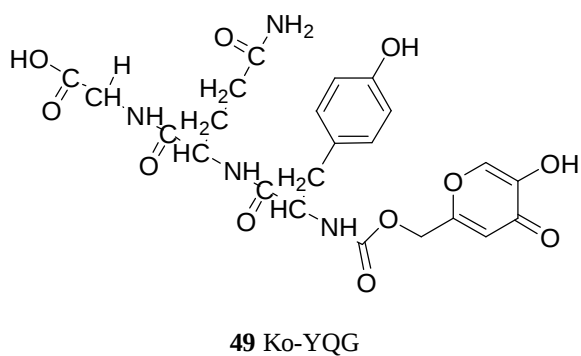
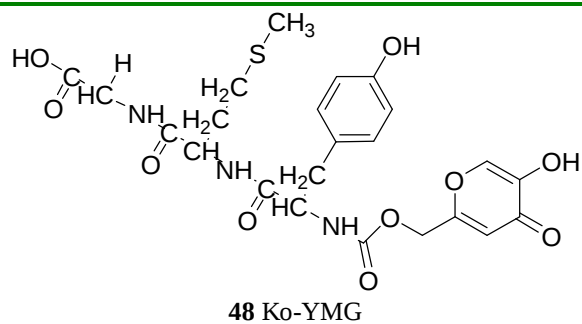
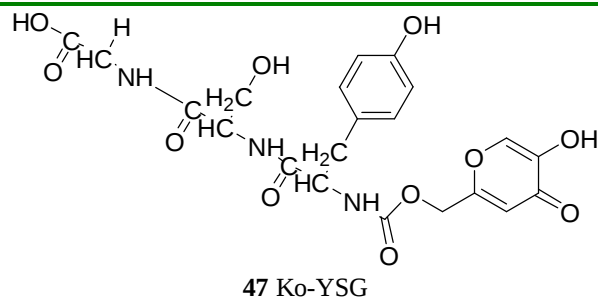
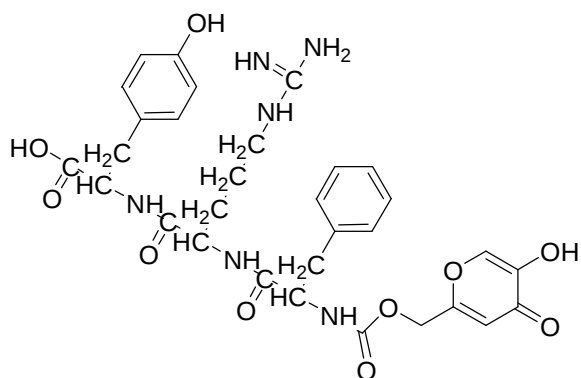
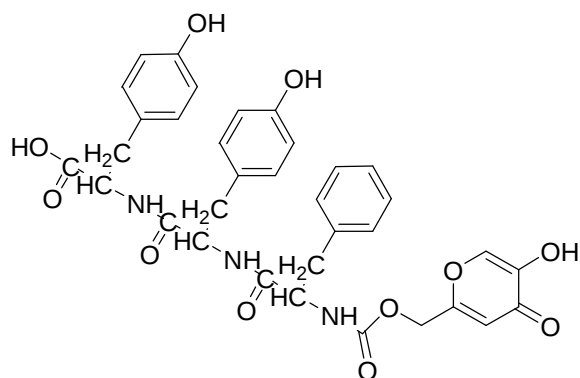


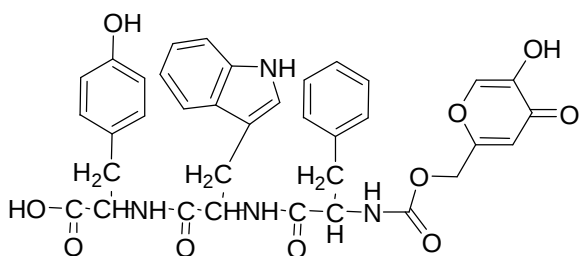
Table 1. Cont.



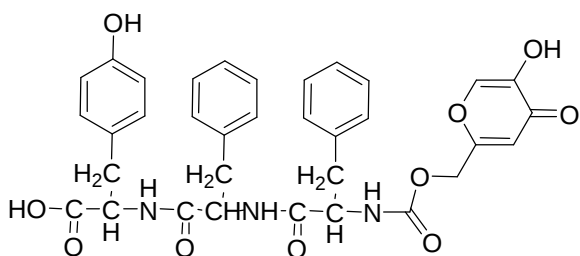
55 Ko-FRY



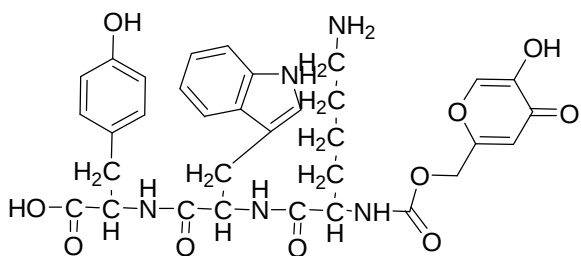
56 Ko-FYY



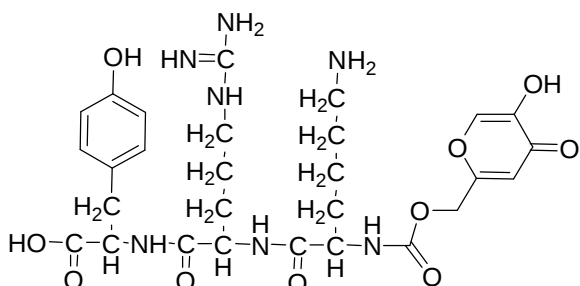
57 Ko-FWY



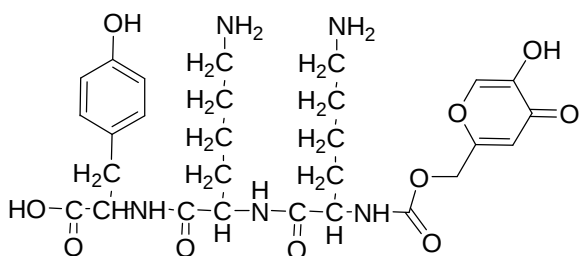
58 Ko-FFY



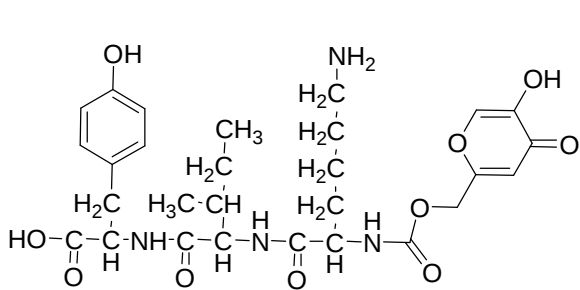
59 Ko-KWY



60 Ko-KRY

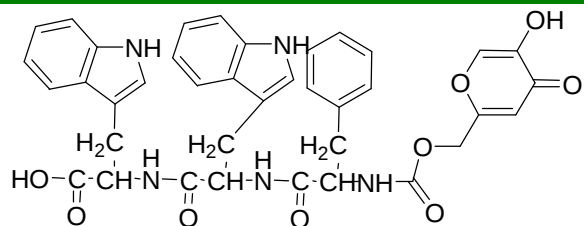


61 Ko-KKY

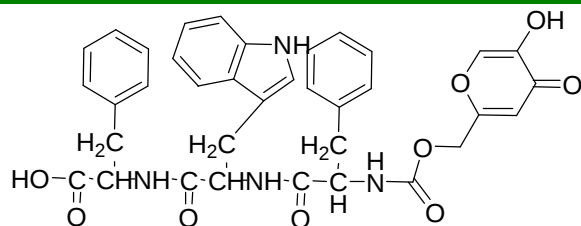


62 Ko-KIY

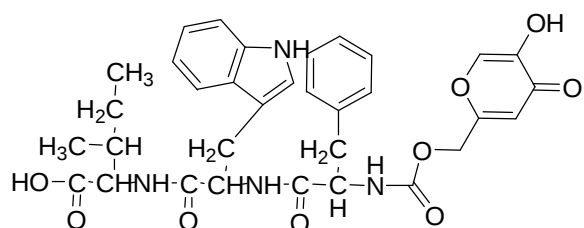
Table 1. Cont.



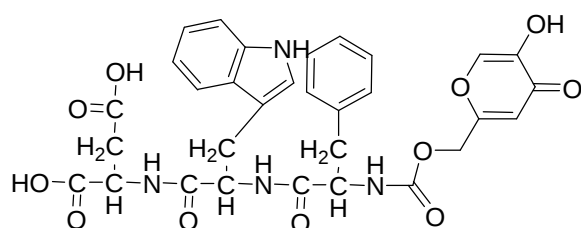
63 Ko-FWW



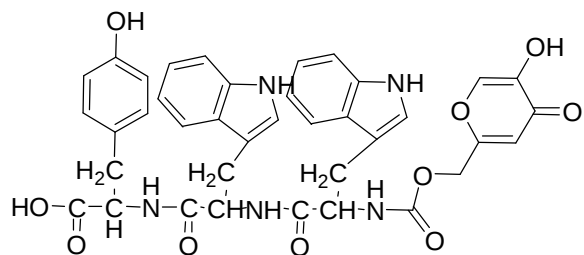
64 Ko-FWF



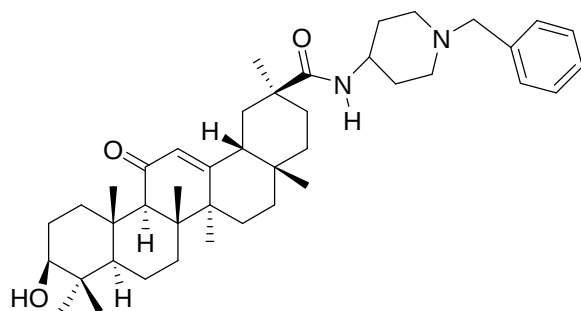
65 Ko-FWI



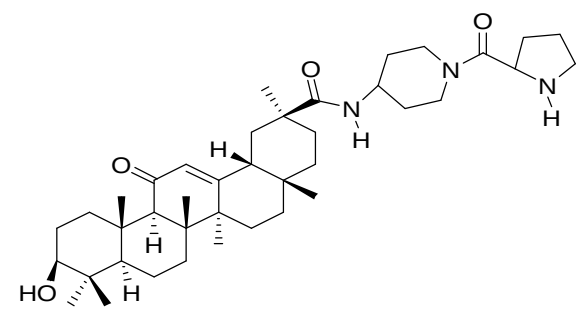
66 Ko-FWD



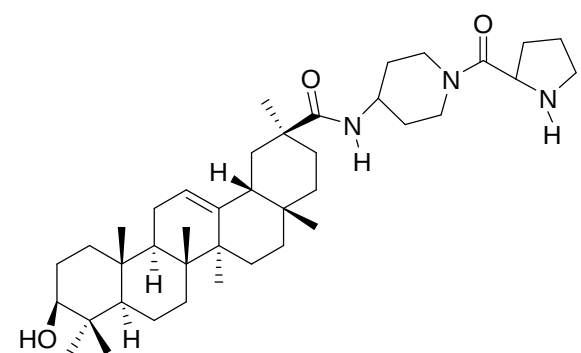
67 Ko-WWY



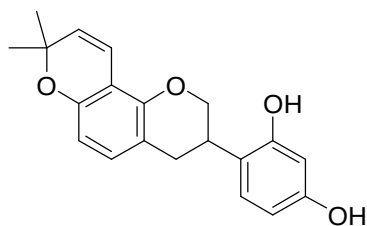
68



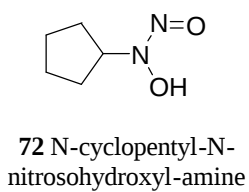
69



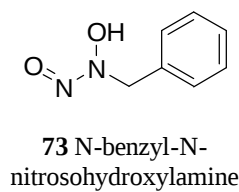
70



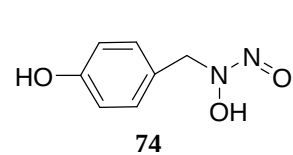
71 Glabridin



72 N-cyclopentyl-N-nitrosohydroxylamine



73 N-benzyl-N-nitrosohydroxylamine



74

Table 1. Cont.

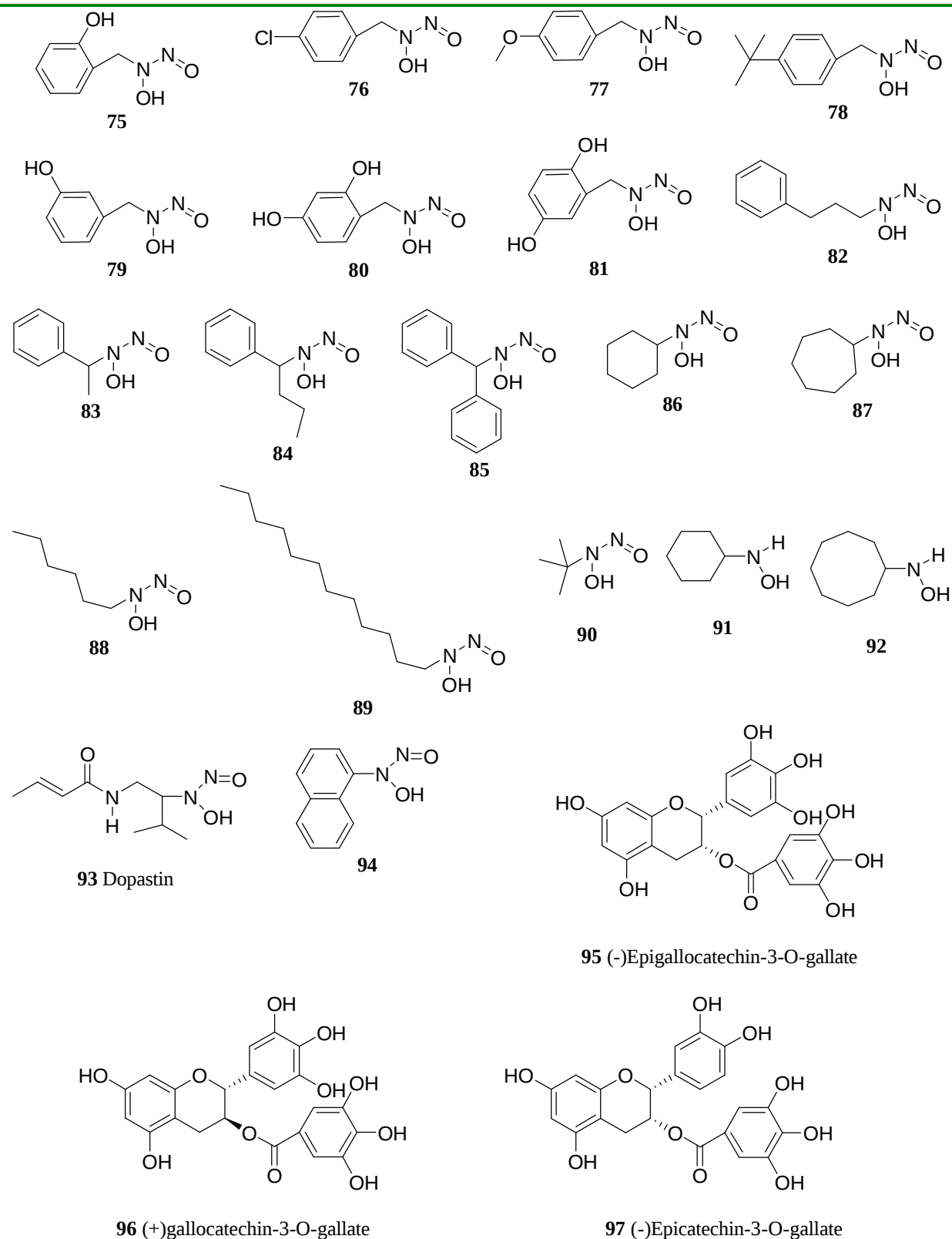


Table 1. Cont.

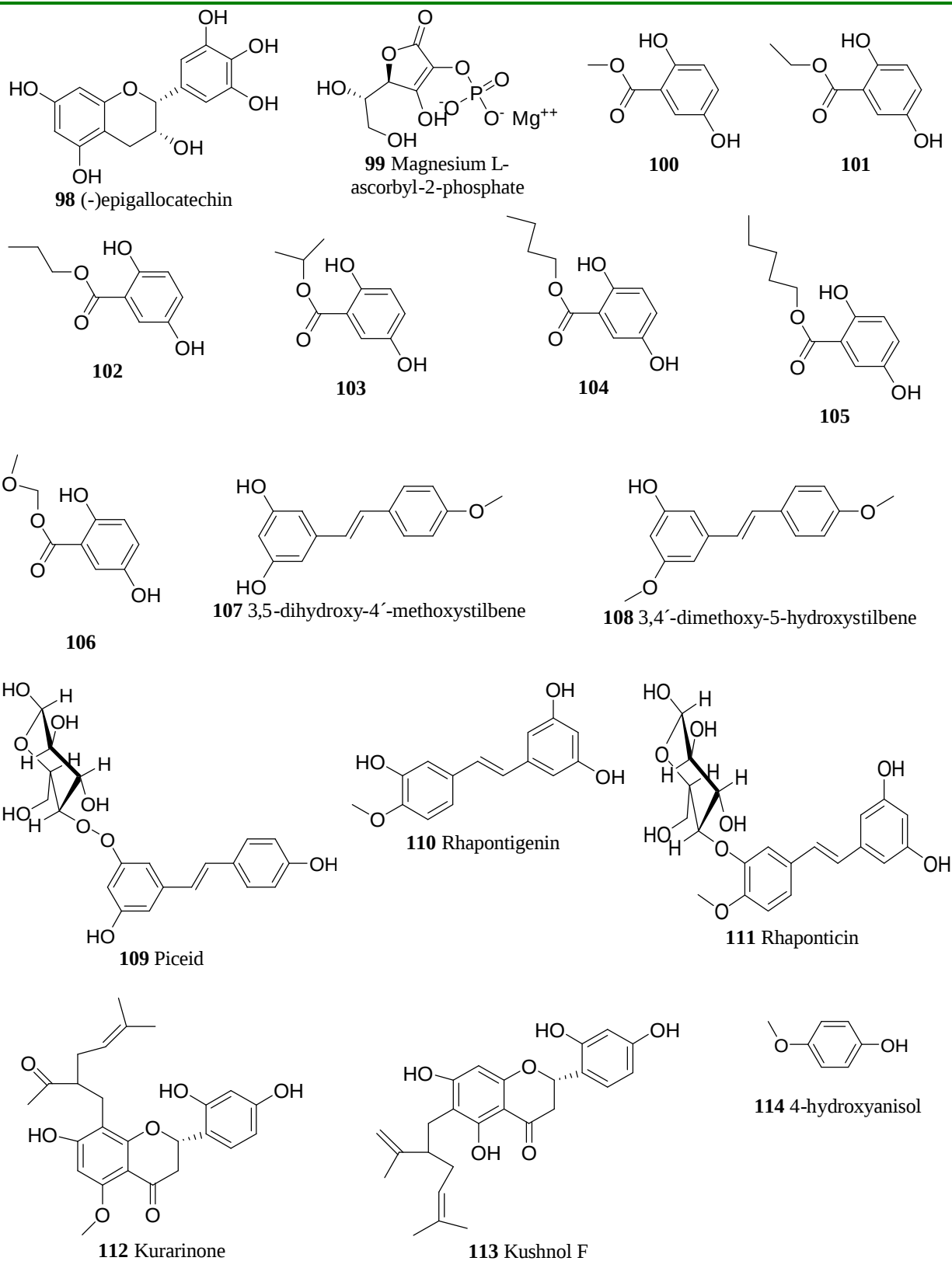


Table 1. Cont.

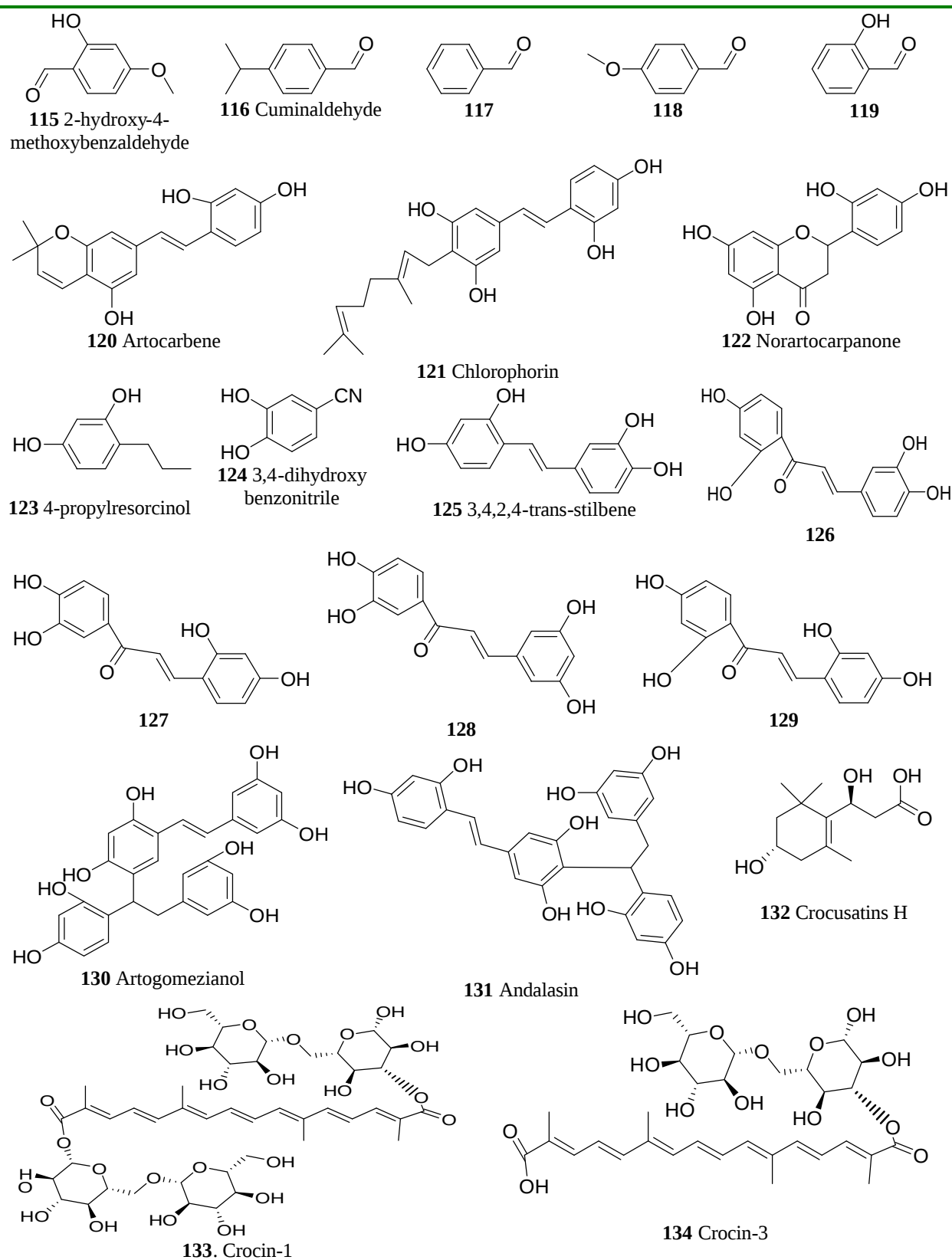


Table 1. Cont.

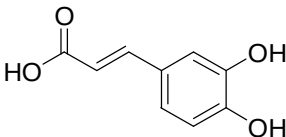
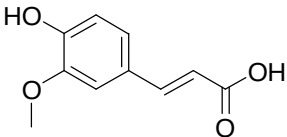
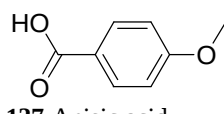
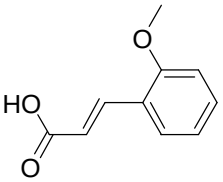
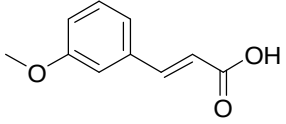
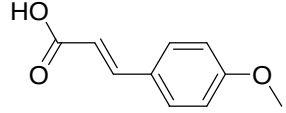
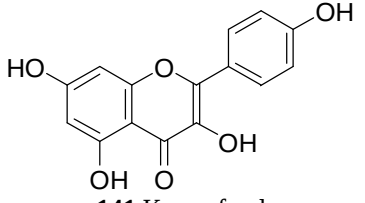
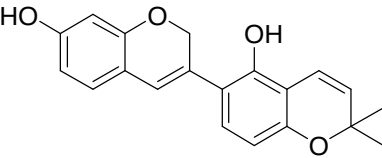
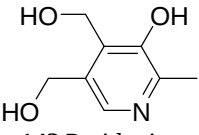
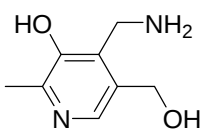
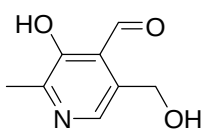
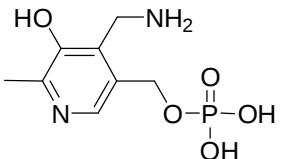
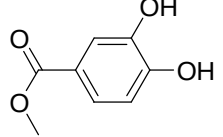
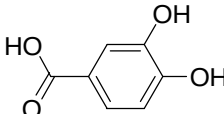
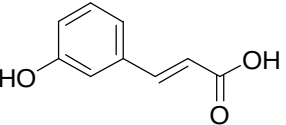
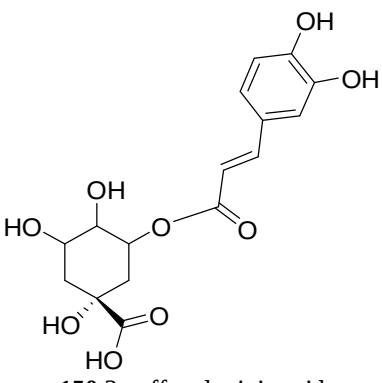
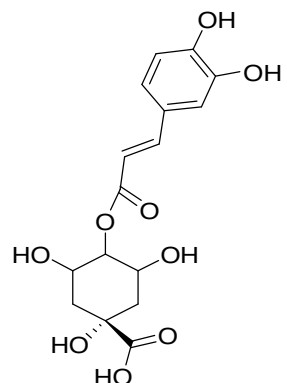
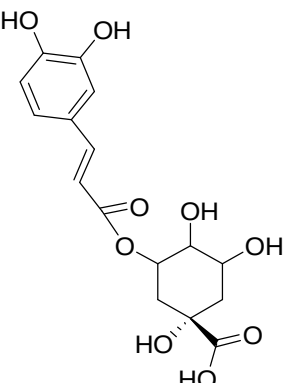
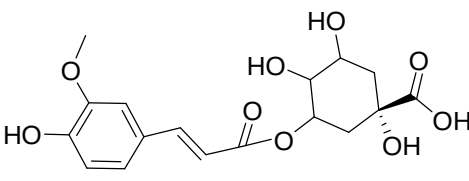
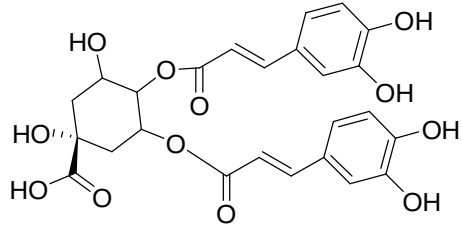
 135 3,4-dihydroxycinnamic acid	 136 4-hydroxy-3-methoxycinnamic acid	 137 Anisic acid	 138 2-methoxycinnamic acid
 139 3-methoxycinnamic acid	 140 4-methoxycinnamic acid	 141 Kaempferol	
 142 Glabrene	 143 Pyridoxine	 144 Pyridoxamine	 145 Pyridoxal
 146 Pyridoxamine 5'-phosphate	 147 Protocatechuic acid methyl ester	 148 Protocatechuic acid	 149 <i>m</i> -coumaric acid
 150 3-caffeoylquinic acid	 151 4-caffeoylquinic acid	 152 5-caffeoylquinic acid	
 153 5-feruloylquinic acid	 154 3,4-dicafeoylquinic acid		

Table 1. Cont.

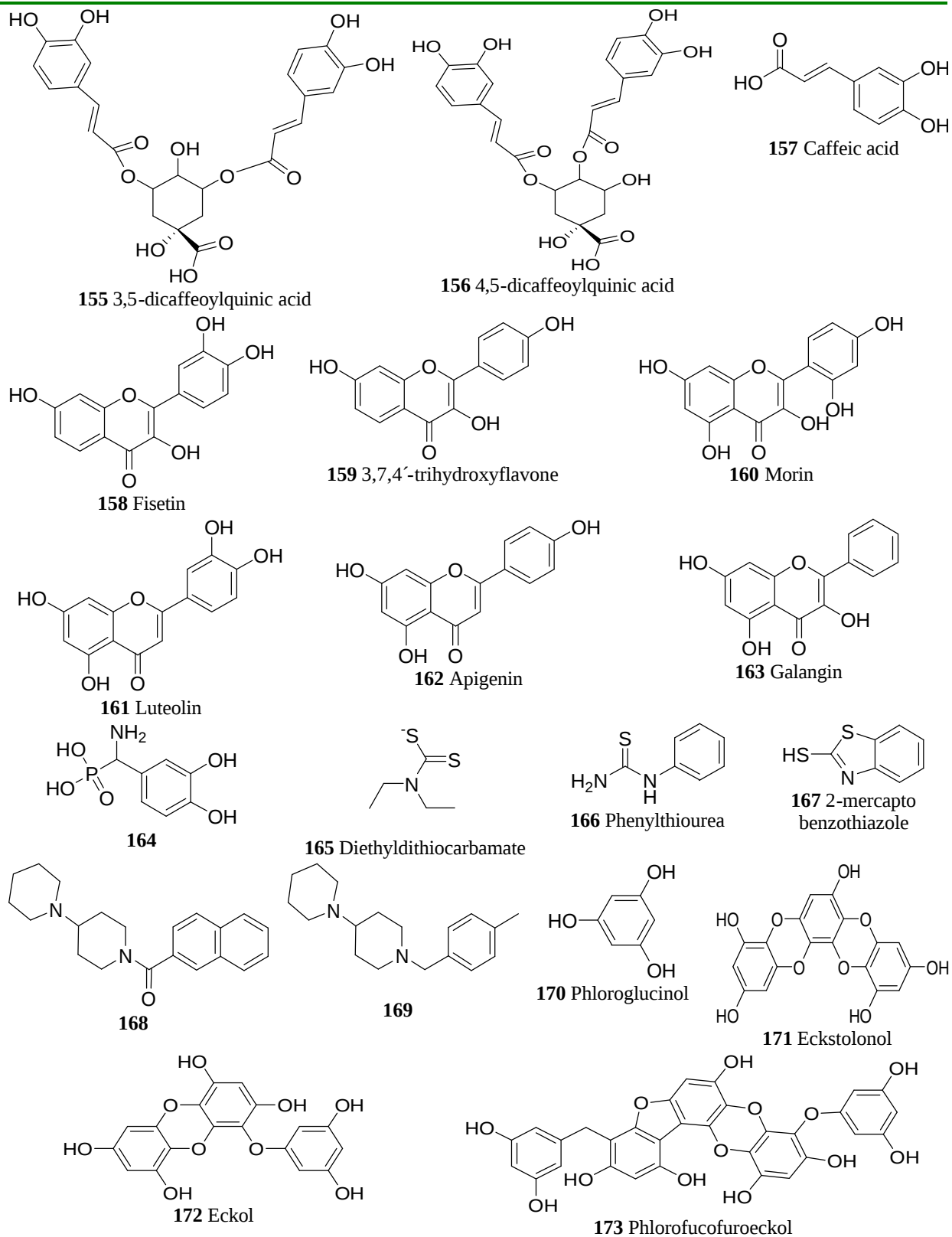


Table 1. Cont.

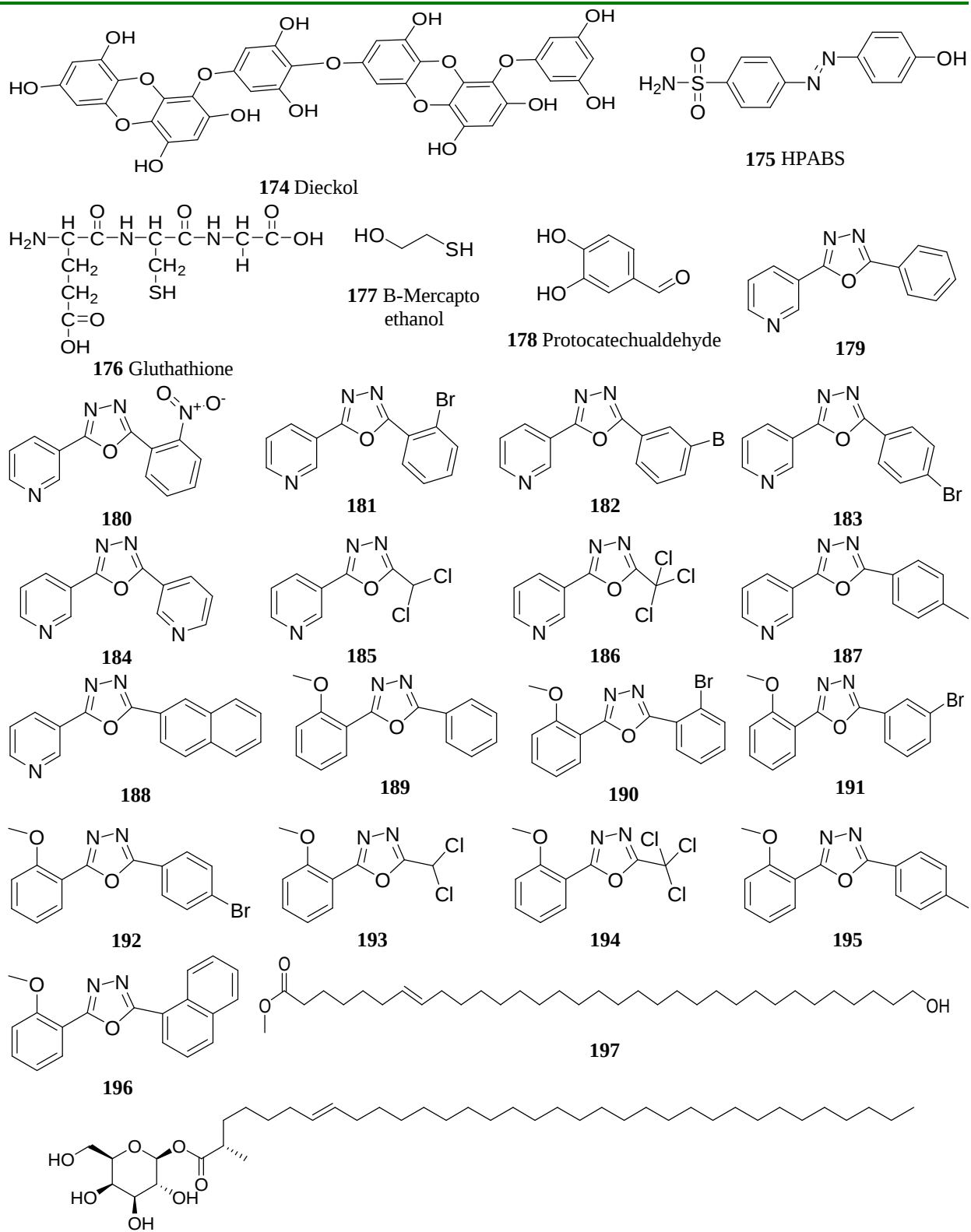


Table 1. Cont.

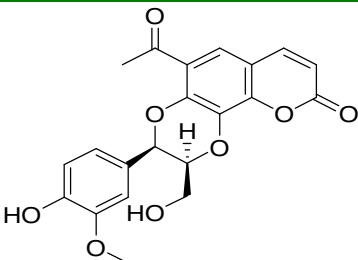
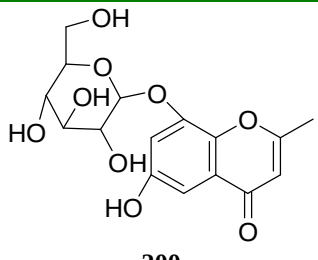
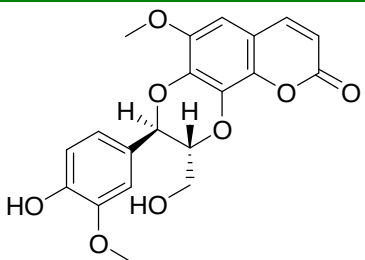
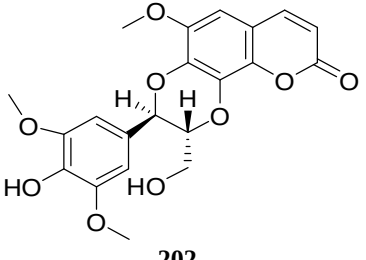
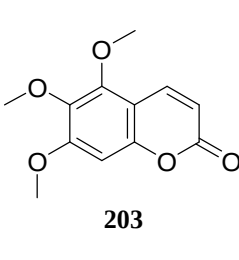
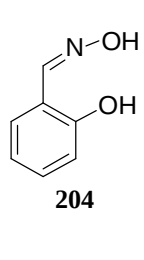
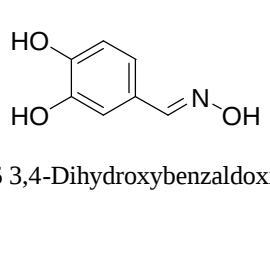
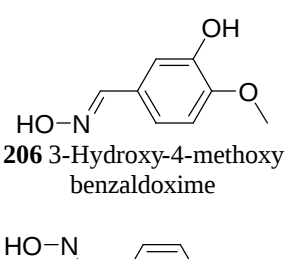
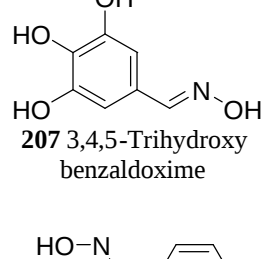
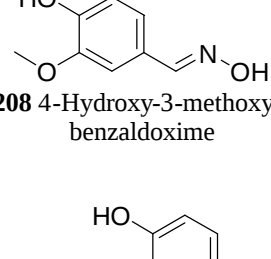
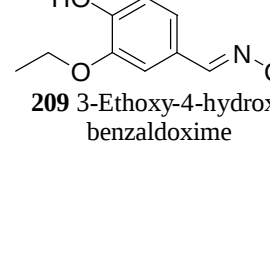
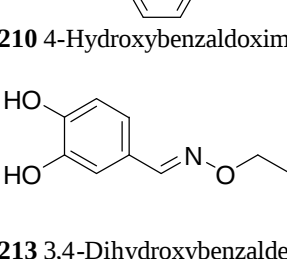
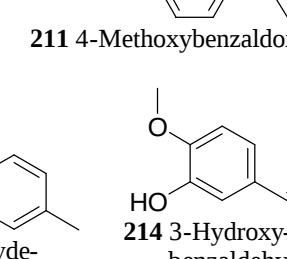
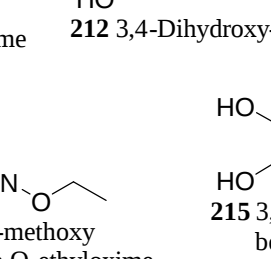
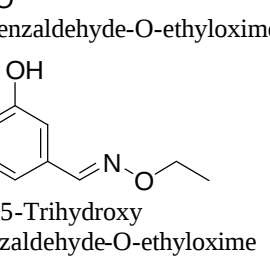
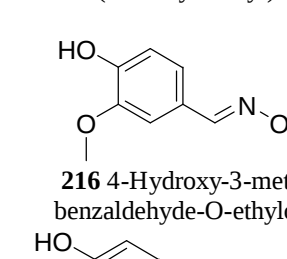
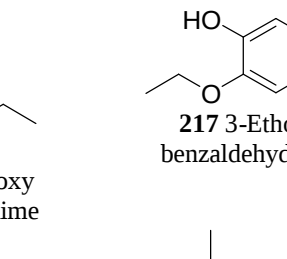
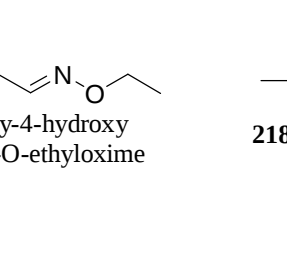
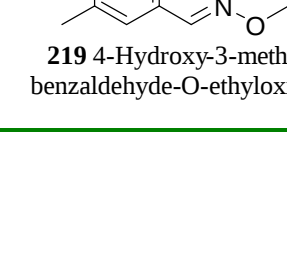
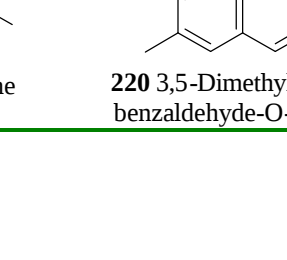
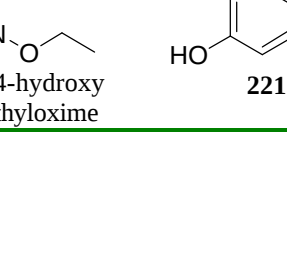
		
199 8'-epi-cleomiscosin A	200	201
		
202	203	204
		
205 3,4-Dihydroxybenzaldehyde	206 3-Hydroxy-4-methoxy benzaldehyde	207 3,4,5-Trihydroxy benzaldehyde
		
208 4-Hydroxy-3-methoxy benzaldehyde	209 3-Ethoxy-4-hydroxy benzaldehyde	210 4-Hydroxybenzaldehyde
		
211 4-Methoxybenzaldehyde	212 3,4-Dihydroxy-benzaldehyde-O-ethyloxime	213 3,4-Dihydroxybenzaldehyde-O-(4-methylbenzyl)-oxime
		
214 3-Hydroxy-4-methoxy benzaldehyde-O-ethyloxime	215 3,4,5-Trihydroxy benzaldehyde-O-ethyloxime	216 4-Hydroxy-3-methoxy benzaldehyde-O-ethyloxime
		
217 3-Ethoxy-4-hydroxy benzaldehyde-O-ethyloxime	218 4-Hydroxybenzaldehyde-O-ethyloxime	219 4-Hydroxy-3-methyl benzaldehyde-O-ethyloxime
		
220 3,5-Dimethyl-4-hydroxy benzaldehyde-O-ethyloxime	221	222

Table 1. Cont.

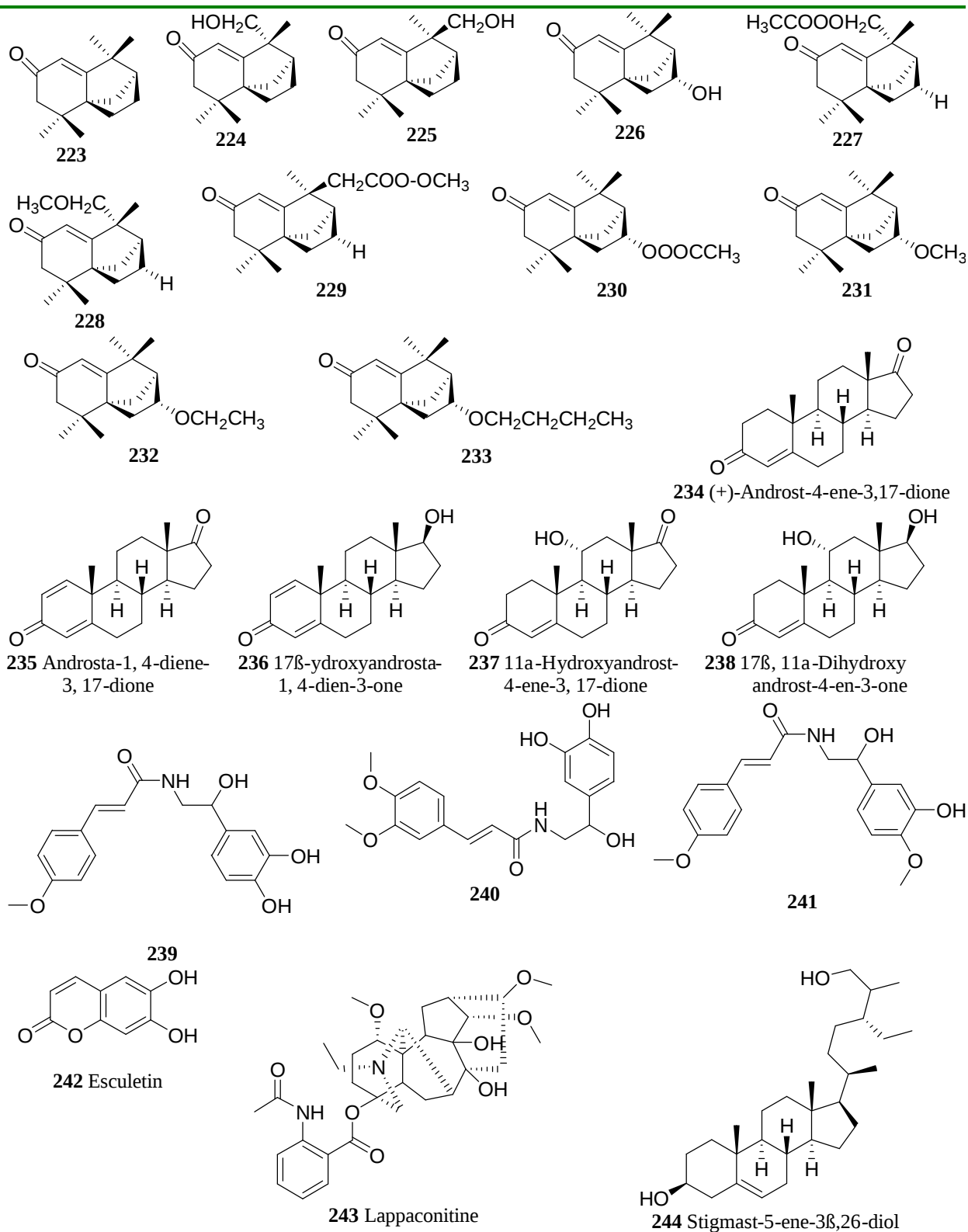


Table 1. Cont.

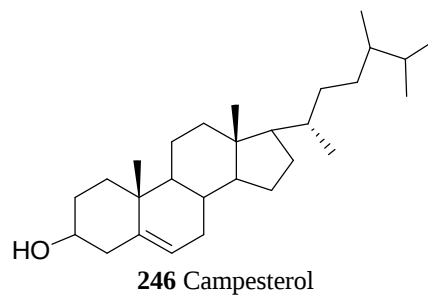
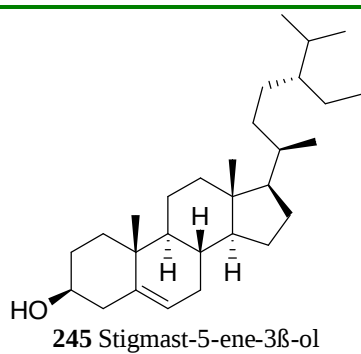


Table 2. Results of the Classification of Active Compounds in the Training Set by the Use of LDA-QSAR Models Developed Using non-Stochastic Total and Local Bilinear Indices Calculated with Different Weighting Scheme

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
1 Kojic acid	72,56	0,91	80,73	-1,07	70,78	0,85	80,22	-1,02	79,68	-1,03	79,91	1,10
3 L-mimosine	69,38	0,85	80,80	-1,07	68,67	0,82	70,29	-0,86	91,96	-1,30	76,95	1,03
4 Hydroquinone	88,77	1,36	90,71	-1,42	89,56	1,34	89,04	-1,38	72,07	-0,93	93,96	1,65
6 Ascorbic acid	96,24	1,87	97,39	-1,99	97,22	1,92	95,35	-1,76	88,65	-1,20	98,09	2,16
8 Quercetin	99,56	2,86	99,48	-2,70	99,52	2,68	98,96	-2,38	99,85	-2,42	99,35	2,63
9 Benzoic acid	67,81	0,82	71,11	-0,87	77,87	0,99	78,76	-1,15	79,92	-1,03	83,08	1,18
10 Benzaldehyde	21,04	0,27	30,59	-0,37	37,93	0,44	50,36	-0,65	73,48	-0,94	57,92	0,72
11 Cupferron	59,75	0,70	69,68	-0,85	88,73	1,30	72,41	-1,16	82,04	-1,06	67,27	0,85
13 Resveratrol	97,93	2,15	98,30	-2,18	98,42	2,17	96,31	-1,94	99,30	-1,99	98,01	2,14
15 Cinnamic acid	72,36	0,91	77,01	-0,99	90,84	1,39	89,89	-1,44	91,93	-1,30	93,59	1,62
16 Gnetol	99,31	2,65	99,33	-2,59	99,37	2,56	98,09	-2,20	99,50	-2,08	99,12	2,50
17 Dihydrognetol	99,52	2,82	99,59	-2,81	99,55	2,71	99,00	-2,48	99,41	-2,03	99,65	2,90
19 3,3',4,4'-tetrahydroxy -trans-stilbene	99,44	2,75	99,52	-2,73	99,57	2,72	98,47	-2,34	99,49	-2,08	99,38	2,66
20 3-amino-L-tyrosine	97,26	2,02	98,46	-2,22	96,58	1,83	93,80	-1,79	95,63	-1,48	96,98	1,95
21 2-aminophenol	87,47	1,30	88,71	-1,33	78,19	1,00	78,66	-1,12	68,78	-0,89	92,78	1,57
22 Isoquiritigenin	97,95	2,15	98,29	-2,18	98,43	2,17	97,00	-2,01	99,63	-2,16	98,47	2,26
24 Butein	99,34	2,67	99,41	-2,65	99,46	2,62	98,64	-2,34	99,73	-2,25	99,42	2,68
25 4'-hydroxychalcone	85,98	1,25	89,16	-1,34	91,30	1,42	87,89	-1,45	99,27	-1,98	92,37	1,54
27 2',4'-dihydroxychalcone	94,77	1,72	95,65	-1,76	96,31	1,80	93,79	-1,72	99,48	-2,07	96,65	1,91
29 cis-4-azobenzene carboxylic acid	72,80	0,91	74,73	-0,94	88,60	1,30	75,44	-1,20	98,43	-1,76	79,40	1,08
30 trans-4,4'-azobenzene dicarboxylic acid	85,88	1,25	87,28	-1,27	95,67	1,72	87,93	-1,56	99,45	-2,05	89,99	1,42
31 cis-4,4'-azobenzene dicarboxylic acid	85,88	1,25	87,28	-1,27	95,67	1,72	87,93	-1,56	99,45	-2,05	89,99	1,42
33 Deosynojirimycin	85,36	1,23	90,87	-1,42	88,24	1,28	73,34	-0,74	82,79	-1,08	69,39	0,90
34 Ko-YGC	99,98	4,29	99,98	-4,19	99,99	4,57	-25,49	0,07	99,99	-3,13	99,75	3,06
36 Ko-YGE	85,87	1,25	92,09	-1,49	93,84	1,57	97,06	-2,01	100,00	-3,54	96,95	1,96
37 Ko-YGT	87,12	1,29	92,78	-1,53	92,65	1,49	95,72	-1,80	100,00	-3,36	95,22	1,76
38 Ko-YGL	82,28	1,13	86,15	-1,23	87,03	1,24	92,55	-1,63	100,00	-3,45	92,69	1,57

Table 2. Cont

Name*	DP%^a	Scores	DP%^b	Scores	DP%^c	Scores	DP%^d	Scores	DP%^e	Scores	DP%^f	Scores
39 Ko-YGW	88,90	1,36	92,99	-1,54	93,31	1,53	93,68	-1,66	100,00	-4,18	93,33	1,61
40 Ko-YGF	89,65	1,40	95,40	-1,73	95,37	1,70	96,73	-2,11	100,00	-3,88	95,87	1,82
41 Ko-YGH	59,73	0,70	78,72	-1,02	72,89	0,89	85,51	-1,17	100,00	-3,55	84,82	1,24
43 Ko-YGD	83,87	1,18	90,82	-1,42	92,74	1,49	97,06	-1,99	100,00	-3,45	96,69	1,93
44 Ko-YGG	62,35	0,74	79,91	-1,05	78,10	0,99	90,14	-1,38	99,99	-3,08	84,36	1,22
45 Ko-YIG	83,66	1,17	88,31	-1,31	87,71	1,26	91,93	-1,61	100,00	-3,45	93,40	1,61
47 Ko-YSG	85,01	1,22	92,86	-1,54	92,79	1,50	95,30	-1,74	99,99	-3,28	93,57	1,63
48 Ko-IMG	-31,85	-0,23	-17,22	0,06	39,86	0,45	20,12	-0,04	99,99	-3,28	44,97	0,58
49 Ko-YQG	70,83	0,88	80,39	-1,06	79,57	1,02	93,00	-1,63	100,00	-3,50	92,40	1,55
50 Ko-YRG	24,93	0,30	17,96	-0,25	41,90	0,48	69,98	-0,77	100,00	-3,58	68,12	0,87
51 Ko-YHG	59,30	0,69	78,16	-1,01	72,39	0,88	84,93	-1,15	100,00	-3,55	84,19	1,22
52 Ko-ING	67,25	0,82	77,23	-0,99	76,35	0,95	93,00	-1,61	100,00	-3,40	91,74	1,52
54 Ko-FIY	95,87	1,83	97,37	-1,99	98,06	2,07	98,41	-2,45	100,00	-4,27	98,97	2,43
55 Ko-FRY	75,06	0,96	74,08	-0,93	88,48	1,29	93,51	-1,61	100,00	-4,41	94,43	1,69
56 Ko-FYY	99,00	2,48	99,61	-2,83	99,77	2,99	99,81	-3,34	100,00	-4,82	99,83	3,20
58 Ko-FFY	97,39	2,04	98,96	-2,39	99,44	2,61	99,61	-3,05	100,00	-4,73	99,60	2,84
59 Ko-KWY	92,69	1,56	96,14	-1,81	96,50	1,82	94,13	-1,76	100,00	-4,66	94,06	1,65
60 Ko-KRY	61,07	0,72	56,41	-0,65	60,63	0,70	63,97	-0,74	100,00	-4,04	66,80	0,85
62 Ko-KIY	93,09	1,59	95,14	-1,71	92,45	1,48	90,05	-1,58	100,00	-3,90	93,08	1,58
63 Ko-FWW	92,36	1,54	93,58	-1,58	95,14	1,68	91,51	-1,63	100,00	-5,19	93,38	1,61
64 Ko-FWF	92,85	1,57	95,76	-1,77	97,40	1,95	97,39	-2,20	100,00	-4,91	97,50	2,04
65 Ko-FWI	88,78	1,36	89,57	-1,36	91,20	1,41	89,69	-1,61	100,00	-4,46	93,67	1,63
67 Ko-WWY	97,01	1,98	97,57	-2,02	98,02	2,07	95,76	-1,92	100,00	-5,28	97,07	1,97
68	97,07	1,99	96,77	-1,89	95,06	1,69	98,09	-2,37	100,00	-4,75	94,29	1,66
70	95,45	1,78	94,82	-1,68	87,93	1,29	93,96	-1,86	100,00	-4,45	82,30	1,14
71 Glabridin	89,35	1,38	88,05	-1,30	84,13	1,15	81,17	-1,11	99,93	-2,63	86,19	1,28
73 N-benzyl-N-nitroso-hydroxyl-amine	39,84	0,46	56,25	-0,65	83,72	1,13	64,36	-0,95	88,08	-1,19	49,31	0,61
74	71,79	0,90	81,23	-1,08	93,10	1,52	80,85	-1,23	91,33	-1,28	74,96	0,99
76	17,62	0,23	39,47	-0,46	63,56	0,74	46,46	-0,71	91,90	-1,30	-0,51	0,14
78	51,72	0,59	58,98	-0,68	78,11	0,99	56,10	-0,87	96,89	-1,57	24,19	0,36

Table 2. Cont

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
79	71,82	0,90	80,75	-1,07	93,00	1,51	80,69	-1,22	91,33	-1,28	75,38	1,00
80	89,29	1,38	92,73	-1,53	97,17	1,91	90,11	-1,51	93,68	-1,37	90,31	1,44
81	89,27	1,38	92,98	-1,54	97,20	1,91	90,06	-1,51	93,71	-1,37	90,36	1,44
82	45,66	0,52	57,79	-0,67	83,88	1,13	56,34	-0,86	93,78	-1,38	47,48	0,59
84	63,05	0,75	68,12	-0,82	87,81	1,26	55,88	-0,93	95,39	-1,46	56,81	0,70
85	75,61	0,97	83,99	-1,16	96,01	1,76	84,33	-1,48	99,08	-1,91	82,11	1,15
87	44,65	0,51	32,68	-0,39	73,75	0,90	22,65	-0,56	81,11	-1,05	32,07	0,43
88	19,61	0,25	4,75	-0,13	51,45	0,58	-22,81	-0,11	72,27	-0,93	-13,09	0,03
90	21,27	0,27	23,32	-0,30	34,46	0,41	9,98	-0,37	47,33	-0,71	-20,04	-0,03
91	46,73	0,53	45,94	-0,52	27,10	0,34	18,21	-0,32	60,78	-0,81	22,16	0,34
93 Dopastin	18,80	0,25	11,76	-0,19	45,54	0,52	7,73	-0,38	92,85	-1,34	-9,21	0,06
94	54,42	0,63	57,65	-0,67	86,44	1,21	45,23	-0,82	96,92	-1,57	48,30	0,60
96 (+)gallocatechin-3-O-gallate	99,99	4,85	100,00	-4,79	100,00	4,71	99,98	-4,11	100,00	-3,55	100,00	4,88
97 (-)Epicatechin3-O-gallate	99,98	4,33	99,99	-4,33	99,99	4,27	99,95	-3,78	100,00	-3,46	99,99	4,44
98 (-)Epigallocatechin	99,88	3,47	99,90	-3,42	99,89	3,32	99,66	-2,84	99,85	-2,41	99,86	3,30
100	79,51	1,06	82,81	-1,13	79,16	1,02	78,49	-1,04	91,60	-1,29	88,71	1,37
102	85,33	1,23	84,22	-1,17	81,90	1,09	73,84	-1,00	95,49	-1,47	89,41	1,40
103	84,29	1,19	83,55	-1,15	74,68	0,93	74,30	-0,99	95,20	-1,45	86,46	1,29
104	87,17	1,29	84,81	-1,19	83,66	1,13	73,51	-1,01	96,78	-1,56	90,14	1,43
105	88,81	1,36	85,41	-1,21	85,34	1,18	73,21	-1,03	97,72	-1,66	90,85	1,46
106	58,55	0,68	64,86	-0,77	64,09	0,75	62,95	-0,71	95,68	-1,48	81,45	1,14
108 3,4'-dimethoxy- 5-hydroxystilbene	42,60	0,49	54,08	-0,62	45,62	0,52	36,72	-0,43	99,58	-2,13	47,52	0,60
109 Piceid	99,40	2,71	99,70	-2,95	99,87	3,24	99,10	-2,46	99,99	-3,16	99,13	2,51
110 Rhapontigenin	95,80	1,82	96,43	-1,85	96,27	1,80	91,93	-1,52	99,61	-2,15	95,48	1,79
112 Kurarinone	95,20	1,76	95,30	-1,73	88,05	1,28	94,28	-1,60	99,99	-3,35	93,08	1,59
114 4-hydroxyanisol	46,66	0,53	55,29	-0,64	45,63	0,52	55,62	-0,63	77,76	-1,00	63,99	0,81
115 2-hydroxy-4- methoxybenzaldehyde	29,94	0,35	38,46	-0,44	31,63	0,38	43,92	-0,46	88,55	-1,20	56,92	0,71
117	21,04	0,27	30,59	-0,37	37,93	0,44	50,36	-0,65	73,48	-0,94	57,92	0,72
118	-20,93	-0,12	-7,63	-0,02	-10,55	0,01	11,58	-0,18	84,46	-1,11	15,78	0,29

Table 2. Cont

Name*	DP%^a	Scores	DP%^b	Scores	DP%^c	Scores	DP%^d	Scores	DP%^e	Scores	DP%^f	Scores
119	62,83	0,75	67,10	-0,80	69,38	0,83	71,83	-0,92	80,11	-1,03	81,95	1,15
120 Artocarbene	97,23	2,01	96,63	-1,88	95,26	1,69	91,01	-1,51	99,92	-2,58	93,18	1,60
121 Chlorophorin	98,98	2,48	98,96	-2,39	98,45	2,18	97,75	-2,21	99,99	-3,19	97,42	2,02
123 4-propylresorcinol	92,01	1,52	91,24	-1,44	89,09	1,32	82,13	-1,20	89,13	-1,21	92,12	1,53
124 3,4-dihydroxybenzonitrile	81,94	1,12	81,40	-1,09	80,49	1,05	77,96	-1,09	81,54	-1,06	86,53	1,29
125 3,4,2,4-trans-stilbene	99,38	2,70	99,45	-2,67	99,49	2,65	98,31	-2,27	99,49	-2,08	99,28	2,59
126	99,34	2,67	99,41	-2,65	99,46	2,62	98,64	-2,34	99,73	-2,25	99,42	2,68
127	99,34	2,67	99,44	-2,67	99,48	2,64	98,63	-2,34	99,73	-2,25	99,42	2,68
129	99,27	2,63	99,33	-2,59	99,36	2,55	98,50	-2,28	99,73	-2,25	99,34	2,63
130 Artogomezianol	100,00	5,18	100,00	-5,06	100,00	5,02	99,97	-4,13	100,00	-4,11	99,99	4,50
131 Andalsin	100,00	5,23	100,00	-5,09	100,00	5,05	99,97	-4,15	100,00	-4,11	99,99	4,54
132 Crocusatins H	91,90	1,51	91,10	-1,44	88,54	1,30	93,68	-1,65	97,46	-1,63	89,17	1,39
133 Crocin-1	100,00	5,54	100,00	-6,43	100,00	7,13	100,00	-6,03	100,00	-6,81	100,00	5,77
135 3,4-dihydroxycinnamic acid	95,54	1,79	96,15	-1,82	96,96	1,88	95,35	-1,82	95,19	-1,45	97,11	1,98
138 2-methoxycinnamic acid	39,99	0,46	47,32	-0,54	53,62	0,61	56,05	-0,70	94,84	-1,43	61,29	0,77
139 3-methoxycinnamic acid	38,91	0,45	48,04	-0,55	52,50	0,60	57,94	-0,73	94,86	-1,43	61,27	0,77
140 4-methoxycinnamic acid	39,49	0,45	49,31	-0,56	53,30	0,61	58,65	-0,74	94,85	-1,43	61,96	0,78
144 Pyridoxamine	84,57	1,20	90,51	-1,41	62,81	0,74	42,93	-0,43	88,04	-1,19	29,83	0,41
146 Pyridoxamine-5'-phosphate	49,27	0,56	54,04	-0,62	74,33	0,92	25,47	-0,57	85,37	-1,13	-64,41	-0,52
147 Protocatechuic acid methyl ester	81,12	1,10	84,63	-1,18	82,97	1,11	80,22	-1,10	91,60	-1,29	89,47	1,40
150 3-caffeoylquinic acid	99,74	3,11	99,85	-3,26	99,90	3,36	99,78	-3,20	99,92	-2,60	99,91	3,50
152 5-caffeoylquinic acid	99,74	3,11	99,85	-3,26	99,90	3,36	99,78	-3,20	99,92	-2,60	99,91	3,50
153 5-feroloylquinic acid	98,37	2,26	99,09	-2,45	99,34	2,53	98,88	-2,44	99,94	-2,67	99,46	2,72
154 3,4-dicafeoylquinic acid	99,97	4,04	99,98	-4,21	99,99	4,40	99,97	-4,22	100,00	-3,88	99,99	4,57
156 4,5-dicafeoylquinic acid	99,97	4,04	99,98	-4,21	99,99	4,40	99,97	-4,22	100,00	-3,88	99,99	4,57
157 Caffeic acid	95,54	1,79	96,15	-1,82	96,96	1,88	95,35	-1,82	95,19	-1,45	97,11	1,98
158 Fisetin	98,81	2,41	98,73	-2,31	98,96	2,34	97,75	-2,08	99,80	-2,33	98,59	2,29
159 3,7,4'-trihydroxyflavone	96,41	1,90	96,31	-1,83	97,04	1,89	94,94	-1,74	99,72	-2,24	96,45	1,89
161 Luteolin	98,38	2,26	98,19	-2,15	97,99	2,06	96,96	-1,89	99,79	-2,32	98,12	2,17
163 Galangin	96,61	1,92	95,96	-1,79	96,62	1,84	95,11	-1,74	99,71	-2,24	96,52	1,90

Table 2. Cont

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
164 Amino-(3,4-dihydroxyphenyl) methylphosphonic acid	94,93	1,73	93,60	-1,59	98,70	2,25	92,66	-1,89	82,22	-1,07	74,95	0,98
165 Diethyldithiocarbamate	98,67	2,35	98,16	-2,14	99,62	2,78	-96,45	1,33	-35,74	-0,22	73,12	0,96
167 2-mercaptobenzothiazole	99,82	3,28	99,72	-2,97	99,94	3,55	-87,27	0,71	33,23	-0,61	95,56	1,79
168	-38,21	-0,29	-53,93	0,44	-41,23	-0,27	-77,36	0,78	99,86	-2,43	-48,93	-0,31
170 Phloroglucinol	95,67	1,81	95,95	-1,79	95,22	1,69	94,51	-1,66	79,04	-1,02	97,60	2,07
171 Eckstolonol	99,37	2,69	99,13	-2,47	99,36	2,55	99,25	-2,43	99,97	-2,88	99,49	2,74
173 Phlorofucofuroeckol A	99,99	4,47	99,97	-4,03	99,99	4,18	99,97	-3,77	100,00	-4,76	99,97	4,02
174 Dieckol	100,00	6,22	100,00	-5,81	100,00	5,90	100,00	-5,29	100,00	-5,73	100,00	5,88
175	10,81	0,17	13,88	-0,21	1,29	0,11	-49,82	0,21	93,74	-1,37	-40,47	-0,23
176 Gluthathione	99,94	3,74	99,93	-3,57	99,95	3,64	-91,08	1,17	96,96	-1,58	97,63	2,08
177 β-Mercaptoethanol	99,90	3,55	99,84	-3,23	99,94	3,53	-95,72	1,60	-22,75	-0,30	92,49	1,57
178 Protocatechualdehyde	85,23	1,22	87,54	-1,28	88,17	1,28	86,51	-1,26	85,43	-1,13	92,46	1,56
179	8,66	0,15	16,08	-0,23	40,72	0,47	26,80	-0,54	97,61	-1,64	40,84	0,52
180	-20,46	-0,12	-15,38	0,05	39,38	0,45	6,74	-0,42	98,94	-1,87	-6,14	0,08
181	-40,89	-0,32	-23,81	0,12	-49,05	-0,36	-18,85	-0,15	97,56	-1,64	-20,54	-0,04
182	-49,75	-0,42	-35,76	0,24	-58,20	-0,47	-21,26	-0,11	97,67	-1,65	-28,04	-0,11
184	-37,30	-0,28	-28,74	0,17	-7,35	0,04	-24,98	0,03	96,32	-1,52	-16,05	0,01
185	-77,61	-0,87	-72,24	0,71	-49,43	-0,37	-58,18	0,30	91,00	-1,27	-69,60	-0,60
186	-74,39	-0,80	-58,29	0,50	-7,71	0,03	6,46	-0,62	93,49	-1,36	-61,63	-0,49
187	8,70	0,15	16,44	-0,23	30,31	0,37	20,59	-0,48	98,30	-1,74	27,36	0,38
188	-1,70	0,06	-3,83	-0,05	29,03	0,36	-14,76	-0,23	99,61	-2,15	18,06	0,30
189	12,38	0,19	19,48	-0,26	45,41	0,52	48,38	-0,71	99,20	-1,95	62,04	0,77
191	-46,87	-0,39	-32,63	0,21	-54,26	-0,42	3,76	-0,28	99,22	-1,96	0,42	0,14
192	-45,45	-0,37	-29,58	0,18	-53,05	-0,40	4,14	-0,29	99,20	-1,95	0,83	0,15
193	-76,01	-0,83	-70,38	0,68	-44,69	-0,32	-38,79	0,13	96,90	-1,57	-51,11	-0,35
195	12,42	0,19	19,84	-0,27	35,44	0,42	43,17	-0,65	99,43	-2,04	51,74	0,64
196	-7,83	0,00	-14,72	0,04	32,77	0,39	20,07	-0,38	99,88	-2,48	50,90	0,63
197	96,95	1,97	68,45	-0,82	92,76	1,51	1,67	-0,70	100,00	-3,60	84,88	1,21
200	95,19	1,76	97,12	-1,95	97,34	1,93	96,65	-1,68	99,91	-2,57	96,22	1,87
201	28,15	0,34	44,15	-0,51	45,75	0,52	46,31	-0,39	99,98	-2,94	46,01	0,58

Table 2. Cont

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
202	-8,66	-0,01	8,32	-0,16	2,83	0,12	10,16	0,03	99,99	-3,10	8,36	0,23
203	-73,81	-0,79	-69,24	0,66	-71,02	-0,66	-44,74	0,51	98,39	-1,75	-38,56	-0,20
204	81,25	1,11	84,48	-1,18	86,42	1,22	80,52	-1,13	83,95	-1,10	87,83	1,34
205	92,94	1,58	94,27	-1,64	95,06	1,67	90,96	-1,47	88,26	-1,19	94,81	1,72
206	62,29	0,74	69,12	-0,84	70,22	0,84	61,96	-0,71	90,83	-1,26	71,07	0,92
207	97,69	2,10	97,95	-2,10	98,19	2,10	95,92	-1,81	91,43	-1,28	98,13	2,18
209	66,23	0,80	69,42	-0,84	68,30	0,81	52,88	-0,62	93,13	-1,35	68,10	0,87
210	79,49	1,06	83,93	-1,16	86,31	1,21	80,85	-1,13	84,01	-1,10	85,97	1,27
211	17,69	0,24	31,91	-0,38	33,39	0,40	31,44	-0,38	87,45	-1,17	35,62	0,47
213 3,4-Dihydroxybenzaldehyde-O-(4-methylbenzyl)-oxime	88,94	1,37	92,17	-1,49	93,80	1,57	89,70	-1,41	99,48	-2,07	90,80	1,46
214 3-Hydroxy-4-methoxybenzaldehyde-O-ethyloxime	-5,82	0,02	-2,89	-0,06	-6,35	0,05	-25,38	0,20	94,42	-1,41	-12,27	0,05
216	-6,46	0,01	-3,05	-0,06	-6,51	0,04	-25,72	0,20	94,42	-1,41	-13,25	0,04
217 3-Ethoxy-4-hydroxybenzaldehyde-O-ethyloxime	0,87	0,08	-2,33	-0,07	-10,02	0,01	-37,59	0,29	95,84	-1,49	-17,57	0,00
218 4-Hydroxybenzaldehyde-O-ethyloxime	28,86	0,34	32,73	-0,39	35,44	0,42	13,75	-0,22	90,14	-1,24	26,93	0,39
219	32,52	0,38	34,54	-0,41	26,88	0,34	4,82	-0,15	92,92	-1,34	15,86	0,29
220	35,10	0,41	34,31	-0,40	16,28	0,24	-5,99	-0,06	94,93	-1,43	2,81	0,17
221	85,23	1,22	87,54	-1,28	88,17	1,28	86,51	-1,26	85,43	-1,13	92,46	1,56
222	76,67	0,99	75,10	-0,95	57,48	0,67	78,01	-1,20	97,27	-1,61	63,49	0,79
223	63,41	0,75	62,35	-0,73	29,40	0,37	71,29	-1,00	97,92	-1,68	46,62	0,58
224	80,70	1,09	83,98	-1,16	66,91	0,80	83,01	-1,22	98,64	-1,80	64,53	0,81
225	80,70	1,09	83,98	-1,16	66,91	0,80	83,01	-1,22	98,64	-1,80	64,53	0,81
226	79,18	1,05	80,20	-1,06	59,57	0,69	84,13	-1,24	98,57	-1,79	66,09	0,83
227	18,25	0,24	26,03	-0,32	3,30	0,13	48,15	-0,65	99,62	-2,16	5,86	0,20
229	18,25	0,24	26,03	-0,32	3,30	0,13	48,15	-0,65	99,62	-2,16	5,86	0,20
230	28,44	0,34	33,94	-0,40	-1,91	0,09	56,72	-0,77	99,58	-2,13	5,74	0,19
231	22,20	0,28	25,67	-0,32	-24,34	-0,10	44,92	-0,54	98,90	-1,86	1,76	0,16
232	48,85	0,56	49,79	-0,57	-13,15	0,00	49,12	-0,67	99,02	-1,89	13,35	0,26
234 (+)-Androst-4-ene-3,17-dione	79,29	1,06	81,25	-1,09	69,94	0,84	89,49	-1,57	99,66	-2,18	82,18	1,15

Table 2. Cont

Name*	DP%^a	Scores	DP%^b	Scores	DP%^c	Scores	DP%^d	Scores	DP%^e	Scores	DP%^f	Scores
236 17 β -Hydroxyandrosta-1, 4-dien-3-one	92,10	1,53	93,13	-1,55	91,71	1,45	94,91	-1,89	99,73	-2,25	93,54	1,61
237 11 α -Hydroxyandrost-4-ene-3, 17-dione	88,75	1,36	90,45	-1,40	84,76	1,17	94,46	-1,81	99,76	-2,29	90,27	1,43
238 17 β ,11 α -Dihydroxyandrost-4-en-3-one	95,78	1,82	96,39	-1,84	95,14	1,68	97,43	-2,14	99,78	-2,31	96,27	1,86
239	93,97	1,65	96,28	-1,83	95,75	1,74	92,04	-1,46	99,91	-2,56	92,97	1,59
240	87,29	1,30	92,05	-1,49	89,94	1,36	82,67	-1,03	99,95	-2,72	83,64	1,20
242 Esculetin	86,14	1,26	87,55	-1,28	87,24	1,25	86,08	-1,28	94,83	-1,43	90,91	1,47
243 Lappaconitine	25,52	0,31	53,15	-0,61	27,18	0,34	59,88	-0,58	100,00	-4,12	66,63	0,86
244 Stigmast-5-ene-3 β ,26-diol	99,15	2,56	98,71	-2,30	98,71	2,26	98,28	-2,53	99,99	-3,22	97,24	1,98
246 Campesterol	98,18	2,21	96,57	-1,87	96,42	1,82	97,02	-2,32	99,98	-3,00	95,34	1,75

*The molecular structures of these 246 tyrosinase inhibitors is given as Supporting Information (see Table 1). ^{a,b,c,d,e,f}DP% = [P(Active) - P(Inactive)]x100 as well as canonical scores of each compounds in this set: (i) Classification of each compounds using the obtained models with non-stochastic bilinear indices in the following order: Eq. 22, 23, 24, 25, 26, and 27.

Table 3. Results of the Classification of Active Compounds in the Training Set by the Use of LDA-QSAR Models Developed Using Stochastic Total and Local Bilinear Indices Calculated with Different Weighting Scheme.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
1 Kojic acid	83,01	-1,22	84,01	1,21	80,00	1,08	69,86	-1,10	60,63	0,74	91,46	1,50
3 L-mimosine	83,59	-1,24	76,74	1,02	68,17	0,83	72,03	-1,14	32,34	0,39	52,83	0,61
4 Hydroquinone	89,62	-1,47	90,19	1,46	86,15	1,26	68,31	-1,07	81,90	1,16	87,59	1,32
6 Ascorbic acid	95,76	-1,90	97,38	2,10	94,58	1,71	82,96	-1,44	86,12	1,29	75,26	0,97
8 Quercetin	99,57	-2,96	99,51	2,90	99,60	2,92	98,84	-2,92	99,44	2,83	99,62	2,95
9 Benzoic acid	73,78	-1,00	76,10	1,00	85,12	1,23	61,37	-0,94	66,55	0,83	71,78	0,90
10 Benzaldehyde	7,55	-0,19	8,76	0,14	4,22	0,11	16,46	-0,35	6,45	0,14	-4,93	0,02
11 Cupferron	51,88	-0,65	56,90	0,67	88,69	1,36	39,82	-0,63	85,73	1,28	87,11	1,30
13 Resveratrol	95,99	-1,92	96,93	2,03	96,63	1,94	91,18	-1,82	97,16	2,06	97,70	2,12
15 Cinnamic acid	58,75	-0,75	69,96	0,88	83,60	1,18	48,24	-0,74	76,13	1,01	58,45	0,68
16 Gnetol	98,83	-2,50	99,11	2,62	99,11	2,55	97,10	-2,42	99,03	2,57	99,33	2,69
17 Dihydrognetol	99,06	-2,60	99,10	2,62	99,03	2,51	97,06	-2,42	98,75	2,45	99,04	2,52
19 3,3',4,4'-tetrahydroxy-trans-stilbene	97,88	-2,22	98,49	2,37	99,18	2,59	95,87	-2,23	99,17	2,64	97,84	2,15
20 3-amino-L-tyrosine	98,16	-2,29	96,70	1,99	95,94	1,85	86,16	-1,56	85,91	1,29	71,92	0,90
21 2-aminophenol	72,76	-0,98	73,40	0,94	69,12	0,85	56,45	-0,86	44,86	0,53	18,71	0,24
22 Isoquiritigenin	95,38	-1,86	96,07	1,91	95,81	1,83	91,50	-1,84	96,47	1,96	96,90	1,98
24 Butein	98,12	-2,28	98,53	2,38	98,90	2,45	96,22	-2,28	98,89	2,51	98,47	2,31
25 4'-hydroxychalcone	58,67	-0,75	60,84	0,72	52,44	0,60	64,92	-1,00	68,27	0,86	68,17	0,83
27 2',4'-dihydroxychalcone	85,37	-1,30	86,83	1,31	86,65	1,28	83,29	-1,45	89,40	1,43	89,42	1,40
29 cis-4-azobenzene carboxylic acid	56,86	-0,72	62,11	0,74	70,39	0,87	73,06	-1,17	77,90	1,06	73,40	0,93
30 trans-4,4'-azobenzene dicarboxylic acid	87,09	-1,36	90,73	1,49	95,91	1,84	91,01	-1,80	94,23	1,72	94,73	1,73
31 cis-4,4'-azobenzene dicarboxylic acid	87,09	-1,36	90,73	1,49	95,91	1,84	91,01	-1,80	94,23	1,72	94,73	1,73
33 Deosynojirimycin	98,18	-2,29	98,50	2,37	97,32	2,04	83,99	-1,48	94,50	1,75	85,90	1,25
34 Ko-YGC	99,08	-2,61	99,95	3,95	99,40	2,73	-72,64	0,80	99,26	2,70	99,89	3,53
36 Ko-YGE	97,26	-2,10	96,38	1,95	97,45	2,06	84,28	-1,49	91,58	1,54	96,19	1,88
37 Ko-YGT	96,54	-1,99	95,43	1,84	95,69	1,82	88,01	-1,64	86,20	1,30	91,07	1,48
38 Ko-YGL	94,94	-1,81	91,37	1,52	95,75	1,83	77,58	-1,28	83,82	1,22	95,17	1,77

Table 3. Cont

Name*	DP%^a	Scores	DP%^b	Scores	DP%^c	Scores	DP%^d	Scores	DP%^e	Scores	DP%^f	Scores
39 Ko-YGW	94,27	-1,75	88,78	1,39	93,99	1,66	85,00	-1,52	93,46	1,66	95,32	1,78
40 Ko-YGF	93,86	-1,72	88,42	1,38	96,51	1,92	71,17	-1,13	96,39	1,95	96,46	1,92
41 Ko-YGH	91,51	-1,57	86,36	1,29	91,28	1,49	80,05	-1,35	85,42	1,27	90,84	1,47
43 Ko-YGD	96,81	-2,03	95,85	1,88	97,91	2,16	86,56	-1,58	91,49	1,54	96,17	1,88
44 Ko-YGG	91,24	-1,55	88,29	1,37	90,29	1,43	73,71	-1,18	76,38	1,02	87,20	1,30
45 Ko-YIG	92,66	-1,64	90,16	1,46	91,82	1,52	75,81	-1,23	71,31	0,92	87,44	1,31
47 Ko-YSG	97,09	-2,08	96,89	2,02	94,78	1,73	84,31	-1,49	88,54	1,39	91,44	1,50
48 Ko-YMG	74,78	-1,02	52,42	0,61	74,29	0,95	8,14	-0,26	12,71	0,20	57,59	0,67
49 Ko-YQG	92,03	-1,60	86,10	1,28	85,58	1,24	79,51	-1,33	67,94	0,85	77,94	1,03
50 Ko-YRG	56,40	-0,71	41,41	0,47	64,75	0,78	72,38	-1,15	57,19	0,69	72,85	0,92
51 Ko-YHG	92,67	-1,64	86,63	1,30	87,48	1,31	80,78	-1,37	80,74	1,13	86,73	1,28
52 Ko-YNQ	92,52	-1,63	86,11	1,29	86,42	1,27	81,79	-1,40	67,54	0,85	81,80	1,13
54 Ko-FIY	94,23	-1,75	91,12	1,51	95,40	1,79	80,83	-1,37	91,20	1,52	95,59	1,81
55 Ko-FRY	63,75	-0,82	43,28	0,49	78,57	1,04	78,05	-1,29	87,05	1,33	89,40	1,39
56 Ko-FYY	98,37	-2,35	97,38	2,10	99,14	2,57	92,69	-1,92	99,36	2,77	99,51	2,83
58 Ko-FFY	94,52	-1,78	90,29	1,47	96,79	1,96	85,78	-1,55	98,12	2,26	97,95	2,17
59 Ko-KWY	95,53	-1,87	87,69	1,35	93,06	1,59	71,54	-1,13	91,46	1,53	89,51	1,40
60 Ko-KRY	79,85	-1,14	49,76	0,57	78,29	1,04	58,91	-0,90	66,28	0,83	69,26	0,85
62 Ko-KIY	97,06	-2,07	92,14	1,57	95,15	1,76	63,45	-0,97	76,29	1,02	85,89	1,25
63 Ko-FWW	87,52	-1,38	66,75	0,82	81,79	1,12	87,11	-1,60	91,46	1,53	89,57	1,40
64 Ko-FWF	85,95	-1,32	67,51	0,83	85,79	1,25	81,26	-1,39	93,31	1,65	90,51	1,45
65 Ko-FWI	85,40	-1,30	72,21	0,92	81,24	1,11	78,29	-1,30	67,81	0,85	82,19	1,14
67 Ko-WWY	96,62	-2,00	91,12	1,51	95,07	1,76	93,40	-1,98	96,96	2,03	97,44	2,07
68	58,85	-0,75	44,59	0,51	-28,16	-0,20	72,67	-1,16	14,71	0,22	-6,14	0,01
70	74,70	-1,02	45,92	0,53	-37,66	-0,29	50,57	-0,77	8,62	0,16	0,96	0,08
71 Glabridin	76,77	-1,06	79,75	1,09	75,63	0,98	86,94	-1,59	81,65	1,15	85,70	1,25
73 N-benzyl-N-nitroso- hydroxyl-amine	74,04	-1,00	54,68	0,64	88,75	1,36	20,28	-0,40	87,06	1,33	86,34	1,27
74	92,12	-1,60	86,91	1,32	96,64	1,94	50,93	-0,78	94,89	1,78	96,63	1,94
76	48,31	-0,61	27,02	0,32	70,47	0,87	-22,50	0,07	67,50	0,85	71,34	0,89
78	70,77	-0,94	53,98	0,63	88,16	1,34	48,46	-0,74	85,02	1,26	87,64	1,32

Table 3. Cont

Name*	DP%^a	Scores	DP%^b	Scores	DP%^c	Scores	DP%^d	Scores	DP%^e	Scores	DP%^f	Scores
79	93,54	-1,70	86,90	1,31	96,42	1,91	54,80	-0,83	94,78	1,77	96,60	1,94
80	97,92	-2,23	96,25	1,93	98,74	2,39	77,06	-1,27	97,80	2,18	98,74	2,40
81	98,46	-2,37	96,41	1,95	98,53	2,32	78,35	-1,30	97,71	2,17	98,95	2,48
82	48,70	-0,62	42,22	0,48	74,09	0,94	-15,81	-0,01	83,23	1,20	85,17	1,23
84	64,89	-0,84	55,40	0,65	80,28	1,08	-8,01	-0,09	76,07	1,01	86,13	1,26
85	67,96	-0,89	58,74	0,69	90,83	1,46	55,52	-0,84	90,80	1,50	91,32	1,49
87	76,09	-1,05	51,06	0,59	95,01	1,75	-30,53	0,16	97,42	2,11	92,49	1,56
88	71,15	-0,95	42,24	0,48	93,78	1,65	-40,63	0,28	97,27	2,08	90,80	1,46
90	81,73	-1,19	68,05	0,84	62,83	0,75	36,71	-0,59	73,02	0,95	42,31	0,48
91	89,86	-1,48	82,07	1,15	63,65	0,76	-15,34	-0,01	62,19	0,76	75,72	0,98
93 Dopastin	8,02	-0,20	7,72	0,13	54,17	0,63	20,52	-0,40	62,56	0,77	78,74	1,05
94	43,92	-0,56	57,77	0,68	89,77	1,41	57,47	-0,87	87,96	1,37	89,84	1,42
96 (+)gallocatechin-3-O-gallate	99,96	-4,04	99,97	4,25	99,99	4,64	99,89	-4,18	99,99	4,58	99,95	3,91
97 (-)Epicatechin3-O-gallate	99,90	-3,63	99,92	3,78	99,97	4,06	99,74	-3,71	99,96	4,09	99,91	3,63
98 (-)Epigallocatechin	99,94	-3,88	99,89	3,62	99,91	3,60	99,39	-3,26	99,84	3,40	99,88	3,47
100	89,31	-1,45	86,80	1,31	86,09	1,26	62,70	-0,96	76,99	1,03	78,31	1,04
102	84,67	-1,28	86,63	1,30	77,40	1,01	41,43	-0,65	41,61	0,49	81,68	1,12
103	80,94	-1,16	85,18	1,25	82,01	1,13	52,51	-0,80	48,74	0,58	88,03	1,34
104	84,30	-1,26	86,31	1,29	84,98	1,22	36,83	-0,59	63,08	0,77	87,18	1,30
105	84,88	-1,28	86,07	1,28	87,71	1,32	30,04	-0,51	70,08	0,89	87,44	1,31
106	84,91	-1,28	85,74	1,27	62,80	0,75	35,12	-0,57	50,42	0,60	65,96	0,80
108 3,4'-dimethoxy-5-hydroxystilbene	24,04	-0,35	41,55	0,47	47,77	0,55	50,39	-0,77	69,46	0,88	42,37	0,48
109 Piceid	99,53	-2,92	99,77	3,26	99,07	2,53	97,95	-2,61	99,79	3,30	99,74	3,13
110 Rhapontigenin	93,67	-1,71	95,05	1,80	96,02	1,86	91,03	-1,81	96,86	2,02	95,61	1,81
112 Kurarinone	84,39	-1,27	89,45	1,42	92,82	1,58	93,97	-2,03	91,46	1,53	94,16	1,68
114 4-hydroxyanisol	55,04	-0,70	57,92	0,68	49,51	0,57	34,85	-0,56	46,09	0,55	40,97	0,47
115 2-hydroxy-4-methoxybenzaldehyde	37,37	-0,49	46,38	0,53	47,68	0,55	44,30	-0,68	44,19	0,52	17,97	0,24
117	7,55	-0,19	8,76	0,14	4,22	0,11	16,46	-0,35	6,45	0,14	-4,93	0,02
118	-23,03	0,09	-11,78	-0,06	-12,76	-0,05	5,27	-0,23	-1,85	0,06	-33,37	-0,25

Table 3. Cont

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
119	59,58	-0,76	60,21	0,72	61,87	0,73	52,34	-0,80	56,14	0,67	44,12	0,50
120 Artocarbene	94,88	-1,81	95,65	1,86	95,51	1,80	94,72	-2,10	95,57	1,85	98,02	2,19
121 Chlorophorin	95,08	-1,83	95,76	1,87	96,42	1,91	97,80	-2,57	96,94	2,03	97,95	2,17
123 4-propylresorcinol	91,13	-1,54	90,52	1,48	86,83	1,29	60,45	-0,92	73,07	0,95	87,68	1,32
124 3,4-dihydroxybenzonitrile	73,89	-1,00	81,55	1,14	82,09	1,13	71,21	-1,13	82,62	1,18	67,61	0,82
125 3,4,2,4-trans-stilbene	98,48	-2,38	98,83	2,49	99,13	2,56	96,25	-2,28	99,12	2,61	98,75	2,40
126	98,12	-2,28	98,53	2,38	98,90	2,45	96,22	-2,28	98,89	2,51	98,47	2,31
127	98,27	-2,32	98,55	2,39	98,63	2,35	96,45	-2,31	98,85	2,49	98,63	2,36
129	98,65	-2,43	98,85	2,50	98,78	2,41	96,58	-2,33	98,83	2,48	99,09	2,55
130 Artogomezianol	99,99	-4,83	99,99	5,03	100,00	4,99	99,95	-4,64	100,00	5,27	100,00	5,55
131 Andalsin	99,99	-4,92	99,99	5,03	100,00	5,00	99,96	-4,76	100,00	5,23	100,00	5,55
132 Crocusatins H	80,17	-1,14	82,77	1,17	96,48	1,91	95,78	-2,22	93,83	1,69	96,96	1,99
133 Crocin-1	99,99	-4,93	100,00	6,29	100,00	5,68	99,98	-4,99	100,00	6,53	100,00	5,12
135 3,4-dihydroxycinnamic acid	95,13	-1,83	96,72	2,00	98,46	2,30	86,13	-1,56	96,35	1,94	95,60	1,81
138 2-methoxycinnamic acid	47,74	-0,60	58,32	0,69	72,38	0,91	39,69	-0,62	65,17	0,81	47,97	0,55
139 3-methoxycinnamic acid	43,83	-0,56	57,42	0,67	74,07	0,94	39,07	-0,62	67,62	0,85	49,62	0,57
140 4-methoxycinnamic acid	43,04	-0,55	57,29	0,67	73,98	0,94	38,94	-0,62	68,04	0,86	49,99	0,57
144 Pyridoxamine	98,06	-2,27	95,41	1,83	89,32	1,39	91,83	-1,86	68,46	0,86	96,99	1,99
146 Pyridoxamine-5'-phosphate	86,67	-1,35	91,73	1,55	83,94	1,19	6,46	-0,25	63,26	0,78	69,64	0,86
147 Protocatechuic acid methyl ester	85,20	-1,29	84,24	1,22	86,10	1,26	60,56	-0,92	77,79	1,05	67,31	0,82
150 3-caffeoylquinic acid	99,74	-3,20	99,81	3,36	99,89	3,51	97,18	-2,44	99,73	3,17	99,61	2,94
152 5-caffeoylquinic acid	99,74	-3,20	99,81	3,36	99,89	3,51	97,18	-2,44	99,73	3,17	99,61	2,94
153 5-feruloylquinic acid	98,85	-2,51	99,11	2,62	99,42	2,75	92,99	-1,94	99,00	2,55	98,16	2,22
154 3,4-dicafeoylquinic acid	99,83	-3,40	99,88	3,56	99,97	4,15	98,89	-2,94	99,95	4,00	99,93	3,75
156 4,5-dicafeoylquinic acid	99,83	-3,40	99,88	3,56	99,97	4,15	98,89	-2,94	99,95	4,00	99,93	3,75
157 Caffeic acid	95,13	-1,83	96,72	2,00	98,46	2,30	86,13	-1,56	96,35	1,94	95,60	1,81
158 Fisetin	98,71	-2,46	98,32	2,32	98,53	2,32	97,27	-2,46	98,36	2,32	98,87	2,45
159 3,7,4'-trihydroxyflavone	96,62	-2,00	95,48	1,84	95,05	1,75	93,86	-2,02	95,07	1,80	97,72	2,12
161 Luteolin	96,59	-2,00	97,99	2,23	98,67	2,37	96,44	-2,31	98,45	2,35	97,84	2,15
163 Galangin	96,01	-1,93	95,20	1,81	95,53	1,80	94,88	-2,12	94,73	1,77	97,06	2,00

Table 3. Cont

Name*	DP%^a	Scores	DP%^b	Scores	DP%^c	Scores	DP%^d	Scores	DP%^e	Scores	DP%^f	Scores
164 Amino-(3,4-dihydroxyphenyl) methylphosphonic acid	93,67	-1,71	94,84	1,78	99,01	2,50	42,24	-0,66	95,57	1,85	91,81	1,52
165 Diethyldithiocarbamate	46,49	-0,59	93,18	1,64	89,86	1,41	-94,86	1,76	87,27	1,34	93,71	1,65
167 2-mercaptobenzothiazole	97,27	-2,10	99,56	2,96	99,46	2,78	-93,34	1,62	97,08	2,05	99,29	2,66
168	-48,51	0,37	-36,47	-0,31	-48,91	-0,42	-67,29	0,69	-29,99	-0,21	-11,91	-0,04
170 Phloroglucinol	96,32	-1,96	96,98	2,04	96,14	1,87	85,10	-1,52	93,45	1,66	94,89	1,74
171 Eckstolonol	98,73	-2,46	99,24	2,70	98,70	2,38	98,59	-2,81	98,93	2,52	99,36	2,71
173 Phlorofucofuroeckol A	99,98	-4,49	99,99	4,97	99,99	4,62	99,97	-4,85	99,99	5,00	100,00	5,30
174 Dieckol	100,00	-5,40	100,00	5,88	100,00	5,51	99,99	-5,81	100,00	5,82	100,00	6,17
175	-46,13	0,34	-34,41	-0,29	-16,41	-0,08	-11,02	-0,06	10,04	0,17	3,90	0,10
176 Gluthathione	99,60	-3,00	99,95	4,01	98,58	2,34	-82,33	1,07	92,78	1,62	99,41	2,75
177 β-Mercaptoethanol	98,83	-2,50	99,88	3,59	98,24	2,24	-91,32	1,47	98,57	2,39	99,47	2,79
178 Protocatechualdehyde	84,69	-1,28	85,06	1,25	85,58	1,24	74,18	-1,19	82,21	1,17	75,95	0,98
179	-27,06	0,13	-29,85	-0,24	-17,43	-0,09	29,08	-0,50	20,09	0,27	-5,93	0,01
180	-52,45	0,42	-53,15	-0,51	-25,84	-0,17	29,06	-0,50	38,39	0,46	11,64	0,18
181	-75,03	0,78	-69,44	-0,76	-67,30	-0,68	-29,06	0,14	-34,52	-0,26	-52,77	-0,47
182	-82,70	0,97	-73,25	-0,83	-85,78	-1,11	-35,00	0,21	-36,31	-0,28	-52,36	-0,47
184	-50,67	0,39	-44,84	-0,40	-42,56	-0,35	19,57	-0,39	1,11	0,09	-23,25	-0,15
185	-25,95	0,12	-75,33	-0,87	-78,87	-0,91	-70,87	0,76	-85,75	-1,12	-79,97	-0,94
186	-10,79	-0,02	-86,84	-1,20	-44,36	-0,37	-49,84	0,41	-93,56	-1,51	-88,36	-1,21
187	-29,06	0,15	-30,47	-0,24	-18,84	-0,11	46,30	-0,71	16,07	0,23	-7,78	0,00
188	-24,40	0,11	-28,05	-0,22	-14,40	-0,06	45,90	-0,71	33,38	0,40	11,84	0,18
189	-38,46	0,25	-33,40	-0,27	-15,32	-0,07	33,43	-0,55	17,74	0,25	-33,20	-0,25
191	-86,39	1,09	-75,02	-0,87	-85,18	-1,09	-30,72	0,16	-38,41	-0,30	-69,96	-0,73
192	-87,92	1,15	-76,07	-0,89	-84,19	-1,06	-29,95	0,15	-39,47	-0,31	-69,77	-0,73
193	-36,31	0,23	-76,49	-0,90	-77,76	-0,88	-69,66	0,74	-88,27	-1,22	-87,48	-1,18
195	-40,29	0,27	-34,02	-0,28	-16,71	-0,09	50,02	-0,76	13,86	0,21	-34,89	-0,27
196	-41,28	0,28	-33,31	-0,27	-15,52	-0,07	49,56	-0,76	29,19	0,36	-22,63	-0,14
197	54,35	-0,69	45,80	0,52	34,59	0,40	-98,88	2,58	55,77	0,67	63,30	0,75
200	92,54	-1,63	97,47	2,12	93,97	1,66	93,58	-1,99	95,48	1,84	96,02	1,86
201	35,36	-0,46	54,35	0,63	52,04	0,60	55,08	-0,84	70,28	0,90	48,86	0,56

Table 3. Cont

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
202	4,24	-0,16	33,35	0,38	33,62	0,39	53,18	-0,81	54,43	0,65	1,08	0,08
203	-75,75	0,80	-53,60	-0,51	-54,14	-0,49	-12,37	-0,05	-58,21	-0,54	-84,02	-1,06
204	93,30	-1,68	89,86	1,44	86,89	1,29	75,70	-1,23	85,59	1,28	89,15	1,38
205	98,33	-2,33	96,71	1,99	95,99	1,85	87,15	-1,60	94,52	1,75	95,47	1,80
206	91,20	-1,55	84,92	1,24	80,73	1,10	72,42	-1,15	80,32	1,12	79,87	1,08
207	99,44	-2,84	98,84	2,49	98,78	2,40	94,54	-2,08	97,91	2,21	97,60	2,10
209	92,36	-1,62	86,01	1,28	75,27	0,97	50,75	-0,77	70,52	0,90	85,56	1,24
210	94,85	-1,81	90,80	1,49	86,94	1,29	72,01	-1,14	85,34	1,27	90,73	1,46
211	65,68	-0,85	56,13	0,66	48,77	0,56	41,62	-0,65	56,56	0,68	46,85	0,54
213 3,4-Dihydroxybenzaldehyde-O- (4-methylbenzyl)-oxime	74,22	-1,01	78,39	1,06	80,70	1,10	85,40	-1,53	89,59	1,44	82,91	1,16
214 3-Hydroxy-4-methoxy-benzaldehyde-O-ethyloxime	1,81	-0,14	23,20	0,28	-20,88	-0,12	1,47	-0,19	-7,66	0,01	8,94	0,15
216	-3,08	-0,09	22,79	0,27	-20,66	-0,12	-2,51	-0,15	-7,73	0,01	5,36	0,12
217 3-Ethoxy-4-hydroxy-benzaldehyde-O-ethyloxime	4,78	-0,17	25,16	0,30	-35,24	-0,27	-33,01	0,19	-29,79	-0,21	23,92	0,29
218 4-Hydroxybenzaldehyde-O-ethyloxime	29,72	-0,41	46,44	0,53	0,64	0,08	0,73	-0,19	11,75	0,19	49,78	0,57
219	25,14	-0,36	43,17	0,49	-3,82	0,03	26,53	-0,47	5,33	0,13	31,12	0,36
220	21,75	-0,33	39,62	0,45	-7,85	0,00	48,61	-0,74	-0,18	0,08	8,85	0,15
221	84,69	-1,28	85,06	1,25	85,58	1,24	74,18	-1,19	82,21	1,17	75,95	0,98
222	12,16	-0,24	18,16	0,23	3,68	0,10	60,88	-0,93	6,18	0,14	18,35	0,24
223	-10,20	-0,03	-0,22	0,05	-4,22	0,03	65,70	-1,02	-16,64	-0,08	2,36	0,09
224	49,08	-0,62	65,24	0,79	60,18	0,71	77,08	-1,27	47,39	0,56	70,26	0,87
225	49,08	-0,62	65,24	0,79	60,18	0,71	77,08	-1,27	47,39	0,56	70,26	0,87
226	69,08	-0,91	59,71	0,71	60,51	0,71	86,10	-1,56	39,96	0,48	69,72	0,86
227	-53,88	0,44	-42,74	-0,38	2,43	0,09	25,79	-0,46	9,25	0,17	13,75	0,20
229	-53,88	0,44	-42,74	-0,38	2,43	0,09	25,79	-0,46	9,25	0,17	13,75	0,20
230	-56,59	0,47	-44,20	-0,40	-29,58	-0,21	53,21	-0,81	-15,95	-0,07	16,31	0,22
231	-42,27	0,30	-22,52	-0,16	-15,79	-0,08	53,67	-0,82	-19,51	-0,10	-26,91	-0,19
232	-38,38	0,25	-19,89	-0,14	-16,18	-0,08	63,94	-0,98	-39,32	-0,31	-12,91	-0,05
234 (+)-Androst-4-ene-3,17-dione	-12,72	0,00	-12,08	-0,06	-19,22	-0,11	30,20	-0,51	-8,75	0,00	7,82	0,14

Table 3. Cont

Name*	DP%^a	Scores	DP%^b	Scores	DP%^c	Scores	DP%^d	Scores	DP%^e	Scores	DP%^f	Scores
236 17 β -Hydroxyandrosta-1, 4-dien-3-one	62,72	-0,80	61,06	0,73	47,08	0,54	58,32	-0,89	52,51	0,63	47,48	0,54
237 11 α -Hydroxyandrost-4-ene-3, 17-dione	61,22	-0,78	45,33	0,52	49,95	0,57	72,60	-1,16	46,49	0,55	72,31	0,91
238 17 β ,11 α -Dihydroxyandrost-4-en-3-one	93,30	-1,68	87,39	1,33	86,81	1,29	83,31	-1,45	83,89	1,22	89,38	1,39
239	94,43	-1,77	94,60	1,75	95,94	1,85	85,09	-1,52	96,22	1,93	96,02	1,86
240	90,65	-1,52	92,30	1,58	94,83	1,73	82,42	-1,42	95,00	1,79	92,32	1,55
242 Esculetin	76,64	-1,06	81,16	1,13	85,83	1,25	72,37	-1,15	82,43	1,17	79,84	1,07
243 Lappaconitine	-13,24	0,00	-1,70	0,04	57,35	0,67	-48,79	0,39	50,29	0,60	12,60	0,18
244 Stigmast-5-ene-3 β ,26-diol	96,65	-2,01	93,40	1,66	87,88	1,33	49,49	-0,76	90,80	1,50	94,63	1,72
246 Campesterol	81,75	-1,19	71,40	0,90	64,24	0,77	44,41	-0,69	71,26	0,91	85,20	1,23

*The molecular structures of these 246 tyrosinase inhibitors is given as Supporting Information (see Table 1). ^{a,b,c,d,e,f}DP% = [P(Active) - P(Inactive)]x100 as well as canonical scores of each compounds in this set: (i) Classification of each compounds using the obtained models with stochastic bilinear indices in the following order: Eq. 28, 29, 30, 31, 32 and 33.

Table 4. Results of the Classification of Inactive Compounds in the Training Set by the Use of LDA-QSAR Models Developed Using non-Stochastic Total and Local Bilinear Indices Calculated with Different Weighting Scheme.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
Enviroxime	-34,94	-0,26	-59,71	0,52	-69,63	-0,62	-84,26	0,72	-99,93	1,79	-67,29	-0,56
Thiacetazone	-94,80	-1,58	-98,64	2,10	-85,61	-0,99	-46,53	0,28	-99,41	1,19	-93,77	-1,34
Riodoxol	-26,85	-0,18	-61,55	0,54	-96,46	-1,60	-92,98	0,90	-81,16	0,20	-61,44	-0,49
BVDU	-62,85	-0,60	-48,66	0,38	-69,99	-0,64	0,69	-0,11	-99,39	1,18	-2,47	0,13
TSKI- VI	-99,96	-3,87	-100,00	4,87	-99,06	-2,18	-96,50	1,61	-100,00	2,88	-99,95	-3,42
Calcii bromoaminoacetate	-85,82	-1,10	-81,48	0,91	-60,79	-0,50	-17,24	-0,02	-89,47	0,38	-39,70	-0,22
Chlorobutanol	-32,42	-0,23	11,51	-0,19	5,59	0,15	48,05	-0,89	-93,62	0,52	-28,86	-0,12
Clomethiazole	-85,78	-1,10	-80,86	0,90	-88,20	-1,08	-83,14	0,99	-96,28	0,67	-87,80	-1,04
Bason	3,56	0,11	-18,98	0,08	-65,40	-0,56	-9,24	-0,12	-94,41	0,56	-37,21	-0,20
Zonisamide	-82,76	-1,00	-87,96	1,12	-93,49	-1,34	-95,24	1,52	-99,26	1,12	-87,32	-1,02
Phenacetamide	-12,95	-0,05	-31,95	0,20	-14,06	-0,02	41,72	-0,61	-97,06	0,74	23,37	0,35
Brofexine	-45,62	-0,38	-47,82	0,37	-85,82	-0,99	-33,35	0,09	-96,34	0,68	-46,19	-0,29
Sultame	-97,29	-1,88	-98,62	2,09	-99,07	-2,18	-99,78	2,80	-99,97	1,98	-99,35	-2,33
Albutoin	-61,77	-0,58	-71,22	0,69	-54,01	-0,41	-21,10	-0,21	-99,70	1,38	-46,47	-0,30
NSD 3004	-89,67	-1,25	-81,84	0,92	-76,52	-0,76	-87,01	1,16	-99,86	1,58	-85,12	-0,94
Mephentoin	12,49	0,19	12,65	-0,20	-0,89	0,10	3,05	-0,33	-98,91	1,02	35,25	0,46
Cobalti besilas	-7,32	0,01	-18,83	0,08	12,45	0,21	-8,25	-0,24	-96,82	0,72	12,91	0,26
Calcium Sodium ferriclate	-99,72	-2,91	-99,70	2,77	-99,96	-3,50	-99,42	3,31	-100,00	2,88	-98,08	-1,86
Erythrophyll	-97,73	-1,96	-99,92	3,35	-50,84	-0,38	-63,32	-0,06	-100,00	2,52	-76,96	-0,75
Oxyphenisatin Acetate	-15,26	-0,07	-10,52	0,00	-22,97	-0,10	-13,61	-0,19	-98,87	1,01	9,01	0,22
Bibrofenum	-35,65	-0,27	-22,32	0,11	-96,19	-1,57	-30,69	0,02	-76,74	0,14	-52,84	-0,37
Carbazochrome sodium sulfonate	-87,03	-1,14	-92,50	1,34	-91,53	-1,22	-90,99	1,09	-99,90	1,67	-91,52	-1,20
Naftazone	-15,95	-0,07	-36,77	0,25	-9,88	0,02	-3,28	-0,26	-96,75	0,71	-8,85	0,06
Oxamarin	-95,12	-1,61	-96,26	1,65	-98,58	-2,01	-99,01	2,60	-99,99	2,32	-98,53	-1,96
Polyurene	-89,67	-1,25	-83,16	0,96	-89,39	-1,13	-83,47	0,80	-99,95	1,86	-68,37	-0,58
Pytamine hydrochloride	-59,75	-0,56	-64,20	0,58	-70,05	-0,63	-88,72	1,25	-99,89	1,65	-82,11	-0,85
Hydroxindasate	-34,45	-0,25	-10,29	0,00	-71,50	-0,66	-74,51	0,78	-99,78	1,46	-86,60	-0,99
Decinin	-30,13	-0,21	-43,76	0,32	-66,24	-0,58	-75,89	0,83	-99,97	1,97	-72,30	-0,64
Chlormetaminofenamide	-98,57	-2,17	-96,87	1,73	-99,53	-2,48	-99,31	2,78	-99,96	1,93	-99,92	-3,22
Metipamid	-74,67	-0,81	-67,83	0,64	-91,26	-1,21	-87,77	1,05	-99,81	1,50	-93,41	-1,32

Table 4. Cont

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
Urea	-38,19	-0,29	-55,68	0,46	-49,53	-0,36	-7,15	-0,11	-91,13	0,43	-34,70	-0,17
Propazolamide	-87,67	-1,17	-82,07	0,93	-96,90	-1,66	-90,39	0,77	-99,90	1,67	-67,95	-0,58
Methazolamide	-91,34	-1,34	-73,11	0,73	-98,85	-2,08	-95,53	1,14	-99,92	1,73	-82,15	-0,87
Clofenamide	-93,34	-1,46	-88,72	1,15	-97,84	-1,83	-96,91	1,83	-99,82	1,51	-99,06	-2,17
Bromothiazide	-99,48	-2,64	-98,46	2,05	-99,31	-2,32	-97,59	2,18	-99,86	1,59	-99,34	-2,32
Sulclamide	-56,84	-0,52	-58,63	0,50	-87,46	-1,05	-74,06	0,69	-98,94	1,03	-88,17	-1,06
Hydrochlorothiazide	-98,39	-2,12	-96,64	1,70	-99,06	-2,19	-98,55	2,44	-99,90	1,68	-99,83	-2,92
Flumethiazide	-98,95	-2,32	-96,51	1,68	-96,48	-1,63	-93,25	1,72	-99,85	1,57	-96,46	-1,59
Teclothiazide	-98,29	-2,09	-97,44	1,82	-99,15	-2,23	-98,69	2,46	-99,94	1,82	-99,79	-2,82
Mateina	-83,48	-1,02	-78,01	0,83	-88,42	-1,09	-81,58	0,84	-99,42	1,19	-74,49	-0,69
Pallirad	-93,39	-1,46	-96,99	1,75	-91,87	-1,24	-86,19	1,22	-98,29	0,89	-96,40	-1,58
WR 2823	-80,49	-0,94	-89,86	1,20	-57,94	-0,46	-94,09	1,18	-99,93	1,76	-99,61	-2,57
Ficusin	-10,36	-0,02	-9,23	-0,01	-3,24	0,07	12,69	-0,26	-85,32	0,28	28,34	0,40
Glicondamide	-93,87	-1,50	-94,26	1,46	-95,97	-1,55	-95,50	1,56	-99,96	1,94	-98,53	-1,99
Glibutimine	-88,28	-1,19	-93,74	1,42	-89,80	-1,14	-93,84	1,32	-100,00	2,62	-78,62	-0,77
Glipentide	-78,93	-0,90	-89,32	1,17	-77,99	-0,79	-86,41	0,94	-99,99	2,31	-82,56	-0,88
Gliamilide	-85,96	-1,10	-94,16	1,45	-92,91	-1,30	-93,22	1,07	-100,00	2,97	-82,41	-0,87
Glicaramide	-94,48	-1,55	-98,70	2,12	-98,11	-1,88	-99,43	2,41	-100,00	3,62	-99,18	-2,24
Etomoxir	-12,30	-0,04	-20,00	0,09	-34,49	-0,21	-14,10	-0,11	-99,77	1,44	-11,35	0,05
Glimepiride	-67,04	-0,67	-84,30	0,99	-78,24	-0,79	-83,23	0,64	-100,00	2,95	-80,25	-0,83
Amformin	-83,82	-1,03	-98,01	1,93	-94,07	-1,38	-90,89	1,36	-99,81	1,50	-75,83	-0,71
Benfosformin	-78,81	-0,90	-95,95	1,62	-61,81	-0,51	-68,20	0,50	-99,87	1,60	-75,20	-0,70
Glyprothiazol	-68,01	-0,68	-73,72	0,74	-78,62	-0,80	-84,34	0,57	-99,94	1,84	-84,25	-0,93
Phenbutamide	-75,37	-0,82	-87,59	1,10	-80,75	-0,85	-89,44	0,99	-99,87	1,61	-80,98	-0,84
Butadiazamide	-89,98	-1,27	-92,97	1,37	-92,12	-1,26	-92,31	0,95	-99,93	1,77	-94,79	-1,43
SPC-703	-85,65	-1,09	-89,02	1,16	-88,84	-1,10	-90,56	1,07	-99,90	1,69	-88,39	-1,06
Glybuthiazol	-56,10	-0,51	-66,36	0,61	-71,09	-0,65	-74,65	0,28	-99,96	1,96	-79,22	-0,80
Tolbutamide	-75,95	-0,83	-87,46	1,10	-84,18	-0,94	-90,03	1,03	-99,91	1,72	-85,53	-0,97
Anisilbutamide	-89,13	-1,23	-93,96	1,43	-92,05	-1,25	-94,85	1,42	-99,93	1,80	-91,92	-1,23
Furfurylurea	-76,88	-0,85	-79,44	0,86	-78,24	-0,79	-66,86	0,52	-99,79	1,48	-72,51	-0,65
Glypinamide	-92,71	-1,42	-96,21	1,65	-94,61	-1,43	-95,07	1,44	-99,94	1,84	-93,94	-1,36

Table 4. Cont

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
Glycyclamide	-64,38	-0,62	-84,32	0,99	-71,68	-0,66	-78,85	0,63	-99,94	1,81	-63,66	-0,51
Glyparamide	-90,57	-1,30	-92,34	1,33	-92,66	-1,29	-91,69	1,27	-99,88	1,64	-93,40	-1,32
Ag 307	-97,61	-1,94	-99,45	2,50	-94,33	-1,40	-86,05	1,04	-99,22	1,11	-96,08	-1,55
Iodocholine	-99,90	-3,37	-99,95	3,55	-99,85	-2,97	-99,58	3,01	-98,35	0,90	-99,32	-2,30
Diazoxide	-92,35	-1,40	-91,76	1,29	-94,42	-1,42	-86,96	1,20	-99,04	1,05	-92,05	-1,23
Tiamenidine hydrochloride	-63,90	-0,62	-51,35	0,41	-79,86	-0,83	-71,35	0,61	-98,82	0,99	-57,95	-0,43
Guanfacine hydrochloride	-65,86	-0,65	-83,73	0,98	-86,91	-1,03	-42,46	0,31	-97,39	0,77	-74,93	-0,70
Guanoclor sulfate	-83,33	-1,02	-84,81	1,01	-94,19	-1,39	-79,16	0,99	-98,97	1,03	-95,31	-1,47
Guanazodine sulfate	-68,40	-0,69	-87,89	1,12	-83,95	-0,93	-84,83	1,17	-99,81	1,51	-82,19	-0,86
Tolonidine nitrate	-31,17	-0,22	-40,74	0,29	-72,47	-0,68	-62,56	0,56	-98,38	0,91	-61,89	-0,48
Nicopholine	-77,40	-0,87	-74,04	0,75	-74,83	-0,73	-73,75	0,88	-98,53	0,93	-67,50	-0,55
Dipropamine	-97,34	-1,89	-98,26	1,99	-99,41	-2,37	-99,05	2,76	-100,00	2,55	-99,52	-2,45
Stilonium iodide	-35,23	-0,26	-32,29	0,21	-63,50	-0,53	-75,92	0,85	-99,89	1,66	-70,50	-0,61
Pentaquinomethonium	-31,66	-0,23	-51,52	0,41	-60,96	-0,49	-95,87	1,44	-99,69	1,36	-79,59	-0,79
Pentacynium chloride	-94,41	-1,54	-96,40	1,67	-97,39	-1,73	-97,49	2,12	-99,99	2,44	-97,84	-1,80
Pentolonium tartrate	-89,71	-1,25	-95,24	1,54	-96,97	-1,67	-97,04	2,06	-99,98	2,14	-97,44	-1,72
Dicoline	-86,98	-1,14	-89,83	1,20	-95,08	-1,47	-96,05	1,82	-99,97	1,99	-94,14	-1,36
Tetramethoquine methiodide	-80,41	-0,94	-80,57	0,89	-87,42	-1,04	-90,03	1,29	-99,80	1,49	-87,41	-1,02
Chlorisondamine chloride	-97,47	-1,91	-97,92	1,91	-99,69	-2,64	-98,75	2,50	-99,73	1,41	-99,89	-3,12
Temechin	-11,74	-0,03	-24,62	0,13	-69,71	-0,63	-24,91	0,18	-99,61	1,30	-59,73	-0,44
Methylene chloride	-88,51	-1,20	-85,68	1,04	-75,53	-0,75	-78,94	0,91	-74,16	0,10	-75,00	-0,69
Teflurane	-80,64	-0,94	-74,33	0,75	-55,96	-0,45	-39,48	0,12	-68,92	0,05	-11,39	0,05
Enflurane	-72,90	-0,77	-64,38	0,58	-51,53	-0,40	-29,63	0,03	-79,12	0,17	6,31	0,20
Halopropane	-92,54	-1,41	-91,34	1,27	-87,89	-1,08	-68,18	0,65	-79,52	0,18	-42,74	-0,24
Methoxyflurane	-83,61	-1,03	-79,10	0,86	-65,65	-0,58	-57,17	0,38	-84,99	0,27	-62,49	-0,49
Aliflurane	-24,62	-0,16	-14,10	0,04	-22,60	-0,10	25,45	-0,48	-84,93	0,27	19,58	0,31
Vinamar	-38,25	-0,29	-46,21	0,35	-60,86	-0,50	-42,64	0,33	-92,78	0,49	-31,73	-0,13
Bathyrane	-95,01	-1,60	-98,37	2,02	-91,87	-1,25	-34,77	0,12	-97,47	0,78	-83,86	-0,90
Bijodtyrosin	12,23	0,18	6,93	-0,15	-72,22	-0,67	-62,43	0,18	-95,47	0,62	-30,20	-0,14
Beta-Dijodtyrosin	5,02	0,12	-10,93	0,01	-82,04	-0,88	-70,26	0,35	-95,58	0,63	-34,42	-0,17
Thiophenobarbital	-70,21	-0,72	-89,09	1,16	-40,49	-0,26	22,72	-0,57	-99,11	1,07	-37,01	-0,20

Table 4. Cont

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
Allantovanamide	-35,50	-0,27	-61,42	0,54	-65,36	-0,56	-6,33	-0,32	-98,10	0,86	24,53	0,36
W 3580 B	-79,48	-0,91	-77,57	0,82	-83,90	-0,94	-85,88	1,18	-97,98	0,85	-86,24	-0,97
Cyclocumarol	3,96	0,11	5,26	-0,13	-4,76	0,06	20,67	-0,37	-98,45	0,92	31,94	0,43
Amikhelline hydrochloride	-64,33	-0,62	-76,81	0,80	-88,61	-1,10	-80,95	1,21	-99,77	1,44	-79,86	-0,79
Efloxate	-28,14	-0,19	-24,75	0,13	-29,74	-0,16	-9,51	-0,06	-98,45	0,92	10,36	0,24
Chloracyzine	-59,51	-0,55	-67,04	0,62	-74,46	-0,72	-87,60	1,07	-99,75	1,43	-83,61	-0,90
Nitrous ether	-41,60	-0,33	-46,13	0,35	-8,27	0,02	-44,42	0,20	-90,53	0,41	-47,07	-0,30
Clonitrate	-87,15	-1,15	-85,86	1,04	-31,03	-0,19	-73,44	0,46	-97,20	0,75	-90,71	-1,17
Nitrosorbide	-83,33	-1,02	-80,05	0,88	-9,03	0,01	-37,39	0,00	-98,92	1,02	-78,25	-0,76
Trolnitrate	-96,48	-1,76	-95,58	1,58	-47,29	-0,36	-92,03	1,04	-99,82	1,51	-98,63	-2,01
Carpronium chloride	-90,18	-1,28	-92,08	1,31	-95,83	-1,54	-90,70	1,47	-99,63	1,32	-93,17	-1,29
Nicodan percuton	-20,84	-0,12	-21,96	0,11	-23,70	-0,11	-32,01	0,14	-97,32	0,77	-8,18	0,08
Molsidomine	-94,71	-1,57	-94,18	1,45	-98,59	-2,01	-97,13	1,79	-99,89	1,66	-93,62	-1,32
Empiroline	54,19	0,63	58,39	-0,68	66,11	0,77	36,43	-0,55	-99,02	1,05	68,40	0,87
Peroxycalamenene	28,06	0,34	12,39	-0,20	-5,17	0,06	-8,54	-0,15	-98,86	1,01	-28,37	-0,11
Nitroguanil	-63,48	-0,61	-89,24	1,17	-55,14	-0,43	-38,19	0,14	-99,11	1,08	-53,98	-0,38
Cloguanamil	-80,35	-0,94	-95,03	1,52	-90,97	-1,20	-63,27	0,55	-98,57	0,94	-70,55	-0,62
Amquinate	-28,81	-0,20	-48,58	0,38	-66,50	-0,58	-89,97	1,23	-99,86	1,60	-76,45	-0,72
6-dimethyl,6-difluoromethyl-B-artether	-25,21	-0,16	-30,19	0,19	-32,33	-0,19	21,87	-0,40	-99,94	1,82	3,61	0,18
Supazine	-55,24	-0,49	-76,50	0,80	-97,77	-1,80	-94,02	1,33	-99,96	1,96	-76,76	-0,73
Antimony sodium tioglycollate	-89,69	-1,25	-76,27	0,79	-85,19	-0,97	-43,78	0,27	-97,19	0,75	-76,87	-0,74
Lindane	-97,00	-1,83	-96,78	1,72	-99,04	-2,18	-95,16	1,65	-88,00	0,34	-99,02	-2,15
Antienite	-86,45	-1,12	-78,27	0,84	-81,48	-0,87	-74,45	0,73	-97,94	0,84	-86,50	-0,99
lobendazole	-45,99	-0,38	-69,65	0,67	-76,88	-0,76	-80,22	0,69	-99,12	1,08	-73,03	-0,66
Iodotimol	23,53	0,29	28,45	-0,35	-42,19	-0,27	-39,45	0,03	-96,01	0,65	-11,74	0,04
Famopos	-99,58	-2,73	-99,69	2,75	-99,07	-2,19	-99,55	1,96	-99,98	2,10	-99,65	-2,60
Nitramisole hydrochloride	-65,36	-0,64	-48,19	0,37	-22,67	-0,10	-52,43	0,18	-98,54	0,94	-70,38	-0,62
Vincofos	-85,97	-1,10	-94,01	1,44	-78,62	-0,81	-82,85	0,36	-99,90	1,68	-90,74	-1,17
Bromofenofos	-93,84	-1,50	-89,24	1,17	-85,85	-1,01	-39,07	-0,16	-97,07	0,74	-99,41	-2,39
Tioxidazole	-81,62	-0,97	-86,83	1,08	-83,57	-0,93	-75,96	0,59	-99,55	1,27	-80,00	-0,81

Table 4. Cont

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
Phoxim	-75,94	-0,83	-81,79	0,92	-52,17	-0,39	-80,62	-0,10	-99,87	1,60	-81,80	-0,86
Cetovex	-59,94	-0,56	-23,94	0,13	-41,73	-0,27	-6,82	-0,68	-99,92	1,74	-42,75	-0,27
Amendol	33,98	0,39	23,51	-0,30	10,50	0,19	-20,67	-0,03	-98,69	0,97	10,26	0,24
Tandamine Hydrochloride	-90,47	-1,29	-93,87	1,43	-92,64	-1,29	-94,06	1,75	-99,55	1,26	-95,94	-1,52
Mariptiline hydrochloride	11,99	0,18	11,65	-0,19	10,34	0,19	-57,60	0,33	-98,16	0,87	-56,83	-0,42
Noxiptiline hydrochloride	-61,50	-0,58	-70,57	0,68	-55,48	-0,43	-83,64	1,01	-99,44	1,20	-74,57	-0,69
Imipraminoxide	-53,18	-0,47	-60,43	0,53	-63,79	-0,54	-73,65	0,88	-99,70	1,37	-77,53	-0,74
Etoferidone hydrochloride	-91,83	-1,36	-89,48	1,18	-97,13	-1,70	-98,05	2,02	-99,98	2,12	-98,40	-1,93
Tisocromide	-90,40	-1,29	-91,83	1,30	-39,99	-0,28	-76,06	0,88	-99,95	1,89	-92,25	-1,24
Befuraline	-39,37	-0,31	-27,73	0,16	-7,27	0,04	-20,94	0,18	-99,40	1,18	-7,87	0,08
Carnidazole	-97,14	-1,86	-96,36	1,66	-88,05	-1,08	-86,62	0,87	-99,68	1,36	-97,93	-1,83
Hachimycin	-71,14	-0,74	-62,38	0,55	-89,91	-1,15	-74,04	0,78	-99,68	1,35	-85,48	-0,96
Homidium	-99,92	-3,48	-99,94	3,45	-99,94	-3,37	-99,64	2,06	-99,07	1,06	-99,92	-3,26
Dimidium bromide	-99,90	-3,40	-99,91	3,31	-99,91	-3,19	-99,36	1,87	-98,55	0,94	-99,89	-3,11
Nithiazide	-87,53	-1,16	-92,33	1,33	-85,70	-0,99	-80,16	0,60	-99,46	1,21	-94,59	-1,41
Puromycin	-99,51	-2,67	-96,56	1,69	-92,14	-1,28	-95,05	2,22	-100,00	2,57	-92,30	-1,22
Quinapyramine	-31,49	-0,22	-55,13	0,46	-97,05	-1,67	-98,40	2,07	-99,91	1,70	-97,82	-1,80
Acranil	-60,29	-0,56	-77,19	0,81	-87,85	-1,06	-95,68	1,69	-99,86	1,59	-97,67	-1,77
Nitrofuril	-61,08	-0,57	-69,01	0,66	-39,68	-0,26	-19,28	-0,10	-98,29	0,89	-62,66	-0,50
Clioquinol	-34,57	-0,26	-48,21	0,37	-82,56	-0,89	-71,09	0,52	-90,54	0,41	-71,88	-0,65
Noscapina	-92,46	-1,40	-89,61	1,19	-87,99	-1,08	-85,16	1,30	-99,52	1,24	-82,85	-0,87
Remifentanilo	-73,34	-0,78	-64,27	0,58	-82,96	-0,91	-79,09	0,84	-99,97	2,05	-70,99	-0,61
Alylprodine	-0,91	0,06	-1,61	-0,07	-9,15	0,02	-4,52	-0,08	-99,79	1,48	9,18	0,23
Clonitazene	-79,19	-0,91	-78,11	0,83	-84,67	-0,96	-93,26	1,38	-99,90	1,67	-96,41	-1,59
Codeinemetilbromide	-44,67	-0,37	-42,66	0,31	-54,25	-0,41	-55,05	0,69	-99,74	1,42	-66,98	-0,55
Dimenoxadol	-52,74	-0,46	-51,51	0,41	-41,68	-0,28	-65,23	0,65	-99,77	1,45	-40,68	-0,22
Tenalidine tartrate	-97,35	-1,89	-97,78	1,88	-93,76	-1,36	-98,15	2,43	-99,94	1,82	-95,88	-1,51
Bromazine	-72,29	-0,76	-77,34	0,81	-88,25	-1,08	-77,97	0,87	-99,81	1,50	-75,75	-0,71
Clorfenoxamine hydrochloride	-55,87	-0,50	-50,15	0,40	-68,93	-0,62	-63,73	0,69	-99,36	1,16	-73,51	-0,66
Ametobenzepine	-41,45	-0,33	-40,68	0,29	-34,61	-0,20	-60,11	0,61	-99,33	1,15	-43,39	-0,25
Closiramine acetate	-3,92	0,04	-22,43	0,11	-6,16	0,05	-27,10	0,20	-99,66	1,34	-8,65	0,07

Table 4. Cont

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
Etiloxamine hydrochloride	-14,80	-0,06	-11,70	0,01	-22,34	-0,09	-44,58	0,38	-99,66	1,34	-26,93	-0,09
Trastomin	-43,45	-0,35	-69,72	0,67	-79,50	-0,82	-82,85	0,99	-99,97	2,06	-75,86	-0,71
Hiproheptine hydrochloride	-6,91	0,01	-52,70	0,43	-64,59	-0,55	-71,71	0,67	-99,84	1,54	-70,29	-0,61
Trazitiline	-34,71	-0,26	-44,68	0,33	-39,86	-0,25	-74,34	0,85	-99,90	1,69	-55,93	-0,40
Acipimox	-33,96	-0,25	-34,41	0,23	-56,44	-0,44	-51,89	0,40	-98,05	0,86	-49,57	-0,32
Choline glycerophosphate	-90,40	-1,29	-95,57	1,57	-94,39	-1,40	-93,24	1,24	-99,96	1,92	-94,96	-1,43
Acidum sultosilicum	-30,37	-0,21	-26,12	0,15	61,71	0,71	46,03	-0,74	-99,83	1,54	75,65	0,99
Timofibrate	-68,85	-0,70	-62,55	0,56	-50,00	-0,37	-46,21	0,39	-99,59	1,29	-55,25	-0,39
Tibric acid	-68,58	-0,69	-81,50	0,91	-62,24	-0,52	-67,37	0,50	-99,89	1,65	-54,27	-0,39
Urefibrate	-37,34	-0,28	-36,77	0,25	-40,94	-0,27	43,46	-0,66	-98,48	0,92	-24,05	-0,07
Treloxinate	-41,44	-0,33	-22,87	0,12	-43,61	-0,30	-0,47	-0,17	-96,22	0,67	-39,35	-0,22
Pirinixil	-34,79	-0,26	-31,95	0,20	-34,30	-0,20	-75,60	0,73	-99,88	1,64	-77,82	-0,76
Serfibrate	-53,06	-0,47	-46,12	0,35	-62,08	-0,52	-18,73	0,00	-99,87	1,61	-58,16	-0,43
Clofibrade	-59,88	-0,56	-54,56	0,45	-81,67	-0,88	-53,49	0,40	-99,84	1,56	-71,12	-0,62
Metiapine	-80,50	-0,94	-78,77	0,85	-74,95	-0,73	-86,58	1,24	-99,71	1,39	-89,29	-1,09
Pecajine	-48,75	-0,41	-62,17	0,55	-40,79	-0,26	-74,26	0,74	-99,62	1,31	-67,56	-0,56
Trifluomeprazine	-66,98	-0,67	-72,71	0,72	-64,00	-0,55	-79,88	0,89	-99,60	1,30	-71,99	-0,64
Docloxytepin succinate	-94,55	-1,56	-94,46	1,47	-95,87	-1,55	-96,53	1,87	-99,68	1,36	-97,77	-1,79
Triapride	-99,55	-2,70	-99,68	2,74	-99,58	-2,53	-99,89	3,60	-99,98	2,13	-99,73	-2,69
Rolipram	-30,58	-0,22	-39,92	0,28	-47,04	-0,34	-35,51	0,28	-99,63	1,32	-39,03	-0,21
Diclorpromazine	-85,96	-1,10	-88,61	1,14	-93,49	-1,34	-94,22	1,56	-99,32	1,15	-97,37	-1,73
Flutizenal	-98,91	-2,30	-98,64	2,10	-95,88	-1,56	-98,88	2,71	-99,98	2,07	-98,97	-2,11
Timelatam maleate	-92,01	-1,38	-92,04	1,31	-90,69	-1,19	-94,57	1,74	-99,70	1,37	-95,07	-1,43
Etacepride	-52,78	-0,46	-60,45	0,53	-78,25	-0,79	-75,34	0,90	-99,87	1,62	-79,55	-0,79
Diopirone fumarate	-37,72	-0,29	-49,35	0,39	-35,59	-0,22	-45,80	0,28	-99,94	1,84	-21,13	-0,04
Bis(etilmercuri)sulfide	-54,25	-0,48	-64,48	0,58	-91,59	-1,22	-71,28	0,69	-95,35	0,61	-91,76	-1,22
5-bromo-2-metil-5nitro-1,3dioxane	-94,30	-1,53	-94,55	1,48	-97,79	-1,82	-79,41	0,77	-97,22	0,76	-93,90	-1,35
2,6 dicloro-4-nitroaniline	-39,11	-0,30	-36,90	0,25	-28,31	-0,15	-13,21	-0,24	-91,33	0,43	-80,74	-0,84
1,2 dibromo 1,3,4,5,6 pentaclorociclohexano	-99,45	-2,61	-98,81	2,16	-99,86	-3,00	-96,86	1,63	-87,08	0,32	-99,66	-2,62
6 cloro-1,2-benzisotiazolidin-3-one	-57,67	-0,53	-43,86	0,32	-71,04	-0,66	-52,81	0,47	-90,43	0,40	-96,32	-1,58
3,5 dibromosalicilic amide	4,91	0,12	12,66	-0,20	-83,24	-0,91	5,66	-0,27	-88,39	0,35	-9,81	0,06

Table 4. Cont

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
2,4,6 tribromo-3-metilfenol	-11,25	-0,03	9,30	-0,17	-93,08	-1,31	-32,47	0,00	-84,38	0,26	-53,82	-0,39
2 mercapto benzotiazole	-79,43	-0,91	-82,91	0,95	-23,21	-0,10	31,81	-0,65	-94,17	0,55	-46,00	-0,29
N(2,2,2 tricloro-1-(4morfolinyl) etil)formamide	-98,58	-2,18	-96,28	1,65	-95,76	-1,54	-86,53	1,06	-98,82	1,00	-97,29	-1,71
Fosforotioic acid	-85,55	-1,09	-85,35	1,03	-81,63	-0,88	-80,62	0,14	-99,20	1,10	-94,02	-1,37
5-etil-p-aminobenzenetiosulfonate	-76,00	-0,83	-83,10	0,96	-82,78	-0,90	-93,31	1,21	-99,57	1,28	-80,01	-0,81
Tricloroetene	-61,44	-0,58	-53,02	0,43	-73,59	-0,70	-32,27	0,07	-70,58	0,06	-75,19	-0,70
Dimetilsulfoxide	-96,21	-1,72	-96,54	1,69	-87,23	-1,05	-94,81	1,73	-95,28	0,61	-92,36	-1,24
4(2 aminoetil)imidazole	-22,50	-0,14	-6,59	-0,03	-59,85	-0,48	-60,15	0,60	-97,25	0,76	-65,03	-0,52
1H(piridotiazin-one)	-59,31	-0,55	-64,60	0,59	-49,09	-0,36	-62,13	0,53	-95,52	0,62	-38,76	-0,21
N-fenil acetidrazine	-3,15	0,04	6,91	-0,15	-34,18	-0,20	6,14	-0,19	-96,54	0,69	8,47	0,22
O-acetilsalicylamide	15,33	0,21	14,90	-0,22	-19,07	-0,06	28,44	-0,45	-95,97	0,65	26,27	0,38
p-metoxycetanilide	-38,19	-0,29	-40,49	0,29	-60,98	-0,50	-26,95	0,20	-97,12	0,75	-28,97	-0,10
p-Etoxyanilinometane sulfonic acid	-71,89	-0,75	-84,54	1,00	-86,46	-1,01	-91,70	1,25	-99,66	1,35	-86,53	-0,99
4,5,6,7-tetrahidro-2-metil-3-(metilamino)-2H-indazole	-37,99	-0,29	-40,62	0,29	-72,58	-0,68	-82,13	0,97	-99,33	1,15	-80,15	-0,81
7 Cloro-3,3 dihidro-2H,9H isoxazolo benzoxazin	-54,68	-0,49	-49,90	0,39	-57,30	-0,46	-34,16	0,21	-95,19	0,60	-51,90	-0,35
2,3 dihidro-9H-isoxazolo (3,2b)quinazolin-9-one	-32,23	-0,23	-31,90	0,20	-31,16	-0,18	-34,54	0,12	-96,07	0,66	-22,74	-0,05
BA 1	-48,15	-0,41	-47,72	0,37	-66,60	-0,58	-41,55	0,21	-96,08	0,66	-35,88	-0,18
Fluorembichin	-94,34	-1,54	-95,37	1,55	-96,45	-1,61	-94,78	1,78	-97,03	0,74	-93,51	-1,31
DONU	-23,46	-0,15	-31,82	0,20	21,64	0,28	-34,50	0,13	-99,71	1,39	-25,27	-0,07
Imifos	-99,56	-2,72	-99,83	3,01	-99,82	-2,87	-99,92	3,63	-99,90	1,68	-99,93	-3,30
Azapicyl	-43,77	-0,35	-36,43	0,25	-60,42	-0,50	-29,54	0,12	-98,15	0,87	-44,19	-0,26
Uramustine	-97,25	-1,87	-98,58	2,08	-97,94	-1,85	-96,37	1,88	-99,11	1,07	-94,68	-1,40
Imidazol mustan	-99,03	-2,35	-99,27	2,37	-99,23	-2,27	-99,44	2,72	-99,83	1,53	-99,45	-2,39
DMDAI	-99,93	-3,53	-99,97	3,80	-99,96	-3,51	-99,96	3,71	-99,98	2,11	-99,92	-3,25
Benzotef	-92,16	-1,38	-95,85	1,60	-94,86	-1,44	-96,85	1,59	-99,77	1,45	-97,06	-1,67
Glucin	-36,35	-0,27	-30,99	0,19	-49,53	-0,36	-42,06	0,06	-99,44	1,20	-24,40	-0,07
Acesulfame	-68,02	-0,68	-84,50	1,00	-86,93	-1,03	-68,17	0,31	-99,03	1,05	-45,61	-0,29
Ethyllysergamide	-62,30	-0,59	-76,13	0,79	-81,95	-0,88	-93,06	1,48	-99,60	1,29	-94,25	-1,37

Table 4. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
Sigetin	7,16	0,14	-19,12	0,08	41,14	0,48	-50,56	-0,07	-99,97	2,01	-11,76	0,03
Amidefrini mesilas	-86,93	-1,14	-89,44	1,18	-94,74	-1,43	-98,45	2,25	-99,87	1,60	-98,27	-1,90
Metizoline	-64,61	-0,63	-65,76	0,60	-83,09	-0,91	-81,00	0,99	-98,46	0,92	-88,93	-1,08
Clonazoline hydrochloride	-51,12	-0,44	-56,33	0,47	-73,88	-0,70	-80,13	0,88	-96,71	0,71	-83,13	-0,89
Tymazoline hydrochloride	-32,96	-0,24	-30,75	0,19	-64,82	-0,55	-61,78	0,60	-99,60	1,30	-66,75	-0,55
Mtrafazoline	2,45	0,09	-7,15	-0,03	-35,20	-0,20	-57,83	0,46	-99,51	1,24	-51,06	-0,34
Glumipressin	-89,73	-1,26	-91,19	1,26	-91,29	-1,22	-77,33	0,66	-100,00	5,48	-78,87	-0,77
Felypressin	-92,78	-1,42	-92,19	1,32	-94,58	-1,43	-93,41	1,23	-100,00	5,57	-95,67	-1,51
Terlipressin	-97,99	-2,02	-96,67	1,70	-98,96	-2,15	-98,19	2,01	-100,00	6,69	-99,66	-2,61
Dimebamate	-38,29	-0,29	-55,92	0,47	-47,74	-0,34	14,07	-0,46	-99,41	1,19	-9,58	0,06
Emylcamate	-5,67	0,02	-31,36	0,20	-53,12	-0,40	-19,51	-0,11	-99,13	1,08	-20,65	-0,04
Tizanidine hydrochloride	-91,51	-1,35	-97,32	1,80	-98,86	-2,10	-98,78	2,37	-99,40	1,19	-100,00	-4,45
Chlorphenesin carbamate	-8,43	0,00	0,95	-0,10	-8,35	0,03	33,88	-0,48	-98,13	0,87	-1,88	0,13
Promoxolane	24,60	0,30	15,76	-0,23	-14,61	-0,02	-8,09	-0,08	-99,60	1,30	-12,93	0,04
Chlormezanone	-96,15	-1,72	-96,68	1,70	-97,21	-1,71	-98,50	2,05	-99,54	1,26	-96,95	-1,66
Ebubamate	-11,77	-0,04	-41,69	0,30	-29,53	-0,16	1,09	-0,43	-99,89	1,65	0,35	0,14
Metaxalone	-32,90	-0,24	-25,76	0,14	-40,19	-0,26	-5,29	-0,08	-98,85	1,00	-26,77	-0,09
Lorbamate	-30,85	-0,22	-58,19	0,50	-40,40	-0,26	-7,07	-0,28	-99,89	1,66	-6,98	0,08
Quiloflex	-74,46	-0,80	-72,82	0,72	-78,11	-0,80	-76,89	1,03	-99,48	1,22	-81,67	-0,84
Clodanolene	-73,59	-0,78	-72,56	0,72	-81,65	-0,88	-54,69	0,33	-98,28	0,89	-81,82	-0,85
Furtrethonium iodide	-79,71	-0,92	-81,31	0,91	-87,84	-1,06	-67,06	0,88	-98,65	0,96	-82,47	-0,86
Pyrophos	-96,33	-1,74	-98,85	2,18	-93,95	-1,38	-99,29	1,06	-99,99	2,23	-98,90	-2,12
Tetrastigmine	-95,91	-1,69	-98,92	2,20	-85,79	-1,00	-98,13	1,04	-99,97	2,00	-95,45	-1,49
Eseridine	-88,74	-1,21	-86,51	1,06	-89,07	-1,11	-91,82	1,47	-99,85	1,56	-96,41	-1,58
SY 28	-95,24	-1,62	-96,07	1,63	-94,90	-1,45	-95,82	1,71	-98,21	0,88	-88,95	-1,08
Methoxyphenamine hydrochloride	-36,65	-0,28	-27,14	0,16	-55,78	-0,43	-56,12	0,59	-98,77	0,98	-75,63	-0,71
DIHNE	10,14	0,17	-0,61	-0,08	-81,20	-0,85	-78,75	0,55	-96,28	0,67	-61,57	-0,49
Isometheptene	-8,56	-0,01	-15,48	0,05	-50,90	-0,37	-35,20	0,27	-99,29	1,14	-68,26	-0,58
Propylhexedrine	0,71	0,08	-26,57	0,15	-35,24	-0,21	-50,60	0,40	-99,53	1,25	-56,75	-0,42
Phenoxybenzamine hydrochloride	-52,28	-0,46	-42,62	0,31	-37,16	-0,23	-36,12	0,37	-99,37	1,17	-35,21	-0,16
Benfurodil hemisuccinate	-1,79	0,06	1,35	-0,10	-12,49	-0,01	15,94	-0,36	-99,45	1,21	25,65	0,38

Table 4. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
Bufeniode	28,15	0,34	10,26	-0,18	-64,26	-0,53	-67,59	0,34	-99,54	1,26	-42,98	-0,26
Papaverine	-86,22	-1,11	-84,38	1,00	-88,39	-1,09	-90,38	1,37	-99,50	1,24	-89,65	-1,11
Aligeron	-22,10	-0,13	-15,61	0,05	10,08	0,19	-21,26	0,19	-99,57	1,28	-0,93	0,15
Alkaloid F	-20,31	-0,11	-30,43	0,19	-43,47	-0,29	-49,45	0,41	-99,80	1,48	-31,75	-0,13
Nimedipine	-71,05	-0,74	-86,55	1,07	-90,17	-1,16	-93,14	1,29	-99,96	1,96	-95,71	-1,51
Assedil	-53,70	-0,47	-63,96	0,58	-54,77	-0,42	-80,89	0,86	-99,93	1,78	-67,78	-0,57
Diniprofylline	-90,44	-1,29	-80,26	0,88	-81,71	-0,88	-79,43	0,79	-99,98	2,08	-68,81	-0,58
Diprofenhydrochloride	-46,70	-0,39	-50,95	0,41	-24,03	-0,11	-72,49	0,68	-99,90	1,68	-50,91	-0,34
Nicergoline	-95,96	-1,70	-95,54	1,57	-98,20	-1,90	-96,85	1,89	-99,91	1,71	-97,16	-1,68
Mecinarone	-97,02	-1,84	-97,11	1,77	-97,60	-1,78	-96,32	2,07	-99,91	1,70	-95,96	-1,52
Acebutolol hydrochloride	-26,67	-0,18	-47,89	0,37	-74,01	-0,71	-75,12	0,91	-99,96	1,95	-81,65	-0,84
Betaxolol	-5,72	0,02	-16,61	0,06	-17,06	-0,04	-28,76	0,30	-99,92	1,75	-45,83	-0,28
Carpindolol	-3,79	0,04	-44,24	0,33	-54,46	-0,42	-59,05	0,71	-99,93	1,77	-63,52	-0,49
Chinoïn 103	43,27	0,49	15,38	-0,22	40,80	0,47	-24,03	0,08	-99,78	1,47	6,17	0,20
Pirepolol	-70,19	-0,72	-64,42	0,58	-86,16	-1,01	-89,20	1,34	-99,99	2,48	-90,66	-1,15
Mindodilol	25,08	0,31	16,13	-0,23	35,09	0,41	6,00	0,00	-99,89	1,66	18,26	0,32
Bopindolol	-5,99	0,02	-36,16	0,24	-48,12	-0,34	-35,08	0,30	-99,91	1,71	-55,70	-0,40
Actosin"Daiichi" Bucladesine	-94,25	-1,53	-97,20	1,78	-85,04	-0,98	-94,02	1,00	-100,00	2,65	-93,10	-1,29
Neo-Coronaril	-3,46	0,04	4,95	-0,13	-10,39	0,02	-29,29	0,22	-99,77	1,45	-14,14	0,03
Falipamil hydrochloride	-95,96	-1,69	-94,48	1,48	-96,21	-1,58	-96,46	2,05	-99,98	2,12	-96,36	-1,57
Mioflazine hydrochloride	-40,13	-0,31	-43,34	0,32	-70,68	-0,65	-26,20	0,20	-99,96	1,94	-44,24	-0,26
Frutisin	-99,99	-4,68	-100,00	5,17	-100,00	-6,56	-100,00	5,90	-100,00	3,49	-100,00	-5,57
Deltamethrin	-81,19	-0,96	-37,77	0,26	-79,79	-0,83	71,38	-1,22	-99,38	1,18	3,74	0,17
Bromopropylate	-0,25	0,07	22,01	-0,29	-72,55	-0,68	-0,76	-0,32	-97,89	0,83	-8,14	0,07
Heptenophos	-73,56	-0,78	-78,98	0,85	-43,69	-0,30	-48,54	-0,04	-98,87	1,01	-66,75	-0,55
Sch 24937	-97,89	-2,00	-98,69	2,12	-98,08	-1,88	-98,85	2,28	-98,75	0,98	-99,43	-2,39
Ciclosporin	-94,39	-1,54	-98,59	2,08	-99,78	-2,78	-99,88	2,98	-100,00	8,68	-99,84	-2,95
Homocysteine thiolactone	-46,39	-0,38	-24,47	0,13	-53,78	-0,41	-49,52	0,36	-95,66	0,63	-28,13	-0,10
Xanthine	-48,71	-0,41	-72,97	0,73	-73,38	-0,70	-41,77	0,24	-97,35	0,77	-2,83	0,12
Orotonsan S	-75,23	-0,82	-85,94	1,05	-82,99	-0,91	-58,10	0,50	-98,93	1,02	-45,71	-0,28
Thioctamide	-80,36	-0,94	-91,42	1,28	-76,03	-0,76	-77,28	0,71	-99,13	1,08	-84,63	-0,92

Table 4. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
Ambucetamide	-20,36	-0,12	-45,42	0,34	-51,76	-0,38	-70,28	0,62	-99,94	1,80	-50,90	-0,34
Aminopromazine	-92,69	-1,42	-93,80	1,42	-92,77	-1,29	-97,12	2,03	-99,89	1,64	-97,27	-1,70
Cimetropium Bromide	-17,59	-0,09	-1,99	-0,07	-28,87	-0,15	1,81	-0,01	-99,95	1,87	-25,59	-0,07
Emepronium Bromide	-5,27	0,02	-1,26	-0,08	-32,01	-0,17	-38,80	0,30	-99,79	1,48	-42,96	-0,25
Fenalamide	-53,65	-0,47	-61,35	0,54	-78,72	-0,80	-88,52	1,17	-99,97	2,01	-79,43	-0,79
Fenpiverinium Bromide	16,59	0,23	0,04	-0,09	-4,57	0,07	-24,91	0,09	-99,88	1,63	-21,47	-0,04
Hydramitrazine	-66,19	-0,65	-59,15	0,51	-95,50	-1,50	-97,87	1,73	-99,98	2,17	-97,34	-1,72
Mebeverine	-66,65	-0,66	-59,46	0,51	-67,91	-0,61	-74,08	0,86	-99,97	2,04	-64,52	-0,51
Octaverine	-95,13	-1,61	-97,20	1,78	-98,16	-1,90	-99,11	2,43	-99,90	1,69	-98,05	-1,85
Tio-Urasin	-85,05	-1,07	-68,05	0,64	-97,20	-1,70	-90,79	0,94	-99,58	1,28	-75,84	-0,72
Cycloserine	-32,92	-0,24	-15,67	0,05	-50,97	-0,38	-26,44	0,13	-94,83	0,58	-27,08	-0,09
Bromamphenicol	-84,81	-1,07	-39,53	0,28	29,24	0,35	-7,49	-0,24	-98,71	0,97	-46,71	-0,30
Fosfomycin	-45,23	-0,37	-54,71	0,45	-13,69	-0,02	-41,57	0,09	-97,93	0,84	-74,07	-0,68
Emimycin	-71,43	-0,74	-83,89	0,98	-88,92	-1,10	-78,19	0,85	-96,33	0,68	-94,71	-1,41
Selectan	-37,34	-0,28	-32,63	0,21	-74,45	-0,71	-47,45	0,19	-86,89	0,31	-34,15	-0,16
Nibroxane	-94,30	-1,53	-94,55	1,48	-97,79	-1,82	-79,41	0,77	-97,22	0,76	-93,90	-1,35
Alafosfalin	-53,16	-0,47	-62,05	0,55	-56,14	-0,44	-72,54	0,59	-99,71	1,38	-92,80	-1,28
Selectan-neutral	-91,82	-1,36	-92,52	1,34	-97,50	-1,76	-72,12	0,58	-91,56	0,44	-84,04	-0,91
Furaguanidine	-75,39	-0,82	-87,10	1,09	-67,37	-0,60	-51,84	0,36	-98,82	0,99	-77,26	-0,74
Sulfanilamide	-12,87	-0,05	-9,71	0,00	-67,86	-0,60	-82,85	0,74	-98,84	1,00	-84,16	-0,92
Allicin	-83,56	-1,03	-89,07	1,16	-36,77	-0,23	-78,12	0,61	-98,03	0,85	-82,09	-0,86

*The molecular structures of these 246 tyrosinase inhibitors is given as Supporting Information (see Table 1). ^{a,b,c,d,e,f}DP% = [P(Active) - P(Inactive)]x100 as well as canonical scores of each compounds in this set: (i) Classification of each compounds using the obtained models with non-stochastic bilinear indices in the following order: Eq. 22, 23, 24, 25, 26, and 27.

Table 5. Results of the Classification of Inactive Compounds in the Training Set by the Use of LDA-QSAR Models Developed Using Stochastic Total and Local Bilinear Indices Calculated with Different Weighting Scheme.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
Enviroxime	76,12	-1,05	32,52	0,37	-43,32	-0,36	65,36	-1,01	-68,22	-0,70	8,22	0,14
Thiacetazone	-95,76	1,65	-91,14	-1,40	-74,97	-0,82	-68,76	0,72	-51,20	-0,45	-87,71	-1,19
Riodoxol	-99,93	3,59	-99,79	-3,19	-96,61	-1,79	-34,46	0,21	-64,44	-0,64	-99,46	-2,65
BVDU	37,20	-0,48	33,43	0,38	48,14	0,55	-52,93	0,45	29,62	0,37	26,11	0,31
TSKI- VI	-99,70	2,88	-99,22	-2,57	-99,87	-3,30	-98,77	2,53	-98,25	-2,13	-99,92	-3,56
Calcii bromoaminoacetate	-98,90	2,29	61,25	0,73	-64,49	-0,63	-88,47	1,31	-74,84	-0,83	31,23	0,37
Chlorobutanol	-34,90	0,22	-33,32	-0,27	71,49	0,89	-16,51	0,00	-77,97	-0,90	32,95	0,38
Clomethiazole	-92,77	1,40	-85,74	-1,16	-60,02	-0,57	-55,58	0,49	-76,06	-0,85	-85,77	-1,11
Bason	-87,57	1,13	-78,27	-0,94	-27,22	-0,19	31,01	-0,52	-53,53	-0,48	-68,82	-0,71
Zonisamide	-90,45	1,26	-84,35	-1,11	-86,43	-1,13	-79,13	0,97	-75,60	-0,84	-79,13	-0,92
Phenacetamide	-68,84	0,66	-53,60	-0,51	-52,25	-0,46	-6,52	-0,11	-4,70	0,04	-72,24	-0,77
Brofexine	-48,88	0,37	-48,25	-0,44	-50,57	-0,44	-37,59	0,24	-53,71	-0,48	-40,15	-0,32
Sultiam	-97,05	1,82	-97,45	-2,01	-94,50	-1,57	-95,19	1,79	-97,12	-1,89	-92,71	-1,44
Albutoin	-48,74	0,37	-57,12	-0,56	-8,91	-0,01	-64,27	0,63	-60,91	-0,58	-44,19	-0,37
NSD 3004	-92,39	1,37	-94,21	-1,61	-79,68	-0,93	-69,88	0,74	-84,26	-1,07	-79,68	-0,93
Mephentoin	-15,77	0,02	-12,55	-0,06	-14,13	-0,06	-30,86	0,16	-45,23	-0,38	-69,53	-0,72
Cobalt besilas	3,21	-0,15	-15,41	-0,09	45,43	0,52	-37,65	0,24	17,21	0,24	-0,50	0,06
Calcium Sodium ferriclate	-99,97	4,01	-98,15	-2,16	-99,23	-2,48	-98,38	2,38	-99,67	-2,91	-99,31	-2,54
Erythrophyll	-93,89	1,48	-94,78	-1,66	80,95	1,10	68,21	-1,06	98,86	2,49	97,91	2,16
Oxyphenisatin Acetate	-72,32	0,72	-60,77	-0,61	61,25	0,72	-3,83	-0,14	46,51	0,55	50,90	0,58
Bibrofenum	-97,07	1,83	-93,51	-1,56	-91,47	-1,36	-71,01	0,77	-82,74	-1,02	-90,15	-1,29
Carbazochrome sodium sulfonate	-82,12	0,95	-81,01	-1,01	-78,75	-0,91	-52,72	0,45	-66,10	-0,66	-94,99	-1,62
Naftazone	-31,83	0,18	-38,29	-0,33	-58,95	-0,55	28,76	-0,49	-13,50	-0,05	-76,53	-0,86
Oxamarin	-93,57	1,46	-81,11	-1,02	-91,39	-1,35	-89,37	1,36	-93,24	-1,49	-71,10	-0,75
Polyurene	-95,34	1,61	-84,16	-1,11	-94,44	-1,56	-81,40	1,04	-97,61	-1,98	-98,73	-2,26
Pytamine hydrochloride	-74,49	0,77	-48,38	-0,45	-75,43	-0,83	-65,18	0,65	-79,49	-0,93	-61,98	-0,60
Hydroxindasate	6,33	-0,18	-20,88	-0,15	15,37	0,21	1,68	-0,20	4,86	0,13	-13,75	-0,06
Decinin	-41,58	0,29	-4,79	0,01	33,73	0,39	-27,17	0,12	24,96	0,32	54,14	0,63
Chlormetaminofenamide	-97,38	1,88	-92,54	-1,49	-98,56	-2,19	-96,91	2,03	-99,32	-2,58	-99,77	-3,04
Metipamid	-79,33	0,88	-73,73	-0,84	-64,17	-0,63	-87,47	1,26	-79,70	-0,94	-77,82	-0,89

Table 5. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
Urea	-99,84	3,18	-97,66	-2,05	-82,89	-1,02	19,73	-0,39	-72,98	-0,79	-84,99	-1,09
Propazolamide	-95,33	1,61	-82,56	-1,06	-96,79	-1,82	-85,55	1,18	-98,45	-2,19	-98,32	-2,13
Methazolamide	-92,20	1,36	-82,72	-1,06	-94,29	-1,55	-81,51	1,04	-98,94	-2,37	-98,67	-2,24
Clofenamide	-97,17	1,84	-95,21	-1,70	-92,85	-1,44	-94,89	1,76	-96,04	-1,74	-96,04	-1,73
Bromothiazide	-97,53	1,91	-96,95	-1,92	-98,87	-2,30	-97,49	2,15	-96,40	-1,79	-96,27	-1,76
Sulclamide	-37,24	0,24	-37,89	-0,32	-59,69	-0,56	-55,21	0,48	-86,68	-1,15	-77,01	-0,87
Hydrochlorothiazide	-95,80	1,66	-94,02	-1,59	-96,36	-1,76	-96,46	1,96	-97,37	-1,94	-96,01	-1,72
Flumethiazide	-96,62	1,76	-96,31	-1,83	-91,63	-1,37	-90,42	1,41	-90,20	-1,31	-80,06	-0,94
Teclothiazide	-97,01	1,82	-95,91	-1,78	-98,28	-2,11	-96,80	2,02	-99,00	-2,39	-98,79	-2,28
Mateina	-83,59	1,00	-61,51	-0,63	-86,86	-1,15	-72,24	0,79	-95,73	-1,71	-96,79	-1,83
Pallirad	-99,21	2,44	-96,61	-1,87	-89,15	-1,24	-59,51	0,55	-89,99	-1,30	-93,60	-1,50
WR 2823	-81,12	0,93	-86,23	-1,18	-9,22	-0,02	-99,50	3,01	50,76	0,60	-72,07	-0,77
Ficusin	-27,67	0,14	-18,79	-0,13	-13,39	-0,05	25,71	-0,46	4,93	0,13	-0,97	0,06
Glicondamide	-96,77	1,78	-87,26	-1,22	-98,11	-2,06	-95,13	1,79	-96,87	-1,86	-99,68	-2,89
Glibutimine	-92,76	1,40	-94,30	-1,62	-91,61	-1,37	-92,72	1,57	-78,66	-0,91	-93,37	-1,48
Glipentide	-74,10	0,76	-75,16	-0,87	-60,29	-0,57	-86,99	1,24	-27,62	-0,18	-67,99	-0,69
Gliamilide	-98,54	2,15	-94,42	-1,63	-98,44	-2,15	-97,85	2,23	-96,08	-1,75	-98,85	-2,30
Glicaramide	-95,79	1,66	-91,39	-1,42	-92,67	-1,43	-95,43	1,82	-85,73	-1,12	-91,43	-1,36
Etomoxir	-72,12	0,72	-65,99	-0,70	-88,70	-1,22	-86,84	1,24	-87,70	-1,19	-75,11	-0,83
Glimepiride	-63,22	0,57	-74,50	-0,86	-70,49	-0,73	-92,21	1,53	-59,01	-0,55	-79,31	-0,93
Amformin	-96,87	1,80	-92,03	-1,45	-63,37	-0,62	-36,26	0,23	-29,15	-0,20	31,51	0,37
Benfosformin	-99,58	2,74	-91,25	-1,41	-85,42	-1,10	-88,23	1,30	-21,72	-0,13	4,82	0,11
Glyprothiazol	-74,35	0,77	-74,63	-0,86	-90,05	-1,28	-85,97	1,20	-97,91	-2,05	-91,95	-1,39
Phenbutamide	-78,44	0,86	-69,84	-0,76	-76,36	-0,85	-89,62	1,37	-62,47	-0,60	-81,45	-0,98
Butadiazamide	-97,43	1,89	-95,20	-1,70	-95,22	-1,63	-96,92	2,04	-94,51	-1,59	-95,85	-1,71
SPC-703	-88,73	1,18	-85,74	-1,16	-82,99	-1,02	-68,84	0,72	-84,42	-1,07	-78,68	-0,91
Glybuthiazol	-69,98	0,68	-71,90	-0,80	-91,51	-1,36	-74,47	0,85	-98,26	-2,13	-92,98	-1,46
Tolbutamide	-81,05	0,92	-70,97	-0,79	-77,62	-0,88	-85,42	1,18	-67,96	-0,69	-83,92	-1,05
Anisilbutamide	-91,53	1,32	-81,62	-1,03	-86,99	-1,15	-92,17	1,53	-72,21	-0,77	-91,78	-1,38
Furfurylurea	-79,90	0,89	-66,03	-0,70	-75,94	-0,84	-66,99	0,69	-67,64	-0,69	-71,66	-0,76
Glypinamide	-91,94	1,35	-88,04	-1,25	-91,91	-1,38	-96,43	1,96	-69,93	-0,73	-86,18	-1,13

Table 5. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
Glycyclamide	-70,50	0,69	-68,95	-0,75	-55,04	-0,50	-82,73	1,08	-33,44	-0,24	-65,29	-0,65
Glyparamide	-90,58	1,27	-81,92	-1,04	-85,25	-1,09	-89,74	1,38	-83,94	-1,06	-81,50	-0,98
Ag 307	-87,25	1,12	-82,07	-1,04	-87,13	-1,16	-87,49	1,26	-76,29	-0,86	-90,54	-1,31
Iodocholine	-95,21	1,60	-99,90	-3,56	-96,30	-1,75	-95,93	1,89	-84,42	-1,07	-92,60	-1,43
Diazoxide	-88,36	1,17	-85,99	-1,17	-90,28	-1,29	-79,78	0,99	-88,64	-1,23	-85,12	-1,09
Tiamenidine hydrochloride	-65,27	0,60	-74,28	-0,85	-75,09	-0,82	-40,91	0,29	-92,18	-1,42	-95,79	-1,70
Guanfacine hydrochloride	-90,79	1,28	-90,29	-1,36	-95,54	-1,66	-59,44	0,55	-83,83	-1,06	-91,55	-1,37
Guanoclor sulfate	-92,43	1,38	-94,10	-1,60	-96,54	-1,78	-67,48	0,70	-95,28	-1,66	-96,52	-1,79
Guanazodine sulfate	3,02	-0,15	-47,96	-0,44	-27,65	-0,19	-46,87	0,36	-0,70	0,07	-0,74	0,06
Tolonidine nitrate	-12,91	0,00	-41,40	-0,36	-69,92	-0,72	-25,51	0,10	-80,36	-0,96	-87,36	-1,17
Nicopholine	-67,12	0,63	-48,95	-0,45	-69,61	-0,72	-57,93	0,53	-53,32	-0,48	-59,72	-0,57
Dipropamine	-95,91	1,67	-80,59	-1,00	-94,43	-1,56	-95,53	1,83	-94,83	-1,62	-91,81	-1,38
Silonium iodide	-56,78	0,47	-36,77	-0,31	-62,75	-0,61	-46,72	0,36	-18,31	-0,09	-10,78	-0,03
Pentaquinomethonium	-30,31	0,17	-20,70	-0,14	-55,11	-0,50	11,13	-0,30	-16,19	-0,07	-19,44	-0,11
Pentacynium chloride	-91,12	1,30	-75,73	-0,88	-82,17	-1,00	-78,48	0,95	-57,33	-0,53	-83,76	-1,05
Pentolonium tartrate	-71,01	0,70	-52,59	-0,50	-70,77	-0,74	-90,09	1,40	-59,62	-0,56	-72,19	-0,77
Dicoline	-72,34	0,72	-64,61	-0,67	-51,73	-0,46	-85,76	1,19	-54,17	-0,49	-62,38	-0,60
Tetramethoquine methiodide	-73,31	0,74	-51,33	-0,48	-58,44	-0,54	-79,98	0,99	-90,44	-1,32	-88,39	-1,21
Chlorisondamine chloride	-84,48	1,02	-71,78	-0,80	-95,58	-1,67	-96,64	1,99	-99,77	-3,09	-99,57	-2,76
Temechin	-16,22	0,03	-10,05	-0,04	-17,05	-0,09	26,50	-0,47	6,00	0,14	-1,51	0,05
Methylene chloride	-69,77	0,68	-80,35	-1,00	-83,64	-1,04	-20,58	0,04	-92,68	-1,45	-74,94	-0,83
Teflurane	-90,51	1,27	-86,07	-1,17	-91,29	-1,35	-84,19	1,13	-97,17	-1,90	-88,40	-1,21
Enflurane	-71,17	0,70	-68,42	-0,74	-93,72	-1,50	-88,83	1,33	-98,11	-2,10	-91,31	-1,35
Halopropane	-96,29	1,72	-94,75	-1,66	-97,47	-1,93	-90,12	1,40	-96,25	-1,77	-85,08	-1,09
Methoxyflurane	-45,89	0,34	-74,16	-0,85	-87,37	-1,17	-82,12	1,06	-96,77	-1,84	-94,96	-1,61
Aliflurane	-75,61	0,79	-68,29	-0,74	-93,31	-1,47	-74,19	0,84	-98,43	-2,18	-94,66	-1,59
Vinamar	-17,32	0,04	-6,90	-0,01	-30,54	-0,22	-42,06	0,30	-34,23	-0,25	-27,64	-0,19
Bathyrin	-99,68	2,86	-96,31	-1,83	-96,60	-1,79	-78,27	0,94	-91,95	-1,40	-80,88	-0,97
Bijodtyrosin	-24,29	0,11	-78,57	-0,95	-18,44	-0,10	-33,14	0,19	12,21	0,20	-82,45	-1,01
Beta-Dijodtyrosin	-70,70	0,69	-86,88	-1,20	-25,78	-0,17	-51,65	0,43	16,01	0,23	-68,67	-0,71
Thiophenobarbital	-81,73	0,94	-60,80	-0,61	-55,41	-0,50	-77,78	0,93	-57,59	-0,53	-52,10	-0,46

Table 5. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
Allantovanamide	31,58	-0,43	36,82	0,42	-55,22	-0,50	15,96	-0,35	-85,45	-1,11	-48,57	-0,42
W 3580 B	-68,69	0,66	-44,12	-0,39	-64,92	-0,64	-30,28	0,16	-73,54	-0,80	-81,36	-0,98
Cyclocumarol	-56,43	0,47	-39,87	-0,35	-25,18	-0,17	0,94	-0,19	-9,45	-0,01	-18,94	-0,11
Amikhelline hydrochloride	-49,59	0,38	-11,86	-0,06	-40,02	-0,32	-2,41	-0,15	-62,76	-0,61	-5,06	0,02
Efloxate	-69,52	0,67	-55,36	-0,54	-55,58	-0,51	-12,99	-0,04	-46,18	-0,39	-21,88	-0,14
Chloracyzine	-71,59	0,71	-62,44	-0,64	-68,51	-0,70	-80,58	1,01	-54,97	-0,50	-53,99	-0,49
Nitrous ether	2,35	-0,14	-18,56	-0,12	-34,67	-0,26	-36,49	0,23	-4,16	0,04	-6,21	0,01
Clonitrate	-81,56	0,94	-83,06	-1,07	-79,67	-0,93	-85,19	1,17	-67,80	-0,69	-74,84	-0,82
Nitrosorbide	-23,17	0,10	-69,59	-0,76	36,64	0,42	-71,39	0,78	26,50	0,33	-3,83	0,03
Trolnitrate	-31,30	0,18	-82,99	-1,07	-3,25	0,04	-92,08	1,52	54,57	0,65	-15,64	-0,08
Carpronium chloride	-78,59	0,86	-55,14	-0,53	-67,86	-0,69	-80,04	0,99	-87,67	-1,19	-90,72	-1,32
Nicodan percuton	-38,81	0,26	-24,46	-0,18	-46,88	-0,40	-41,04	0,29	-55,21	-0,50	-47,81	-0,41
Molsidomine	-82,99	0,98	-67,83	-0,73	-97,08	-1,86	-79,62	0,98	-96,47	-1,80	-96,67	-1,81
Empiroline	55,56	-0,70	11,95	0,17	85,54	1,24	22,46	-0,42	15,05	0,22	44,91	0,51
Peroxycalamenene	-27,42	0,14	-12,70	-0,07	-43,15	-0,35	49,10	-0,75	4,45	0,12	19,72	0,25
Nitroguanil	-82,29	0,96	-87,13	-1,21	-82,13	-1,00	-7,63	-0,10	-6,64	0,02	-57,77	-0,54
Cloguanamil	-93,95	1,48	-91,65	-1,43	-94,30	-1,55	-38,75	0,26	-68,58	-0,70	-92,08	-1,40
Amquinat	1,82	-0,14	18,53	0,23	7,90	0,14	-47,72	0,38	-21,65	-0,13	-11,12	-0,03
6-dimethyl,6-difluoromethyl-B-arteether	-65,71	0,61	-65,25	-0,68	-89,63	-1,26	-57,74	0,52	-60,43	-0,57	-37,80	-0,30
Supazine	-96,08	1,69	-90,68	-1,38	-69,37	-0,71	-17,80	0,01	-77,01	-0,87	-78,35	-0,90
Antimony sodium tioglycollate	-48,06	0,36	-45,62	-0,41	26,11	0,31	64,47	-0,99	-96,28	-1,77	-95,92	-1,71
Lindane	-77,69	0,84	-85,39	-1,15	-97,95	-2,03	-99,31	2,84	-99,64	-2,88	-98,95	-2,34
Antienite	-82,60	0,97	-81,90	-1,04	-48,02	-0,41	-66,27	0,67	-60,04	-0,57	-77,72	-0,89
Iobendazole	-32,69	0,19	-32,39	-0,26	-41,18	-0,33	-36,54	0,23	-45,14	-0,37	-20,00	-0,12
Iodotimol	24,84	-0,36	8,14	0,13	-62,02	-0,60	-23,70	0,08	-12,42	-0,04	6,31	0,13
Famopos	-81,30	0,93	-96,42	-1,84	-95,43	-1,65	-98,43	2,40	-98,97	-2,38	-96,81	-1,83
Nitramisole hydrochloride	-58,98	0,51	-67,70	-0,73	-11,11	-0,03	-30,63	0,16	-6,80	0,02	-20,79	-0,13
Vincofos	-92,89	1,41	-97,78	-2,07	-78,22	-0,89	-88,33	1,30	-76,08	-0,85	-91,39	-1,36
Bromofenofos	-16,04	0,03	11,51	0,16	-52,11	-0,46	-94,83	1,76	53,80	0,64	-24,25	-0,16
Tioxidazole	-85,98	1,08	-68,55	-0,74	-76,19	-0,85	-86,20	1,21	-83,62	-1,05	-94,19	-1,55

Table 5. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
Phoxim	-87,43	1,13	-92,73	-1,50	-97,75	-1,98	-98,20	2,32	-96,85	-1,85	-62,39	-0,60
Cetovex	-35,63	0,22	-83,39	-1,08	-16,23	-0,08	-35,55	0,22	-52,95	-0,47	-74,67	-0,82
Amendol	23,47	-0,34	39,51	0,45	28,69	0,34	36,71	-0,59	37,79	0,45	56,78	0,66
Tandamine Hidrochloride	-89,83	1,23	-75,72	-0,88	-76,00	-0,84	-74,79	0,85	-89,11	-1,25	-80,72	-0,96
Mariptiline hidrochloride	-48,04	0,36	-32,60	-0,27	-78,39	-0,90	12,44	-0,31	-17,82	-0,09	-72,14	-0,77
Noxiptiline hidrochloride	-72,30	0,72	-45,53	-0,41	-77,06	-0,87	-31,25	0,17	-72,99	-0,79	-56,84	-0,53
Imipraminoxide	-84,06	1,01	-57,81	-0,57	-84,93	-1,08	-54,96	0,48	-68,26	-0,70	-45,74	-0,39
Etoferidone hidrochloride	-91,80	1,34	-84,84	-1,13	-96,20	-1,74	-93,59	1,64	-98,05	-2,08	-95,88	-1,71
Tisocromide	-99,62	2,78	-98,63	-2,31	-92,75	-1,44	-88,00	1,29	-40,49	-0,32	-66,11	-0,66
Befuraline	-55,59	0,46	-44,65	-0,40	-58,40	-0,54	-34,37	0,20	-44,69	-0,37	-21,57	-0,13
Carnidazole	-97,89	1,98	-95,30	-1,71	-95,07	-1,62	-63,38	0,62	-94,44	-1,58	-98,81	-2,29
Hachimycin	-25,39	0,12	-32,29	-0,26	-86,27	-1,13	-78,84	0,96	-78,30	-0,90	-82,09	-1,00
Homidium	25,46	-0,36	41,21	0,47	-23,03	-0,15	57,75	-0,88	-38,85	-0,30	-49,87	-0,44
Dimidium bromide	0,82	-0,13	33,98	0,39	-15,84	-0,08	69,71	-1,09	-24,90	-0,16	-55,37	-0,51
Nithiazide	-87,66	1,14	-77,68	-0,93	-95,30	-1,64	-75,33	0,87	-83,49	-1,05	-90,59	-1,32
Puromycin	-96,53	1,75	-82,91	-1,07	-98,03	-2,05	1,93	-0,20	-84,82	-1,09	-97,29	-1,91
Quinapiramine	63,79	-0,82	20,94	0,26	-10,97	-0,03	80,76	-1,37	-51,09	-0,45	-26,55	-0,18
Acranil	-8,65	-0,04	-3,35	0,02	-56,57	-0,52	-17,59	0,01	-35,61	-0,27	-0,94	0,06
Nitrofuril	-90,08	1,25	-80,73	-1,01	-82,22	-1,00	-8,06	-0,09	-37,72	-0,29	-77,11	-0,87
Clioquinol	-80,37	0,91	-67,03	-0,71	-67,77	-0,69	-21,55	0,06	-50,19	-0,44	-76,60	-0,86
Noscapina	-89,33	1,21	-74,55	-0,86	-50,41	-0,44	5,54	-0,24	-35,67	-0,27	-83,14	-1,03
Remifentanilo	-78,27	0,85	-71,69	-0,80	-80,02	-0,94	-85,82	1,19	-86,94	-1,16	-87,80	-1,19
Alylprodine	-56,65	0,47	-37,66	-0,32	-39,95	-0,32	-72,27	0,80	-67,60	-0,69	-37,33	-0,29
Clonitazene	-90,50	1,27	-81,25	-1,02	-86,27	-1,13	-76,62	0,90	-53,06	-0,47	-53,19	-0,48
Codeinemetilbromide	5,88	-0,18	18,52	0,23	15,16	0,21	13,60	-0,32	-0,62	0,07	13,12	0,19
Dimenoxadol	-76,48	0,81	-55,32	-0,54	-59,01	-0,55	-72,58	0,80	-75,80	-0,85	-54,08	-0,49
Tenalidine tartrate	-90,68	1,28	-84,65	-1,12	-85,58	-1,10	-94,68	1,74	-89,65	-1,28	-77,72	-0,89
Bromazine	-88,95	1,19	-76,27	-0,90	-93,14	-1,46	-95,59	1,84	-92,21	-1,42	-80,41	-0,95
Clorfenoxamine hidrochloride	-80,60	0,91	-58,71	-0,58	-82,18	-1,00	-70,14	0,75	-87,31	-1,18	-70,78	-0,74
Ametobenzepine	-63,78	0,58	-33,51	-0,28	-65,51	-0,65	-33,42	0,19	-71,84	-0,77	-47,46	-0,41
Closiramine aceturate	-68,48	0,65	-45,20	-0,41	-70,89	-0,74	-88,34	1,30	-84,93	-1,09	-63,02	-0,61

Table 5. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
Etiloxamine hydrochloride	-50,19	0,39	-30,65	-0,25	-62,15	-0,60	-46,72	0,36	-44,74	-0,37	-15,77	-0,08
Trastomin	-42,74	0,30	-34,02	-0,28	-55,64	-0,51	-77,69	0,93	-32,23	-0,23	-16,99	-0,09
Hiproheptine hydrochloride	-28,27	0,15	-32,94	-0,27	-13,66	-0,06	-36,64	0,23	2,84	0,11	20,55	0,26
Trazitiline	-58,96	0,50	-33,94	-0,28	-55,88	-0,51	-77,29	0,92	-61,70	-0,59	-27,88	-0,20
Acipimox	27,65	-0,39	50,54	0,58	20,74	0,26	65,33	-1,01	-10,07	-0,01	-3,79	0,03
Choline glycerophosphate	-98,06	2,02	-94,66	-1,65	-93,79	-1,51	-96,42	1,96	-15,95	-0,07	-98,85	-2,30
Acidum sultosilicum	-37,87	0,25	-58,24	-0,58	36,34	0,42	-53,00	0,45	16,00	0,23	1,78	0,08
Timofibrate	-68,85	0,66	-69,47	-0,76	-73,57	-0,79	-58,50	0,54	-87,00	-1,17	-81,63	-0,99
Tibric acid	-92,66	1,39	-80,14	-0,99	-79,61	-0,93	-57,12	0,51	-91,22	-1,36	-93,01	-1,46
Urefibrate	-98,12	2,04	-93,79	-1,58	-97,74	-1,98	-64,93	0,65	-82,86	-1,03	-93,58	-1,50
Treloxinate	-82,02	0,95	-75,28	-0,87	-86,05	-1,12	-63,03	0,61	-73,92	-0,81	-74,55	-0,82
Pirinixil	-2,69	-0,10	-10,81	-0,05	-69,02	-0,71	2,65	-0,21	-43,78	-0,36	-79,19	-0,92
Serfibrate	-61,88	0,55	-60,80	-0,61	-44,85	-0,37	-41,07	0,29	-86,94	-1,16	-73,50	-0,80
Clofibrade	-85,26	1,05	-76,49	-0,90	-91,93	-1,38	-85,66	1,19	-96,50	-1,80	-93,46	-1,49
Metiapine	-78,24	0,85	-65,08	-0,68	-78,21	-0,89	-70,87	0,76	-76,62	-0,86	-73,54	-0,80
Pecajine	-66,36	0,62	-53,45	-0,51	-72,42	-0,77	-74,05	0,84	-65,35	-0,65	-68,56	-0,70
Trifluomeprazine	-89,99	1,24	-78,12	-0,94	-72,45	-0,77	-74,74	0,85	-89,38	-1,27	-82,51	-1,01
Docloxytepin succinate	-93,89	1,48	-86,62	-1,19	-93,51	-1,49	-92,02	1,52	-85,27	-1,10	-84,63	-1,08
Triapride	-94,51	1,53	-95,54	-1,74	-91,12	-1,34	-96,71	2,00	-91,89	-1,40	-87,86	-1,19
Rolipram	-42,56	0,30	-33,46	-0,28	-47,75	-0,41	-58,69	0,54	-42,82	-0,35	-31,95	-0,24
Diclorpromazine	-89,90	1,24	-76,71	-0,91	-94,58	-1,57	-94,52	1,72	-97,23	-1,91	-96,14	-1,74
Flutizenal	-92,73	1,40	-91,95	-1,45	-66,97	-0,67	-94,22	1,69	-81,57	-0,99	-74,02	-0,81
Timelatam maleate	-93,07	1,42	-87,11	-1,21	-85,41	-1,10	-83,11	1,09	-80,59	-0,96	-71,23	-0,75
Etacepride	-7,36	-0,05	-19,90	-0,14	-38,04	-0,30	-40,13	0,28	-55,62	-0,51	-58,08	-0,54
Diopirone fumarate	-91,27	1,31	-86,33	-1,18	-77,81	-0,89	-85,84	1,19	-66,64	-0,67	-61,24	-0,59
Bis(etilmercuri)sulfide	17,48	-0,29	-10,62	-0,05	-1,73	0,05	67,23	-1,05	-75,74	-0,85	-82,97	-1,02
5-bromo-2-metil-5nitro-1,3dioxane	-96,83	1,79	-92,66	-1,49	-90,16	-1,29	-81,43	1,04	-80,40	-0,96	-87,24	-1,17
2,6 dicloro-4-nitroaniline	-79,03	0,87	-69,37	-0,76	-66,52	-0,67	-56,42	0,50	-54,57	-0,49	-56,11	-0,52
1,2 dibromo 1,3,4,5,6 pentaclorociclohexano	-23,47	0,10	-85,04	-1,14	-99,77	-3,03	-99,30	2,84	-99,94	-3,73	-99,77	-3,05
6 cloro-1,2-benzisotiazolidin-3-one	-47,25	0,35	-51,55	-0,49	-49,93	-0,43	-49,46	0,40	-40,50	-0,32	-71,23	-0,75
3,5 dibromosalicilic amide	2,04	-0,14	-1,24	0,04	-71,39	-0,75	-13,56	-0,03	-59,27	-0,56	-34,19	-0,26

Table 5. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
2,4,6 tribromo-3-metilfenol	-92,11	1,36	-90,38	-1,36	-91,64	-1,37	-49,55	0,40	-85,55	-1,11	-90,10	-1,29
2 mercapto benzotiazole	-2,16	-0,10	-29,55	-0,23	51,71	0,59	-48,16	0,38	-32,44	-0,23	-21,17	-0,13
N(2,2,2 tricloro-1-(4morfolinyl) etil)formamide	-88,72	1,18	-77,08	-0,91	18,17	0,24	-83,88	1,12	-88,36	-1,22	-88,19	-1,21
Fosforotioic acid	-32,50	0,19	-81,38	-1,02	-75,87	-0,84	-96,57	1,98	-93,65	-1,52	-66,15	-0,66
5-etil-p-aminobenzenetiosulfonate	-47,77	0,36	-70,06	-0,77	-82,29	-1,00	-93,44	1,62	-94,54	-1,59	-77,57	-0,88
Tricloroetene	-3,58	-0,09	-24,00	-0,18	-85,11	-1,09	-55,15	0,48	-96,79	-1,84	-93,14	-1,47
Dimetilsulfoxide	-83,22	0,99	-92,89	-1,51	-74,51	-0,81	-89,21	1,35	-83,87	-1,06	-59,09	-0,56
4(2 aminoetil)imidazole	77,07	-1,07	30,10	0,35	-27,38	-0,19	5,64	-0,24	-51,19	-0,45	-40,87	-0,33
1H(piridotiazin-one)	-54,36	0,44	-48,05	-0,44	-43,15	-0,35	-46,45	0,36	-49,27	-0,42	-64,53	-0,64
N-fenil acetidrazine	22,57	-0,34	-9,46	-0,04	-17,62	-0,09	8,99	-0,27	-12,49	-0,04	-6,92	0,00
O-acetilsalicylamide	42,63	-0,54	40,40	0,46	63,83	0,76	22,07	-0,42	-2,50	0,06	45,30	0,52
p-metoxiacetanilide	-11,72	-0,01	-22,11	-0,16	-3,30	0,04	-8,15	-0,09	-9,64	-0,01	-31,57	-0,23
p-Etoxyanilinometane sulfonic acid	-41,83	0,29	-62,51	-0,64	-40,86	-0,33	-80,34	1,00	-43,24	-0,35	-17,10	-0,09
4,5,6,7-tetrahidro-2-metil-3-(metilamino)-2H-indazole	-68,57	0,66	-32,38	-0,26	-57,44	-0,53	-40,98	0,29	-76,80	-0,87	-93,63	-1,50
7 Cloro-3,3 dihidro-2H,9H isoxazolo benzoxazin	-75,54	0,79	-61,50	-0,62	-82,26	-1,00	-64,17	0,63	-67,46	-0,69	-57,67	-0,54
2,3 dihidro-9H-isoxazolo (3,2b)quinazolin-9-one	-33,61	0,20	-30,86	-0,25	-25,64	-0,17	-12,24	-0,05	-10,94	-0,02	-14,85	-0,07
BA 1	-57,16	0,48	-6,31	0,00	-38,38	-0,30	-21,76	0,06	-47,86	-0,41	-80,49	-0,96
Fluorembichin	-69,95	0,68	-73,82	-0,84	-78,40	-0,90	-87,99	1,29	-75,14	-0,83	-79,89	-0,94
DONU	87,83	-1,39	62,33	0,75	36,49	0,42	-45,14	0,34	40,30	0,48	22,97	0,28
Imifos	-97,22	1,85	-98,46	-2,25	-94,00	-1,52	-91,06	1,45	-79,60	-0,94	-91,23	-1,35
Azapicyl	-11,57	-0,01	-24,36	-0,18	-43,65	-0,36	14,63	-0,33	-43,28	-0,35	-27,70	-0,19
Uramustine	-99,93	3,59	-98,87	-2,40	-95,82	-1,69	-91,74	1,50	-98,82	-2,32	-89,82	-1,28
Imidazol mustan	-83,58	1,00	-80,34	-1,00	-98,00	-2,04	-91,94	1,51	-95,91	-1,73	-92,03	-1,40
DMDAI	-99,84	3,18	-99,92	-3,67	-99,65	-2,85	-99,77	3,42	-98,99	-2,39	-99,11	-2,42
Benzotef	-72,45	0,73	-78,77	-0,96	-83,67	-1,04	-76,35	0,89	-80,83	-0,97	-76,03	-0,85
Glucin	-46,19	0,34	-32,29	-0,26	-54,86	-0,50	-19,56	0,03	-71,32	-0,76	-53,29	-0,48
Acesulfame	-93,96	1,48	-86,78	-1,20	-94,12	-1,53	-83,67	1,11	-89,58	-1,28	-72,49	-0,78

Table 5. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
Ethyllysergamide	-21,25	0,08	-26,42	-0,20	-64,96	-0,64	-42,13	0,30	-56,70	-0,52	-52,41	-0,47
Sigetin	-17,73	0,04	-48,42	-0,45	76,71	1,00	-84,15	1,13	48,93	0,58	12,87	0,19
Amidefrini mesilas	-87,44	1,13	-78,24	-0,94	-43,38	-0,36	-90,38	1,41	-68,77	-0,71	-78,16	-0,90
Metizoline	-27,06	0,13	-42,44	-0,37	-49,99	-0,43	-20,99	0,05	-50,61	-0,44	-59,37	-0,56
Clonazoline hydrochloride	-11,43	-0,02	-30,09	-0,24	-56,22	-0,51	-35,70	0,22	-58,30	-0,54	-51,05	-0,45
Tymazoline hydrochloride	-12,52	-0,01	-25,70	-0,19	-51,52	-0,45	7,49	-0,26	-59,13	-0,56	-48,20	-0,42
Mtrafazoline	12,50	-0,24	-4,76	0,01	-23,89	-0,15	-6,65	-0,11	-25,29	-0,16	-13,53	-0,06
Glumipressin	-98,14	2,04	-99,62	-2,92	-99,63	-2,82	-47,24	0,37	-98,99	-2,39	-95,38	-1,65
Felypressin	-98,48	2,14	-99,85	-3,36	-99,79	-3,08	-84,01	1,12	-99,41	-2,64	-98,60	-2,21
Terlipressin	-92,46	1,38	-99,48	-2,76	-99,59	-2,77	-84,81	1,15	-99,59	-2,81	-94,36	-1,56
Dimebamate	-7,35	-0,05	-14,51	-0,08	-60,56	-0,57	-41,80	0,30	-75,11	-0,83	-95,72	-1,69
Emylcamate	-56,61	0,47	-26,92	-0,21	-0,36	0,07	-13,29	-0,04	-39,01	-0,30	-37,97	-0,30
Tizanidine hydrochloride	-27,53	0,14	-61,47	-0,62	-96,22	-1,74	-56,04	0,50	-96,40	-1,79	-99,41	-2,61
Chlorphenesin carbamate	-16,81	0,03	-23,68	-0,17	-76,63	-0,86	-41,71	0,30	-45,81	-0,38	-76,08	-0,85
Promoxolane	47,14	-0,60	47,98	0,55	-15,79	-0,08	-9,98	-0,07	-16,46	-0,07	1,14	0,08
Chlormezanone	-96,83	1,79	-96,72	-1,89	-92,53	-1,42	-89,87	1,38	-90,76	-1,34	-91,48	-1,36
Ebubamate	-42,73	0,30	-31,62	-0,26	-24,79	-0,16	-76,63	0,90	-4,59	0,04	-89,54	-1,27
Metaxalone	-43,62	0,31	-32,05	-0,26	-43,60	-0,36	-5,46	-0,12	-39,00	-0,30	-53,67	-0,48
Lorbamate	3,81	-0,16	-17,79	-0,12	-11,47	-0,04	-70,19	0,75	-38,47	-0,30	-80,35	-0,95
Quiloflex	-54,33	0,44	-50,10	-0,47	-82,64	-1,01	-72,82	0,81	-70,13	-0,73	-80,15	-0,95
Clodanole	-65,35	0,60	-64,92	-0,68	-81,09	-0,97	-62,39	0,60	-84,11	-1,06	-78,02	-0,89
Furtrethonium iodide	-74,93	0,78	-42,55	-0,38	-60,95	-0,58	-57,43	0,52	-86,34	-1,14	-78,68	-0,91
Pyrophos	-99,85	3,20	-99,97	-4,06	-100,00	-4,81	-99,97	4,59	-99,66	-2,90	-99,38	-2,59
Tetrastigmine	-99,67	2,84	-99,86	-3,38	-99,99	-4,76	-99,77	3,43	-99,83	-3,24	-99,14	-2,44
Eseridine	-90,30	1,26	-63,09	-0,65	-77,88	-0,89	-83,90	1,12	-82,14	-1,01	-95,91	-1,71
SY 28	-95,97	1,68	-93,20	-1,53	-90,58	-1,31	-86,78	1,23	-82,31	-1,01	-45,70	-0,39
Methoxyphenamine hydrochloride	-47,09	0,35	-29,66	-0,24	-33,85	-0,25	-50,93	0,42	-43,75	-0,36	-74,38	-0,81
DIHNE	-53,79	0,43	-81,78	-1,04	-58,09	-0,54	-38,42	0,25	-14,42	-0,06	-92,06	-1,40
Isometheptene	-36,12	0,23	-18,87	-0,13	-38,85	-0,31	-29,52	0,15	-48,65	-0,42	-62,00	-0,60
Propylhexedrine	-27,74	0,14	-15,37	-0,09	-17,65	-0,09	-68,04	0,71	-23,91	-0,15	-43,41	-0,36
Phenoxybenzamine hydrochloride	-77,01	0,82	-68,25	-0,74	-73,65	-0,80	-74,74	0,85	-64,43	-0,64	-40,41	-0,33

Table 5. Cont.

Name*	DP%^a	Scores	DP%^b	Scores	DP%^c	Scores	DP%^d	Scores	DP%^e	Scores	DP%^f	Scores
Benfurodil hemisuccinate	-27,03	0,13	-11,85	-0,06	57,54	0,67	39,94	-0,63	39,85	0,47	37,15	0,43
Bufeniode	-86,57	1,10	-89,90	-1,34	-73,83	-0,80	-61,26	0,58	-2,52	0,06	-81,65	-0,99
Papaverine	-82,66	0,97	-64,01	-0,66	-51,96	-0,46	9,18	-0,28	6,15	0,14	-76,81	-0,87
Aligeron	-47,46	0,36	-28,58	-0,22	-39,34	-0,31	-45,16	0,34	-24,23	-0,15	-11,76	-0,04
Alkaloid F	-39,10	0,26	-37,37	-0,32	-62,98	-0,61	-34,20	0,20	-52,37	-0,46	-62,00	-0,60
Nimedipine	-90,61	1,27	-85,24	-1,14	-86,99	-1,15	-42,23	0,30	-81,04	-0,97	-59,41	-0,56
Assedil	-71,11	0,70	-68,49	-0,74	-61,80	-0,59	-90,06	1,39	-30,84	-0,22	-37,50	-0,29
Diniprofylline	-96,33	1,72	-90,02	-1,34	-92,84	-1,44	-78,45	0,95	-91,83	-1,39	-96,16	-1,74
Diprofenhydrochloride	-73,03	0,74	-69,09	-0,75	-10,75	-0,03	-80,28	1,00	-36,89	-0,28	-20,72	-0,13
Nicergoline	-97,14	1,84	-89,90	-1,34	-94,93	-1,60	-83,45	1,10	-79,51	-0,93	-90,61	-1,32
Mecinarone	-96,40	1,73	-83,58	-1,09	-90,93	-1,33	-57,36	0,52	-93,54	-1,51	-95,70	-1,69
Acebutolol hydrochloride	5,40	-0,17	-11,36	-0,05	-40,21	-0,32	-20,62	0,05	-44,90	-0,37	9,53	0,16
Betaxolol	4,90	-0,17	-3,15	0,03	-30,98	-0,22	-30,19	0,15	18,77	0,26	6,20	0,13
Carpindolol	24,65	-0,36	13,23	0,18	-18,46	-0,10	25,24	-0,45	-8,43	0,00	54,04	0,62
Chinoin 103	47,32	-0,60	23,67	0,28	-4,66	0,03	-24,05	0,08	47,07	0,56	38,24	0,44
Pirepolol	-73,20	0,74	-66,93	-0,71	-95,88	-1,70	-92,69	1,56	-97,27	-1,92	-98,40	-2,15
Mindodilol	10,22	-0,22	3,54	0,09	-16,07	-0,08	9,23	-0,28	11,10	0,18	49,60	0,57
Bopindolol	-57,06	0,48	-63,03	-0,65	-32,93	-0,24	28,42	-0,49	-12,29	-0,04	14,41	0,20
Actosin"Daiichi" Bucladesine	-96,86	1,79	-92,49	-1,48	-96,11	-1,73	-94,58	1,73	-85,65	-1,12	-86,79	-1,15
Neo-Coronaril	-51,96	0,41	-31,85	-0,26	-61,98	-0,60	-48,96	0,39	-40,72	-0,32	-13,46	-0,06
Falipamil hydrochloride	-95,61	1,64	-83,65	-1,09	-85,98	-1,12	-76,85	0,90	-85,58	-1,11	-95,13	-1,63
Mioflazine hydrochloride	-85,20	1,05	-91,73	-1,44	-94,05	-1,53	-62,12	0,60	-91,65	-1,38	-87,65	-1,18
Frutisin	-99,96	3,86	-98,96	-2,43	-99,83	-3,17	-100,00	6,06	-99,32	-2,58	-99,99	-4,49
Deltamethrin	-99,80	3,08	-99,71	-3,04	-50,35	-0,44	56,49	-0,86	-76,66	-0,87	-71,23	-0,75
Bromopropylate	-17,58	0,04	-49,85	-0,46	-84,90	-1,08	-71,14	0,77	-60,95	-0,58	14,42	0,20
Heptenophos	-30,84	0,17	-64,84	-0,68	-72,92	-0,78	-77,93	0,93	-85,70	-1,12	-72,40	-0,77
Sch 24937	-83,62	1,00	-91,23	-1,41	-96,88	-1,83	-91,15	1,46	-94,90	-1,62	-74,36	-0,81
Ciclosporin	-95,58	1,63	-97,08	-1,94	-99,54	-2,71	-85,51	1,18	-99,96	-3,92	-99,96	-3,89
Homocysteine thiolactone	-6,57	-0,06	-34,15	-0,28	-24,04	-0,16	-9,77	-0,07	-74,28	-0,81	-45,35	-0,38
Xanthine	-34,75	0,21	-14,78	-0,09	-61,04	-0,58	-5,04	-0,12	-65,50	-0,65	-55,94	-0,51
Orotonsan S	-88,98	1,19	-60,65	-0,61	-75,98	-0,84	-37,24	0,24	-88,70	-1,24	-67,42	-0,69

Table 5. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
Thioctamide	-95,58	1,63	-97,88	-2,10	-59,69	-0,56	-95,59	1,84	-7,79	0,01	11,82	0,18
Ambucetamide	1,17	-0,13	3,27	0,09	-16,50	-0,08	-54,78	0,48	-51,51	-0,45	-4,83	0,02
Aminopromazine	-92,14	1,36	-77,44	-0,92	-89,21	-1,24	-86,67	1,23	-92,76	-1,45	-92,08	-1,40
Cimetropium Bromide	20,92	-0,32	23,44	0,28	10,89	0,17	-28,51	0,13	49,36	0,59	27,40	0,33
Emeprium Bromide	-55,26	0,45	-24,17	-0,18	-55,65	-0,51	-42,31	0,30	-52,97	-0,47	-28,74	-0,20
Fenalamide	-26,89	0,13	-40,40	-0,35	-76,11	-0,85	-87,95	1,29	-75,41	-0,84	-32,02	-0,24
Fenpiverinium Bromide	-10,85	-0,02	27,98	0,33	2,98	0,10	-15,16	-0,01	-18,51	-0,09	28,09	0,33
Hydramitrazine	0,93	-0,13	-6,07	0,00	-98,34	-2,12	-67,00	0,69	-99,57	-2,79	-94,06	-1,54
Mebeverine	-82,20	0,96	-68,55	-0,74	-72,21	-0,77	-72,29	0,80	-66,78	-0,67	-67,30	-0,68
Octaverine	-92,33	1,37	-76,50	-0,90	-87,80	-1,18	-78,83	0,96	-74,19	-0,81	-83,74	-1,05
Tio-Urasin	-89,12	1,20	-78,07	-0,94	-90,97	-1,33	-60,39	0,57	-97,64	-1,99	-95,60	-1,68
Cycloserine	47,27	-0,60	15,33	0,20	-52,21	-0,46	18,36	-0,38	-69,28	-0,72	-63,83	-0,63
Bromamphenicol	-93,95	1,48	-67,28	-0,72	38,48	0,44	-33,73	0,20	29,22	0,36	62,01	0,74
Fosfomicin	-46,44	0,34	-46,28	-0,42	26,60	0,32	-61,49	0,59	-12,56	-0,04	-4,08	0,03
Emimycin	-50,17	0,39	-40,21	-0,35	-59,59	-0,56	-1,25	-0,16	-50,09	-0,43	-40,57	-0,33
Selectan	-10,48	-0,02	-0,41	0,05	-62,56	-0,60	-50,09	0,41	-13,16	-0,04	-9,42	-0,02
Nibroxane	-96,83	1,79	-92,66	-1,49	-90,16	-1,29	-81,43	1,04	-80,40	-0,96	-87,24	-1,17
Alafosfalin	67,46	-0,88	11,03	0,16	17,50	0,23	-9,77	-0,07	-45,01	-0,37	-70,50	-0,74
Selectan-neutral	-99,33	2,51	-98,28	-2,20	-60,57	-0,57	-81,81	1,05	-62,21	-0,60	-82,64	-1,01
Furaguanidine	-91,38	1,31	-89,72	-1,33	-89,27	-1,25	6,51	-0,25	-47,01	-0,40	-61,16	-0,59
Sulfanilamide	-12,06	-0,01	-33,41	-0,27	-1,40	0,06	-47,59	0,37	-52,44	-0,46	-19,03	-0,11
Allicin	-44,87	0,33	-90,07	-1,34	-17,47	-0,09	-93,86	1,66	36,49	0,44	42,66	0,49

*The molecular structures of these 246 tyrosinase inhibitors is given as Supporting Information (see Table 1). ^{a,b,c,d,e,f}DP% = [P(Active) - P(Inactive)]x100 as well as canonical scores of each compounds in this set: (i) Classification of each compounds using the obtained models with stochastic bilinear indices in the following order: Eq. 28, 29, 30, 31, 32, and 33.

Table 6. Results of the Classification of Active Compounds in the Test Set by the Use of LDA-QSAR Models Developed Using non-Stochastic Total and Local Bilinear Indices Calculated with Different Weighting Scheme.

Name*	DP%^a	Scores	DP%^b	Scores	DP%^c	Scores	DP%^d	Scores	DP%^e	Scores	DP%^f	Scores
2 Arbutin	97,30	2,03	98,66	-2,29	98,83	2,29	97,35	-1,91	99,29	-1,99	97,82	2,11
5 Tropolone	71,81	0,90	74,63	-0,94	76,38	0,96	81,17	-1,16	78,45	-1,01	86,41	1,28
7 Oxyresveratrol	99,26	2,62	99,33	-2,59	99,35	2,55	98,15	-2,21	99,50	-2,08	99,10	2,49
12 Aloesin	84,92	1,21	89,42	-1,36	78,06	0,99	82,61	-0,98	99,96	-2,77	69,68	0,91
14 Anisaldehyde	-20,93	-0,12	-7,63	-0,02	-10,55	0,01	11,58	-0,18	84,46	-1,11	15,78	0,29
18 3,3',4-trihydroxy-trans-stilbene	98,26	2,23	98,55	-2,25	98,72	2,26	96,58	-1,99	99,29	-1,99	98,38	2,23
23 4-hydroxychalcone	86,02	1,25	89,14	-1,34	91,33	1,42	87,80	-1,45	99,27	-1,98	92,24	1,54
26 2',4'-dihydroxychalcone	94,77	1,72	95,49	-1,74	96,15	1,78	93,91	-1,73	99,48	-2,07	96,69	1,92
28 trans-4-azobenzene carboxylic acid	72,80	0,91	74,73	-0,94	88,60	1,30	75,44	-1,20	98,43	-1,76	79,40	1,08
32 Castanospermine	82,80	1,15	86,12	-1,23	88,03	1,28	77,65	-0,84	90,46	-1,25	83,30	1,20
35 Ko-YGV	81,52	1,11	87,84	-1,29	86,70	1,23	92,76	-1,64	99,99	-3,35	93,13	1,60
42 Ko-YGN	67,58	0,82	77,80	-1,00	76,76	0,96	93,26	-1,62	100,00	-3,40	92,18	1,54
46 Ko-YYG	95,84	1,83	98,20	-2,15	98,50	2,18	99,01	-2,50	100,00	-3,99	98,86	2,39
53 Ko-YDG	83,70	1,18	90,57	-1,41	92,60	1,48	96,95	-1,98	100,00	-3,45	96,56	1,91
57 Ko-FWY	97,21	2,01	98,41	-2,21	98,95	2,34	98,71	-2,49	100,00	-5,00	98,91	2,40
61 Ko-KKY	92,69	1,56	96,40	-1,85	91,41	1,43	84,70	-1,30	100,00	-3,99	82,53	1,16
66 Ko-FWD	88,82	1,36	91,59	-1,46	94,73	1,64	96,04	-1,97	100,00	-4,45	96,72	1,93
69	92,92	1,58	91,61	-1,46	79,04	1,03	90,48	-1,61	100,00	-4,52	72,65	0,93
72 N-cyclopentyl- N-nitrosohydroxyl-amine	32,29	0,38	28,66	-0,35	67,92	0,80	24,15	-0,53	65,43	-0,86	24,82	0,36
75	74,08	0,94	82,14	-1,11	93,38	1,53	80,58	-1,23	91,27	-1,28	78,51	1,07
77	-0,18	0,07	24,12	-0,30	60,97	0,70	31,34	-0,48	93,25	-1,35	3,45	0,18
83	51,50	0,59	65,78	-0,78	84,00	1,14	60,61	-0,94	91,01	-1,27	49,44	0,61
86	38,65	0,44	30,69	-0,37	70,95	0,85	23,41	-0,55	74,27	-0,95	28,51	0,40
89	56,12	0,65	17,82	-0,25	72,66	0,88	-27,26	-0,19	96,08	-1,51	10,32	0,23
92	57,30	0,67	49,35	-0,56	37,60	0,44	16,67	-0,35	78,30	-1,01	29,53	0,41
95 (-)Epigallocatechin-3- O-gallate	99,99	4,85	100,00	-4,79	100,00	4,71	99,98	-4,11	100,00	-3,55	100,00	4,88
99 Magnesium L-ascorbyl- 2-phosphate	85,06	1,22	83,73	-1,15	98,58	2,20	91,66	-1,98	87,63	-1,18	88,96	1,37

Table 6. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
101	82,07	1,13	83,11	-1,14	77,70	0,99	73,39	-0,96	93,64	-1,37	87,75	1,33
107 3,5-dihydroxy-4'-methoxystilbene	87,95	1,32	90,36	-1,40	89,70	1,35	83,00	-1,19	99,46	-2,06	88,78	1,37
111 Rhaponticin	98,59	2,33	99,32	-2,58	99,41	2,59	97,61	-1,92	99,99	-3,21	97,73	2,10
113 Kushnol F	99,69	3,01	99,61	-2,83	99,37	2,57	99,54	-2,83	99,99	-3,33	99,51	2,75
116 Cuminaldehyde	31,12	0,37	34,42	-0,40	28,56	0,35	31,67	-0,49	89,77	-1,23	41,88	0,53
122 Norartocarpanone	98,62	2,34	98,70	-2,30	98,23	2,12	97,82	-2,01	99,76	-2,29	98,87	2,40
128	99,28	2,63	99,40	-2,64	99,45	2,62	98,64	-2,34	99,73	-2,26	99,36	2,64
134 Crocin-3	99,95	3,84	99,99	-4,35	100,00	4,67	99,98	-4,45	100,00	-4,65	99,97	3,95
136 4-hydroxy-3-methoxy cinnamic acid	74,42	0,95	78,27	-1,01	80,64	1,05	78,66	-1,06	96,27	-1,52	83,41	1,19
137 Anisic acid	37,76	0,43	45,92	-0,52	48,97	0,56	55,90	-0,68	88,41	-1,20	59,37	0,74
141 Kaempferol	98,67	2,35	98,48	-2,23	98,63	2,22	97,65	-2,04	99,80	-2,33	98,35	2,23
142 Glabrene	82,67	1,15	75,71	-0,96	70,79	0,86	59,52	-0,73	99,94	-2,68	61,23	0,77
143 Pyridoxine	88,74	1,36	91,87	-1,48	83,71	1,14	71,22	-0,80	89,37	-1,22	68,78	0,88
145 Pyridoxal	64,41	0,77	70,59	-0,86	56,46	0,65	48,16	-0,48	88,98	-1,21	51,46	0,65
148 Protocatechuic acid	95,40	1,78	95,92	-1,79	96,55	1,83	95,00	-1,77	89,17	-1,22	97,27	2,01
149 <i>m</i> -coumaric acid	86,76	1,28	88,83	-1,33	91,29	1,42	89,85	-1,48	93,38	-1,36	92,44	1,55
151 4-caffeoylquinic acid	99,74	3,09	99,82	-3,17	99,90	3,36	99,78	-3,20	99,92	-2,60	99,91	3,50
155 3,5-dicaffeoylquinic acid	99,97	4,07	99,99	-4,30	99,99	4,40	99,97	-4,22	100,00	-3,88	99,99	4,58
160 Morin	99,52	2,82	99,40	-2,64	99,40	2,58	98,87	-2,32	99,85	-2,42	99,24	2,57
162 Apigenin	95,09	1,75	94,76	-1,68	94,30	1,61	93,25	-1,55	99,71	-2,23	95,24	1,76
166 Phenylthiourea	-78,65	-0,89	-93,15	1,38	-38,44	-0,24	25,02	-0,44	53,18	-0,75	-58,07	-0,43
169	-41,54	-0,33	-49,35	0,39	-49,48	-0,36	-62,59	0,69	99,22	-1,96	-54,08	-0,37
172 Eckol	99,87	3,42	99,85	-3,25	99,87	3,23	99,78	-2,99	99,97	-2,90	99,88	3,39
183	-48,38	-0,41	-32,76	0,21	-57,07	-0,45	-20,88	-0,12	97,63	-1,65	-27,65	-0,11
190	-37,76	-0,29	-20,41	0,09	-44,59	-0,31	6,35	-0,31	99,18	-1,94	8,41	0,21
194	-72,64	-0,77	-55,73	0,46	-1,75	0,08	31,17	-0,79	97,78	-1,67	-39,93	-0,24
198	99,89	3,48	98,82	-2,34	99,84	3,14	88,70	-1,99	100,00	-4,66	99,31	2,58
199 8'-epi-cleomiscosin A	50,68	0,58	59,37	-0,69	63,92	0,74	66,20	-0,69	99,99	-3,07	68,66	0,88
208	61,90	0,73	69,04	-0,83	70,14	0,84	61,73	-0,71	90,83	-1,26	70,46	0,91
212 3,4-Dihydroxy-benzaldehyde-O-ethyloxime	69,93	0,86	70,75	-0,86	71,76	0,87	49,40	-0,56	92,82	-1,33	66,14	0,84

Table 6. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
215 3,4,5-Trihydroxy-benzaldehyde-O-ethyloxime	89,29	1,38	88,66	-1,32	88,79	1,31	74,08	-0,89	94,79	-1,43	86,55	1,30
228	22,15	0,28	23,26	-0,30	-12,23	0,00	43,48	-0,54	98,95	-1,88	10,77	0,24
233	45,10	0,52	33,10	-0,39	-10,26	0,02	36,02	-0,52	99,59	-2,14	10,54	0,23
235 Androsta-1, 4-diene-3, 17-dione	79,61	1,06	82,39	-1,12	74,99	0,94	89,22	-1,56	99,70	-2,23	83,91	1,19
241	67,06	0,81	78,98	-1,03	73,93	0,91	65,80	-0,70	99,93	-2,63	61,62	0,78
245 Stigmast-5-ene-3 β -ol	98,42	2,27	96,88	-1,91	96,80	1,87	96,83	-2,31	99,99	-3,10	95,62	1,77

*The molecular structures of these 246 tyrosinase inhibitors is given as Supporting Information (see Table 1). ^{a,b,c,d,e,f}DP% = [P(Active) - P(Inactive)]x100 as well as canonical scores of each compounds in this set: (i) Classification of each compounds using the obtained models with non-stochastic bilinear indices in the following order: Eq. 22, 23, 24, 25, 26, and 27.

Table 7. Results of the Classification of Active Compounds in the Test Set by the Use of LDA-QSAR Models Developed Using Stochastic Total and Local Bilinear Indices Calculated with Different Weighting Scheme.

Name*	DP%^a	Scores	DP%^b	Scores	DP%^c	Scores	DP%^d	Scores	DP%^e	Scores	DP%^f	Scores
2 Arbutin	97,51	-2,15	98,59	2,40	97,12	2,01	90,40	-1,77	98,35	2,32	97,30	2,04
5 Tropolone	59,21	-0,75	56,21	0,66	52,75	0,61	49,04	-0,75	50,03	0,59	57,74	0,67
7 Oxyresveratrol	98,81	-2,49	99,11	2,62	99,09	2,54	96,43	-2,31	99,10	2,60	99,35	2,70
12 Aloesin	70,46	-0,93	87,99	1,36	83,45	1,17	87,06	-1,60	93,21	1,65	86,82	1,29
14 Anisaldehyde	-23,03	0,09	-11,78	-0,06	-12,76	-0,05	5,27	-0,23	-1,85	0,06	-33,37	-0,25
18 3,3',4-trihydroxy-trans-stilbene	94,84	-1,80	96,02	1,90	96,83	1,96	91,46	-1,83	97,18	2,07	95,81	1,84
23 4-hydroxychalcone	57,33	-0,73	60,78	0,72	54,70	0,63	64,87	-1,00	69,46	0,88	68,72	0,84
26 2',4'-dihydroxychalcone	85,03	-1,29	86,58	1,30	85,57	1,24	83,82	-1,47	88,58	1,39	88,22	1,34
28 trans-4-azobenzene carboxylic acid	56,86	-0,72	62,11	0,74	70,39	0,87	73,06	-1,17	77,90	1,06	73,40	0,93
32 Castanospermine	97,73	-2,19	97,34	2,10	97,37	2,05	82,14	-1,41	95,31	1,82	93,68	1,64
35 Ko-YGV	92,11	-1,60	91,12	1,51	92,37	1,55	82,85	-1,44	68,62	0,87	86,47	1,28
42 Ko-YGN	94,82	-1,80	89,18	1,41	90,53	1,45	82,41	-1,42	70,77	0,91	88,55	1,36
46 Ko-YYG	98,11	-2,28	96,95	2,03	98,04	2,19	89,64	-1,73	97,39	2,10	98,45	2,30
53 Ko-YDG	96,66	-2,01	95,39	1,83	97,22	2,02	86,25	-1,56	90,96	1,51	94,43	1,70
57 Ko-FWY	95,56	-1,88	90,52	1,48	96,06	1,86	90,27	-1,76	97,64	2,15	97,70	2,12
61 Ko-KKY	98,78	-2,48	92,72	1,61	96,09	1,86	45,17	-0,70	84,17	1,23	80,51	1,09
66 Ko-FWD	93,96	-1,73	86,55	1,30	93,70	1,64	87,15	-1,60	90,93	1,50	92,11	1,54
69	63,14	-0,81	29,71	0,35	-49,91	-0,43	52,92	-0,80	-25,15	-0,16	-24,24	-0,16
72 N-cyclopentyl- N-nitrosohydroxyl-amine	69,76	-0,92	50,88	0,59	91,61	1,50	-14,97	-0,02	94,39	1,74	88,25	1,34
75	93,07	-1,66	85,43	1,26	95,85	1,84	57,14	-0,87	94,60	1,76	95,23	1,78
77	53,52	-0,68	38,21	0,44	82,90	1,16	9,53	-0,28	83,47	1,21	75,25	0,97
83	54,12	-0,68	52,80	0,61	85,07	1,22	13,22	-0,32	84,80	1,25	82,85	1,16
86	73,77	-1,00	51,19	0,59	93,63	1,64	-22,77	0,07	96,28	1,93	90,79	1,46
89	69,44	-0,92	41,70	0,48	90,47	1,44	-74,65	0,85	95,95	1,89	91,43	1,50
92	90,75	-1,52	82,20	1,16	66,32	0,80	-31,30	0,17	67,99	0,86	79,69	1,07
95 (-)Epigallocatechin-3- O-gallate	99,96	-4,04	99,97	4,25	99,99	4,64	99,89	-4,18	99,99	4,58	99,95	3,91
99 Magnesium L-ascorbyl- 2-phosphate	83,50	-1,24	92,01	1,56	92,43	1,55	-59,70	0,56	64,00	0,79	64,04	0,77

Table 7. Cont.

Name*	DP%^a	Scores	DP%^b	Scores	DP%^c	Scores	DP%^d	Scores	DP%^e	Scores	DP%^f	Scores
101	85,41	-1,30	86,09	1,28	79,70	1,07	44,53	-0,69	57,54	0,69	85,05	1,23
107 3,5-dihydroxy-4'-methoxystilbene	79,05	-1,12	84,90	1,24	85,73	1,25	79,00	-1,32	90,67	1,49	86,76	1,29
111 Rhaponticin	99,23	-2,70	99,63	3,04	98,94	2,47	96,68	-2,35	99,73	3,17	99,26	2,64
113 Kushnol F	98,07	-2,27	98,42	2,35	98,96	2,48	99,12	-3,06	98,30	2,30	99,07	2,54
116 Cuminaldehyde	4,75	-0,17	7,81	0,13	3,13	0,10	15,08	-0,34	-1,87	0,06	-2,58	0,04
122 Norartocarpanone	97,79	-2,20	98,42	2,34	98,76	2,40	96,12	-2,27	98,27	2,30	98,64	2,36
128	98,12	-2,28	98,59	2,40	98,69	2,37	96,26	-2,29	98,89	2,51	98,79	2,42
134 Crocin-3	99,86	-3,48	99,97	4,20	99,93	3,72	99,69	-3,62	99,96	4,07	99,84	3,34
136 4-hydroxy-3-methoxy cinnamic acid	78,81	-1,11	85,08	1,25	92,27	1,54	68,21	-1,06	87,03	1,33	80,55	1,09
137 Anisic acid	58,04	-0,74	66,91	0,82	78,06	1,03	53,74	-0,82	57,62	0,69	53,87	0,62
141 Kaempferol	98,87	-2,52	98,67	2,43	98,65	2,36	97,36	-2,48	98,30	2,31	99,23	2,62
142 Glabrene	79,18	-1,12	81,12	1,13	78,07	1,03	91,44	-1,83	84,05	1,22	90,64	1,45
143 Pyridoxine	97,68	-2,18	97,67	2,16	96,18	1,88	95,73	-2,21	91,37	1,53	97,97	2,18
145 Pyridoxal	84,70	-1,28	86,80	1,31	81,65	1,12	86,85	-1,59	70,52	0,90	80,95	1,10
148 Protocatechuic acid	97,65	-2,18	97,64	2,15	98,40	2,28	90,52	-1,77	94,88	1,78	96,27	1,89
149 <i>m</i> -coumaric acid	89,08	-1,44	91,06	1,51	94,13	1,67	72,62	-1,16	89,28	1,42	91,26	1,49
151 4-caffeoylquinic acid	99,67	-3,09	99,65	3,06	99,87	3,43	97,90	-2,60	99,69	3,11	99,74	3,12
155 3,5-dicaffeoylquinic acid	99,84	-3,43	99,91	3,69	99,98	4,21	98,72	-2,86	99,96	4,04	99,95	3,85
160 Morin	99,57	-2,97	99,61	3,01	99,59	2,91	98,95	-2,97	99,41	2,81	99,78	3,19
162 Apigenin	92,15	-1,60	94,69	1,76	95,35	1,78	92,05	-1,87	95,20	1,81	95,72	1,83
166 Phenylthiourea	31,70	-0,43	14,01	0,19	-6,65	0,01	-77,56	0,92	-17,91	-0,09	-62,17	-0,60
169	-53,16	0,43	-33,24	-0,27	-53,78	-0,48	-64,39	0,64	-36,76	-0,28	-21,94	-0,14
172 Eckol	99,72	-3,16	99,84	3,43	99,76	3,15	99,23	-3,14	99,73	3,17	99,85	3,38
183	-84,64	1,03	-74,38	-0,85	-84,83	-1,08	-34,28	0,20	-37,41	-0,29	-52,08	-0,46
190	-80,30	0,90	-71,46	-0,80	-66,00	-0,66	-24,72	0,09	-36,69	-0,28	-70,25	-0,73
194	-22,19	0,09	-87,50	-1,23	-41,12	-0,33	-48,34	0,38	-94,83	-1,62	-92,78	-1,44
198	94,88	-1,81	95,57	1,85	94,65	1,72	-91,44	1,48	95,65	1,86	97,65	2,11
199 8'-epi-cleomiscosin A	32,52	-0,43	53,26	0,62	64,88	0,78	67,70	-1,05	78,66	1,07	71,91	0,90
208	91,51	-1,57	85,30	1,26	81,14	1,11	70,46	-1,11	80,26	1,11	79,28	1,06
212 3,4-Dihydroxy-benzaldehyde-O-ethyloxime	65,76	-0,85	77,82	1,04	56,67	0,66	41,27	-0,64	53,88	0,64	72,23	0,91

Table 7. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
215 3,4,5-Trihydroxy-benzaldehyde-O-ethyloxime	84,74	-1,28	91,75	1,55	85,28	1,23	70,94	-1,12	78,67	1,07	84,35	1,20
228	-27,59	0,14	-15,96	-0,10	-25,78	-0,17	39,25	-0,62	-20,46	-0,11	-31,04	-0,23
233	-39,81	0,27	-21,96	-0,16	-37,48	-0,29	27,04	-0,47	-42,09	-0,34	-8,08	-0,01
235 Androsta-1, 4-diene-3, 17-dione	-10,68	-0,02	-9,79	-0,04	-25,17	-0,17	38,45	-0,61	-11,44	-0,03	5,22	0,12
241	72,39	-0,97	76,18	1,00	80,82	1,10	68,34	-1,07	86,33	1,30	81,72	1,12
245 Stigmast-5-ene-3 β -ol	81,75	-1,19	71,40	0,90	64,24	0,77	30,85	-0,52	71,82	0,93	85,87	1,25

*The molecular structures of these 246 tyrosinase inhibitors is given as Supporting Information (see Table 1). ^{a,b,c,d,e,f}DP% = [P(Active) - P(Inactive)]x100 as well as canonical scores of each compounds in this set: (i) Classification of each compounds using the obtained models with stochastic bilinear indices in the following order: Eq. 28, 29, 30, 31, 32, and 33.

Table 8. Results of the Classification of Inactive Compounds in the Test Set by the Use of LDA-QSAR Models Developed Using non-Stochastic Total and Local Bilinear Indices Calculated with Different Weighting Scheme

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
PALA	-40,25	-0,32	-68,70	0,65	-53,18	-0,40	-52,68	0,21	-99,72	1,40	36,83	0,49
Citenazone	-97,61	-1,94	-99,44	2,49	-91,59	-1,23	-49,69	0,28	-98,36	0,90	-97,63	-1,77
Arildone	-0,77	0,07	-14,48	0,04	-58,51	-0,47	-38,85	0,14	-99,94	1,82	-40,82	-0,23
Valaciclovir	-71,22	-0,74	-77,44	0,82	-92,69	-1,29	-85,14	0,93	-99,97	2,03	-58,09	-0,43
Triclofos	-91,57	-1,35	-88,33	1,13	-34,04	-0,21	-2,81	-0,54	-96,21	0,67	-94,81	-1,43
Methonal	-99,88	-3,30	-99,94	3,49	-99,97	-3,58	-99,98	4,20	-99,91	1,71	-99,95	-3,45
Baldrianol	-38,43	-0,30	-70,50	0,68	-66,46	-0,58	-24,62	-0,01	-98,91	1,02	-28,44	-0,11
Aminoglutethimide	57,88	0,67	52,58	-0,60	19,87	0,28	37,90	-0,63	-99,05	1,06	58,75	0,73
Chlorphenacemide	-26,90	-0,18	-36,71	0,25	-19,92	-0,07	20,22	-0,43	-96,25	0,67	7,68	0,21
Norantoin	-6,45	0,01	5,07	-0,13	-5,45	0,06	13,67	-0,36	-97,42	0,78	28,57	0,40
Mephebarbital	1,26	0,08	-27,15	0,16	-5,29	0,06	45,22	-0,73	-97,77	0,82	50,03	0,62
Metindion	3,01	0,10	5,42	-0,14	-22,63	-0,09	-37,69	0,24	-97,47	0,78	-41,86	-0,25
Diciferron	-44,73	-0,37	-82,99	0,95	16,97	0,25	-76,49	0,66	-99,79	1,47	-52,21	-0,36
Ferroceron	-32,23	-0,23	-65,69	0,60	75,26	0,93	-58,52	0,42	-96,87	0,72	6,55	0,21
Picosulfate	19,84	0,26	-26,40	0,15	60,76	0,71	-2,18	-0,94	-99,93	1,80	45,50	0,55
A-Peest	-59,68	-0,55	-75,29	0,77	-71,62	-0,66	-60,13	0,70	-99,54	1,25	-71,67	-0,63
Morfafen	-89,53	-1,25	-90,35	1,22	-93,05	-1,32	-91,58	1,39	-99,61	1,30	-94,59	-1,40
MJ 8592-1	16,81	0,23	-0,38	-0,09	-32,60	-0,18	-58,82	0,44	-99,67	1,35	-55,89	-0,40
Lemidosul	-55,45	-0,50	-59,06	0,51	-76,16	-0,74	-89,92	1,33	-99,85	1,56	-89,67	-1,12
Acetazolamide	-91,58	-1,35	-86,91	1,08	-98,00	-1,85	-90,59	0,85	-99,84	1,56	-77,57	-0,76
CGS 4270	64,00	0,76	57,90	-0,67	-31,73	-0,17	-6,47	-0,43	-99,26	1,12	27,63	0,38
Ambuside	-96,51	-1,76	-93,92	1,43	-96,56	-1,63	-93,70	1,73	-99,98	2,18	-98,00	-1,84
Carzenide	-10,50	-0,02	-9,38	-0,01	-32,76	-0,19	-46,11	0,24	-98,67	0,96	-43,17	-0,25
Siccamid	-97,14	-1,85	-93,71	1,42	-98,44	-1,96	-96,33	1,26	-99,96	1,96	-91,01	-1,19
Cystamine	-86,37	-1,12	-82,80	0,95	-87,45	-1,06	-96,34	1,80	-98,35	0,90	-98,75	-2,05
Adeturon	-10,13	-0,02	-42,66	0,31	97,19	1,91	25,51	-1,61	-100,00	2,65	-8,18	0,06
Glisolamide	-75,94	-0,83	-90,27	1,22	-79,88	-0,83	-86,49	0,83	-99,99	2,48	-86,60	-1,01
Glisamuride	-84,35	-1,05	-92,54	1,34	-84,55	-0,95	-92,76	1,12	-100,00	2,80	-90,64	-1,17
Gliquidone	-76,19	-0,84	-88,36	1,13	-80,45	-0,84	-88,11	0,85	-100,00	2,72	-77,63	-0,76
CGP 11112	-85,05	-1,07	-92,79	1,35	-86,80	-1,02	-93,07	1,24	-100,00	2,62	-71,76	-0,64

Table 8. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
CPSI	-91,61	-1,35	-92,26	1,32	-90,31	-1,17	-87,53	0,99	-99,49	1,23	-85,46	-0,96
Glycopyramide	-94,50	-1,55	-96,53	1,68	-95,71	-1,53	-94,91	1,47	-99,87	1,61	-94,78	-1,42
Glybuzole	-73,41	-0,78	-82,64	0,95	-71,19	-0,65	-75,46	0,28	-99,94	1,82	-78,06	-0,78
Thiazanol	-99,32	-2,52	-99,69	2,75	-98,82	-2,09	-99,35	2,66	-99,95	1,85	-99,10	-2,18
Glysobuzole	-92,89	-1,43	-95,09	1,53	-93,36	-1,33	-93,26	1,09	-99,97	2,00	-94,63	-1,42
Tolazamide	-88,03	-1,18	-94,36	1,47	-90,04	-1,15	-93,43	1,28	-99,97	1,99	-88,24	-1,06
Bromcholine	-99,14	-2,41	-99,31	2,40	-99,48	-2,43	-97,79	2,25	-98,34	0,90	-98,16	-1,87
Meбетide	-86,10	-1,11	-87,61	1,10	-86,69	-1,03	-83,91	1,04	-99,18	1,10	-81,52	-0,84
MJ 10459-2	-26,78	-0,18	-26,36	0,15	-72,85	-0,68	-51,77	0,37	-96,61	0,70	-71,56	-0,64
Guanacine sulfate	-83,23	-1,02	-90,96	1,25	-89,67	-1,13	-77,61	1,08	-99,71	1,38	-84,64	-0,92
Flutonidine hydrochloride	-27,76	-0,19	-38,39	0,27	-66,59	-0,58	-49,27	0,44	-98,41	0,91	-33,26	-0,15
Quateron	-52,62	-0,46	-68,40	0,65	-88,36	-1,08	-91,91	1,32	-99,99	2,45	-88,16	-1,05
Trimethidinium methosulfate	-87,09	-1,14	-92,36	1,33	-96,75	-1,63	-88,20	1,45	-99,99	2,34	-97,24	-1,70
Fubregonium iodide	-92,73	-1,42	-90,42	1,22	-99,00	-2,15	-91,41	1,36	-99,91	1,70	-95,56	-1,49
Trepirium iodide	-97,53	-1,92	-98,13	1,96	-99,17	-2,23	-97,83	2,31	-99,96	1,96	-99,01	-2,13
Cryofluorane	-33,54	-0,25	-15,25	0,05	20,99	0,27	16,39	-0,60	-66,26	0,02	14,85	0,27
Tribromethanol	-99,84	-3,16	-97,17	1,78	-96,25	-1,60	2,08	-0,34	-84,50	0,26	-87,84	-1,04
Roflurane	-88,54	-1,20	-83,84	0,98	-75,01	-0,74	-62,95	0,45	-85,39	0,28	-46,55	-0,29
Vinyl ether	-24,75	-0,16	-30,37	0,19	-41,78	-0,28	-3,38	-0,04	-88,43	0,35	0,04	0,15
Basedol	-68,73	-0,70	-76,46	0,80	-71,47	-0,66	-48,60	0,31	-93,89	0,53	-52,20	-0,35
Carbimazole	-82,20	-0,99	-62,15	0,55	-79,42	-0,82	-65,57	0,30	-99,33	1,15	-67,71	-0,57
Diobutil	-57,05	-0,52	-77,20	0,81	-93,47	-1,34	-91,46	0,89	-97,16	0,75	-67,82	-0,58
FBF	-83,14	-1,01	-74,76	0,76	-63,08	-0,54	-0,50	-0,08	-98,74	0,98	-21,18	-0,05
Iowarfarin	-1,11	0,06	-5,29	-0,04	-52,51	-0,39	-4,77	-0,29	-97,26	0,76	13,83	0,26
Oxazidione	-61,59	-0,58	-66,93	0,62	-50,00	-0,37	-58,81	0,59	-98,91	1,02	-36,45	-0,18
Diclofutime mesilate	-88,55	-1,20	-89,39	1,18	-95,22	-1,48	-94,96	1,67	-99,83	1,53	-97,47	-1,74
Amyl nitrite	-18,51	-0,10	-38,44	0,27	11,40	0,19	-31,78	0,01	-97,15	0,75	-34,41	-0,17
Methylis nicotinas	-37,60	-0,29	-26,49	0,15	-31,05	-0,18	-21,81	0,10	-93,67	0,52	-12,29	0,04
Acide tofesilique	-96,11	-1,71	-96,79	1,72	-98,13	-1,88	-98,25	1,83	-99,95	1,88	-95,64	-1,50
Methylene blue	-93,51	-1,47	-94,50	1,48	-97,22	-1,71	-98,05	2,12	-99,63	1,32	-98,63	-2,00
Perchloroetane	-87,34	-1,15	-62,89	0,56	-0,43	0,08	16,30	-0,89	-68,66	0,04	-87,26	-1,04

Table 8. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
Nitrodan	-90,46	-1,29	-73,75	0,74	-17,75	-0,06	-30,68	-0,39	-99,62	1,31	-84,64	-0,95
Clorsulon	-91,51	-1,35	-71,26	0,70	-97,47	-1,76	-94,05	1,52	-99,88	1,63	-99,84	-2,94
Albendazole	-82,58	-1,00	-92,14	1,32	-89,90	-1,15	-91,59	1,28	-99,62	1,31	-89,13	-1,09
Protriptyline hidrocloreto	17,38	0,23	14,89	-0,22	33,82	0,40	-41,73	0,32	-96,13	0,66	-20,04	-0,03
Almoxatone mesilato	-48,16	-0,41	-10,63	0,01	-49,90	-0,37	-38,91	0,30	-99,53	1,25	-74,81	-0,69
Peralopride	-85,82	-1,10	-77,50	0,82	-94,26	-1,40	-88,18	1,44	-99,90	1,67	-90,02	-1,12
Dimetridazole	-86,79	-1,13	-86,53	1,07	-88,96	-1,11	-90,64	1,37	-99,03	1,05	-96,65	-1,61
Nifurtimox	-98,40	-2,12	-99,00	2,24	-97,95	-1,85	-99,51	2,57	-99,89	1,64	-99,46	-2,41
Tenonitrozole	-80,29	-0,94	-80,64	0,89	-65,90	-0,58	-44,33	0,03	-98,46	0,92	-81,20	-0,84
Narceina	-93,74	-1,49	-92,95	1,36	-93,91	-1,38	-91,63	1,71	-99,94	1,84	-92,93	-1,27
Benzitramine	-2,54	0,05	-5,46	-0,04	-11,02	0,01	-54,68	0,16	-99,97	2,03	-1,95	0,12
Dimethylthiambutane	-90,05	-1,27	-88,69	1,15	-90,86	-1,19	-90,52	1,47	-99,18	1,10	-95,63	-1,49
Antazoline hidrocloreto	-19,28	-0,11	-0,30	-0,09	-9,68	0,02	-22,18	0,17	-99,37	1,17	-20,36	-0,03
Borimamide	-98,30	-2,09	-98,76	2,14	-96,88	-1,66	-96,33	1,90	-99,91	1,71	-99,80	-2,85
MTTA	-81,41	-0,96	-70,96	0,69	-69,01	-0,63	-30,58	0,21	-97,53	0,79	-69,38	-0,59
Acetiomate	-95,96	-1,69	-96,22	1,65	-99,47	-2,42	-97,42	1,35	-95,65	0,63	-95,82	-1,54
Pimetina hidrocloreto	-67,24	-0,67	-70,73	0,69	-66,12	-0,57	-73,42	0,96	-99,84	1,55	-68,34	-0,57
Metoxepina	-83,15	-1,01	-80,55	0,89	-81,94	-0,88	-86,16	1,36	-99,77	1,45	-84,97	-0,93
LM 08050	-88,56	-1,20	-86,01	1,05	-92,07	-1,26	-85,62	1,34	-99,97	1,99	-92,42	-1,24
Bis(O-etiltiofosfono)disulfida	-97,05	-1,84	-99,56	2,60	-61,19	-0,51	-91,11	-1,06	-99,98	2,07	-99,94	-3,41
O,O dimetil-1-acetoxi	-99,28	-2,49	-98,97	2,22	-98,32	-1,94	-95,33	1,15	-99,52	1,25	-99,23	-2,25
2,2,2 triclorometanefosfonato												
5(3 cloropropil)4-metiltiazolo	-83,73	-1,03	-80,15	0,88	-86,48	-1,02	-83,97	0,99	-97,48	0,78	-87,02	-1,01
Carbamimidatoico acido	-97,61	-1,94	-99,45	2,50	-94,33	-1,40	-86,05	1,04	-99,22	1,11	-96,08	-1,55
O-acetil-5-bromosalicilico acido	-14,61	-0,06	2,29	-0,11	-59,89	-0,49	23,00	-0,39	-93,34	0,51	5,83	0,20
Cystogon	-97,17	-1,86	-92,98	1,37	-86,54	-1,02	-83,42	0,87	-98,69	0,97	-91,62	-1,21
Azatepa	-99,20	-2,44	-99,51	2,55	-99,47	-2,42	-99,85	2,72	-99,97	2,01	-99,85	-2,96
Phenetilurea	-23,74	-0,15	-41,31	0,30	-44,93	-0,31	-19,54	0,03	-98,21	0,88	-23,24	-0,06
Piperazina estrone sulfato	66,85	0,81	49,90	-0,57	71,14	0,87	67,60	-1,37	-99,89	1,66	75,07	0,97
Tetryzolina hidrocloreto	5,02	0,12	4,78	-0,13	-13,32	-0,01	-37,92	0,23	-98,56	0,94	-18,34	-0,01
Ornipressina	-84,27	-1,05	-80,68	0,89	-88,42	-1,09	-86,74	0,96	-100,00	5,51	-91,03	-1,18

Table 8. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
Silamprobamate	-99,33	-2,52	-99,87	3,13	-96,60	-1,63	-99,89	3,72	-99,93	1,79	-99,23	-2,25
AHR-2666	-66,65	-0,66	-57,02	0,48	-78,05	-0,79	-60,36	0,57	-99,19	1,10	-81,03	-0,83
Tybamate	-32,37	-0,23	-62,92	0,56	-52,11	-0,39	-46,11	0,07	-99,96	1,92	-43,42	-0,27
Methacholine chloride	-90,75	-1,31	-92,59	1,34	-97,53	-1,76	-91,14	1,50	-99,67	1,35	-95,11	-1,44
Methyphemin,M6T	-61,02	-0,57	-58,54	0,50	-78,19	-0,79	-73,27	0,90	-99,51	1,24	-77,87	-0,75
Mephentermine	4,05	0,11	3,64	-0,12	-24,26	-0,10	-2,90	-0,02	-98,45	0,92	-43,65	-0,26
Phenamazoline	-30,99	-0,22	-20,68	0,10	-54,03	-0,41	-54,23	0,57	-98,55	0,94	-50,70	-0,33
Fostedil	-91,65	-1,35	-94,13	1,45	-79,80	-0,83	-96,93	1,40	-99,85	1,57	-92,84	-1,28
Ftorin	-26,24	-0,17	-52,61	0,42	-78,80	-0,81	-77,83	0,73	-99,79	1,47	-63,37	-0,50
Azaclorzine hydrochloride	-88,37	-1,20	-89,63	1,19	-92,49	-1,28	-93,14	1,52	-99,89	1,65	-95,77	-1,51
Ericolol	-20,00	-0,11	-32,15	0,20	-64,25	-0,55	-37,19	0,38	-99,78	1,47	-77,89	-0,75
Cromipranol	-7,13	0,01	-30,66	0,19	-76,97	-0,76	-73,13	0,86	-99,97	2,04	-90,29	-1,14
Teoprolol	-77,33	-0,86	-81,48	0,91	-90,84	-1,19	-93,89	1,54	-99,99	2,50	-94,54	-1,40
Niludipine	-76,59	-0,85	-82,47	0,94	-74,94	-0,74	-83,29	0,95	-99,99	2,25	-81,90	-0,85
Amitraz	-21,13	-0,12	-10,30	0,00	-39,62	-0,25	-52,77	0,32	-99,74	1,42	-54,22	-0,39
Cipermethrin	19,10	0,25	49,97	-0,57	17,97	0,26	81,92	-1,38	-99,33	1,15	39,08	0,49
Asame	-96,31	-1,74	-97,36	1,81	-99,63	-2,57	-99,19	2,36	-99,89	1,65	-96,71	-1,61
Adapiprazine	-41,83	-0,33	-57,95	0,49	-21,77	-0,08	-64,31	0,62	-99,99	2,22	-60,84	-0,46
Succinyl-Methionine	-72,42	-0,76	-79,31	0,86	-43,12	-0,30	-65,16	0,80	-99,64	1,33	-32,41	-0,13
Cyclonium iodide	-22,54	-0,14	-47,18	0,36	-46,71	-0,32	-53,30	0,45	-99,98	2,16	-47,07	-0,29
Fenoverine	-91,75	-1,36	-89,20	1,17	-87,13	-1,04	-93,95	1,60	-99,91	1,70	-93,66	-1,32
Fluopsin C	-73,34	-0,78	-52,15	0,42	-37,89	-0,24	-44,88	0,35	-93,75	0,53	-42,25	-0,24
Cryptargol	-79,22	-0,91	-86,46	1,06	-85,08	-0,97	-92,94	1,34	-98,91	1,02	-84,79	-0,93
Azaserine	-4,13	0,03	17,99	-0,25	-11,65	0,00	0,40	-0,24	-98,49	0,93	-7,56	0,08
F-8	-95,26	-1,62	-98,55	2,07	-69,97	-0,64	-27,06	-0,05	-98,80	0,99	-94,47	-1,40
Parabortine	-87,97	-1,18	-95,36	1,55	-48,93	-0,35	-22,75	-0,17	-99,39	1,18	-91,92	-1,23

*The molecular structures of these 246 tyrosinase inhibitors is given as Supporting Information (see Table 1). ^{a,b,c,d,e,f}DP% = [P(Active) - P(Inactive)]x100 as well as canonical scores of each compounds in this set: (i) Classification of each compounds using the obtained models with non-stochastic bilinear indices in the following order: Eq. 22, 23, 24, 25, 26, and 27.

Table 9. Results of the Classification of Inactive Compounds in the Test Set by the Use of LDA-QSAR Models Developed Using Stochastic Total and Local Bilinear Indices Calculated with Different Weighting Scheme.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
PALA	-42,86	0,30	-27,43	-0,21	27,97	0,33	-76,32	0,89	8,12	0,16	-0,42	0,06
Citenazone	-99,62	2,78	-98,23	-2,18	-95,91	-1,71	-81,92	1,05	-80,38	-0,96	-97,93	-2,03
Arildone	-74,34	0,77	-66,60	-0,71	-85,42	-1,10	-89,35	1,35	-92,21	-1,42	-84,77	-1,08
Valaciclovir	57,11	-0,72	18,14	0,23	-87,27	-1,16	-24,74	0,09	-94,43	-1,58	-84,02	-1,06
Triclofos	100,00	-5,08	98,93	2,53	75,68	0,98	25,33	-0,45	-85,63	-1,12	-60,74	-0,58
Methonal	-98,71	2,21	-99,50	-2,78	-96,65	-1,80	-92,02	1,52	-97,19	-1,91	-97,84	-2,01
Baldrianol	-94,91	1,57	-76,82	-0,91	-72,99	-0,78	-4,95	-0,12	-58,33	-0,54	-49,32	-0,43
Aminoglutethimide	40,93	-0,53	34,71	0,40	5,77	0,12	-3,47	-0,14	-20,58	-0,11	24,11	0,29
Chlorphenacemide	-81,59	0,94	-67,39	-0,72	-76,47	-0,85	-60,90	0,58	-48,27	-0,41	-82,66	-1,02
Norantoin	-17,36	0,04	-17,34	-0,11	7,01	0,13	-22,34	0,06	-21,26	-0,12	-44,51	-0,37
Mephebarbital	-35,89	0,23	-17,23	-0,11	-23,83	-0,15	-5,71	-0,12	-12,18	-0,03	-47,80	-0,41
Metindion	-49,95	0,39	-23,63	-0,17	-48,22	-0,41	-18,19	0,02	-62,50	-0,61	-59,76	-0,57
Diciferron	-91,30	1,31	-97,95	-2,11	-31,01	-0,22	-87,31	1,26	7,43	0,15	-18,36	-0,10
Ferroceron	-59,45	0,51	-85,99	-1,17	67,79	0,83	-54,11	0,47	62,53	0,77	57,05	0,66
Picosulfate	8,78	-0,20	7,97	0,13	40,39	0,46	-91,86	1,50	54,41	0,65	30,00	0,35
A-Peest	13,82	-0,25	-25,16	-0,19	-66,31	-0,66	48,32	-0,74	-39,21	-0,31	-48,03	-0,41
Morfafen	-92,03	1,35	-84,49	-1,12	-90,10	-1,29	-90,17	1,40	-80,09	-0,95	-84,80	-1,08
MJ 8592-1	-8,93	-0,04	-14,95	-0,09	-38,28	-0,30	56,10	-0,85	4,28	0,12	21,03	0,26
Lemidosul	13,83	-0,25	-31,21	-0,25	19,82	0,25	-15,71	-0,01	-62,33	-0,60	18,89	0,24
Acetazolamide	-97,32	1,87	-88,08	-1,25	-95,85	-1,70	-80,19	1,00	-96,88	-1,86	-95,95	-1,72
CGS 4270	22,12	-0,33	-5,20	0,01	-60,76	-0,58	42,92	-0,67	-92,75	-1,45	-82,39	-1,01
Ambuside	-96,33	1,72	-93,97	-1,59	-94,71	-1,58	-95,11	1,78	-92,29	-1,42	-97,57	-1,96
Carzenide	-21,99	0,08	2,49	0,08	58,20	0,68	-8,01	-0,09	3,36	0,11	14,62	0,20
Siccamid	-98,79	2,24	-96,88	-1,91	-98,87	-2,30	-98,26	2,34	-98,58	-2,23	-97,34	-1,91
Cystamine	-78,69	0,86	-96,76	-1,89	-80,10	-0,94	-90,47	1,42	-37,71	-0,29	-21,96	-0,14
Adeturon	-97,42	1,89	46,55	0,53	-74,69	-0,82	-95,23	1,80	41,84	0,50	-50,75	-0,45
Glisolamide	-78,59	0,86	-81,07	-1,02	-77,26	-0,87	-86,52	1,22	-53,08	-0,47	-70,65	-0,74
Glisamuride	-79,63	0,89	-80,63	-1,00	-70,58	-0,74	-94,71	1,74	-38,83	-0,30	-86,82	-1,15
Gliquidone	-86,98	1,11	-86,44	-1,19	-76,51	-0,86	-86,33	1,21	-47,11	-0,40	-80,77	-0,96
CGP 11112	-92,81	1,40	-93,55	-1,56	-87,11	-1,16	-90,99	1,45	-65,76	-0,66	-93,01	-1,46

Table 9. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
CPSI	-94,14	1,50	-90,15	-1,35	-97,07	-1,86	-92,72	1,57	-95,13	-1,65	-95,75	-1,69
Glycopyramide	-92,92	1,41	-88,02	-1,25	-95,34	-1,64	-95,03	1,78	-86,55	-1,15	-91,58	-1,37
Glybuzole	-83,64	1,00	-83,96	-1,10	-92,83	-1,44	-75,00	0,86	-97,48	-1,96	-93,52	-1,49
Thiazanol	-98,80	2,25	-97,93	-2,11	-94,50	-1,57	-93,69	1,65	-93,69	-1,52	-98,12	-2,08
Glysobuzole	-96,68	1,77	-93,29	-1,54	-90,66	-1,31	-90,01	1,39	-87,90	-1,20	-94,96	-1,61
Tolazamide	-78,85	0,87	-75,40	-0,88	-69,06	-0,71	-88,86	1,33	-40,47	-0,32	-71,82	-0,76
Bromcholine	-83,48	0,99	-94,64	-1,65	-89,93	-1,28	-92,52	1,55	-85,72	-1,12	-89,79	-1,28
Mebetide	-70,00	0,68	-73,14	-0,83	-60,92	-0,58	-62,17	0,60	-71,89	-0,77	-66,11	-0,66
MJ 10459-2	40,54	-0,52	-1,49	0,04	-59,06	-0,55	-47,82	0,38	-79,23	-0,93	-77,12	-0,87
Guanacline sulfate	-91,38	1,31	-86,42	-1,19	-76,26	-0,85	-10,02	-0,07	-52,14	-0,46	-63,55	-0,62
Flutonidine hydrochloride	1,34	-0,13	-19,62	-0,13	-65,12	-0,64	13,20	-0,32	-70,57	-0,74	-83,08	-1,03
Quateron	-70,10	0,68	-57,03	-0,56	-75,35	-0,83	-88,44	1,31	-70,05	-0,73	-37,60	-0,30
Trimethidinium methosulfate	-85,87	1,07	-59,30	-0,59	-79,48	-0,93	-60,98	0,58	-90,10	-1,30	-88,55	-1,22
Fubrogonium iodide	-99,44	2,60	-96,21	-1,82	-91,68	-1,37	-88,91	1,33	-88,78	-1,24	-84,05	-1,06
Trepirium iodide	-92,14	1,36	-76,10	-0,89	-72,12	-0,77	-85,20	1,17	-90,11	-1,30	-93,39	-1,49
Cryofluorane	-53,50	0,43	-49,95	-0,47	-87,22	-1,16	-85,11	1,16	-99,40	-2,63	-96,81	-1,83
Tribromethanol	30,68	-0,42	19,02	0,24	-74,99	-0,82	97,74	-2,56	-97,49	-1,96	-3,84	0,03
Roflurane	-74,95	0,78	-85,57	-1,16	-90,51	-1,31	-86,67	1,23	-95,49	-1,68	-92,59	-1,43
Vinyl ether	-11,92	-0,01	-3,50	0,02	-21,65	-0,13	-22,56	0,07	-24,42	-0,15	-20,39	-0,12
Basedol	19,14	-0,30	17,04	0,22	-8,40	-0,01	-53,37	0,46	-47,87	-0,41	-40,34	-0,33
Carbimazole	-84,13	1,01	-81,62	-1,03	-66,45	-0,67	-67,71	0,70	-90,63	-1,33	-91,74	-1,38
Diobutil	-99,24	2,46	-98,04	-2,13	-97,14	-1,87	-89,60	1,37	-72,86	-0,79	-96,18	-1,74
FBF	-71,06	0,70	-56,61	-0,55	-84,74	-1,07	21,75	-0,41	-20,85	-0,12	-33,88	-0,26
Iowarfarin	-68,88	0,66	-41,66	-0,37	-37,57	-0,29	-44,86	0,34	24,36	0,31	8,36	0,15
Oxazidione	-60,24	0,52	-44,37	-0,40	-63,63	-0,62	-31,60	0,17	-51,43	-0,45	-35,13	-0,27
Diclofutime mesilate	-87,26	1,12	-79,17	-0,97	-93,29	-1,47	-89,53	1,36	-92,22	-1,42	-92,75	-1,44
Amyl nitrite	54,47	-0,69	-7,04	-0,01	76,38	0,99	-34,29	0,20	86,67	1,31	65,86	0,80
Methylis nicotinas	-28,39	0,15	-19,08	-0,13	-19,97	-0,12	-15,04	-0,02	-15,82	-0,07	-49,74	-0,43
Acide tofesilique	-95,05	1,58	-88,49	-1,27	-94,35	-1,55	-95,42	1,82	-96,86	-1,85	-98,07	-2,06
Methylene blue	-90,09	1,25	-74,46	-0,86	-70,90	-0,74	-61,86	0,59	-78,01	-0,90	-91,74	-1,38
Perchloroetane	94,12	-1,74	50,10	0,58	-94,60	-1,57	-23,83	0,08	-99,98	-4,21	-99,93	-3,59

Table 9. Cont.

Name*	DP%^a	Scores	DP%^b	Scores	DP%^c	Scores	DP%^d	Scores	DP%^e	Scores	DP%^f	Scores
Nitrodan	-86,34	1,09	-93,68	-1,57	-43,50	-0,36	6,75	-0,25	-81,39	-0,98	-83,79	-1,05
Clorsulon	-47,07	0,35	-88,94	-1,29	-95,53	-1,66	-95,09	1,78	-99,62	-2,85	-97,41	-1,93
Albendazole	-63,22	0,57	-62,36	-0,64	-75,37	-0,83	-77,32	0,92	-88,64	-1,23	-90,55	-1,31
Protriptyline hidroclore	-27,76	0,14	-10,39	-0,04	-52,57	-0,47	-37,22	0,24	-32,60	-0,24	-75,34	-0,83
Almoxatone mesilate	-87,75	1,14	-73,71	-0,84	-74,87	-0,82	-79,38	0,97	-78,20	-0,90	-91,34	-1,36
Peralopride	-90,89	1,29	-81,54	-1,03	-82,12	-0,99	-64,57	0,64	-90,91	-1,34	-92,71	-1,44
Dimetridazole	-50,37	0,39	-61,31	-0,62	-59,48	-0,56	-48,66	0,39	-47,89	-0,41	-77,54	-0,88
Nifurtimox	-97,47	1,90	-98,16	-2,16	-97,15	-1,87	-83,96	1,12	-92,04	-1,41	-83,41	-1,04
Tenonitrozole	-78,45	0,86	-62,19	-0,64	-72,21	-0,77	-71,90	0,79	-59,67	-0,56	-58,73	-0,55
Narceina	-79,74	0,89	-31,27	-0,25	4,29	0,11	5,78	-0,24	-62,05	-0,60	-73,14	-0,79
Benzitramine	-74,47	0,77	-63,56	-0,66	-48,72	-0,42	-62,77	0,61	-53,72	-0,48	-41,47	-0,34
Dimethylthiambutane	-93,86	1,48	-86,48	-1,19	-59,63	-0,56	-83,59	1,11	-70,61	-0,74	-83,51	-1,04
Antazoline hidroclore	-15,78	0,03	-28,98	-0,23	-40,65	-0,33	5,21	-0,23	-21,33	-0,12	-35,31	-0,27
Borimamide	-94,13	1,50	-91,66	-1,43	-84,51	-1,07	-92,06	1,52	-89,12	-1,25	-97,98	-2,04
MTTA	-90,32	1,26	-75,82	-0,89	18,39	0,24	-33,62	0,20	-31,47	-0,22	-77,39	-0,88
Acetiomate	-98,16	2,04	-87,11	-1,21	-95,88	-1,70	-99,26	2,80	-78,09	-0,90	-84,71	-1,08
Pimetine hidroclore	-71,04	0,70	-41,75	-0,37	-66,63	-0,67	-76,62	0,90	-73,54	-0,80	-58,99	-0,56
Metoxepin	-83,36	0,99	-61,85	-0,63	-75,84	-0,84	-53,47	0,46	-73,97	-0,81	-68,40	-0,70
LM 08050	-76,55	0,81	-69,40	-0,76	-82,54	-1,01	-93,08	1,60	-85,79	-1,12	-90,31	-1,30
Bis(O-etiltiofosono)disulfide	-99,99	4,73	-99,99	-4,83	-99,10	-2,41	-100,00	7,40	-73,75	-0,80	-91,72	-1,38
O,O dimetil-1-acetoxi	-99,34	2,52	-98,88	-2,40	-94,00	-1,52	-97,62	2,17	-99,15	-2,47	-99,84	-3,20
2,2,2 triclorometanefosfonate												
5(3 cloropropil)4-metiltiazole	-91,49	1,32	-86,24	-1,18	-71,99	-0,76	-77,44	0,92	-76,60	-0,86	-85,96	-1,12
Carbamimidotioic acid	-87,25	1,12	-82,07	-1,04	-87,13	-1,16	-87,49	1,26	-76,29	-0,86	-90,54	-1,31
O-acetil-5-bromosalicilic acid	-42,67	0,30	5,46	0,11	15,51	0,21	-24,88	0,09	0,23	0,08	35,43	0,41
Cystogon	-90,03	1,24	-93,91	-1,59	-83,06	-1,02	-33,29	0,19	-99,59	-2,81	-98,21	-2,10
Azatepa	-95,76	1,65	-97,47	-2,01	-98,45	-2,16	-95,77	1,86	-97,94	-2,05	-98,26	-2,11
Phenetylurea	32,19	-0,43	22,31	0,27	-9,83	-0,02	-25,45	0,10	-17,77	-0,09	-59,24	-0,56
Piperazine estrone sulfate	11,16	-0,23	7,38	0,12	16,85	0,23	-68,17	0,71	15,50	0,23	12,66	0,19
Tetryzoline hidroclore	12,68	-0,24	-1,49	0,04	-27,14	-0,19	-18,25	0,02	-31,59	-0,23	-32,39	-0,24
Ornipressin	-91,84	1,34	-99,26	-2,60	-99,41	-2,60	-66,16	0,67	-98,91	-2,35	-95,55	-1,67

Table 9. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
Silamprobamate	-98,89	2,28	-99,81	-3,25	-80,76	-0,96	-97,47	2,14	-95,68	-1,70	-99,20	-2,47
AHR-2666	-77,22	0,83	-58,14	-0,58	-87,76	-1,18	-88,45	1,31	-91,65	-1,38	-96,48	-1,78
Tybamate	-15,72	0,02	-28,83	-0,23	-19,67	-0,11	-82,78	1,08	-38,00	-0,29	-77,96	-0,89
Methacholine chloride	-81,48	0,93	-59,99	-0,60	-61,23	-0,58	-72,11	0,79	-84,44	-1,08	-78,45	-0,90
Methyphemin,M6T	-64,10	0,58	-35,88	-0,30	-42,30	-0,34	-38,98	0,26	-67,28	-0,68	-63,39	-0,62
Mephentermine	-22,12	0,09	-15,18	-0,09	-18,37	-0,10	-17,24	0,01	-29,59	-0,20	-36,55	-0,28
Phenamazoline	35,04	-0,46	-6,34	-0,01	-32,34	-0,24	-6,18	-0,11	-42,57	-0,34	-28,73	-0,20
Fostedil	-89,50	1,22	-94,80	-1,66	-92,98	-1,45	-94,26	1,70	-90,86	-1,34	-35,21	-0,27
Ftorin	-60,70	0,53	-74,71	-0,86	-58,98	-0,55	-30,76	0,16	-90,33	-1,31	-65,54	-0,65
Azaclorzine hydrochloride	-91,35	1,31	-84,87	-1,13	-87,91	-1,19	-90,88	1,44	-75,05	-0,83	-81,94	-0,99
Ericolol	-40,11	0,27	-34,70	-0,29	-42,11	-0,34	2,90	-0,21	-15,31	-0,06	-4,38	0,03
Cromipranol	5,70	-0,18	-2,70	0,03	-43,85	-0,36	53,74	-0,82	-35,97	-0,27	-9,38	-0,02
Teoprolol	-65,64	0,61	-57,80	-0,57	-91,77	-1,37	-66,98	0,69	-92,06	-1,41	-97,22	-1,89
Niludipine	-91,04	1,29	-84,50	-1,12	-89,51	-1,26	-87,38	1,26	-49,38	-0,43	-39,14	-0,31
Amitraz	-22,85	0,09	-20,51	-0,14	-42,00	-0,34	45,43	-0,70	-48,40	-0,41	-42,68	-0,35
Cipermethrin	-91,11	1,30	-88,74	-1,28	-31,30	-0,23	35,81	-0,58	-65,24	-0,65	-58,97	-0,56
Asame	-98,32	2,09	-94,81	-1,66	-95,39	-1,65	-91,74	1,50	-97,40	-1,94	-97,45	-1,93
Adapiprazine	-70,47	0,69	-65,16	-0,68	-76,65	-0,86	-84,69	1,15	-45,63	-0,38	-50,37	-0,44
Succinyl-Methionine	51,39	-0,65	33,78	0,39	75,60	0,97	-32,60	0,18	-34,88	-0,26	-14,54	-0,07
Cyclonium iodide	-67,84	0,64	-47,77	-0,44	-65,67	-0,65	-77,86	0,93	-57,26	-0,53	-37,53	-0,30
Fenoverine	-87,66	1,14	-81,87	-1,04	-66,66	-0,67	-70,44	0,76	-47,24	-0,40	-60,57	-0,58
Fluopsin C	-17,60	0,04	-2,14	0,03	-3,88	0,03	7,08	-0,25	-71,86	-0,77	-24,05	-0,16
Cryptargol	-16,79	0,03	-14,44	-0,08	-72,91	-0,78	-62,63	0,61	-96,42	-1,79	-79,41	-0,93
Azaserine	12,86	-0,24	21,76	0,26	-54,20	-0,49	40,43	-0,63	-36,07	-0,27	-57,35	-0,53
F-8	-99,21	2,44	-96,88	-1,91	-94,36	-1,55	-75,48	0,87	-68,88	-0,71	-92,44	-1,42
Parabortine	-94,14	1,50	-91,43	-1,42	-60,24	-0,57	-67,17	0,69	-13,93	-0,05	-87,71	-1,19

*The molecular structures of these 246 tyrosinase inhibitors is given as Supporting Information (see Table 1). ^{a,b,c,d,e,f}DP% = [P(Active) - P(Inactive)]x100 as well as canonical scores of each compounds in this set: (i) Classification of each compounds using the obtained models with stochastic bilinear indices in the following order: Eq. 28, 29, 30, 31, 32, and 33.

Table 10. Structures of the Compounds Used in Virtual Screening.

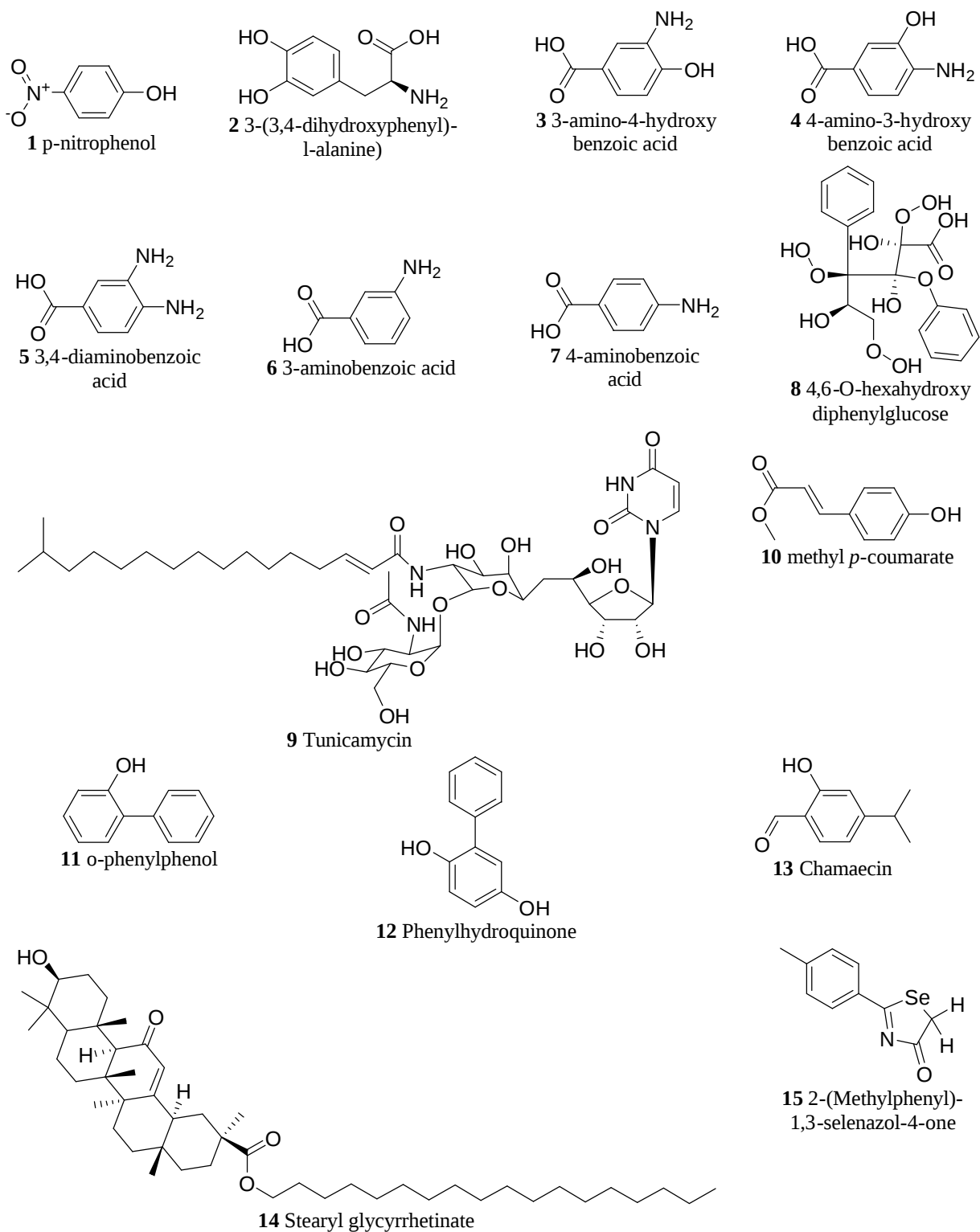


Table 10. Cont.

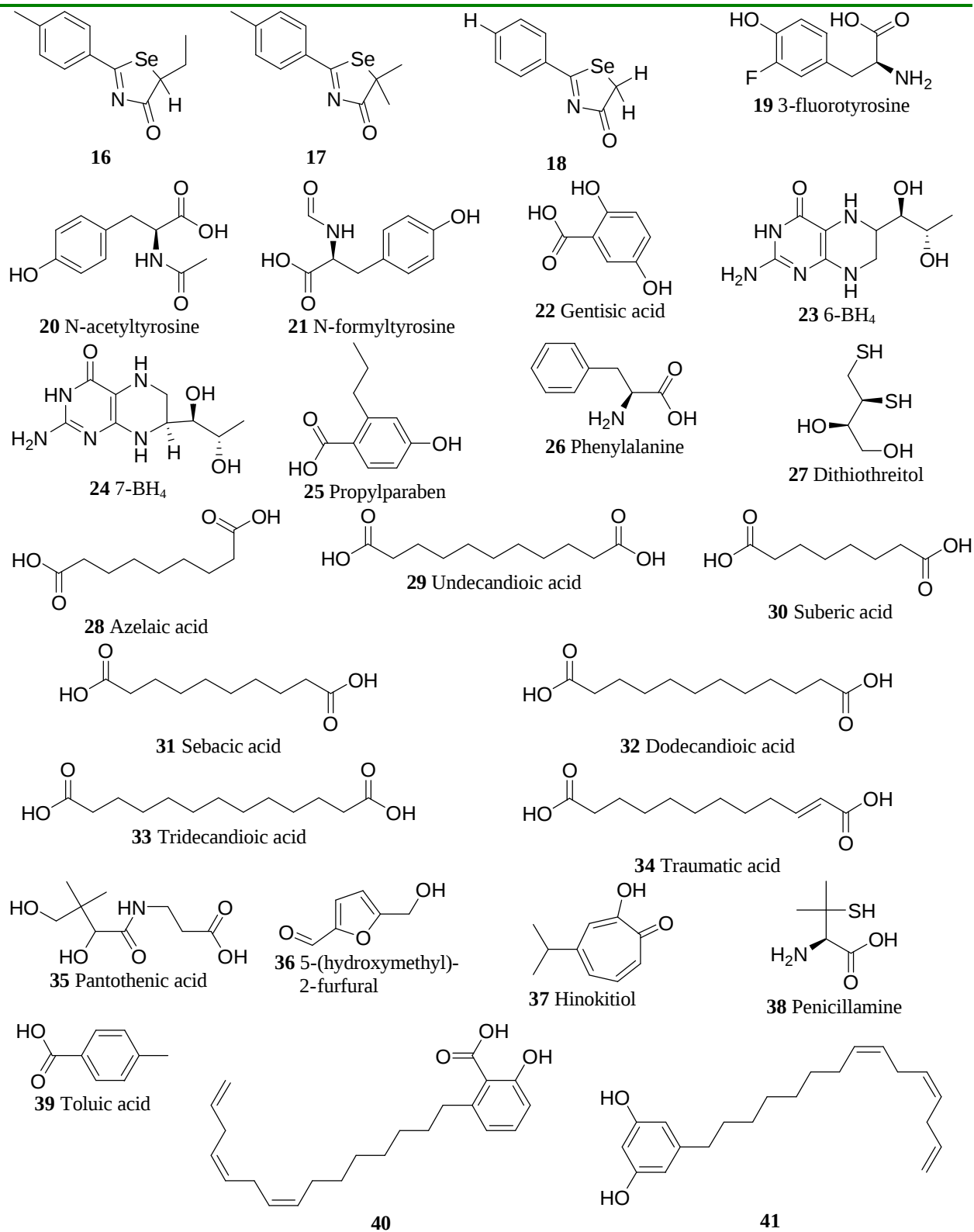


Table 10. Cont.

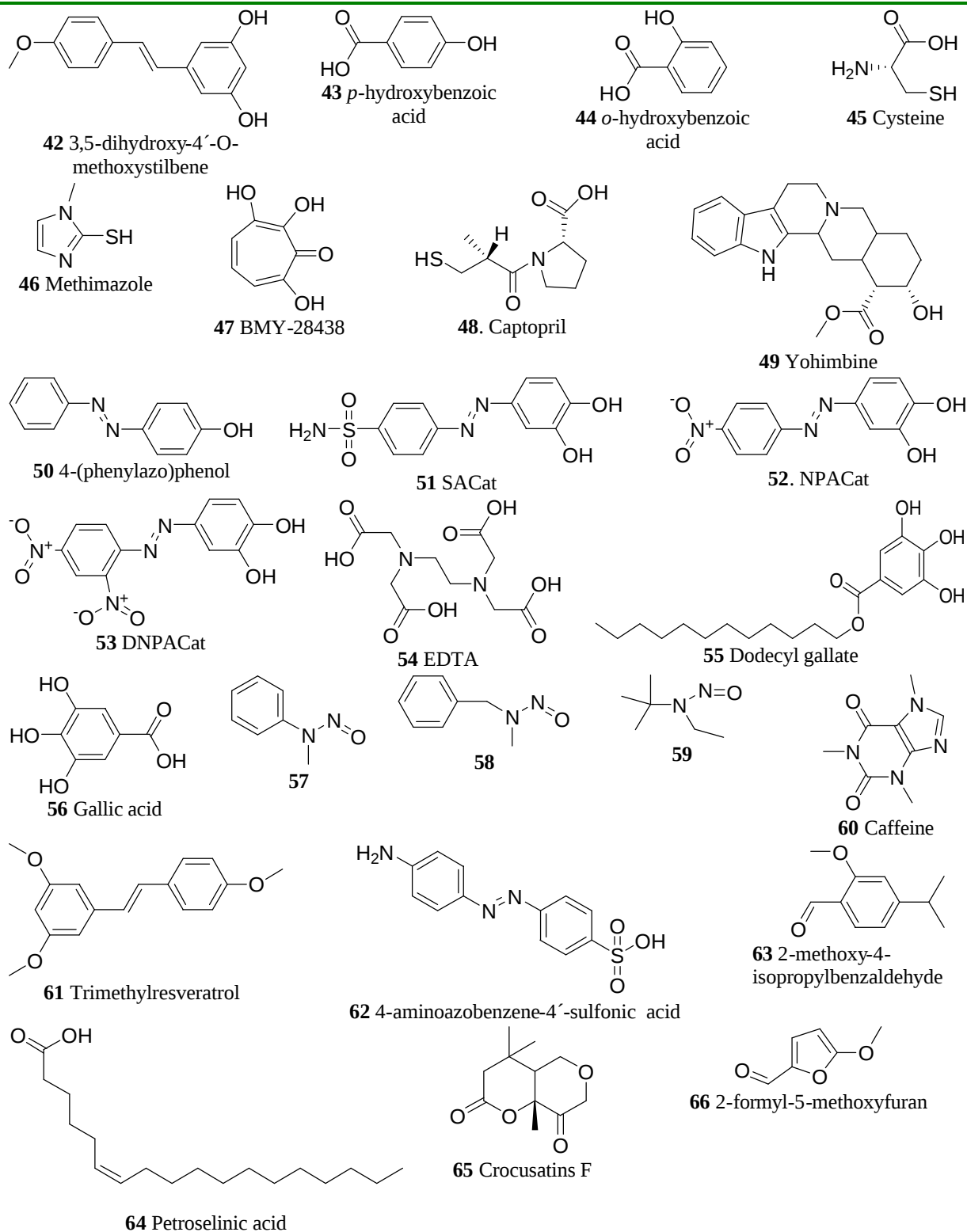


Table 10. Cont.

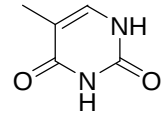
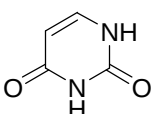
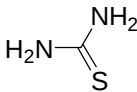
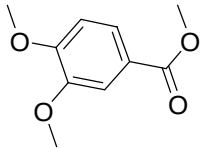
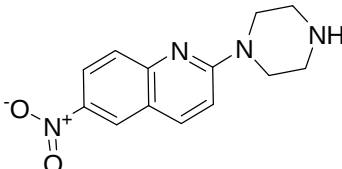
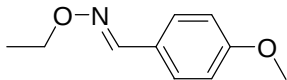
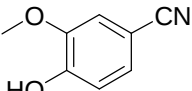
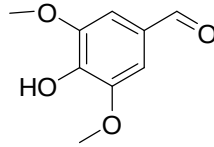
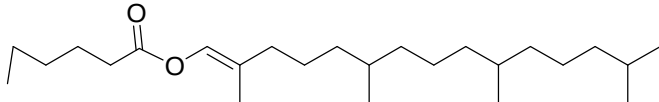
 67 5-methyluracil	 Uracil 68	 69 Thiourea	 70 Veratric acid methyl ester
 71 6-nitroquipazine	 72 4-Methoxybenzaldehyde-O-ethyloxime	 73	
 74	 75 Phytol-1-hexanoate		

Table 11. Results of the Classification of Compounds in the Virtual Screening Set.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
1 <i>p</i> -nitrophenol	60,34	0,71	63,66	-0,75	76,87	0,97	65,60	-0,95	81,26	-1,05	57,43	0,71
	60,01	-0,76	52,15	0,60	60,28	0,71	43,76	-0,68	70,11	0,89	72,21	0,91
2 3-(3,4-dihydroxyphenyl)-l-alanine	97,93	2,15	98,85	-2,35	98,71	2,25	97,17	-2,11	96,11	-1,51	98,13	2,16
	98,90	-2,53	98,19	2,28	98,24	2,24	90,90	-1,80	95,72	1,87	90,57	1,45
3 3-amino-4-hydroxybenzoic acid	93,99	1,65	94,67	-1,67	91,09	1,41	89,21	-1,45	87,90	-1,18	95,49	1,78
	96,28	-1,96	95,34	1,83	95,96	1,85	85,49	-1,53	81,35	1,14	86,34	1,27
4 4-amino-3-hydroxybenzoic acid	93,90	1,65	94,63	-1,67	91,07	1,41	89,25	-1,45	87,87	-1,18	95,41	1,77
	96,43	-1,98	95,41	1,83	96,03	1,86	84,67	-1,50	81,27	1,14	85,82	1,25
5 3,4-diaminobenzoic acid	92,04	1,52	93,03	-1,55	77,89	0,99	77,42	-1,14	86,45	-1,15	92,57	1,56
	94,55	-1,78	91,65	1,54	90,64	1,45	77,78	-1,28	42,30	0,50	51,28	0,59
6 3-aminobenzoic acid	81,67	1,12	84,10	-1,16	76,08	0,95	76,98	-1,10	83,60	-1,09	87,21	1,31
	91,95	-1,59	88,42	1,38	88,67	1,36	69,60	-1,09	57,37	0,69	80,30	1,09
7 4-aminobenzoic acid	81,30	1,11	84,09	-1,16	76,48	0,96	77,23	-1,11	83,50	-1,09	86,82	1,30
	93,56	-1,70	88,84	1,40	89,27	1,39	65,28	-1,01	56,82	0,68	79,22	1,06
8 4,6-O-hexahydroxy diphenylglucose	99,94	3,75	99,98	-4,14	100,00	4,65	99,95	-4,08	99,99	-3,27	99,97	3,97
	99,86	-3,50	99,95	3,99	99,95	3,88	99,30	-3,19	100,00	5,06	99,79	3,21
9 Tunicamycin	99,32	2,66	99,03	-2,43	99,66	2,81	98,40	-2,36	100,00	-5,52	99,52	2,77
	99,80	-3,32	99,78	3,29	99,46	2,78	56,07	-0,85	99,69	3,11	99,84	3,35
10 methyl <i>p</i> -coumarate	54,97	0,64	65,35	-0,78	62,21	0,72	64,19	-0,84	94,88	-1,43	74,19	0,98
	45,22	-0,57	54,36	0,63	58,72	0,69	16,60	-0,36	53,23	0,64	46,07	0,53
11 <i>o</i> -phenylphenol	80,07	1,07	78,75	-1,02	82,48	1,10	68,47	-0,98	96,87	-1,57	81,37	1,13
	65,91	-0,86	67,73	0,84	61,82	0,73	67,52	-1,05	66,03	0,82	68,98	0,85
12 phenylhydroquinone	91,71	1,50	91,40	-1,45	92,28	1,48	83,56	-1,27	97,77	-1,66	89,83	1,42
	88,75	-1,43	90,01	1,45	87,24	1,30	83,03	-1,44	88,50	1,39	92,50	1,56
13 Chamaecin	68,65	0,84	68,40	-0,82	62,55	0,73	58,74	-0,76	92,55	-1,32	71,61	0,93
	61,94	-0,79	61,73	0,74	61,67	0,73	53,72	-0,82	43,86	0,52	53,86	0,62
14 Stearyl glycyrrhetinate	99,74	3,11	98,53	-2,24	98,92	2,34	97,16	-2,67	100,00	-5,19	98,14	2,13
	74,74	-1,02	55,62	0,65	32,97	0,38	-34,69	0,21	63,26	0,78	72,38	0,91
15	23,71	0,29	22,96	-0,29	7,69	0,17	36,23	-0,59	91,57	-1,29	28,53	0,40

Table 11. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
	-19,59	0,06	-9,53	-0,04	23,66	0,29	34,12	-0,56	-22,98	-0,14	7,73	0,14
16	43,56	0,50	34,93	-0,41	29,68	0,36	26,83	-0,57	95,69	-1,48	41,67	0,52
	-18,90	0,05	-7,79	-0,02	-25,18	-0,17	15,10	-0,34	-61,82	-0,59	-11,01	-0,03
17	50,30	0,58	45,19	-0,52	37,56	0,44	36,88	-0,70	95,74	-1,48	48,70	0,60
	-1,60	-0,11	-0,19	0,05	-30,42	-0,22	36,48	-0,58	-15,82	-0,07	-24,06	-0,16
18	23,48	0,29	22,63	-0,29	19,48	0,27	42,23	-0,65	88,27	-1,19	42,17	0,53
	-18,02	0,05	-9,08	-0,03	24,48	0,30	15,33	-0,34	-23,73	-0,15	7,54	0,14
19 3-fluorotyrosine	71,75	0,89	82,13	-1,11	66,48	0,78	80,25	-1,12	96,45	-1,53	75,47	1,00
	79,56	-1,13	59,93	0,71	46,72	0,53	51,53	-0,78	18,77	0,26	22,09	0,27
20 N-acetyltyrosine	27,84	0,33	34,95	-0,41	25,86	0,33	60,37	-0,74	97,47	-1,63	44,70	0,57
	29,91	-0,41	28,84	0,34	54,69	0,63	28,78	-0,49	40,97	0,49	34,56	0,40
21 N-formyltyrosine	68,11	0,83	77,06	-0,99	81,96	1,09	81,17	-1,12	96,57	-1,54	81,76	1,15
	83,58	-1,24	86,81	1,31	87,81	1,32	49,48	-0,76	85,63	1,28	77,89	1,03
22 Gentisic acid	95,01	1,74	95,32	-1,73	95,73	1,73	94,54	-1,71	89,16	-1,21	97,09	1,98
	97,82	-2,21	97,93	2,22	98,46	2,30	91,28	-1,82	94,94	1,79	97,25	2,03
23 6-BH4	57,18	0,66	22,25	-0,29	-18,86	-0,05	-10,13	0,04	93,38	-1,36	50,71	0,64
	88,80	-1,43	81,22	1,13	30,34	0,36	64,50	-0,99	-13,12	-0,04	-14,76	-0,07
24 7-BH4	57,06	0,66	21,92	-0,28	-18,83	-0,05	-11,31	0,05	93,31	-1,35	49,20	0,62
	83,20	-1,23	78,09	1,05	30,05	0,35	67,41	-1,05	3,16	0,11	2,21	0,09
25 Propylparaben	88,39	1,34	87,05	-1,26	88,05	1,28	79,37	-1,16	94,58	-1,41	87,33	1,31
	94,55	-1,78	93,88	1,69	95,48	1,80	72,50	-1,16	77,57	1,05	94,33	1,69
26 Phenylalanine	78,56	1,04	87,11	-1,26	79,95	1,04	80,21	-1,20	91,82	-1,30	82,21	1,15
	86,70	-1,35	73,97	0,96	72,33	0,91	60,04	-0,92	62,93	0,77	44,84	0,51
27 Dithiothreitol	100,00	7,55	100,00	-6,92	100,00	7,48	-99,58	2,55	21,97	-0,55	99,95	3,77
	99,95	-3,94	100,00	6,90	99,99	4,44	-99,52	3,03	99,99	4,75	100,00	5,13
28 Azelaic acid	70,70	0,88	53,38	-0,61	70,16	0,84	64,51	-0,95	90,31	-1,25	80,40	1,11
	69,54	-0,92	71,05	0,90	93,98	1,66	12,71	-0,31	83,31	1,20	82,18	1,14
29 Undecandioic acid	77,25	1,01	56,46	-0,65	75,65	0,94	63,57	-0,98	95,04	-1,44	83,00	1,18
	72,10	-0,97	71,09	0,90	95,71	1,82	-4,23	-0,13	89,75	1,44	86,81	1,29
30 Suberic acid	66,87	0,81	51,78	-0,59	67,06	0,79	64,97	-0,93	86,55	-1,15	78,96	1,08
	68,30	-0,90	71,11	0,90	93,44	1,62	21,03	-0,40	80,84	1,13	79,88	1,08

Table 11. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
31 Sebacic acid	74,15	0,94	54,94	-0,63	73,02	0,89	64,04	-0,96	93,05	-1,34	81,74	1,14
	71,54	-0,95	71,05	0,90	95,48	1,80	4,31	-0,22	88,67	1,40	85,67	1,25
32 Dodecandioic acid	80,02	1,07	57,95	-0,67	78,05	0,99	63,09	-0,99	96,47	-1,54	84,18	1,21
	73,58	-0,99	71,08	0,90	96,20	1,88	-12,68	-0,04	91,62	1,54	88,33	1,35
33 Tridecandioic acid	82,48	1,14	59,40	-0,69	80,24	1,04	62,61	-1,00	97,50	-1,63	85,29	1,24
	73,93	-1,00	71,09	0,90	96,26	1,89	-20,97	0,05	92,03	1,57	88,98	1,38
34 Traumatic acid	83,75	1,18	70,67	-0,86	73,36	0,90	66,14	-1,11	96,55	-1,54	78,05	1,05
	84,74	-1,28	80,98	1,12	96,99	1,99	-10,27	-0,07	90,74	1,49	93,97	1,67
35 Pantothenic acid	77,33	1,01	78,30	-1,01	73,44	0,90	74,20	-0,96	93,84	-1,38	70,69	0,91
	88,92	-1,44	93,09	1,63	81,49	1,12	77,03	-1,26	74,20	0,97	46,88	0,54
36 5-(hydroxymethyl)-2-furfural	25,15	0,31	42,40	-0,49	30,52	0,37	52,21	-0,55	74,57	-0,96	39,71	0,52
	55,97	-0,71	60,54	0,72	43,19	0,49	38,23	-0,61	33,40	0,41	64,66	0,78
37 Hinokithiol	77,03	1,00	75,67	-0,96	71,95	0,88	73,70	-1,03	91,90	-1,30	79,93	1,10
	70,98	-0,94	60,07	0,71	52,51	0,60	56,47	-0,86	32,08	0,39	60,12	0,71
38 Penicillamine	99,97	4,12	99,96	-3,84	99,93	3,51	-77,94	0,69	44,55	-0,69	98,69	2,34
	98,52	-2,39	99,92	3,76	98,46	2,30	-54,46	0,47	95,41	1,83	92,82	1,58
39 Toluic acid	68,03	0,83	71,33	-0,87	72,77	0,89	75,83	-1,08	85,39	-1,13	76,97	1,03
	74,35	-1,01	76,22	1,00	84,89	1,22	72,45	-1,15	63,94	0,79	72,18	0,91
40	98,62	2,33	97,24	-1,96	99,00	2,36	97,62	-2,35	99,94	-2,68	98,99	2,43
	92,25	-1,61	92,78	1,61	96,93	1,98	56,78	-0,86	88,77	1,40	95,08	1,76
41	98,88	2,43	98,09	-2,13	99,05	2,39	98,00	-2,39	99,88	-2,49	99,19	2,52
	89,63	-1,47	90,96	1,50	89,70	1,41	33,08	-0,54	85,77	1,28	94,94	1,75
42 3,5-dihydroxy-4'-O-methoxystilbene	87,95	1,32	90,36	-1,40	89,70	1,35	83,00	-1,19	99,46	-2,06	88,78	1,37
	79,05	-1,12	84,90	1,24	85,73	1,25	79,00	-1,32	90,67	1,49	86,76	1,29
43 p-hydroxybenzoic acid	86,26	1,26	88,20	-1,31	90,41	1,38	89,14	-1,43	85,22	-1,12	92,33	1,55
	93,69	-1,71	93,35	1,65	95,08	1,76	78,78	-1,31	86,62	1,31	92,38	1,55
44 o-hydroxybenzoic acid	87,43	1,30	87,64	-1,28	90,10	1,36	88,95	-1,43	85,05	-1,12	93,39	1,61
	91,87	-1,59	92,08	1,57	95,91	1,84	81,70	-1,40	87,04	1,33	87,74	1,32
45 Cysteine	99,96	3,93	99,95	-3,77	99,97	3,80	-90,35	1,12	17,27	-0,52	98,24	2,21
	95,51	-1,87	99,89	3,62	95,53	1,80	-85,11	1,16	90,29	1,47	97,91	2,16

Table 11. Cont.

Name*	DP% ^a	Scores	DP% ^b	Scores	DP% ^c	Scores	DP% ^d	Scores	DP% ^e	Scores	DP% ^f	Scores
46 Methimazole	99,77	3,15	99,69	-2,94	99,78	3,02	-96,69	1,48	-14,22	-0,34	93,07	1,60
	89,57	-1,47	99,27	2,72	96,46	1,91	-93,47	1,63	91,25	1,52	92,03	1,53
47 BMY-28438	96,86	1,96	96,88	-1,91	97,18	1,91	96,33	-1,89	88,15	-1,19	98,63	2,31
	95,03	-1,82	93,64	1,67	95,50	1,80	86,34	-1,57	92,05	1,57	89,60	1,40
48 Captopril	99,92	3,66	99,85	-3,26	99,95	3,65	-93,65	1,26	84,45	-1,11	97,23	2,01
	98,57	-2,41	99,84	3,45	96,14	1,87	-97,25	2,10	91,75	1,55	98,61	2,35
49 Yohimbine	40,58	0,46	23,98	-0,30	26,35	0,33	-5,83	-0,05	99,93	-2,63	29,87	0,42
	62,72	-0,80	36,87	0,42	29,10	0,34	-11,76	-0,05	28,59	0,36	5,82	0,12
50 4-(phenylazo)phenol	77,70	1,02	79,72	-1,05	87,57	1,26	74,75	-1,14	96,85	-1,57	80,81	1,12
	48,17	-0,61	51,25	0,59	36,73	0,42	59,45	-0,91	70,77	0,91	61,21	0,72
51 SACat	58,88	0,69	59,69	-0,69	49,40	0,57	-12,76	-0,13	95,47	-1,46	9,64	0,23
	-8,20	-0,05	12,60	0,18	41,12	0,47	28,51	-0,49	56,69	0,68	32,13	0,37
52 NPACat	87,76	1,32	88,35	-1,31	95,83	1,74	81,56	-1,36	98,96	-1,88	80,10	1,09
	58,00	-0,74	64,16	0,78	72,97	0,92	78,99	-1,32	93,14	1,64	84,77	1,22
53 DNPAcat	79,80	1,07	80,46	-1,07	96,12	1,77	77,66	-1,34	99,54	-2,10	61,21	0,75
	25,05	-0,36	43,41	0,50	59,51	0,70	78,83	-1,31	95,25	1,82	87,57	1,32
54 EDTA	-27,81	-0,19	-28,69	0,17	25,78	0,32	40,71	-0,29	98,11	-1,71	32,18	0,46
	-6,49	-0,06	58,67	0,69	95,41	1,79	85,57	-1,54	72,41	0,94	80,53	1,09
55 Dodecyl gallate	98,76	2,38	96,50	-1,86	97,99	2,06	87,10	-1,53	99,85	-2,42	98,24	2,19
	92,54	-1,63	93,75	1,68	96,17	1,87	14,93	-0,34	92,64	1,61	92,70	1,57
56 Gallic acid	98,51	2,30	98,58	-2,26	98,73	2,26	97,77	-2,11	92,12	-1,31	99,05	2,47
	99,09	-2,62	99,17	2,65	99,47	2,79	96,03	-2,25	98,01	2,23	98,03	2,19
57	-14,86	-0,06	-3,61	-0,06	31,93	0,38	-0,16	-0,21	78,84	-1,01	-15,97	0,01
	-6,98	-0,06	-17,41	-0,11	18,25	0,24	-22,89	0,07	33,25	0,40	14,73	0,20
58	-28,68	-0,20	-17,01	0,06	24,09	0,31	-6,90	-0,09	85,77	-1,13	-25,83	-0,08
	-4,09	-0,08	-16,62	-0,10	1,57	0,08	-38,07	0,25	23,70	0,31	23,20	0,29
59	-44,33	-0,36	-54,66	0,45	-60,34	-0,49	-68,30	0,56	51,51	-0,74	-82,65	-0,87
	5,80	-0,18	-27,42	-0,21	-32,56	-0,24	1,99	-0,20	14,06	0,21	5,18	0,12
60 Caffeine	-83,48	-1,02	-78,01	0,83	-88,42	-1,09	-81,58	0,84	78,55	-1,01	-74,49	-0,69
	-83,59	1,00	-61,51	-0,63	-86,86	-1,15	-72,24	0,79	-95,73	-1,71	-96,79	-1,83
61 trimethylresveratrol	-43,58	-0,35	-28,15	0,17	-44,00	-0,30	-39,56	0,32	99,68	-2,20	-35,13	-0,17

Table 11. Cont

Name*	DP%^a	Scores	DP%^b	Scores	DP%^c	Scores	DP%^d	Scores	DP%^e	Scores	DP%^f	Scores
	-59,47	0,51	-38,29	-0,33	-25,43	-0,17	4,71	-0,23	20,84	0,28	-51,39	-0,45
62 4-aminobenzene-4'-sulfonic acid	29,95	0,35	26,79	-0,33	49,16	0,56	-7,49	-0,33	94,94	-1,43	25,30	0,36
	22,81	-0,34	-8,25	-0,02	19,40	0,25	-14,88	-0,02	25,07	0,32	14,47	0,20
63 2-methoxy-4-isopropyl benzaldehyde	-10,70	-0,03	-7,26	-0,02	-23,20	-0,10	-14,16	0,01	94,23	-1,40	-6,46	0,09
	-21,09	0,08	-10,75	-0,05	-7,05	0,00	5,30	-0,23	-16,35	-0,07	-36,90	-0,29
64 Petroselinic acid	99,95	3,84	97,79	-2,06	99,96	3,70	-67,85	0,36	99,08	-1,91	52,67	0,65
	-63,45	0,57	48,38	0,56	51,21	0,59	-83,73	1,11	76,48	1,02	20,05	0,26
65 Crocusatins F	-23,70	-0,15	-20,30	0,09	-52,95	-0,40	31,17	-0,41	94,51	-1,41	-1,27	0,14
	-46,90	0,35	-44,01	-0,39	-41,26	-0,33	29,72	-0,50	-58,53	-0,55	-45,06	-0,38
66 2-formyl-5-methoxyfuran	-44,65	-0,36	-34,18	0,22	-46,65	-0,33	-1,31	-0,03	71,09	-0,92	-5,45	0,11
	-45,15	0,33	-27,28	-0,21	-45,30	-0,38	-14,00	-0,03	-45,98	-0,38	-60,91	-0,58
67 5-methyluracil	-23,51	-0,15	-45,69	0,34	-43,34	-0,29	10,21	-0,30	54,38	-0,76	31,04	0,42
	-28,35	0,15	-7,32	-0,01	-48,93	-0,42	-11,54	-0,05	-68,24	-0,70	-76,37	-0,86
68 Uracil	-48,03	-0,40	-68,14	0,64	-58,06	-0,47	-9,64	-0,05	39,62	-0,66	6,41	0,20
	-72,78	0,73	-48,20	-0,44	-62,99	-0,61	-29,78	0,15	-52,89	-0,47	-32,16	-0,24
69 Thiourea	-94,73	-1,57	-99,10	2,28	-80,37	-0,84	-16,18	0,00	-54,80	-0,08	-91,49	-1,20
	-100,0	7,55	-100,0	-5,30	-95,27	-1,64	-38,53	0,26	-84,63	-1,08	-99,10	-2,42
70 Veratric acid methyl ester	-62,63	-0,60	-52,10	0,42	-63,48	-0,54	-46,46	0,41	94,92	-1,43	-41,23	-0,23
	-56,18	0,47	-38,85	-0,33	-34,69	-0,26	-26,49	0,11	-35,67	-0,27	-78,25	-0,90
71 DU 24565 (6-nitroquipazine)	-77,29	-0,86	-77,54	0,82	-63,89	-0,55	-90,49	1,27	98,44	-1,76	-95,34	-1,47
	-64,42	0,59	-61,80	-0,63	-69,27	-0,71	-43,80	0,32	-37,72	-0,29	-30,57	-0,22
72 4-Methoxybenzaldehyde-O-ethylloxime	-54,33	-0,48	-49,93	0,39	-52,84	-0,40	-57,77	0,53	92,31	-1,31	-56,41	-0,40
	-56,83	0,48	-37,19	-0,32	-67,54	-0,68	-42,89	0,31	-47,13	-0,40	-45,74	-0,39
73	21,67	0,27	21,73	-0,28	14,19	0,22	23,78	-0,34	85,47	-1,13	41,98	0,54
	22,04	-0,33	37,95	0,43	34,97	0,40	40,71	-0,64	46,04	0,55	5,68	0,12
74	-4,03	0,04	5,41	-0,14	-5,02	0,06	10,91	-0,08	93,54	-1,36	25,76	0,38
	13,23	-0,25	22,30	0,27	22,02	0,27	43,54	-0,67	20,30	0,27	-31,34	-0,23
75 Phytyl-1-hexanoate	86,29	1,26	43,52	-0,50	52,40	0,61	22,06	-0,75	99,95	-2,70	58,52	0,71
	-4,19	-0,08	-11,12	-0,05	25,53	0,31	-78,30	0,94	23,32	0,30	44,35	0,51

*The molecular structures of these chemicals is shown in Table 10 (Supporting Information). ^{a,b,c,d,e,f}DP% = [P(Active) - P(Inactive)]x100 as well as canonical scores of each compounds in this set: (i) *Above in **bold***, classification of each compound using the obtained models with non-stochastic bilinear indices in the following order: Eq. 22, 23, 24, 25, 26, and 27; and (ii) *Below in italic*; classification of each compound using the obtained models with stochastic bilinear indices in the following order Eq. 28, 29, 30, 31, 32, and 33.