**Таблица S1**. Статистические характеристики QSAR моделей ингибиторов KRAS, разработанные с помощью веб-платформы ОСНЕМ

Дескрипторы		Обучающая		Тестовая выборка	
	Метод	выбој	рка,	Все соединения	
		$Q^2_{cv}$	RMSE	$Q^2_{ts}$	RMSE
	RFR	0.57	0.80	0.59	0.79
	ASNN	0.59	0.78	0.50	0.87
ALogPS,	KNN	0.51	0.85	0.46	0.91
OEstate	MLRA	0	1.4	0.44	0.93
	DNN	0.58	0.79	0.50	0.91
	XGBOOST	0.57	0.80	0.59	0.79
	RFR	0.61	0.76	0.57	0.81
	ASNN	0.59	0.78	0.53	0.85
CDV	KNN	0.50	0.86	0.49	0.88
CDK	MLRA	0.47	0.89	0	1.3
	DNN	0.58	0.80	0.50	0.89
	XGBOOST	0.61	0.76	0.60	0.79
	RFR	0.58	0.79	0.58	0.80
	ASNN	0.64	0.73	0.66	0.73
<b>D</b>	KNN	0.51	0.85	0.53	0.85
Dragon	MLRA	0	1.5	0.36	0.99
	DNN	0.54	0.83	0.58	0.80
	XGBOOST	0.57	0.80	0.54	0.84
	RFR	0.60	0.77	0.62	0.77
_	ASNN	0.55	0.82	0.61	0.77
Fragmentor	KNN	0.49	0.87	0.50	0.88
(length: 2-4)	MLRA	0.54	0.83	0.54	0.83
	DNN	0.45	0.91	0.5	0.85
	XGBOOST	0.57	0.80	0.60	0.79
	RFR	0.59	0.78	0.58	0.80
	ASNN	0.59	0.78	0.50	0.84
	KNN	0.48	0.88	0.49	0.88
MOLD2	MLRA	0.49	0.87	0	7
	DNN	0.45	0.91	0.52	0.86
	XGBOOST	0.58	0.79	0.59	0.79

RFR 0.59 0.78 0.58 0.8  ASNN 0.61 0.76 0.67 0.71  KNN 0.52 0.85 0.49 0.89  MORDRED MLRA 0 2.8 0 8  DNN 0.51 0.85 0.5 0.88  XGBOOST 0.57 0.80 0.57 0.81  RFR 0.59 0.78 0.62 0.77  ASNN 0.45 0.90 0.52 0.86  KNN 0.38 0.96 0.36 0.99  MLRA 0.42 0.93 0.52 0.86  DNN 0.43 0.92 0.61 0.77  XGBOOST 0.55 0.82 0.57 0.81  RFR 0.63 0.75 0.69 0.69  ASNN 0.63 0.74 0.66 0.72  KNN 0.56 0.81 0.60 0.79  MLRA 0.23 1.07 0.4 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.61 0.76 0.67 0.71  RFR 0.53 0.84 0.51 0.87  RDKIT MLRA 0 2.4 0.3 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.54 0.83 0.56 0.82  RFR 0.59 0.78 0.59 0.79  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.73  ASNN 0.51 0.86 0.51 0.87  MLRA 0 1.6 0 9						
MORDRED   KNN   0.52   0.85   0.49   0.89   0.89   0.80   0.81   0.85   0.5   0.88   0.80   0.51   0.85   0.5   0.88   0.50   0.57   0.81   0.85   0.57   0.81   0.85   0.57   0.81   0.85   0.57   0.81   0.85   0.57   0.81   0.85   0.57   0.81   0.85   0.57   0.81   0.85   0.57   0.81   0.85   0.57   0.81   0.85   0.99   0.78   0.62   0.77   0.81   0.85   0.99   0.52   0.86   0.99   0.52   0.86   0.99   0.52   0.86   0.99   0.55   0.82   0.57   0.81   0.60   0.77   0.81   0.60   0.75   0.69   0.		RFR	0.59	0.78	0.58	0.8
MORDRED         MLRA         0         2.8         0         8           DNN         0.51         0.85         0.5         0.88           XGBOOST         0.57         0.80         0.57         0.81           RFR         0.59         0.78         0.62         0.77           ASNN         0.45         0.90         0.52         0.86           KNN         0.38         0.96         0.36         0.99           MLRA         0.42         0.93         0.52         0.86           DNN         0.43         0.92         0.61         0.77           XGBOOST         0.55         0.82         0.57         0.81           RFR         0.63         0.74         0.66         0.72           KNN         0.56         0.81         0.60         0.79           ASNN         0.63         0.74         0.66         0.72           KNN         0.56         0.81         0.60         0.79           ASBOOST         0.61         0.76         0.67         0.71           RFR         0.55         0.82         0.56         0.82           ASNN         0.68         0.7         0.67 <td rowspan="5">MORDRED</td> <td>ASNN</td> <td>0.61</td> <td>0.76</td> <td>0.67</td> <td>0.71</td>	MORDRED	ASNN	0.61	0.76	0.67	0.71
DNN 0.51 0.85 0.5 0.88  XGBOOST 0.57 0.80 0.57 0.81  RFR 0.59 0.78 0.62 0.77  ASNN 0.45 0.90 0.52 0.86  KNN 0.38 0.96 0.36 0.99  MLRA 0.42 0.93 0.52 0.86  DNN 0.43 0.92 0.61 0.77  XGBOOST 0.55 0.82 0.57 0.81  RFR 0.63 0.75 0.69 0.69  ASNN 0.63 0.74 0.66 0.72  KNN 0.56 0.81 0.60 0.79  MLRA 0.23 1.07 0.4 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.61 0.76 0.67 0.71  RFR 0.55 0.82 0.56 0.82  ASNN 0.68 0.7 0.67 0.71  KNN 0.53 0.84 0.51 0.87  RDKIT MLRA 0 2.4 0.3 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.54 0.83 0.56 0.82  RFR 0.59 0.78 0.59 0.79  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.72  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.73		KNN	0.52	0.85	0.49	0.89
RFR 0.59 0.78 0.62 0.77  ASNN 0.45 0.90 0.52 0.86  KNN 0.38 0.96 0.36 0.99  MLRA 0.42 0.93 0.52 0.86  DNN 0.43 0.92 0.61 0.77  XGBOOST 0.55 0.82 0.57 0.81  RFR 0.63 0.75 0.69 0.69  ASNN 0.63 0.74 0.66 0.72  KNN 0.56 0.81 0.60 0.79  MLRA 0.23 1.07 0.4 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.61 0.76 0.67 0.71  RFR 0.55 0.82 0.56 0.82  ASNN 0.68 0.7 0.67 0.71  KNN 0.53 0.84 0.51 0.87  RDKIT MLRA 0 2.4 0.3 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.54 0.83 0.56 0.82  RFR 0.59 0.78 0.59 0.79  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.72  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.73		MLRA	0	2.8	0	8
RFR 0.59 0.78 0.62 0.77  ASNN 0.45 0.90 0.52 0.86  KNN 0.38 0.96 0.36 0.99  MLRA 0.42 0.93 0.52 0.86  DNN 0.43 0.92 0.61 0.77  XGBOOST 0.55 0.82 0.57 0.81  RFR 0.63 0.75 0.69 0.69  ASNN 0.63 0.74 0.66 0.72  KNN 0.56 0.81 0.60 0.79  MLRA 0.23 1.07 0.4 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.61 0.76 0.67 0.71  RFR 0.55 0.82 0.56 0.82  ASNN 0.68 0.7 0.67 0.71  KNN 0.53 0.84 0.51 0.87  RDKIT MLRA 0 2.4 0.3 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.54 0.83 0.56 0.82  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.82  RFR 0.59 0.78 0.59 0.79  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.73		DNN	0.51	0.85	0.5	0.88
ASNN 0.45 0.90 0.52 0.86  KNN 0.38 0.96 0.36 0.99  MLRA 0.42 0.93 0.52 0.86  DNN 0.43 0.92 0.61 0.77  XGBOOST 0.55 0.82 0.57 0.81  RFR 0.63 0.75 0.69 0.69  ASNN 0.63 0.74 0.66 0.72  KNN 0.56 0.81 0.60 0.79  MLRA 0.23 1.07 0.4 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.61 0.76 0.67 0.71  RFR 0.55 0.82 0.56 0.82  ASNN 0.68 0.7 0.67 0.71  KNN 0.53 0.84 0.51 0.87  RDKIT MLRA 0 2.4 0.3 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.51 0.86 0.7 0.67 0.71  ASNN 0.68 0.7 0.67 0.71  KNN 0.53 0.84 0.51 0.87  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.82  RFR 0.59 0.78 0.59 0.79  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.73		XGBOOST	0.57	0.80	0.57	0.81
QNPR		RFR	0.59	0.78	0.62	0.77
MLRA 0.42 0.93 0.52 0.86  DNN 0.43 0.92 0.61 0.77  XGBOOST 0.55 0.82 0.57 0.81  RFR 0.63 0.75 0.69 0.69  ASNN 0.63 0.74 0.66 0.72  KNN 0.56 0.81 0.60 0.79  MLRA 0.23 1.07 0.4 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.61 0.76 0.67 0.71  RFR 0.55 0.82 0.56 0.82  ASNN 0.68 0.7 0.67 0.71  KNN 0.53 0.84 0.51 0.87  RDKIT MLRA 0 2.4 0.3 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.54 0.83 0.56 0.82  RFR 0.59 0.78 0.59 0.79  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.73  KNN 0.51 0.86 0.51 0.87	QNPR	ASNN	0.45	0.90	0.52	0.86
MLRA 0.42 0.93 0.52 0.86  DNN 0.43 0.92 0.61 0.77  XGBOOST 0.55 0.82 0.57 0.81  RFR 0.63 0.75 0.69 0.69  ASNN 0.63 0.74 0.66 0.72  KNN 0.56 0.81 0.60 0.79  MLRA 0.23 1.07 0.4 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.61 0.76 0.67 0.71  RFR 0.55 0.82 0.56 0.82  ASNN 0.68 0.7 0.67 0.71  KNN 0.53 0.84 0.51 0.87  RDKIT MLRA 0 2.4 0.3 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.54 0.83 0.56 0.82  RFR 0.59 0.78 0.59 0.79  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.73  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.73  KNN 0.51 0.86 0.51 0.87		KNN	0.38	0.96	0.36	0.99
RFR 0.63 0.75 0.69 0.69  ASNN 0.63 0.74 0.66 0.72  KNN 0.56 0.81 0.60 0.79  MLRA 0.23 1.07 0.4 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.61 0.76 0.67 0.71  RFR 0.55 0.82 0.56 0.82  ASNN 0.68 0.7 0.67 0.71  KNN 0.53 0.84 0.51 0.87  RDKIT MLRA 0 2.4 0.3 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.54 0.83 0.56 0.82  RFR 0.59 0.78 0.59 0.79  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.73		MLRA	0.42	0.93	0.52	0.86
RFR 0.63 0.75 0.69 0.69  ASNN 0.63 0.74 0.66 0.72  KNN 0.56 0.81 0.60 0.79  KNN 0.56 0.81 0.60 0.79  MLRA 0.23 1.07 0.4 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.61 0.76 0.67 0.71  RFR 0.55 0.82 0.56 0.82  ASNN 0.68 0.7 0.67 0.71  KNN 0.53 0.84 0.51 0.87  RDKIT MLRA 0 2.4 0.3 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.54 0.83 0.56 0.82  RFR 0.59 0.78 0.59 0.79  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.73  KNN 0.51 0.86 0.51 0.87		DNN	0.43	0.92	0.61	0.77
ECFP4  ASNN 0.63 0.74 0.66 0.72  KNN 0.56 0.81 0.60 0.79  MLRA 0.23 1.07 0.4 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.61 0.76 0.67 0.71  RFR 0.55 0.82 0.56 0.82  ASNN 0.68 0.7 0.67 0.71  KNN 0.53 0.84 0.51 0.87  RDKIT  MLRA 0 2.4 0.3 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.54 0.83 0.56 0.82  RFR 0.59 0.78 0.59 0.79  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.73  KNN 0.51 0.86 0.51 0.87		XGBOOST	0.55	0.82	0.57	0.81
ECFP4  KNN 0.56 0.81 0.60 0.79  MLRA 0.23 1.07 0.4 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.61 0.76 0.67 0.71  RFR 0.55 0.82 0.56 0.82  ASNN 0.68 0.7 0.67 0.71  KNN 0.53 0.84 0.51 0.87  RDKIT  MLRA 0 2.4 0.3 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.54 0.83 0.56 0.82  RFR 0.59 0.78 0.59 0.79  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.73  kNN 0.51 0.86 0.51 0.87		RFR	0.63	0.75	0.69	0.69
ECFP4  MLRA  0.23  1.07  0.4  1  DNN  0.51  0.86  0.4  0.94  XGBOOST  0.61  0.76  0.67  0.71  RFR  0.55  0.82  0.56  0.82  ASNN  0.68  0.7  0.67  0.71  KNN  0.53  0.84  0.51  0.87  MLRA  0  2.4  0.3  1  DNN  0.51  0.86  0.4  0.94  XGBOOST  0.51  0.86  0.4  0.94  XGBOOST  0.54  0.83  0.56  0.82  RFR  0.59  0.78  0.59  0.79  ASNN  0.65  0.72  0.65  0.73  KNN  0.51  0.86		ASNN	0.63	0.74	0.66	0.72
MILRA 0.23 1.07 0.4 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.61 0.76 0.67 0.71  RFR 0.55 0.82 0.56 0.82  ASNN 0.68 0.7 0.67 0.71  KNN 0.53 0.84 0.51 0.87  MLRA 0 2.4 0.3 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.54 0.83 0.56 0.82  RFR 0.59 0.78 0.59 0.79  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.73  KNN 0.51 0.86 0.51 0.87		KNN	0.56	0.81	0.60	0.79
XGBOOST   0.61   0.76   0.67   0.71	ECFP4	MLRA	0.23	1.07	0.4	1
RFR 0.55 0.82 0.56 0.82  ASNN 0.68 0.7 0.67 0.71  KNN 0.53 0.84 0.51 0.87  MLRA 0 2.4 0.3 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.54 0.83 0.56 0.82  RFR 0.59 0.78 0.59 0.79  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.73  KNN 0.51 0.86 0.51 0.87		DNN	0.51	0.86	0.4	0.94
ASNN 0.68 0.7 0.67 0.71  KNN 0.53 0.84 0.51 0.87  MLRA 0 2.4 0.3 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.54 0.83 0.56 0.82  RFR 0.59 0.78 0.59 0.79  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.73  KNN 0.51 0.86 0.51 0.87		XGBOOST	0.61	0.76	0.67	0.71
RDKIT    KNN   0.53   0.84   0.51   0.87	RDKIT	RFR	0.55	0.82	0.56	0.82
RDKIT  MLRA 0 2.4 0.3 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.54 0.83 0.56 0.82  RFR 0.59 0.78 0.59 0.79  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.73  KNN 0.51 0.86 0.51 0.87		ASNN	0.68	0.7	0.67	0.71
MLRA 0 2.4 0.3 1  DNN 0.51 0.86 0.4 0.94  XGBOOST 0.54 0.83 0.56 0.82  RFR 0.59 0.78 0.59 0.79  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.73  KNN 0.51 0.86 0.51 0.87		KNN	0.53	0.84	0.51	0.87
XGBOOST 0.54 0.83 0.56 0.82  RFR 0.59 0.78 0.59 0.79  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.73  KNN 0.51 0.86 0.51 0.87		MLRA	0	2.4	0.3	1
RFR 0.59 0.78 0.59 0.79  ASNN 0.65 0.72 0.65 0.73  KNN 0.51 0.86 0.51 0.87		DNN	0.51	0.86	0.4	0.94
ASNN 0.65 0.72 0.65 0.73  KNN 0.51 0.86 0.51 0.87		XGBOOST	0.54	0.83	0.56	0.82
alvaDesc KNN 0.51 0.86 0.51 0.87			0.59	0.78	0.59	0.79
KNN 0.51 0.86 0.51 0.87	alvaDesc		0.65	0.72	0.65	0.73
MLRA $_{0}$ 1.6 $_{0}$ 9			0.51		0.51	0.87
		MLRA	0	1.6	0	9

	DNN	0.53	0.83	0.56	0.82
	XGBOOST	0.59	0.78	0.63	0.76
-	AttFP	0.54	0.83	0.65	0.73
-	ChemProp	0.53	0.84	0.61	0.77
-	TRANSNN	0.60	0.77	0.66	0.72