

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

Дескрипторы	Метод	Обучающая выборка,		Тестовая выборка	
		Q <sup>2</sup> <sub>cv</sub>	RMSE	Q <sup>2</sup> <sub>ts</sub>	RMSE
ALogPS, OEstate	RFR	0.57	0.80	0.59	0.79
	ASNN	0.59	0.78	0.50	0.87
	KNN	0.51	0.85	0.46	0.91
	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
CDK	RFR	0.61	0.76	0.57	0.81
	ASNN	0.59	0.78	0.53	0.85
	KNN	0.50	0.86	0.49	0.88
	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
Dragon	RFR	0.58	0.79	0.58	0.80
	ASNN	0.64	0.73	0.66	0.73
	KNN	0.51	0.85	0.53	0.85
	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
Fragmentor (length: 2-4)	RFR	0.60	0.77	0.62	0.77
	ASNN	0.55	0.82	0.61	0.77
	KNN	0.49	0.87	0.50	0.88
	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
MOLD2	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
	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

MORDRED	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
	MLRA	0	2.8	0	8
	DNN	0.51	0.85	0.5	0.88
	XGBOOST	0.57	0.80	0.57	0.81
QNPR	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
ECFP4	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
RDKit	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
alvaDesc	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	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