

## PM-BioPred: User Tutorial

*Web-server for predicting compound bioactivity against Plant, Bacterial, Fungal, and Viral proteins*

### 1. Access the Web Server

Open your browser and visit: <https://pmbiopred.streamlit.app/>

You will see the homepage with navigation options (Home, Prediction, Developers, Contact Us):



Figure 1: Homepage

This page introduces the tool and gives basic information about its purpose and use.

### 2. Navigate to the Prediction Page

Click **Prediction** from the left sidebar.

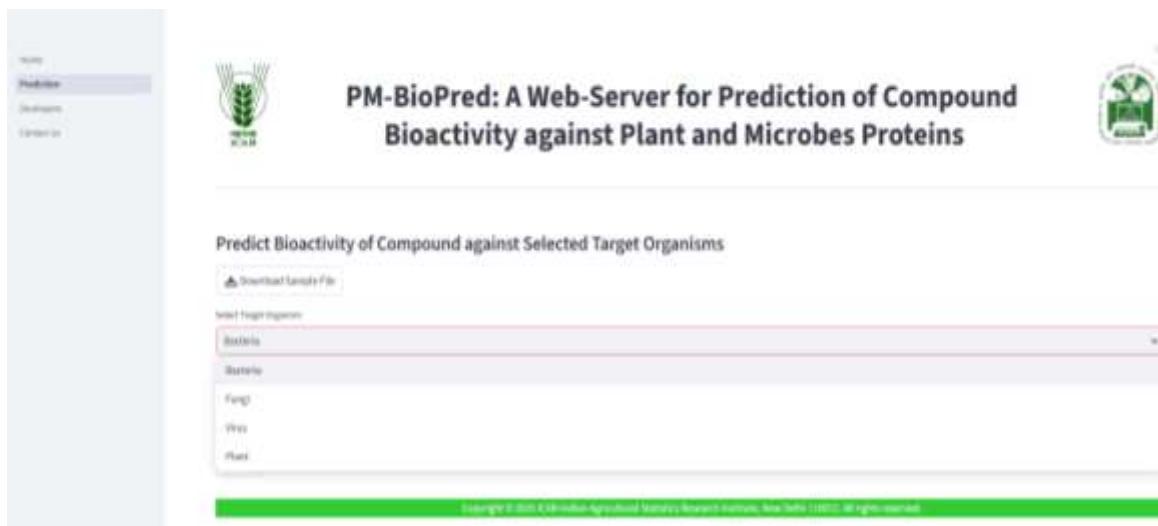


Figure 2: Navigation to Prediction Page

This opens the prediction interface where you can submit your compounds.

### 3. Choose Target Organism

In the dropdown menu “**Select Target Organism**”, choose the type of biological target:

Option	Meaning
<b>Bacteria</b>	Predict antibacterial compound activity
<b>Fungi</b>	Predict antifungal compound activity
<b>Virus</b>	Predict antiviral compound activity
<b>Plant</b>	Predict plant-protein modulator activity

**Note:** Models are trained separately for each organism group for improved accuracy.

### 4. Prepare Your Input File

PM-BioPred accepts a **CSV file** with two required columns:

molecule_id	SMILES
CHEMBL132431	CN(Cc1...
CHEMBL275309	Nc1nc...

Example:

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	molecule_id	SMILES									
2	CHEMBL132431	CN(Cc1cnc2nc(N)nc(N)c2n1)c1ccc(C(=O)NC(CCC(=O)O)C(=O)O)c2cccc12									
3	CHEMBL132142	Nc1nc(N)c2cc(CNc3ccc(C(=O)NC(CCC(=O)O)C(=O)O)c4cccc34)cnc2n1									
4	CHEMBL275309	Nc1nc(N)c2cc(CNc3ccc(C(=O)NC(CCC(=O)O)C(=O)O)c3)cnc2n1									
5	CHEMBL1977479	CC(=O)Nc1ccc(C(C(F)(F)F)(C(F)(F)F)C(F)(F)F)cc1									
6	CHEMBL1979770	CN(C(=O)c1cccc(S(C)(=O)=O)c1)c1c(N)n(Cc2cccc2)c(=O)[nH]c1=O									
7	CHEMBL2005366	O=c1cc(CSc2ccc(C(F)(F)F)cn2)nc2ccc(Br)cn12									
8											
9											
10											
11											

Figure 3: Sample CSV

### Guidelines

- **molecule\_id** can be any identifier (e.g., CHEMBL ID, internal code, compound name)
- **SMILES** must be valid chemical SMILES notation
- File must be in **CSV format**
- Maximum file size: **200MB**

Click “**Download Sample File**” on the page to get the correct template.

## 5. Upload Your File

Click **Drag and Drop file here** or **Browse files** and upload your CSV.

After uploading, the filename will appear on the page.

## 6. Run Prediction

Press the **Predict** button.

PM-BioPred will process your compounds using ML models and display the results.

## 7. Interpreting Results

The output table includes:

Column	Meaning
Molecule ID	ID provided by user
SMILES	Input SMILES string
Probability (Active)	Likelihood compound is bioactive
Probability (Inactive)	Likelihood compound is inactive
Prediction	<b>Active</b> or <b>Inactive</b> label

Example output:

The screenshot shows the 'Predict Bioactivity of Compound against Selected Target Organisms' page. On the left, there's a sidebar with 'Home', 'Prediction', 'Downloads', and 'Contact Us'. The main area has a title 'Predict Bioactivity of Compound against Selected Target Organisms' and a 'Download Sample File' button. Below it is a 'Select Target Organism' dropdown set to 'Bacteria'. Under 'Upload CSV with SMILES entries (1..10000)', there's a 'Drag and drop file here' section containing 'example.csv (10000)' and a 'Browse File' button. A 'Predict' button is at the bottom of this section. Below these is a table titled 'Results' with columns: #, Molecule ID, SMILES, Probability (Active), Probability (Inactive), and Prediction. The table contains 7 rows of data. At the bottom is a green footer bar with the text 'Copyright © 2018 Indian Agricultural Research Institute, New Delhi - 110014 | All rights reserved.'

#	Molecule ID	SMILES	Probability (Active)	Probability (Inactive)	Prediction
1	CHEMBL132431	CC(C)C[C@H]1[C@@H](CCCC[C@H]1O)[C@H](O)C(=O)N2[C@H](C[C@H]2O)C(=O)N3[C@H](C[C@H]3O)C(=O)N4[C@H](C[C@H]4O)C(=O)N5[C@H](C[C@H]5O)C(=O)N6[C@H](C[C@H]6O)C(=O)N7[C@H](C[C@H]7O)C(=O)N8[C@H](C[C@H]8O)C(=O)N9[C@H](C[C@H]9O)C(=O)N10[C@H](C[C@H]10O)C(=O)N11[C@H](C[C@H]11O)C(=O)N12[C@H](C[C@H]12O)C(=O)N13[C@H](C[C@H]13O)C(=O)N14[C@H](C[C@H]14O)C(=O)N15[C@H](C[C@H]15O)C(=O)N16[C@H](C[C@H]16O)C(=O)N17[C@H](C[C@H]17O)C(=O)N18[C@H](C[C@H]18O)C(=O)N19[C@H](C[C@H]19O)C(=O)N20[C@H](C[C@H]20O)C(=O)N21[C@H](C[C@H]21O)C(=O)N22[C@H](C[C@H]22O)C(=O)N23[C@H](C[C@H]23O)C(=O)N24[C@H](C[C@H]24O)C(=O)N25[C@H](C[C@H]25O)C(=O)N26[C@H](C[C@H]26O)C(=O)N27[C@H](C[C@H]27O)C(=O)N28[C@H](C[C@H]28O)C(=O)N29[C@H](C[C@H]29O)C(=O)N30[C@H](C[C@H]30O)C(=O)N31[C@H](C[C@H]31O)C(=O)N32[C@H](C[C@H]32O)C(=O)N33[C@H](C[C@H]33O)C(=O)N34[C@H](C[C@H]34O)C(=O)N35[C@H](C[C@H]35O)C(=O)N36[C@H](C[C@H]36O)C(=O)N37[C@H](C[C@H]37O)C(=O)N38[C@H](C[C@H]38O)C(=O)N39[C@H](C[C@H]39O)C(=O)N40[C@H](C[C@H]40O)C(=O)N41[C@H](C[C@H]41O)C(=O)N42[C@H](C[C@H]42O)C(=O)N43[C@H](C[C@H]43O)C(=O)N44[C@H](C[C@H]44O)C(=O)N45[C@H](C[C@H]45O)C(=O)N46[C@H](C[C@H]46O)C(=O)N47[C@H](C[C@H]47O)C(=O)N48[C@H](C[C@H]48O)C(=O)N49[C@H](C[C@H]49O)C(=O)N50[C@H](C[C@H]50O)C(=O)N51[C@H](C[C@H]51O)C(=O)N52[C@H](C[C@H]52O)C(=O)N53[C@H](C[C@H]53O)C(=O)N54[C@H](C[C@H]54O)C(=O)N55[C@H](C[C@H]55O)C(=O)N56[C@H](C[C@H]56O)C(=O)N57[C@H](C[C@H]57O)C(=O)N58[C@H](C[C@H]58O)C(=O)N59[C@H](C[C@H]59O)C(=O)N60[C@H](C[C@H]60O)C(=O)N61[C@H](C[C@H]61O)C(=O)N62[C@H](C[C@H]62O)C(=O)N63[C@H](C[C@H]63O)C(=O)N64[C@H](C[C@H]64O)C(=O)N65[C@H](C[C@H]65O)C(=O)N66[C@H](C[C@H]66O)C(=O)N67[C@H](C[C@H]67O)C(=O)N68[C@H](C[C@H]68O)C(=O)N69[C@H](C[C@H]69O)C(=O)N70[C@H](C[C@H]70O)C(=O)N71[C@H](C[C@H]71O)C(=O)N72[C@H](C[C@H]72O)C(=O)N73[C@H](C[C@H]73O)C(=O)N74[C@H](C[C@H]74O)C(=O)N75[C@H](C[C@H]75O)C(=O)N76[C@H](C[C@H]76O)C(=O)N77[C@H](C[C@H]77O)C(=O)N78[C@H](C[C@H]78O)C(=O)N79[C@H](C[C@H]79O)C(=O)N80[C@H](C[C@H]80O)C(=O)N81[C@H](C[C@H]81O)C(=O)N82[C@H](C[C@H]82O)C(=O)N83[C@H](C[C@H]83O)C(=O)N84[C@H](C[C@H]84O)C(=O)N85[C@H](C[C@H]85O)C(=O)N86[C@H](C[C@H]86O)C(=O)N87[C@H](C[C@H]87O)C(=O)N88[C@H](C[C@H]88O)C(=O)N89[C@H](C[C@H]89O)C(=O)N90[C@H](C[C@H]90O)C(=O)N91[C@H](C[C@H]91O)C(=O)N92[C@H](C[C@H]92O)C(=O)N93[C@H](C[C@H]93O)C(=O)N94[C@H](C[C@H]94O)C(=O)N95[C@H](C[C@H]95O)C(=O)N96[C@H](C[C@H]96O)C(=O)N97[C@H](C[C@H]97O)C(=O)N98[C@H](C[C@H]98O)C(=O)N99[C@H](C[C@H]99O)C(=O)N100[C@H](C[C@H]100O)C(=O)N101[C@H](C[C@H]101O)C(=O)N102[C@H](C[C@H]102O)C(=O)N103[C@H](C[C@H]103O)C(=O)N104[C@H](C[C@H]104O)C(=O)N105[C@H](C[C@H]105O)C(=O)N106[C@H](C[C@H]106O)C(=O)N107[C@H](C[C@H]107O)C(=O)N108[C@H](C[C@H]108O)C(=O)N109[C@H](C[C@H]109O)C(=O)N110[C@H](C[C@H]110O)C(=O)N111[C@H](C[C@H]111O)C(=O)N112[C@H](C[C@H]112O)C(=O)N113[C@H](C[C@H]113O)C(=O)N114[C@H](C[C@H]114O)C(=O)N115[C@H](C[C@H]115O)C(=O)N116[C@H](C[C@H]116O)C(=O)N117[C@H](C[C@H]117O)C(=O)N118[C@H](C[C@H]118O)C(=O)N119[C@H](C[C@H]119O)C(=O)N120[C@H](C[C@H]120O)C(=O)N121[C@H](C[C@H]121O)C(=O)N122[C@H](C[C@H]122O)C(=O)N123[C@H](C[C@H]123O)C(=O)N124[C@H](C[C@H]124O)C(=O)N125[C@H](C[C@H]125O)C(=O)N126[C@H](C[C@H]126O)C(=O)N127[C@H](C[C@H]127O)C(=O)N128[C@H](C[C@H]128O)C(=O)N129[C@H](C[C@H]129O)C(=O)N130[C@H](C[C@H]130O)C(=O)N131[C@H](C[C@H]131O)C(=O)N132[C@H](C[C@H]132O)C(=O)N133[C@H](C[C@H]133O)C(=O)N134[C@H](C[C@H]134O)C(=O)N135[C@H](C[C@H]135O)C(=O)N136[C@H](C[C@H]136O)C(=O)N137[C@H](C[C@H]137O)C(=O)N138[C@H](C[C@H]138O)C(=O)N139[C@H](C[C@H]139O)C(=O)N140[C@H](C[C@H]140O)C(=O)N141[C@H](C[C@H]141O)C(=O)N142[C@H](C[C@H]142O)C(=O)N143[C@H](C[C@H]143O)C(=O)N144[C@H](C[C@H]144O)C(=O)N145[C@H](C[C@H]145O)C(=O)N146[C@H](C[C@H]146O)C(=O)N147[C@H](C[C@H]147O)C(=O)N148[C@H](C[C@H]148O)C(=O)N149[C@H](C[C@H]149O)C(=O)N150[C@H](C[C@H]150O)C(=O)N151[C@H](C[C@H]151O)C(=O)N152[C@H](C[C@H]152O)C(=O)N153[C@H](C[C@H]153O)C(=O)N154[C@H](C[C@H]154O)C(=O)N155[C@H](C[C@H]155O)C(=O)N156[C@H](C[C@H]156O)C(=O)N157[C@H](C[C@H]157O)C(=O)N158[C@H](C[C@H]158O)C(=O)N159[C@H](C[C@H]159O)C(=O)N160[C@H](C[C@H]160O)C(=O)N161[C@H](C[C@H]161O)C(=O)N162[C@H](C[C@H]162O)C(=O)N163[C@H](C[C@H]163O)C(=O)N164[C@H](C[C@H]164O)C(=O)N165[C@H](C[C@H]165O)C(=O)N166[C@H](C[C@H]166O)C(=O)N167[C@H](C[C@H]167O)C(=O)N168[C@H](C[C@H]168O)C(=O)N169[C@H](C[C@H]169O)C(=O)N170[C@H](C[C@H]170O)C(=O)N171[C@H](C[C@H]171O)C(=O)N172[C@H](C[C@H]172O)C(=O)N173[C@H](C[C@H]173O)C(=O)N174[C@H](C[C@H]174O)C(=O)N175[C@H](C[C@H]175O)C(=O)N176[C@H](C[C@H]176O)C(=O)N177[C@H](C[C@H]177O)C(=O)N178[C@H](C[C@H]178O)C(=O)N179[C@H](C[C@H]179O)C(=O)N180[C@H](C[C@H]180O)C(=O)N181[C@H](C[C@H]181O)C(=O)N182[C@H](C[C@H]182O)C(=O)N183[C@H](C[C@H]183O)C(=O)N184[C@H](C[C@H]184O)C(=O)N185[C@H](C[C@H]185O)C(=O)N186[C@H](C[C@H]186O)C(=O)N187[C@H](C[C@H]187O)C(=O)N188[C@H](C[C@H]188O)C(=O)N189[C@H](C[C@H]189O)C(=O)N190[C@H](C[C@H]190O)C(=O)N191[C@H](C[C@H]191O)C(=O)N192[C@H](C[C@H]192O)C(=O)N193[C@H](C[C@H]193O)C(=O)N194[C@H](C[C@H]194O)C(=O)N195[C@H](C[C@H]195O)C(=O)N196[C@H](C[C@H]196O)C(=O)N197[C@H](C[C@H]197O)C(=O)N198[C@H](C[C@H]198O)C(=O)N199[C@H](C[C@H]199O)C(=O)N200[C@H](C[C@H]200O)C(=O)N201[C@H](C[C@H]201O)C(=O)N202[C@H](C[C@H]202O)C(=O)N203[C@H](C[C@H]203O)C(=O)N204[C@H](C[C@H]204O)C(=O)N205[C@H](C[C@H]205O)C(=O)N206[C@H](C[C@H]206O)C(=O)N207[C@H](C[C@H]207O)C(=O)N208[C@H](C[C@H]208O)C(=O)N209[C@H](C[C@H]209O)C(=O)N210[C@H](C[C@H]210O)C(=O)N211[C@H](C[C@H]211O)C(=O)N212[C@H](C[C@H]212O)C(=O)N213[C@H](C[C@H]213O)C(=O)N214[C@H](C[C@H]214O)C(=O)N215[C@H](C[C@H]215O)C(=O)N216[C@H](C[C@H]216O)C(=O)N217[C@H](C[C@H]217O)C(=O)N218[C@H](C[C@H]218O)C(=O)N219[C@H](C[C@H]219O)C(=O)N220[C@H](C[C@H]220O)C(=O)N221[C@H](C[C@H]221O)C(=O)N222[C@H](C[C@H]222O)C(=O)N223[C@H](C[C@H]223O)C(=O)N224[C@H](C[C@H]224O)C(=O)N225[C@H](C[C@H]225O)C(=O)N226[C@H](C[C@H]226O)C(=O)N227[C@H](C[C@H]227O)C(=O)N228[C@H](C[C@H]228O)C(=O)N229[C@H](C[C@H]229O)C(=O)N230[C@H](C[C@H]230O)C(=O)N231[C@H](C[C@H]231O)C(=O)N232[C@H](C[C@H]232O)C(=O)N233[C@H](C[C@H]233O)C(=O)N234[C@H](C[C@H]234O)C(=O)N235[C@H](C[C@H]235O)C(=O)N236[C@H](C[C@H]236O)C(=O)N237[C@H](C[C@H]237O)C(=O)N238[C@H](C[C@H]238O)C(=O)N239[C@H](C[C@H]239O)C(=O)N240[C@H](C[C@H]240O)C(=O)N241[C@H](C[C@H]241O)C(=O)N242[C@H](C[C@H]242O)C(=O)N243[C@H](C[C@H]243O)C(=O)N244[C@H](C[C@H]244O)C(=O)N245[C@H](C[C@H]245O)C(=O)N246[C@H](C[C@H]246O)C(=O)N247[C@H](C[C@H]247O)C(=O)N248[C@H](C[C@H]248O)C(=O)N249[C@H](C[C@H]249O)C(=O)N250[C@H](C[C@H]250O)C(=O)N251[C@H](C[C@H]251O)C(=O)N252[C@H](C[C@H]252O)C(=O)N253[C@H](C[C@H]253O)C(=O)N254[C@H](C[C@H]254O)C(=O)N255[C@H](C[C@H]255O)C(=O)N256[C@H](C[C@H]256O)C(=O)N257[C@H](C[C@H]257O)C(=O)N258[C@H](C[C@H]258O)C(=O)N259[C@H](C[C@H]259O)C(=O)N260[C@H](C[C@H]260O)C(=O)N261[C@H](C[C@H]261O)C(=O)N262[C@H](C[C@H]262O)C(=O)N263[C@H](C[C@H]263O)C(=O)N264[C@H](C[C@H]264O)C(=O)N265[C@H](C[C@H]265O)C(=O)N266[C@H](C[C@H]266O)C(=O)N267[C@H](C[C@H]267O)C(=O)N268[C@H](C[C@H]268O)C(=O)N269[C@H](C[C@H]269O)C(=O)N270[C@H](C[C@H]270O)C(=O)N271[C@H](C[C@H]271O)C(=O)N272[C@H](C[C@H]272O)C(=O)N273[C@H](C[C@H]273O)C(=O)N274[C@H](C[C@H]274O)C(=O)N275[C@H](C[C@H]275O)C(=O)N276[C@H](C[C@H]276O)C(=O)N277[C@H](C[C@H]277O)C(=O)N278[C@H](C[C@H]278O)C(=O)N279[C@H](C[C@H]279O)C(=O)N280[C@H](C[C@H]280O)C(=O)N281[C@H](C[C@H]281O)C(=O)N282[C@H](C[C@H]282O)C(=O)N283[C@H](C[C@H]283O)C(=O)N284[C@H](C[C@H]284O)C(=O)N285[C@H](C[C@H]285O)C(=O)N286[C@H](C[C@H]286O)C(=O)N287[C@H](C[C@H]287O)C(=O)N288[C@H](C[C@H]288O)C(=O)N289[C@H](C[C@H]289O)C(=O)N290[C@H](C[C@H]290O)C(=O)N291[C@H](C[C@H]291O)C(=O)N292[C@H](C[C@H]292O)C(=O)N293[C@H](C[C@H]293O)C(=O)N294[C@H](C[C@H]294O)C(=O)N295[C@H](C[C@H]295O)C(=O)N296[C@H](C[C@H]296O)C(=O)N297[C@H](C[C@H]297O)C(=O)N298[C@H](C[C@H]298O)C(=O)N299[C@H](C[C@H]299O)C(=O)N300[C@H](C[C@H]300O)C(=O)N301[C@H](C[C@H]301O)C(=O)N302[C@H](C[C@H]302O)C(=O)N303[C@H](C[C@H]303O)C(=O)N304[C@H](C[C@H]304O)C(=O)N305[C@H](C[C@H]305O)C(=O)N306[C@H](C[C@H]306O)C(=O)N307[C@H](C[C@H]307O)C(=O)N308[C@H](C[C@H]308O)C(=O)N309[C@H](C[C@H]309O)C(=O)N310[C@H](C[C@H]310O)C(=O)N311[C@H](C[C@H]311O)C(=O)N312[C@H](C[C@H]312O)C(=O)N313[C@H](C[C@H]313O)C(=O)N314[C@H](C[C@H]314O)C(=O)N315[C@H](C[C@H]315O)C(=O)N316[C@H](C[C@H]316O)C(=O)N317[C@H](C[C@H]317O)C(=O)N318[C@H](C[C@H]318O)C(=O)N319[C@H](C[C@H]319O)C(=O)N320[C@H](C[C@H]320O)C(=O)N321[C@H](C[C@H]321O)C(=O)N322[C@H](C[C@H]322O)C(=O)N323[C@H](C[C@H]323O)C(=O)N324[C@H](C[C@H]324O)C(=O)N325[C@H](C[C@H]325O)C(=O)N326[C@H](C[C@H]326O)C(=O)N327[C@H](C[C@H]327O)C(=O)N328[C@H](C[C@H]328O)C(=O)N329[C@H](C[C@H]329O)C(=O)N330[C@H](C[C@H]330O)C(=O)N331[C@H](C[C@H]331O)C(=O)N332[C@H](C[C@H]332O)C(=O)N333[C@H](C[C@H]333O)C(=O)N334[C@H](C[C@H]334O)C(=O)N335[C@H](C[C@H]335O)C(=O)N336[C@H](C[C@H]336O)C(=O)N337[C@H](C[C@H]337O)C(=O)N338[C@H](C[C@H]338O)C(=O)N339[C@H](C[C@H]339O)C(=O)N340[C@H](C[C@H]340O)C(=O)N341[C@H](C[C@H]341O)C(=O)N342[C@H](C[C@H]342O)C(=O)N343[C@H](C[C@H]343O)C(=O)N344[C@H](C[C@H]344O)C(=O)N345[C@H](C[C@H]345O)C(=O)N346[C@H](C[C@H]346O)C(=O)N347[C@H](C[C@H]347O)C(=O)N348[C@H](C[C@H]348O)C(=O)N349[C@H](C[C@H]349O)C(=O)N350[C@H](C[C@H]350O)C(=O)N351[C@H](C[C@H]351O)C(=O)N352[C@H](C[C@H]352O)C(=O)N353[C@H](C[C@H]353O)C(=O)N354[C@H](C[C@H]354O)C(=O)N355[C@H](C[C@H]355O)C(=O)N356[C@H](C[C@H]356O)C(=O)N357[C@H](C[C@H]357O)C(=O)N358[C@H](C[C@H]358O)C(=O)N359[C@H](C[C@H]359O)C(=O)N360[C@H](C[C@H]360O)C(=O)N361[C@H](C[C@H]361O)C(=O)N362[C@H](C[C@H]362O)C(=O)N363[C@H](C[C@H]363O)C(=O)N364[C@H](C[C@H]364O)C(=O)N365[C@H](C[C@H]365O)C(=O)N366[C@H](C[C@H]366O)C(=O)N367[C@H](C[C@H]367O)C(=O)N368[C@H](C[C@H]368O)C(=O)N369[C@H](C[C@H]369O)C(=O)N370[C@H](C[C@H]370O)C(=O)N371[C@H](C[C@H]371O)C(=O)N372[C@H](C[C@H]372O)C(=O)N373[C@H](C[C@H]373O)C(=O)N374[C@H](C[C@H]374O)C(=O)N375[C@H](C[C@H]375O)C(=O)N376[C@H](C[C@H]376O)C(=O)N377[C@H](C[C@H]377O)C(=O)N378[C@H](C[C@H]378O)C(=O)N379[C@H](C[C@H]379O)C(=O)N380[C@H](C[C@H]380O)C(=O)N381[C@H](C[C@H]381O)C(=O)N382[C@H](C[C@H]382O)C(=O)N383[C@H](C[C@H]383O)C(=O)N384[C@H](C[C@H]384O)C(=O)N385[C@H](C[C@H]385O)C(=O)N386[C@H](C[C@H]386O)C(=O)N387[C@H](C[C@H]387O)C(=O)N388[C@H](C[C@H]388O)C(=O)N389[C@H](C[C@H]389O)C(=O)N390[C@H](C[C@H]390O)C(=O)N391[C@H](C[C@H]391O)C(=O)N392[C@H](C[C@H]392O)C(=O)N393[C@H](C[C@H]393O)C(=O)N394[C@H](C[C@H]394O)C(=O)N395[C@H](C[C@H]395O)C(=O)N396[C@H](C[C@H]396O)C(=O)N397[C@H](C[C@H]397O)C(=O)N398[C@H](C[C@H]398O)C(=O)N399[C@H](C[C@H]399O)C(=O)N400[C@H](C[C@H]400O)C(=O)N401[C@H](C[C@H]401O)C(=O)N402[C@H](C[C@H]402O)C(=O)N403[C@H](C[C@H]403O)C(=O)N404[C@H](C[C@H]404O)C(=O)N405[C@H](C[C@H]405O)C(=O)N406[C@H](C[C@H]406O)C(=O)N407[C@H](C[C@H]407O)C(=O)N408[C@H](C[C@H]408O)C(=O)N409[C@H](C[C@H]409O)C(=O)N410[C@H](C[C@H]410O)C(=O)N411[C@H](C[C@H]411O)C(=O)N412[C@H](C[C@H]412O)C(=O)N413[C@H](C[C@H]413O)C(=O)N414[C@H](C[C@H]414O)C(=O)N415[C@H](C[C@H]415O)C(=O)N416[C@H](C[C@H]416O)C(=O)N417[C@H](C[C@H]417O)C(=O)N418[C@H](C[C@H]418O)C(=O)N419[C@H](C[C@H]419O)C(=O)N420[C@H](C[C@H]420O)C(=O)N421[C@H](C[C@H]421O)C(=O)N422[C@H](C[C@H]422O)C(=O)N423[C@H](C[C@H]423O)C(=O)N424[C@H](C[C@H]424O)C(=O)N425[C@H](C[C@H]425O)C(=O)N426[C@H](C[C@H]426O)C(=O)N427[C@H](C[C@H]427O)C(=O)N428[C@H](C[C@H]428O)C(=O)N429[C@H](C[C@H]429O)C(=O)N430[C@H](C[C@H]430O)C(=O)N431[C@H](C[C@H]431O)C(=O)N432[C@H](C[C@H]432O)C(=O)N433[C@H](C[C@H]433O)C(=O)N434[C@H](C[C@H]434O)C(=O)N435[C@H](C[C@H]435O)C(=O)N436[C@H](C[C@H]436O)C(=O)N437[C@H](C[C@H]437O)C(=O)N438[C@H](C[C@H]438O)C(=O)N439[C@H](C[C@H]439O)C(=O)N440[C@H](C[C@H]440O)C(=O)N441[C@H](C[C@H]441O)C(=O)N442[C@H](C[C@H]442O)C(=O)N443[C@H](C[C@H]443O)C(=O)N444[C@H](C[C@H]444O)C(=O)N445[C@H](C[C@H]445O)C(=O)N446[C@H](C[C@H]446O)C(=O)N447[C@H](C[C@H]447			

Molecule	Active Prob	Inactive Prob	Prediction
CHEMBL2005366	0.19	0.81	<b>Inactive</b>

Higher probability = higher confidence in prediction.

## Exporting Results

Click **Download** (built-in browser table download) to save results.

## 8. Next Steps

You can now take **Active-predicted compounds** forward for:

- ✓ Molecular docking
- ✓ MD simulations
- ✓ Laboratory testing
- ✓ Lead optimization