

Supplemental Table 1 Results for each compound and prediction method.

Compound	Predicted Vss (L/kg)				Prediction error (-fold)				
	Observed Vss (L/kg)	Rat-to-man scaling	Allometric scaling	Rogers-Lucova in silico+in vitro	Conformal methodology	Rat-to-man scaling	Allometric scaling	Rogers-Lucova in silico+in vitro	Conformal methodology
Actisomide	0.58	0.76	1.69	0.76	2.81	1.31	2.92	1.31	4.84
Almotriptan	2.20	1.86	3.86	1.19	2.22	1.18	1.75	1.85	1.01
Antipyrine	0.77	0.56	0.53	0.50	0.99	1.38	1.45	1.54	1.28
Aztreonam	0.18	0.28	1.63	0.16	0.40	1.57	9.07	1.15	2.22
Betamipron	0.28	0.16	0.40	0.16	0.33	1.76	1.41	1.78	1.19
Biperiden	6.20	9.66	3.65	3.87	3.07	1.56	1.70	1.60	2.02
Bisoprolol	2.40	0.97	5.91	1.67	7.94	2.48	2.46	1.44	3.31
Bupivacaine	0.84	1.66	0.29	1.40	0.62	1.97	2.94	1.67	1.36
Caffeine	0.73	0.63	0.71	0.60	1.10	1.15	1.03	1.22	1.51
Captopril	0.75	1.17	4.17	0.25	0.53	1.56	5.56	3.00	1.40
Carumonam	0.18	0.07	0.11	0.24	0.30	2.61	1.58	1.33	1.67
Cefazolin	0.12	0.12	0.22	0.14	0.15	1.02	1.84	1.17	1.27
Cefmetazole	0.13	0.24	0.79	0.14	0.16	1.86	6.10	1.10	1.25
Cefodizime	0.05	0.12	0.23	0.15	0.19	2.48	4.54	2.94	3.86
Cefoperazone	0.17	0.27	0.13	0.13	0.17	1.58	1.32	1.31	1.01
Cefotetan	0.13	0.17	0.19	0.15	0.14	1.33	1.46	1.13	1.08
Cefozopran	0.24	0.14	0.20	0.28	0.30	1.74	1.20	1.17	1.24
Cefpiramide	0.15	0.18	0.25	0.13	0.15	1.20	1.64	1.17	1.00
Ceftizoxime	0.20	0.37	0.18	0.27	0.25	1.86	1.14	1.35	1.24
Ceftriaxone	0.09	0.69	0.05	0.12	0.18	7.67	1.68	1.33	2.01
Chlorpromazine	11.00	20.01	6.48	8.60	11.75	1.82	1.70	1.28	1.17
Cimetidine	1.20	2.28	1.28	0.96	1.07	1.90	1.06	1.25	1.12
Ciprofloxacin	2.10	3.17	1.60	2.40	1.54	1.51	1.31	1.14	1.37
Citalopram	12.00	14.49	5.98	6.40	4.41	1.21	2.01	1.88	2.72

Clonazepam	2.90	2.14	4.37	1.42	2.28	1.36	1.51	2.04	1.27
Coumarin	2.20	0.90	15.25	0.60	0.73	2.45	6.93	3.67	3.00
Crizotinib	25.31	16.56	7.86	8.80	2.81	1.53	3.22	2.88	9.00
Cyclophosphamide	0.70	0.55	0.99	0.51	0.86	1.27	1.42	1.36	1.17
Diclofenac	0.22	0.96	0.07	0.13	0.52	4.36	3.17	1.73	2.38
Diltiazem	3.10	2.48	19.93	11.00	2.09	1.25	6.43	3.55	1.96
Disopyramide	0.78	4.28	1.05	0.73	1.87	5.48	1.34	1.07	3.59
Doripenem	0.23	0.19	0.28	2.00	0.27	1.23	1.22	8.70	1.16
Doxorubicin	25.00	17.25	42.30	2.50	1.25	1.45	1.69	10.00	19.95
Erythromycin	0.95	6.42	2.26	7.60	1.10	6.75	2.38	8.00	1.16
Etoposide	0.18	0.40	0.55	0.18	0.40	2.22	3.07	1.01	2.24
Famotidine	1.20	0.55	1.57	6.80	0.80	2.17	1.31	5.67	1.50
Felodipine	9.70	8.28	2.36	5.40	2.90	1.17	4.12	1.80	3.34
Fleroxacin	1.60	0.90	1.23	0.31	1.22	1.78	1.30	5.16	1.07
Flunisolide	1.80	2.07	4.52	0.30	1.85	1.15	2.51	6.00	1.03
Fluvastatin	0.42	0.69	1.78	0.13	0.53	1.64	4.25	3.23	1.26
Furosemide	0.12	0.08	0.59	0.13	0.48	1.45	4.89	1.08	3.97
Garenoxacin	1.00	0.62	1.34	0.36	1.00	1.61	1.34	2.78	1.00
Gatifloxacin	1.70	1.73	1.71	0.44	1.51	1.01	1.01	3.86	1.13
Gavestinel	0.12	0.21	0.21	0.11	0.32	1.73	1.76	1.05	1.62
Gemfibrozil	1.10	0.19	1.04	0.13	0.68	5.69	1.06	8.46	1.61
Haloperidol	18.00	6.90	26.89	9.87	5.57	2.61	1.49	1.82	3.05
Hydrodolasetron	11.00	10.35	15.08	2.77	2.28	1.06	1.37	3.97	2.54
Imatinib	3.90	2.14	12.34	2.60	1.19	1.82	3.17	1.50	3.28
Imipenem	0.24	0.17	0.36	3.20	0.23	1.45	1.48	13.33	1.03
Imipramine	13.00	7.59	5.55	5.60	11.75	1.71	2.34	2.32	1.02
Indinavir	1.74	1.52	0.55	4.70	1.65	1.15	3.14	2.70	2.01
Indomethacin	0.93	1.31	5.28	0.15	0.31	1.41	5.68	6.26	3.01
Irinotecan	3.50	2.97	0.71	5.01	0.89	1.18	4.96	1.43	3.94

Isosorbide dinitrate	1.90	3.38	1.43	0.66	1.51	1.78	1.33	2.89	1.26
Isosorbide mononitrate	0.60	0.67	0.50	0.40	1.12	1.12	1.20	1.50	1.86
Ketoprofen	0.13	0.29	0.20	0.12	0.15	2.23	1.50	1.08	1.17
Lamifiban	0.29	0.17	0.84	1.50	0.29	1.75	2.90	5.17	1.01
Lamivudine	1.30	1.24	0.66	0.53	1.48	1.05	1.97	2.46	1.14
Levofloxacin	1.20	2.48	0.84	0.77	1.39	2.07	1.43	1.56	1.16
Lidocaine	1.10	1.73	1.08	2.38	2.20	1.57	1.02	2.16	1.22
Lorazepam	1.30	0.69	7.69	0.69	1.06	1.88	5.92	1.90	1.23
Meropenem	0.30	0.10	0.31	0.50	0.34	3.11	1.03	1.67	1.12
Methotrexate	0.67	0.28	1.17	0.13	0.32	2.43	1.75	5.21	2.09
Metoprolol	3.10	4.35	5.54	2.70	2.07	1.40	1.79	1.15	1.49
Midazolam	1.10	1.79	1.24	0.12	1.01	1.63	1.12	9.17	1.08
Mifepristone	1.50	2.97	43.94	7.00	2.08	1.98	29.29	4.67	1.39
Morphine	2.30	10.28	1.21	2.30	2.55	4.47	1.89	1.00	1.11
Moxalactam	0.17	0.17	0.17	0.16	0.12	1.01	1.03	1.06	1.40
Moxifloxacin	1.40	2.48	3.38	1.58	1.29	1.77	2.41	1.13	1.08
Naltrexone	7.60	2.42	14.08	2.90	3.95	3.15	1.85	2.62	1.92
Naproxen	0.09	0.12	0.08	0.11	0.36	1.38	1.13	1.19	3.97
Nicardipine	1.00	1.31	1.75	6.20	6.37	1.31	1.75	6.20	6.37
Nicotine	2.60	3.24	1.48	0.96	1.61	1.25	1.76	2.71	1.62
Nifedipine	0.78	0.09	3.00	2.30	2.86	8.70	3.85	2.95	3.62
Nimodipine	1.10	3.80	2.25	0.58	4.02	3.45	2.05	1.90	3.65
Pazopanib	0.16	0.31	0.22	0.31	0.95	1.95	1.35	1.95	5.97
Pefloxacin	1.50	1.93	0.39	0.26	1.40	1.28	3.88	5.77	1.07
Phencyclidine	6.90	8.69	10.64	9.60	1.68	1.26	1.54	1.39	4.10
Phenytoin	1.40	0.44	5.86	2.30	1.28	3.17	4.19	1.64	1.10
Piperacillin	0.27	0.27	0.18	0.20	0.22	1.00	1.49	1.35	1.24
Pirmenol	1.40	1.79	0.97	1.10	2.76	1.28	1.45	1.27	1.97

Prednisone	0.57	0.90	2.75	0.53	1.04	1.57	4.83	1.08	1.83
Propafenone	2.20	3.38	7.21	1.40	1.68	1.54	3.28	1.57	1.31
Propranolol	3.10	3.16	2.69	2.00	1.94	1.02	1.15	1.55	1.60
Quinidine	2.90	3.64	1.76	4.80	3.31	1.26	1.65	1.66	1.14
Recainam	1.40	2.21	1.17	0.50	1.96	1.58	1.20	2.80	1.40
Remikiren	0.77	3.04	0.79	0.84	0.29	3.94	1.02	1.09	2.66
Ro25-6833	0.11	0.10	0.15	0.12	0.35	1.06	1.39	1.09	3.14
Sulfinpyrazone	0.12	0.30	0.09	0.12	0.35	2.47	1.40	1.00	2.95
Susalimod	0.10	0.32	0.05	0.11	0.08	3.24	1.82	1.14	1.32
Telmisartan	5.30	1.38	2.19	0.16	0.33	3.84	2.42	33.13	15.90
Theophylline	0.51	0.38	0.80	0.38	0.69	1.34	1.56	1.34	1.35
Tiludronate	1.00	10.35	1.80	0.13	0.51	10.35	1.80	7.45	1.97
Tomopenem	0.23	0.14	0.23	3.80	0.31	1.67	1.00	16.52	1.36
Topotecan	1.80	2.13	3.20	1.90	1.12	1.18	1.78	1.06	1.61
Troglitazone	0.71	0.69	0.61	4.30	0.74	1.03	1.17	6.06	1.05
Trovafloxacin	1.30	0.52	2.65	1.44	0.93	2.51	2.04	1.11	1.40
Valproic acid	0.14	0.46	0.17	0.13	0.36	3.25	1.20	1.08	2.59
Warfarin	0.13	0.15	0.17	0.15	0.73	1.04	2.07	1.48	5.62
Venlafaxine	4.40	4.55	2.13	6.50	3.09	2.49	1.94	1.32	1.42
Verapamil	3.70	1.48	7.19	4.87	1.62	5.08	1.18	1.36	2.28
Verlukast	0.11	0.56	0.13	0.15	0.43	5.76	3.71	1.95	3.89
Vildagliptin	1.03	5.93	0.25	2.01	1.94	2.90	44.36	2.73	1.88
Vinblastine	24.00	8.28	0.54	8.80	8.11	1.38	1.55	1.00	2.96
Zidovudine	1.80	0.83	1.10	0.15	0.71	2.17	1.63	12.00	2.53
					Mean error	2.19	2.93	3.14	2.37
					Median error	1.62	1.70	1.66	1.50
					Max error	10.4	44.4	33.1	19.9
					% <2-fold error	69	64	61	64