

Terms & Conditions

Electronic Supporting Information files are available without a subscription to ACS Web Editions. The American Chemical Society holds a copyright ownership interest in any copyrightable Supporting Information. Files available from the ACS website may be downloaded for personal use only. Users are not otherwise permitted to reproduce, republish, redistribute, or sell any Supporting Information from the ACS website, either in whole or in part, in either machine-readable form or any other form without permission from the American Chemical Society. For permission to reproduce, republish and redistribute this material, requesters must process their own requests via the RightsLink permission system. Information about how to use the RightsLink permission system can be found at <http://pubs.acs.org/page/copyright/permissions.html>



Supplementary Material

Thompson N. Doman et al

=====
 || Tanimoto Similarity Measures for Inventory 1 ||
 =====

	1	2	3	4	5
1	1.000000	0.889764	0.810219	0.839695	0.800000
2	0.889764	1.000000	0.890625	0.926230	0.877863
3	0.810219	0.890625	1.000000	0.883721	0.854015
4	0.839695	0.926230	0.883721	1.000000	0.843284
5	0.800000	0.877863	0.854015	0.843284	1.000000
6	0.866142	0.974359	0.912000	0.949580	0.883721
7	0.825758	0.835938	0.827068	0.888000	0.789855
8	0.164384	0.163551	0.157658	0.168224	0.154867
9	0.137755	0.136126	0.130653	0.141361	0.128079
10	0.147208	0.145833	0.140000	0.151042	0.137255
11	0.167488	0.160804	0.154589	0.165829	0.151659
12	0.147059	0.140000	0.134615	0.145000	0.132075
13	0.146119	0.139535	0.134529	0.144186	0.137168
14	0.145923	0.139738	0.135021	0.144105	0.132780
15	0.162577	0.165625	0.168712	0.168750	0.173780
16	0.149153	0.148276	0.148148	0.155709	0.153846
17	0.064516	0.056338	0.059091	0.056075	0.062780
18	0.153595	0.156667	0.156352	0.160000	0.161812
19	0.156667	0.159864	0.159468	0.163265	0.165017
20	0.075397	0.072874	0.070588	0.076923	0.077821
21	0.088123	0.090196	0.087452	0.094118	0.094340
22	0.056701	0.058511	0.056122	0.063830	0.065657
23	0.147059	0.145729	0.140097	0.150754	0.137441
24	0.097378	0.095420	0.092593	0.099237	0.095238

Tanimoto Similarity Measures for Inventory 1 (continued)

	6	7	8	9	10
1	0.866142	0.825758	0.164384	0.137755	0.147208
2	0.974359	0.835938	0.163551	0.136126	0.145833
3	0.912000	0.827068	0.157658	0.130653	0.140000
4	0.949580	0.888000	0.168224	0.141361	0.151042
5	0.883721	0.789855	0.154867	0.128079	0.137255
6	1.000000	0.856000	0.165877	0.138298	0.148148
7	0.856000	1.000000	0.168224	0.141361	0.151042
8	0.165877	0.168224	1.000000	0.744361	0.598639
9	0.138298	0.141361	0.744361	1.000000	0.750000
10	0.148148	0.151042	0.598639	0.750000	1.000000
11	0.163265	0.165829	0.732394	0.860870	0.682171
12	0.142132	0.145000	0.711268	0.883929	0.685039
13	0.141509	0.144186	0.710526	0.740458	0.615385
14	0.141593	0.144105	0.652695	0.659864	0.563291
15	0.167192	0.161491	0.289037	0.271429	0.255245
16	0.149826	0.147766	0.333333	0.311203	0.291498
17	0.057143	0.056075	0.148325	0.149171	0.153005
18	0.158249	0.148515	0.311594	0.294118	0.270992
19	0.161512	0.151515	0.318519	0.301205	0.277344
20	0.073770	0.072581	0.191489	0.186603	0.206731
21	0.091270	0.089844	0.215768	0.213953	0.239437
22	0.059459	0.058201	0.144385	0.159236	0.163522
23	0.147959	0.156566	0.577922	0.701613	0.712000
24	0.096525	0.095057	0.222672	0.232877	0.246575
	11	12	13	14	15
1	0.167488	0.147059	0.146119	0.145923	0.162577
2	0.160804	0.140000	0.139535	0.139738	0.165625
3	0.154589	0.134615	0.134529	0.135021	0.168712
4	0.165829	0.145000	0.144186	0.144105	0.168750
5	0.151659	0.132075	0.137168	0.132780	0.173780
6	0.163265	0.142132	0.141509	0.141593	0.167192
7	0.165829	0.145000	0.144186	0.144105	0.161491
8	0.732394	0.711268	0.710526	0.652695	0.289037
9	0.860870	0.883929	0.740458	0.659864	0.271429
10	0.682171	0.685039	0.615385	0.563291	0.255245
11	1.000000	0.875000	0.716312	0.653846	0.271478
12	0.875000	1.000000	0.683099	0.624204	0.278746
13	0.716312	0.683099	1.000000	0.668712	0.263158
14	0.653846	0.624204	0.668712	1.000000	0.324503
15	0.271478	0.278746	0.263158	0.324503	1.000000
16	0.314741	0.329268	0.298113	0.368821	0.754647
17	0.138462	0.140625	0.151220	0.140271	0.109756
18	0.293233	0.301527	0.283154	0.345324	0.862069
19	0.300000	0.308594	0.289377	0.352941	0.875000
20	0.185520	0.182648	0.243243	0.172691	0.141243
21	0.216814	0.214286	0.229787	0.200787	0.151934
22	0.152941	0.148810	0.160221	0.135678	0.093851
23	0.666667	0.656716	0.593333	0.554878	0.244068
24	0.229437	0.232456	0.226337	0.236220	0.193277

Tanimoto Similarity Measures for Inventory 1 (continued)

	16	17	18	19	20
1	0.149153	0.064516	0.153595	0.156667	0.075397
2	0.148276	0.056338	0.156667	0.159864	0.072874
3	0.148148	0.059091	0.156352	0.159468	0.070588
4	0.155709	0.056075	0.160000	0.163265	0.076923
5	0.153846	0.062780	0.161812	0.165017	0.077821
6	0.149826	0.057143	0.158249	0.161512	0.073770
7	0.147766	0.056075	0.148515	0.151515	0.072581
8	0.333333	0.148325	0.311594	0.318519	0.191489
9	0.311203	0.149171	0.294118	0.301205	0.186603
10	0.291498	0.153005	0.270992	0.277344	0.206731
11	0.314741	0.138462	0.293233	0.300000	0.185520
12	0.329268	0.140625	0.301527	0.308594	0.182648
13	0.298113	0.151220	0.283154	0.289377	0.243243
14	0.368821	0.140271	0.345324	0.352941	0.172691
15	0.754647	0.109756	0.862069	0.875000	0.141243
16	1.000000	0.113402	0.820408	0.841004	0.144654
17	0.113402	1.000000	0.108197	0.110368	0.326425
18	0.820408	0.108197	1.000000	0.973913	0.141994
19	0.841004	0.110368	0.973913	1.000000	0.141104
20	0.144654	0.326425	0.141994	0.141104	1.000000
21	0.160000	0.299517	0.156805	0.156156	0.726257
22	0.095588	0.338028	0.094737	0.096774	0.337209
23	0.277344	0.152632	0.258303	0.264151	0.199074
24	0.191358	0.198276	0.194030	0.197568	0.314050
	21	22	23	24	
1	0.088123	0.056701	0.147059	0.097378	
2	0.090196	0.058511	0.145729	0.095420	
3	0.087452	0.056122	0.140097	0.092593	
4	0.094118	0.063830	0.150754	0.099237	
5	0.094340	0.065657	0.137441	0.095238	
6	0.091270	0.059459	0.147959	0.096525	
7	0.089844	0.058201	0.156566	0.095057	
8	0.215768	0.144385	0.577922	0.222672	
9	0.213953	0.159236	0.701613	0.232877	
10	0.239437	0.163522	0.712000	0.246575	
11	0.216814	0.152941	0.666667	0.229437	
12	0.214286	0.148810	0.656716	0.232456	
13	0.229787	0.160221	0.593333	0.226337	
14	0.200787	0.135678	0.554878	0.236220	
15	0.151934	0.093851	0.244068	0.193277	
16	0.160000	0.095588	0.277344	0.191358	
17	0.299517	0.338028	0.152632	0.198276	
18	0.156805	0.094737	0.258303	0.194030	
19	0.156156	0.096774	0.264151	0.197568	
20	0.726257	0.337209	0.199074	0.314050	
21	1.000000	0.380682	0.230769	0.390756	
22	0.380682	1.000000	0.162651	0.200000	
23	0.230769	0.162651	1.000000	0.265766	
24	0.390756	0.200000	0.265766	1.000000	

=====

|| Tanimoto Similarity Measures for Inventory 2 ||

=====

	25	26	27	28	29
	-----	-----	-----	-----	-----
25	1.000000	0.952880	0.439597	0.544304	0.557018
26	0.952880	1.000000	0.440789	0.582278	0.542373
27	0.439597	0.440789	1.000000	0.683594	0.700405
28	0.544304	0.582278	0.683594	1.000000	0.940217
29	0.557018	0.542373	0.700405	0.940217	1.000000
30	0.514056	0.501945	0.667925	0.839806	0.887179
31	0.509728	0.498113	0.703008	0.797235	0.839806
32	0.505976	0.500000	0.710425	0.844660	0.882653
33	0.468750	0.452830	0.382445	0.459459	0.473896
34	0.451493	0.474074	0.375758	0.481061	0.450382
35	0.430189	0.421245	0.391850	0.426966	0.434109
36	0.500000	0.488722	0.674074	0.800926	0.843902
37	0.460993	0.451724	0.650519	0.717842	0.752174
38	0.436667	0.433225	0.728223	0.671815	0.694779
39	0.444444	0.434263	0.546468	0.446721	0.455319
40	0.439024	0.429134	0.551852	0.441296	0.449580
41	0.457265	0.446281	0.481752	0.465812	0.475556
42	0.465000	0.480392	0.345865	0.489899	0.463918
43	0.450549	0.429319	0.331984	0.445652	0.473988
44	0.438914	0.421739	0.334495	0.409692	0.430556
45	0.432039	0.413953	0.368821	0.421053	0.444444

	30	31	32	33	34
	-----	-----	-----	-----	-----
25	0.514056	0.509728	0.505976	0.468750	0.451493
26	0.501945	0.498113	0.500000	0.452830	0.474074
27	0.667925	0.703008	0.710425	0.382445	0.375758
28	0.839806	0.797235	0.844660	0.459459	0.481061
29	0.887179	0.839806	0.882653	0.473896	0.450382
30	1.000000	0.814480	0.835681	0.440741	0.420495
31	0.814480	1.000000	0.786667	0.423488	0.404762
32	0.835681	0.786667	1.000000	0.439114	0.419014
33	0.440741	0.423488	0.439114	1.000000	0.937198
34	0.420495	0.404762	0.419014	0.937198	1.000000
35	0.410072	0.394464	0.403571	0.827103	0.787611
36	0.818182	0.771552	0.806306	0.450909	0.430556
37	0.741803	0.703125	0.724696	0.422819	0.405145
38	0.688213	0.666667	0.698473	0.406349	0.394495
39	0.438735	0.464844	0.471774	0.385496	0.372263
40	0.433594	0.465116	0.466135	0.381132	0.368231
41	0.433198	0.460000	0.454918	0.406375	0.391635
42	0.416667	0.396476	0.414747	0.386364	0.400881
43	0.420513	0.398058	0.418367	0.373134	0.350467
44	0.396624	0.379032	0.389121	0.594203	0.559091
45	0.495146	0.424107	0.437209	0.358407	0.338912

Tanimoto Similarity Measures for Inventory 2 (continued)

	35	36	37	38	39
25	0.430189	0.500000	0.460993	0.436667	0.444444
26	0.421245	0.488722	0.451724	0.433225	0.434263
27	0.391850	0.674074	0.650519	0.728223	0.546468
28	0.426966	0.800926	0.717842	0.671815	0.446721
29	0.434109	0.843902	0.752174	0.694779	0.455319
30	0.410072	0.818182	0.741803	0.688213	0.438735
31	0.394464	0.771552	0.703125	0.666667	0.464844
32	0.403571	0.806306	0.724696	0.698473	0.471774
33	0.827103	0.450909	0.422819	0.406349	0.385496
34	0.787611	0.430556	0.405145	0.394495	0.372263
35	1.000000	0.420495	0.400000	0.380805	0.396947
36	0.420495	1.000000	0.891304	0.759690	0.432950
37	0.400000	0.891304	1.000000	0.723022	0.404930
38	0.380805	0.759690	0.723022	1.000000	0.421769
39	0.396947	0.432950	0.404930	0.421769	1.000000
40	0.392453	0.428030	0.400697	0.422297	0.982558
41	0.412698	0.427451	0.399281	0.383051	0.863636
42	0.368889	0.398230	0.358566	0.338290	0.481481
43	0.360976	0.400000	0.356522	0.329317	0.485207
44	0.578199	0.403292	0.375940	0.360424	0.438679
45	0.353712	0.465438	0.423237	0.397683	0.484211

	40	41	42	43	44
25	0.439024	0.457265	0.465000	0.450549	0.438914
26	0.429134	0.446281	0.480392	0.429319	0.421739
27	0.551852	0.481752	0.345865	0.331984	0.334495
28	0.441296	0.465812	0.489899	0.445652	0.409692
29	0.449580	0.475556	0.463918	0.473988	0.430556
30	0.433594	0.433198	0.416667	0.420513	0.396624
31	0.465116	0.460000	0.396476	0.398058	0.379032
32	0.466135	0.454918	0.414747	0.418367	0.389121
33	0.381132	0.406375	0.386364	0.373134	0.594203
34	0.368231	0.391635	0.400881	0.350467	0.559091
35	0.392453	0.412698	0.368889	0.360976	0.578199
36	0.428030	0.427451	0.398230	0.400000	0.403292
37	0.400697	0.399281	0.358566	0.356522	0.375940
38	0.422297	0.383051	0.338290	0.329317	0.360424
39	0.982558	0.863636	0.481481	0.485207	0.438679
40	1.000000	0.849162	0.473958	0.476744	0.432558
41	0.849162	1.000000	0.508380	0.515723	0.453202
42	0.473958	0.508380	1.000000	0.738739	0.515337
43	0.476744	0.515723	0.738739	1.000000	0.602941
44	0.432558	0.453202	0.515337	0.602941	1.000000
45	0.476684	0.478261	0.635036	0.725664	0.509091

Tanimoto Similarity Measures for Inventory 2 (continued)

45

25	0.432039
26	0.413953
27	0.368821
28	0.421053
29	0.444444
30	0.495146
31	0.424107
32	0.437209
33	0.358407
34	0.338912
35	0.353712
36	0.465438
37	0.423237
38	0.397683
39	0.484211
40	0.476684
41	0.478261
42	0.635036
43	0.725664
44	0.509091
45	1.000000

=====

|| Tanimoto Similarity Measures for Inventory 3 ||

=====

	46	47	48	49	50
46	1.000000	0.245968	0.224066	0.207143	0.120603
47	0.245968	1.000000	0.227642	0.304569	0.167526
48	0.224066	0.227642	1.000000	0.157407	0.167553
49	0.207143	0.304569	0.157407	1.000000	0.205556
50	0.120603	0.167526	0.167553	0.205556	1.000000
51	0.300493	0.355000	0.359788	0.205656	0.127072
52	0.321951	0.317536	0.281553	0.229974	0.121622
53	0.227848	0.273504	0.308756	0.203883	0.132812
54	0.190114	0.245136	0.214286	0.210280	0.162850
55	0.097778	0.309278	0.132075	0.164948	0.143275
56	0.222628	0.290566	0.197080	0.279621	0.145933
57	0.169753	0.225397	0.203883	0.226891	0.191344
58	0.156098	0.238579	0.236559	0.154047	0.094828
59	0.280000	0.241935	0.323171	0.134921	0.085546
60	0.309524	0.299539	0.212670	0.197007	0.105541
61	0.269231	0.344633	0.251397	0.204420	0.090116
62	0.235294	0.246073	0.210811	0.150396	0.056338
63	0.132597	0.133690	0.144509	0.078947	0.041791
64	0.210762	0.276498	0.335025	0.187500	0.109920
65	0.279188	0.275862	0.458333	0.168798	0.103064
66	0.187097	0.275510	0.236301	0.256579	0.190698
67	0.123563	0.271565	0.126100	0.233954	0.235566
68	0.186364	0.150215	0.149321	0.165000	0.088710
69	0.199367	0.217666	0.211726	0.237288	0.221963

Tanimoto Similarity Measures for Inventory 3 (continued)

	51	52	53	54	55
46	0.300493	0.321951	0.227848	0.190114	0.097778
47	0.355000	0.317536	0.273504	0.245136	0.309278
48	0.359788	0.281553	0.308756	0.214286	0.132075
49	0.205656	0.229974	0.203883	0.210280	0.164948
50	0.127072	0.121622	0.132812	0.162850	0.143275
51	1.000000	0.429448	0.437500	0.238739	0.222222
52	0.429448	1.000000	0.340206	0.194915	0.155080
53	0.437500	0.340206	1.000000	0.242798	0.204082
54	0.238739	0.194915	0.242798	1.000000	0.200000
55	0.222222	0.155080	0.204082	0.200000	1.000000
56	0.274678	0.245902	0.213483	0.189003	0.201717
57	0.235507	0.221053	0.190939	0.167665	0.121107
58	0.344595	0.256098	0.255556	0.164319	0.159236
59	0.500000	0.388489	0.298781	0.140777	0.111842
60	0.331461	0.418605	0.367876	0.176955	0.151832
61	0.419118	0.652893	0.325301	0.174757	0.181208
62	0.378571	0.324503	0.317365	0.146919	0.093168
63	0.265152	0.167785	0.147929	0.074627	0.041667
64	0.389222	0.284946	0.263415	0.185654	0.181319
65	0.389610	0.347561	0.295699	0.184685	0.152047
66	0.245283	0.221014	0.284173	0.188088	0.176692
67	0.135048	0.150160	0.180124	0.192878	0.244444
68	0.179894	0.150000	0.152074	0.123967	0.072917
69	0.188153	0.191781	0.194805	0.270358	0.148936
	56	57	58	59	60
46	0.222628	0.169753	0.156098	0.280000	0.309524
47	0.290566	0.225397	0.238579	0.241935	0.299539
48	0.197080	0.203883	0.236559	0.323171	0.212670
49	0.279621	0.226891	0.154047	0.134921	0.197007
50	0.145933	0.191344	0.094828	0.085546	0.105541
51	0.274678	0.235507	0.344595	0.500000	0.331461
52	0.245902	0.221053	0.256098	0.388489	0.418605
53	0.213483	0.190939	0.255556	0.298781	0.367876
54	0.189003	0.167665	0.164319	0.140777	0.176955
55	0.201717	0.121107	0.159236	0.111842	0.151832
56	1.000000	0.244713	0.227273	0.259804	0.232000
57	0.244713	1.000000	0.217054	0.223577	0.217993
58	0.227273	0.217054	1.000000	0.485981	0.242604
59	0.259804	0.223577	0.485981	1.000000	0.287582
60	0.232000	0.217993	0.242604	0.287582	1.000000
61	0.251185	0.222222	0.317460	0.390909	0.557252
62	0.239437	0.252033	0.328000	0.471154	0.446809
63	0.149758	0.151020	0.333333	0.365591	0.163399
64	0.300429	0.319392	0.507353	0.443609	0.278947
65	0.239130	0.205128	0.298611	0.438017	0.256983
66	0.204204	0.152850	0.156489	0.164659	0.217857
67	0.194366	0.152709	0.120275	0.079310	0.155556
68	0.195122	0.211470	0.173653	0.211921	0.135922
69	0.252280	0.229111	0.129496	0.135849	0.193220

Tanimoto Similarity Measures for Inventory 3 (continued)

	61	62	63	64	65
46	0.269231	0.235294	0.132597	0.210762	0.279188
47	0.344633	0.246073	0.133690	0.276498	0.275862
48	0.251397	0.210811	0.144509	0.335025	0.458333
49	0.204420	0.150396	0.078947	0.187500	0.168798
50	0.090116	0.056338	0.041791	0.109920	0.103064
51	0.419118	0.378571	0.265152	0.389222	0.389610
52	0.652893	0.324503	0.167785	0.284946	0.347561
53	0.325301	0.317365	0.147929	0.263415	0.295699
54	0.174757	0.146919	0.074627	0.185654	0.184685
55	0.181208	0.093168	0.041667	0.181319	0.152047
56	0.251185	0.239437	0.149758	0.300429	0.239130
57	0.222222	0.252033	0.151020	0.319392	0.205128
58	0.317460	0.328000	0.333333	0.507353	0.298611
59	0.390909	0.471154	0.365591	0.443609	0.438017
60	0.557252	0.446809	0.163399	0.278947	0.256983
61	1.000000	0.428571	0.218182	0.344595	0.340741
62	0.428571	1.000000	0.340000	0.372414	0.283688
63	0.218182	0.340000	1.000000	0.272059	0.192308
64	0.344595	0.372414	0.272059	1.000000	0.410256
65	0.340741	0.283688	0.192308	0.410256	1.000000
66	0.173913	0.164706	0.079681	0.138983	0.204545
67	0.130742	0.092150	0.031579	0.143312	0.107143
68	0.165644	0.194969	0.188406	0.174359	0.159341
69	0.184615	0.136531	0.072243	0.164430	0.175000

	66	67	68	69
46	0.187097	0.123563	0.186364	0.199367
47	0.275510	0.271565	0.150215	0.217666
48	0.236301	0.126100	0.149321	0.211726
49	0.256579	0.233954	0.165000	0.237288
50	0.190698	0.235566	0.088710	0.221963
51	0.245283	0.135048	0.179894	0.188153
52	0.221014	0.150160	0.150000	0.191781
53	0.284173	0.180124	0.152074	0.194805
54	0.188088	0.192878	0.123967	0.270358
55	0.176692	0.244444	0.072917	0.148936
56	0.204204	0.194366	0.195122	0.252280
57	0.152850	0.152709	0.211470	0.229111
58	0.156489	0.120275	0.173653	0.129496
59	0.164659	0.079310	0.211921	0.135849
60	0.217857	0.155556	0.135922	0.193220
61	0.173913	0.130742	0.165644	0.184615
62	0.164706	0.092150	0.194969	0.136531
63	0.079681	0.031579	0.188406	0.072243
64	0.138983	0.143312	0.174359	0.164430
65	0.204545	0.107143	0.159341	0.175000
66	1.000000	0.215426	0.135417	0.205962
67	0.215426	1.000000	0.083591	0.206186
68	0.135417	0.083591	1.000000	0.173611
69	0.205962	0.206186	0.173611	1.000000