

Supplementary Table S1. Compounds with known TNIK activity, fetched from ChemBl database and used as a testing set.

compound	PUBMED_ID	journal
CHEMBL2312140	23232060	Bioorg. Med. Chem. Lett.;2013;23;2;569
CHEMBL2312144	23232060	Bioorg. Med. Chem. Lett.;2013;23;2;569
CHEMBL2312152	23232060	Bioorg. Med. Chem. Lett.;2013;23;2;569
CHEMBL2312155	23232060	Bioorg. Med. Chem. Lett.;2013;23;2;569
CHEMBL1163559	20483621	Bioorg. Med. Chem.;2010;18;12;4351
CHEMBL1163566	20483621	Bioorg. Med. Chem.;2010;18;12;4351
CHEMBL1164265	20483621	Bioorg. Med. Chem.;2010;18;12;4351
CHEMBL1956070	16476733	J. Biol. Chem.;2006;281;15;9987
CHEMBL103667	18183025	Nat. Biotechnol.;2008;26;1;127
CHEMBL1241674	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL1289926	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL1908393	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL1908395	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL1908397	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL288441	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL377300	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL379218	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL386051	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL450786	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL477772	18183025	Nat. Biotechnol.;2008;26;1;127
CHEMBL491473	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL516312	19035792	J. Med. Chem.;2008;51;24;7898
CHEMBL522892	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL535	18077425	Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.;2007;104;50;19936
CHEMBL574738	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL607707	18183025	Nat. Biotechnol.;2008;26;1;127
CHEMBL2312143	23232060	Bioorg. Med. Chem. Lett.;2013;23;2;569
CHEMBL101253	18183025	Nat. Biotechnol.;2008;26;1;127
CHEMBL105442	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046

CHEMBL1173655	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL119385	15711537	Nat. Biotechnol.;2005;23;3;329
CHEMBL1236107	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL1240703	19654408	Blood;2009;114;14;2984
CHEMBL124660	15711537	Nat. Biotechnol.;2005;23;3;329
CHEMBL1287853	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL1336	19654408	Blood;2009;114;14;2984
CHEMBL14762	18183025	Nat. Biotechnol.;2008;26;1;127
CHEMBL1789941	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL1908394	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL191003	18183025	Nat. Biotechnol.;2008;26;1;127
CHEMBL215152	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL223360	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL230011	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL249697	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL255863	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL261849	18183025	Nat. Biotechnol.;2008;26;1;127
CHEMBL296468	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL384304	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL428690	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL440084	18183025	Nat. Biotechnol.;2008;26;1;127
CHEMBL445813	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL464552	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL494089	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL513909	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL521851	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL553	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL572881	18183025	Nat. Biotechnol.;2008;26;1;127
CHEMBL573339	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL576982	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL601719	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL608154	22037378	Nat. Biotechnol.;2011;29;11;1046
CHEMBL91829	15711537	Nat. Biotechnol.;2005;23;3;329

CHEMBL162		no reference available
CHEMBL1908392		no reference available
CHEMBL2309006		no reference available
CHEMBL7064		no reference available