

Supporting Information to:

Anticancer Components Identification from the Extract of *Dysosma versipellis* and *Glycyrrhiza uralensis* Based on Support Vector Regression and Mean Impact Value

Hailiu Fan, Jianbang Xuan, Kaixuan Zhang, Jianlan Jiang*

Key Laboratory of Systems Bioengineering, Ministry of Education, Tianjin Key Laboratory of Biological and Pharmaceutical Engineering, School of Chemical Engineering and Technology, Tianjin University, Tianjin 300350, China

* Corresponding author.

Jianlan Jiang

E-mail: jljiang@tju.edu.cn

Fax: +86-022-2740-0388

Table S1 The relative peak area of the 45 common peaks for 46 batches of samples

Sample	Peak no.														
no.	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
1	2.288	2.759	0.521	0.309	0.238	0.147	1.285	0.387	2.973	0.429	0.373	0.289	1.843	0.101	0.243
2	1.774	1.670	0.334	0.246	0.315	0.106	0.819	0.272	2.683	0.180	0.318	0.245	1.592	0.242	0.149
3	1.686	1.953	0.301	0.303	0.283	0.163	0.857	0.261	2.544	0.258	0.322	0.381	1.962	0.301	0.151
4	1.667	1.890	0.161	0.047	0.110	0.000	0.755	0.333	1.820	0.294	0.060	0.203	0.897	0.066	0.252
5	1.850	1.369	0.276	0.176	0.121	0.078	0.998	0.414	1.739	0.238	0.054	0.173	1.058	0.077	0.213
6	1.845	2.080	0.259	0.176	0.222	0.061	0.966	0.273	2.353	0.280	0.300	0.185	1.128	0.157	0.142
7	1.917	4.412	0.255	0.089	0.229	0.059	1.057	0.234	2.379	0.265	0.022	0.247	1.299	0.052	0.230
8	1.459	1.852	0.277	0.361	0.248	0.154	0.906	0.293	3.503	0.317	0.227	0.346	2.000	0.690	0.213
9	2.032	2.544	0.486	0.332	0.164	0.163	1.264	0.343	3.708	0.466	0.422	0.260	2.089	0.149	0.187
10	2.442	3.228	0.373	0.205	0.068	0.103	1.331	0.357	2.726	0.529	0.224	0.224	0.977	0.088	0.122
11	1.342	3.612	0.248	0.137	0.115	0.076	0.689	0.157	2.032	0.190	0.153	0.311	0.742	0.031	0.193
12	1.934	2.152	0.545	0.349	0.232	0.137	1.090	0.348	3.948	0.313	0.160	0.225	1.711	0.123	0.161
13	1.749	1.973	0.127	0.000	0.313	0.023	0.643	0.168	1.500	0.109	0.237	0.277	0.070	0.043	0.132
14	1.717	2.010	0.374	0.294	0.213	0.110	0.901	0.310	2.677	0.363	0.373	0.415	0.813	0.091	0.163
15	1.413	1.676	0.462	0.324	0.087	0.156	0.864	0.277	3.201	0.311	0.145	0.307	1.635	0.122	0.174
16	1.698	2.052	0.415	0.323	0.186	0.084	0.621	0.188	2.682	0.241	0.376	0.394	0.909	0.064	0.142
17	3.116	1.612	0.297	0.307	0.491	0.194	1.997	0.374	2.902	0.136	0.791	0.333	2.313	0.589	0.107
18	4.205	1.432	0.326	0.197	0.344	0.074	2.722	0.841	3.407	0.154	0.986	0.434	0.971	0.200	0.159
19	3.832	1.116	0.485	0.268	0.319	0.084	2.292	0.399	1.893	1.016	2.546	0.424	1.310	0.100	0.095
20	1.447	1.890	0.234	0.147	0.166	0.059	0.767	0.318	2.063	0.276	0.150	0.255	0.735	0.045	0.143
21	3.804	9.922	0.320	0.138	0.098	0.000	2.526	0.207	5.996	0.307	0.111	1.407	0.627	0.041	0.177
22	1.786	2.765	0.568	0.745	0.304	0.271	1.056	0.340	3.393	0.475	0.247	0.321	2.629	0.834	0.149
23	2.825	1.483	0.242	0.172	0.223	0.034	1.380	0.439	1.304	0.199	0.253	0.129	0.381	0.025	0.154

24	1.548	2.597	0.316	0.229	0.103	0.117	0.639	0.237	1.812	0.247	0.103	0.166	1.370	0.037	0.148
25	2.035	0.910	0.292	0.186	0.114	0.065	1.170	0.456	1.686	0.173	0.051	0.097	0.757	0.069	0.170
26	1.303	1.611	0.185	0.111	0.385	0.031	0.430	0.102	1.322	0.077	0.441	0.349	0.613	0.026	0.067
27	1.995	2.418	0.468	0.317	0.209	0.138	0.746	0.167	2.797	0.165	0.378	0.410	1.812	0.069	0.190
28	1.696	1.650	0.229	0.084	0.103	0.039	0.970	0.317	2.046	0.374	0.797	0.184	1.024	0.072	0.118
29	1.659	2.003	0.261	0.126	0.191	0.077	0.920	0.252	2.230	0.282	0.236	0.204	0.712	0.050	0.158
30	1.506	1.784	0.267	0.272	0.257	0.143	0.776	0.243	2.334	0.255	0.332	0.371	1.746	0.355	0.137
31	5.048	0.766	0.434	0.400	0.318	0.142	5.539	3.092	5.249	0.843	0.391	0.684	1.308	0.649	0.110
32	1.386	3.209	0.256	0.141	0.131	0.053	0.755	0.177	1.717	0.191	0.000	0.173	0.617	0.025	0.189
33	1.146	1.480	0.319	0.197	0.083	0.097	0.698	0.219	2.658	0.255	0.139	0.252	1.077	0.102	0.160
34	1.236	1.585	0.218	0.172	0.118	0.081	0.754	0.197	2.359	0.261	0.257	0.134	1.018	0.180	0.094
35	1.190	3.193	0.253	0.245	0.112	0.124	0.615	0.137	1.812	0.164	0.128	0.287	1.718	0.240	0.177
36	1.894	2.103	0.624	0.552	0.290	0.205	1.069	0.345	3.745	0.303	0.145	0.232	2.559	0.800	0.189
37	1.520	1.762	0.190	0.031	0.287	0.011	0.566	0.151	1.306	0.119	0.248	0.239	0.795	0.038	0.120
38	1.440	1.696	0.280	0.176	0.197	0.089	0.747	0.247	2.225	0.300	0.294	0.334	0.994	0.061	0.125
39	1.698	2.006	0.362	0.234	0.128	0.089	1.026	0.321	3.799	0.372	0.175	0.287	1.395	0.240	0.204
40	1.748	2.091	0.275	0.095	0.190	0.072	0.633	0.140	2.563	0.106	0.367	0.368	1.525	0.082	0.156
41	2.834	1.462	0.285	0.352	0.476	0.148	1.739	0.325	2.586	0.146	0.742	0.311	2.172	0.668	0.140
42	3.071	1.072	0.336	0.251	0.252	0.106	1.940	0.591	2.481	0.112	0.760	0.325	1.539	0.135	0.107
43	1.596	2.019	0.232	0.162	0.182	0.081	0.818	0.338	2.196	0.311	0.208	0.300	0.801	0.070	0.187
44	3.128	8.067	0.359	0.229	0.075	0.018	2.023	0.160	4.909	0.239	0.219	1.110	1.045	0.062	0.201
45	1.062	1.589	0.064	0.000	0.097	0.024	0.599	0.168	1.972	0.251	0.116	0.185	0.000	0.045	0.083
46	1.316	2.211	0.222	0.174	0.076	0.064	0.551	0.193	1.553	0.206	0.089	0.140	0.469	0.030	0.131

Table S1 Continue

Sample	Peak no.														
no.	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
1	0.335	0.543	1.005	1.641	1.014	1.548	0.267	1.962	0.542	0.184	0.001	12.433	0.738	0.051	0.348
2	0.316	0.320	0.649	1.448	1.324	1.017	0.166	1.289	0.359	0.141	0.000	8.760	0.523	0.473	0.306
3	0.345	0.362	0.709	1.672	1.257	1.140	0.311	1.357	0.415	0.125	0.001	9.174	0.580	0.577	0.368
4	0.270	0.521	0.832	0.497	0.768	1.288	0.300	1.515	0.441	0.209	0.001	8.258	0.656	0.095	0.171
5	0.220	0.404	0.974	0.652	0.937	0.999	0.233	1.217	0.413	0.190	0.000	7.284	0.567	0.126	0.221
6	0.333	0.324	0.589	0.964	0.505	0.914	0.177	1.275	0.335	0.105	0.000	8.219	0.515	0.263	0.319
7	0.159	0.480	1.169	0.753	0.972	0.496	0.192	1.653	0.365	0.090	0.000	9.797	0.316	0.096	0.270
8	0.262	0.496	0.709	1.581	1.598	1.199	0.286	1.627	0.483	0.213	0.000	8.925	0.676	2.048	0.320
9	0.411	0.433	0.823	1.741	0.970	1.245	0.227	1.628	0.440	0.145	0.001	11.161	0.659	0.046	0.414
10	0.187	0.424	0.696	0.710	0.859	1.280	0.220	1.702	0.425	0.131	0.001	12.557	0.636	0.063	0.427
11	0.210	0.406	0.829	0.530	0.627	0.505	0.204	1.706	0.307	0.052	0.000	8.013	0.371	0.101	0.227
12	0.329	0.439	0.826	1.642	0.808	1.269	0.272	1.666	0.559	0.230	0.001	9.702	0.660	0.106	0.317
13	0.306	0.306	0.675	0.111	0.000	0.959	0.141	1.178	0.339	0.092	0.000	8.766	0.461	0.000	0.288
14	0.326	0.384	0.749	0.652	0.698	1.143	0.272	1.401	0.408	0.127	0.001	9.932	0.588	0.152	0.339
15	0.164	0.411	0.669	1.404	0.611	1.024	0.257	1.398	0.447	0.180	0.000	8.142	0.565	0.049	0.271
16	0.368	0.461	0.662	0.715	0.714	1.328	0.225	1.500	0.411	0.129	0.000	9.776	0.633	0.152	0.376
17	0.484	0.217	0.633	1.918	1.487	0.841	0.252	1.335	0.417	0.079	0.001	11.922	0.557	1.377	0.160
18	0.607	0.205	0.603	0.835	0.760	1.541	0.363	1.288	0.546	0.160	0.001	13.904	0.566	0.487	0.518
19	1.100	0.072	0.445	0.864	0.544	0.533	0.257	1.296	0.399	0.158	0.001	14.307	0.522	0.048	0.543
20	0.281	0.371	0.676	0.554	0.486	0.938	0.269	1.308	0.376	0.130	0.001	7.631	0.553	0.130	0.185
21	0.276	0.329	1.138	0.578	0.559	0.151	0.613	4.131	0.509	0.120	0.001	23.670	0.229	0.142	0.406
22	0.333	0.465	0.660	2.407	1.594	1.290	0.254	1.800	0.440	0.172	0.000	10.994	0.738	1.997	0.513
23	0.300	0.314	0.846	0.421	0.147	1.043	0.140	1.311	0.434	0.206	0.001	9.159	0.532	0.090	0.152

24	0.180	0.437	0.803	1.169	0.587	1.213	0.181	1.398	0.437	0.145	0.000	9.572	0.550	0.000	0.229
25	0.219	0.272	0.896	0.585	0.595	0.715	0.173	0.977	0.336	0.206	0.000	6.016	0.469	0.127	0.176
26	0.311	0.190	0.317	0.687	0.243	0.669	0.185	0.992	0.270	0.064	0.000	7.326	0.402	0.107	0.214
27	0.385	0.445	0.731	1.654	0.868	1.397	0.251	1.785	0.480	0.140	0.001	11.596	0.653	0.104	0.490
28	0.351	0.320	0.593	0.471	0.940	0.786	0.237	1.105	0.304	0.109	0.000	7.620	0.456	0.113	0.225
29	0.245	0.371	0.709	0.584	0.481	1.096	0.232	1.375	0.415	0.145	0.000	8.717	0.541	0.101	0.268
30	0.324	0.313	0.626	1.385	1.354	1.006	0.264	1.179	0.338	0.107	0.000	8.170	0.506	0.833	0.327
31	0.302	0.432	0.911	0.837	0.829	2.563	0.595	2.008	0.747	0.197	0.001	25.716	0.641	0.229	1.382
32	0.119	0.328	0.808	0.588	0.473	0.344	0.139	1.146	0.235	0.063	0.000	6.810	0.211	0.067	0.185
33	0.191	0.369	0.540	0.972	0.660	0.905	0.188	1.262	0.364	0.167	0.000	7.031	0.499	0.086	0.245
34	0.266	0.255	0.475	1.025	1.073	0.753	0.182	1.027	0.277	0.101	0.000	6.645	0.454	0.383	0.240
35	0.184	0.353	0.764	1.424	1.076	0.454	0.167	1.523	0.258	0.029	0.000	7.272	0.302	0.488	0.212
36	0.382	0.418	0.840	2.071	1.682	1.276	0.268	1.668	0.541	0.239	0.001	9.842	0.729	2.259	0.335
37	0.264	0.276	0.597	0.455	0.722	0.852	0.137	1.030	0.319	0.082	0.000	7.687	0.485	0.119	0.201
38	0.272	0.319	0.628	0.664	0.834	0.962	0.256	1.190	0.366	0.106	0.001	8.442	0.501	0.127	0.262
39	0.193	0.494	0.851	1.109	0.690	1.282	0.242	1.800	0.525	0.255	0.001	10.223	0.729	0.332	0.331
40	0.364	0.472	0.680	0.790	1.078	1.349	0.257	1.532	0.448	0.127	0.000	9.877	0.644	0.155	0.376
41	0.487	0.226	0.629	1.683	1.488	0.802	0.285	1.286	0.426	0.092	0.001	10.639	0.534	2.091	0.174
42	0.411	0.144	0.420	1.272	0.641	1.072	0.243	0.904	0.364	0.104	0.001	9.847	0.180	0.259	0.339
43	0.320	0.429	0.762	0.547	0.642	1.057	0.348	1.450	0.429	0.143	0.001	8.402	0.613	0.140	0.196
44	0.210	0.292	0.972	1.030	0.414	0.099	0.505	3.503	0.465	0.093	0.001	19.965	0.165	0.109	0.384
45	0.174	0.276	0.372	0.059	0.024	0.741	0.165	0.989	0.251	0.113	0.000	6.236	0.366	0.026	0.287
46	0.147	0.387	0.703	0.384	0.494	1.044	0.192	1.240	0.396	0.132	0.000	8.247	0.508	0.088	0.192

Table S1 Continue

Sample	Peak no.														
no.	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45
1	2.422	0.761	0.190	0.284	0.779	0.422	0.458	0.211	1.366	0.229	1.835	0.135	0.159	0.187	0.593
2	1.721	0.785	0.266	0.299	0.793	0.670	0.503	0.173	1.494	0.218	2.217	0.133	0.160	0.206	0.646
3	1.852	0.606	0.323	0.249	0.650	0.555	0.436	0.165	1.355	0.182	1.567	0.124	0.134	0.189	0.511
4	1.587	0.224	0.156	0.419	1.034	0.198	0.326	0.169	0.665	0.276	1.329	0.159	0.139	0.148	0.664
5	1.536	0.198	0.319	0.283	0.862	0.338	0.246	0.186	0.595	0.228	1.221	0.155	0.131	0.165	0.628
6	1.650	0.653	0.207	0.255	0.713	0.564	0.442	0.189	1.553	0.191	1.842	0.128	0.134	0.161	0.546
7	0.844	0.357	0.195	0.511	0.798	0.380	0.592	0.269	0.653	0.223	1.042	0.180	0.928	0.191	0.636
8	1.694	0.280	0.191	0.273	0.721	0.291	0.296	0.110	0.679	0.184	1.033	0.071	0.168	0.107	0.444
9	2.279	0.386	0.217	0.232	0.620	0.468	0.340	0.133	1.613	0.175	1.448	0.161	0.136	0.173	0.427
10	2.411	0.429	0.100	0.150	0.414	0.291	0.140	0.092	0.915	0.086	0.808	0.083	0.143	0.085	0.269
11	0.816	0.386	0.078	0.372	0.412	0.190	0.378	0.191	0.542	0.126	0.626	0.084	0.400	0.104	0.341
12	1.872	0.431	0.168	0.282	0.894	0.288	0.475	0.207	1.208	0.274	1.650	0.144	0.218	0.159	0.616
13	1.760	0.656	0.245	0.269	0.837	0.611	0.614	0.086	1.748	0.245	2.584	0.175	0.193	0.188	0.723
14	1.965	0.559	0.292	0.271	0.700	0.581	0.542	0.202	1.426	0.219	1.815	0.123	0.159	0.204	0.644
15	1.558	0.279	0.140	0.205	0.536	0.281	0.240	0.168	0.579	0.160	0.768	0.056	0.148	0.154	0.388
16	2.015	0.450	0.247	0.218	0.688	0.526	0.492	0.203	1.405	0.189	1.592	0.141	0.145	0.156	0.508
17	2.452	0.563	0.221	0.072	0.717	0.344	0.390	0.081	3.122	0.117	2.184	0.232	0.057	0.091	0.303
18	2.950	0.690	0.260	0.168	0.262	0.875	1.604	0.404	3.519	0.240	0.648	0.519	0.183	0.317	0.146
19	2.880	1.183	0.313	0.249	0.443	0.768	0.267	0.414	5.275	0.053	0.506	0.323	0.030	0.000	0.016
20	1.506	0.342	0.126	0.376	1.049	0.308	0.590	0.235	1.179	0.310	1.713	0.231	0.147	0.155	0.908
21	0.302	0.719	0.123	1.407	1.320	0.450	1.091	0.525	0.301	0.149	0.549	0.122	0.614	0.124	0.494
22	2.108	0.439	0.158	0.289	0.748	0.505	0.463	0.153	1.289	0.198	1.683	0.124	0.147	0.131	0.584
23	1.963	0.462	0.182	0.396	1.398	0.349	0.419	0.203	1.524	0.325	1.908	0.276	0.139	0.114	0.787

24	1.835	0.189	0.081	0.301	0.722	0.171	0.314	0.182	0.534	0.213	1.133	0.094	0.122	0.129	0.553
25	1.281	0.272	0.261	0.241	0.931	0.450	0.381	0.167	0.764	0.274	1.186	0.166	0.120	0.129	0.644
26	1.492	0.896	0.346	0.200	0.718	0.742	0.553	0.184	2.635	0.175	3.372	0.233	0.207	0.252	0.599
27	2.404	0.351	0.365	0.256	0.644	0.643	0.404	0.250	1.430	0.206	1.457	0.134	0.140	0.211	0.503
28	1.595	0.104	0.121	0.212	0.624	0.301	0.317	0.109	1.752	0.162	0.903	0.254	0.088	0.088	0.342
29	1.693	0.513	0.130	0.214	0.607	0.309	0.342	0.145	0.965	0.160	1.410	0.101	0.137	0.127	0.431
30	1.650	0.506	0.292	0.214	0.519	0.485	0.380	0.118	1.201	0.159	1.395	0.113	0.120	0.167	0.459
31	5.395	0.416	0.237	0.151	0.624	1.300	0.079	0.067	0.680	0.105	0.126	0.103	0.126	0.248	0.132
32	0.591	0.258	0.127	0.373	0.582	0.279	0.436	0.199	0.453	0.154	0.723	0.111	0.625	0.090	0.399
33	1.327	0.193	0.170	0.217	0.557	0.233	0.225	0.112	0.427	0.165	0.842	0.059	0.140	0.117	0.391
34	1.385	0.277	0.153	0.158	0.458	0.340	0.248	0.065	1.110	0.118	1.025	0.092	0.062	0.100	0.293
35	0.744	0.336	0.069	0.321	0.365	0.157	0.327	0.154	0.458	0.107	0.521	0.068	0.322	0.098	0.286
36	1.903	0.438	0.174	0.277	1.039	0.301	0.518	0.179	1.225	0.266	1.751	0.152	0.215	0.130	0.651
37	1.561	0.537	0.205	0.215	0.726	0.498	0.532	0.170	1.482	0.212	2.121	0.146	0.167	0.166	0.580
38	1.679	0.473	0.256	0.228	0.609	0.489	0.490	0.204	1.209	0.193	1.580	0.107	0.137	0.178	0.535
39	1.934	0.303	0.178	0.252	0.643	0.349	0.317	0.210	0.657	0.177	0.927	0.072	0.152	0.120	0.471
40	2.027	0.461	0.248	0.204	0.676	0.508	0.470	0.211	1.345	0.190	1.475	0.130	0.133	0.170	0.456
41	2.388	0.657	0.323	0.099	0.771	0.386	0.389	0.071	2.980	0.118	2.144	0.243	0.054	0.098	0.322
42	2.198	0.136	0.339	0.020	0.216	0.819	0.057	0.202	1.727	0.110	0.258	0.151	0.056	0.108	0.071
43	1.661	0.387	0.139	0.400	1.133	0.321	0.611	0.260	1.241	0.329	1.831	0.240	0.150	0.177	0.973
44	0.252	0.629	0.108	1.052	1.097	0.339	0.869	0.382	0.228	0.113	0.400	0.083	0.447	0.101	0.383
45	1.201	0.260	0.068	0.157	0.437	0.290	0.287	0.049	0.762	0.112	0.984	0.061	0.085	0.075	0.335
46	1.568	0.191	0.056	0.250	0.607	0.139	0.264	0.131	0.416	0.158	0.908	0.077	0.115	0.084	0.445