

LEAVE-ONE-OUT SENSITIVITY ANALYSIS

	OLC_AUC	ODS_AUC
Omitted data	R²	R²
d1	0.46	0.35
d2	0.38	0.07
d3	0.50	0.26
d4	0.33	0.23
d5	0.34	0.16
d6	0.61	0.40

	OLC_Cmax	ODS_Cmax
Omitted data	R²	R²
d1	0.413	0.29
d2	0.0002*	0.13
d3	0.26	0.06
d4	0.12	0.05
d5	0.14	0.01
d6	0.48	0.21

	OLC_BBB	ODS_BBB
Omitted data	R²	R²
d1	0.29	0.20
d2	0.53	0.23
d3	0.90	0.71
d4	0.27	0.22
d5	0.26	0.16
d6	0.43	0.33

	OLC_HIA	ODS_HIA
Omitted data	R²	R²
d1	0.71	0.69
d2	0.88	0.54
d3	0.56	0.37
d4	0.54	0.49
d5	0.55	0.33
d6	0.55	0.27

	OLC_PPB	ODS_PPB
Omitted data	R²	R²
d1	0.36	0.21
d2	0.54	0.32
d3	0.86	0.60
d4	0.35	0.30
d5	0.41	0.26
d6	0.59	0.44

Values on OLC were consistently higher than those on ODS, except for omission of d2 for OLC_Cmax (see *).