

Table S1. The results of Y-scrambling for Model 1A built with multilinear regression (MLR) based on the training set and test set split by SOM. 50 random shuffles of the Y-vector gave r values in the ranges of 0.002-0.345.

No.	r	No.	r
1	0.338	26	0.215
2	0.033	27	0.159
3	0.232	28	0.202
4	0.029	29	0.183
5	0.029	30	0.021
6	0.061	31	0.085
7	0.088	32	0.033
8	0.194	33	0.055
9	0.062	34	0.237
10	0.188	35	0.167
11	0.110	36	0.113
12	0.131	37	0.072
13	0.222	38	0.270
14	0.171	39	0.345
15	0.204	40	0.098
16	0.096	41	0.002
17	0.241	42	0.090
18	0.249	43	0.148
19	0.293	44	0.002
20	0.079	45	0.072
21	0.139	46	0.041
22	0.114	47	0.057
23	0.111	48	0.097
24	0.063	49	0.344
25	0.069	50	0.065

Table S2. The results of Y-scrambling for Model 2a built with multilinear regression (MLR) based on the training set and test set split randomly. 50 random shuffles of the Y-vector gave r values in the ranges of 0.015-0.413.

No.	r	No.	r
1	0.235	26	0.217
2	0.204	27	0.044
3	0.313	28	0.170
4	0.345	29	0.323
5	0.213	30	0.371
6	0.129	31	0.368
7	0.201	32	0.327
8	0.279	33	0.060
9	0.137	34	0.171
10	0.326	35	0.112
11	0.123	36	0.247
12	0.211	37	0.223
13	0.173	38	0.164
14	0.024	39	0.303
15	0.178	40	0.413
16	0.015	41	0.098
17	0.401	42	0.269
18	0.293	43	0.269
19	0.153	44	0.017
20	0.042	45	0.154
21	0.065	46	0.328
22	0.111	47	0.042
23	0.122	48	0.183
24	0.158	49	0.086
25	0.410	50	0.053

Table S3. The results of Y-scrambling for Model 1B built with support vector machine (SVM) based on the training set and test set split by SOM. 50 random shuffles of the Y-vector gave R values in the ranges of 0.148-0.227.

No.	R	No.	R
1	0.177	26	0.173
2	0.168	27	0.169
3	0.177	28	0.175
4	0.227	29	0.188
5	0.182	30	0.171
6	0.173	31	0.185
7	0.161	32	0.168
8	0.203	33	0.184
9	0.175	34	0.173
10	0.181	35	0.166
11	0.179	36	0.173
12	0.161	37	0.183
13	0.167	38	0.188
14	0.188	39	0.155
15	0.188	40	0.175
16	0.171	41	0.181
17	0.169	42	0.165
18	0.170	43	0.148
19	0.166	44	0.179
20	0.175	45	0.162
21	0.162	46	0.155
22	0.155	47	0.187
23	0.168	48	0.159
24	0.158	49	0.166
25	0.182	50	0.171

Table S4. The results of Y-scrambling for Model 2B built with support vector machine (SVM) based on the training set and test set split randomly. 50 random shuffles of the Y-vector gave R values in the ranges of 0.167-0.208.

No.	R	No.	R
1	0.194	26	0.193
2	0.186	27	0.193
3	0.186	28	0.171
4	0.191	29	0.180
5	0.185	30	0.183
6	0.171	31	0.191
7	0.191	32	0.167
8	0.182	33	0.201
9	0.180	34	0.203
10	0.174	35	0.184
11	0.202	36	0.194
12	0.199	37	0.174
13	0.195	38	0.182
14	0.189	39	0.181
15	0.208	40	0.179
16	0.183	41	0.184
17	0.192	42	0.171
18	0.182	43	0.175
19	0.182	44	0.185
20	0.193	45	0.189
21	0.171	46	0.193
22	0.189	47	0.185
23	0.181	48	0.181
24	0.178	49	0.180
25	0.186	50	0.183