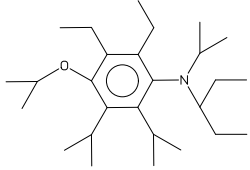
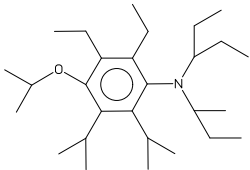
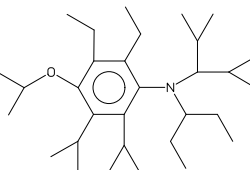
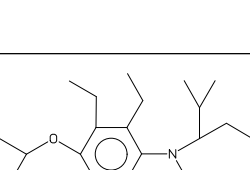
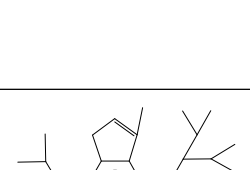


Table 9: GENSMI Structures, Approx. Mass 400-500, Top and Worst Similarities to WDI 03.4

SMILES	Branching	Complexity	Cyclization	Mass	History	Similarity
	2.71	32.1	1	403	S(Nc1ccc(O)cc1).N1(6/1).N1(6/1).N3(6/1).N4(6/1).N6(6/1).N7(6/1).N8(6/1).N9(6/1).N9(6/1).N10(6/1).N10(6/1).N11(6/1).N11(6/1).N12(6/1).N12(6/1).N13(6/1).N13(6/1).N14(6/1).N15(6/1).N16(6/1).N17(6/1).	0.7405
	2.67	32.8	1	417	S(Nc1ccc(O)cc1).N1(6/1).N1(6/1).N3(6/1).N4(6/1).N6(6/1).N7(6/1).N8(6/1).N9(6/1).N9(6/1).N10(6/1).N10(6/1).N11(6/1).N11(6/1).N12(6/1).N12(6/1).N13(6/1).N13(6/1).N14(6/1).N15(6/1).N16(6/1).N17(6/1).N18(6/1).	0.7366
	2.74	36.3	1	459	S(Nc1ccc(O)cc1).N1(6/1).N1(6/1).N3(6/1).N4(6/1).N6(6/1).N7(6/1).N8(6/1).N9(6/1).N9(6/1).N10(6/1).N10(6/1).N11(6/1).N11(6/1).N12(6/1).N12(6/1).N13(6/1).N13(6/1).N14(6/1).N15(6/1).N16(6/1).N17(6/1).N18(6/1).N18(6/1).N19(6/1).N19(6/1).	0.7326
	2.68	34.9	1	445	S(Nc1ccc(O)cc1).N1(6/1).N1(6/1).N3(6/1).N4(6/1).N6(6/1).N7(6/1).N8(6/1).N9(6/1).N9(6/1).N10(6/1).N10(6/1).N11(6/1).N11(6/1).N12(6/1).N12(6/1).N13(6/1).N13(6/1).N14(6/1).N15(6/1).N16(6/1).N17(6/1).N18(6/1).N18(6/1).N19(6/1).	0.7326
	2.68	70.2	1.38	494	S(Nc1ccc(O)cc1).N1(6/1).N1(6/1).N3(6/1).N4(6/1).N6(6/1).N7(6/1).N8(6/1).N9(6/1).N9(6/1).N10(6/1).N10(6/1).N11(6/1).N11(6/1).N12(6/1).N12(6/1).N13(6/1).N13(6/1).N14(6/1).N15(6/1).N16(6/1).N17(6/1).N18(6/1).N18(6/1).N19(6/1).N19(6/1).N20(6/1).N20(8/1).N21(7/2).E15=26.E21-22.E34-36.	0.3895