

**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 0.157-0.332.

No.	R	No.	R
1	0.176	26	0.231
2	0.191	27	0.207
3	0.225	28	0.255
4	0.218	29	0.233
5	0.243	30	0.273
6	0.206	31	0.313
7	0.235	32	0.252
8	0.163	33	0.239
9	0.332	34	0.196
10	0.273	35	0.212
11	0.297	36	0.197
12	0.278	37	0.252
13	0.209	38	0.252
14	0.242	39	0.298
15	0.218	40	0.250
16	0.245	41	0.170
17	0.305	42	0.327
18	0.242	43	0.190
19	0.157	44	0.221
20	0.240	45	0.197
21	0.225	46	0.251
22	0.190	47	0.247
23	0.232	48	0.292
24	0.247	49	0.206
25	0.246	50	0.229

**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 0.162-0.272.

No.	R	No.	R
1	0.242	26	0.204
2	0.213	27	0.239
3	0.257	28	0.248
4	0.191	29	0.225
5	0.286	30	0.240
6	0.226	31	0.223
7	0.216	32	0.208
8	0.162	33	0.219
9	0.235	34	0.230
10	0.266	35	0.213
11	0.208	36	0.267
12	0.222	37	0.210
13	0.221	38	0.272
14	0.272	39	0.240
15	0.201	40	0.234
16	0.197	41	0.213
17	0.241	42	0.205
18	0.234	43	0.212
19	0.226	44	0.261
20	0.242	45	0.189
21	0.165	46	0.212
22	0.205	47	0.244
23	0.206	48	0.264
24	0.232	49	0.263
25	0.221	50	0.235

**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 0.012-0.354.

No.	R	No.	R
1	0.037	26	0.057
2	0.035	27	0.195
3	0.131	28	0.082
4	0.097	29	0.075
5	0.292	30	0.119
6	0.122	31	0.294
7	0.039	32	0.082
8	0.043	33	0.030
9	0.037	34	0.195
10	0.115	35	0.123
11	0.115	36	0.128
12	0.091	37	0.138
13	0.028	38	0.077
14	0.177	39	0.057
15	0.208	40	0.053
16	0.159	41	0.048
17	0.159	42	0.018
18	0.262	43	0.036
19	0.211	44	0.049
20	0.183	45	0.050
21	0.042	46	0.086
22	0.087	47	0.354
23	0.126	48	0.046
24	0.034	49	0.181
25	0.012	50	0.109

**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 0.002-0.374.

No.	R	No.	R
1	0.171	26	0.142
2	0.159	27	0.260
3	0.111	28	0.075
4	0.027	29	0.117
5	0.176	30	0.073
6	0.005	31	0.015
7	0.095	32	0.045
8	0.339	33	0.112
9	0.028	34	0.038
10	0.224	35	0.017
11	0.182	36	0.226
12	0.297	37	0.076
13	0.128	38	0.095
14	0.109	39	0.352
15	0.067	40	0.026
16	0.002	41	0.220
17	0.182	42	0.374
18	0.152	43	0.043
19	0.046	44	0.013
20	0.202	45	0.116
21	0.122	46	0.088
22	0.058	47	0.016
23	0.194	48	0.083
24	0.177	49	0.304
25	0.077	50	0.080