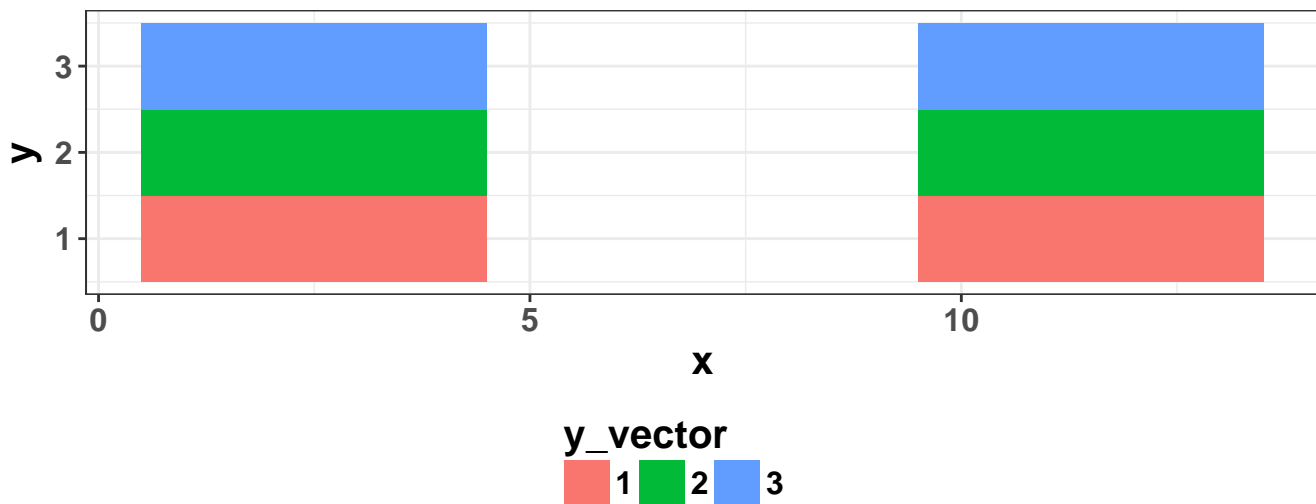


PLS for file:

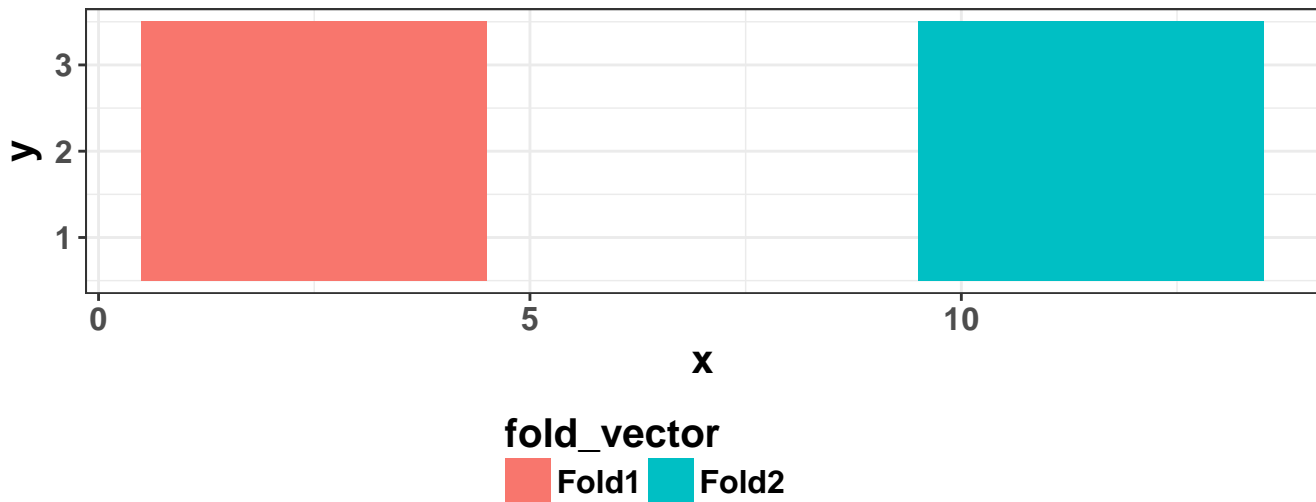
testfile_squares.rdata

properties	values
Number of mz features	2718
Range of mz values	900 – 999.98
Number of pixels	24
Range of x coordinates	1 – 13
Range of y coordinates	1 – 3
Range of intensities	0 – 168
Median of intensities	3
Intensities > 0	98.75 %
Number of empty spectra	0
Preprocessing	
Normalization	FALSE
Smoothing	FALSE
Baseline reduction	FALSE
Peak picking	FALSE
Centroided	FALSE

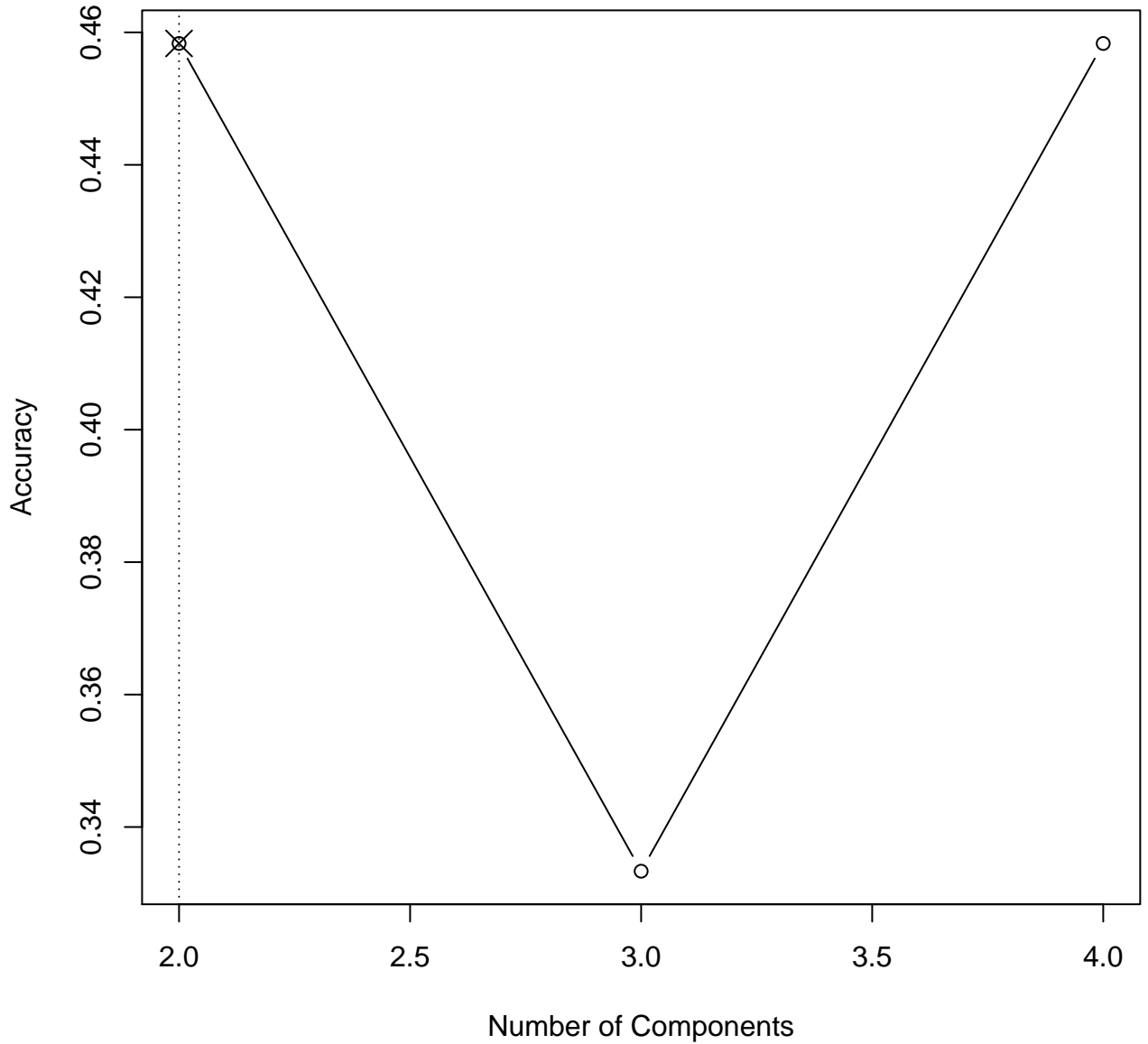
Distribution of the response variable y

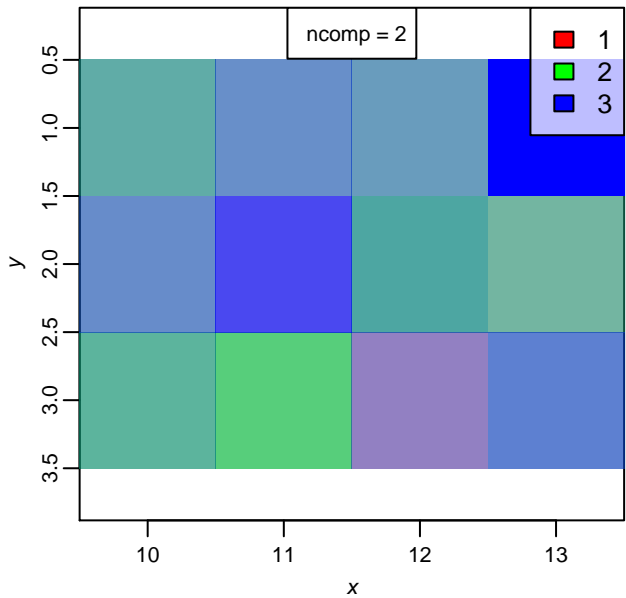
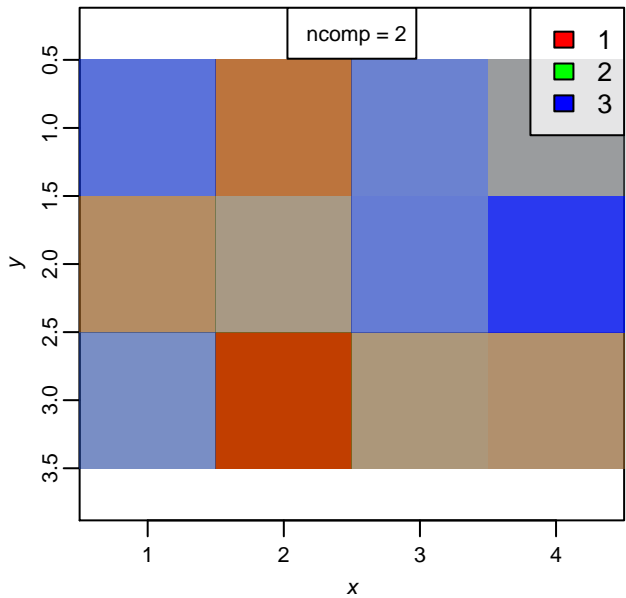


Distribution of the fold variable



Accuracy of PLS classification





Summary for the different components

V1	1	2	3
ncomp = 2			
Accuracy	0.4583333333333333	0.5416666666666667	0.6666666666666667
Sensitivity	0.5	0.5	0
Specificity	0.4375	0.5625	1
FDR	0.69047619047619	0.6333333333333333	NaN
ncomp = 3			
Accuracy	0.3333333333333333	0.5833333333333333	0.6666666666666667
Sensitivity	0.625	0.25	0
Specificity	0.1875	0.75	1
FDR	0.725	0.75	NaN
ncomp = 4			
Accuracy	0.4583333333333333	0.4583333333333333	0.6666666666666667
Sensitivity	0.5	0.375	0
Specificity	0.4375	0.5	1
FDR	0.6833333333333333	0.8333333333333333	NaN