

This table shows the class assignment probabilities for each sample obtained in PLS-DA models

Sample	Microbial genera		NMR metabolites	
	kIBS prob	kHLT prob	kIBS prob	kHLT prob
kIBS01	0.17	0.83	0.68	0.32
kIBS02	0.99	0.01	0.48	0.52
kIBS03	0.66	0.34	0.10	0.90
kIBS04	1.00	0.00	0.85	0.15
kIBS05	0.69	0.31	0.59	0.41
kIBS06	0.95	0.05	0.60	0.40
kIBS07	1.00	0.00	0.75	0.25
kIBS08	0.49	0.51	0.76	0.24
kIBS09	0.12	0.88	0.47	0.53
kIBS10	0.73	0.27	0.46	0.54
kIBS11	0.28	0.72	0.84	0.16
kIBS12	0.98	0.02	0.71	0.29
kIBS13	0.38	0.62	0.88	0.12
kIBS14	0.26	0.74	0.70	0.30
kIBS15	0.99	0.01	0.80	0.20
kIBS16	0.96	0.04	0.70	0.30
kIBS17	1.00	0.00	0.41	0.59
kIBS18	0.97	0.03	0.88	0.12
kIBS19	0.55	0.45	0.78	0.22
kIBS20	0.99	0.01	0.81	0.19
kIBS21	0.99	0.01	0.84	0.16
kIBS22	0.99	0.01	0.69	0.31
kHLT01	0.19	0.81	0.35	0.65
kHLT02	0.06	0.94	0.01	0.99
kHLT03	0.57	0.43	0.28	0.72
kHLT04	0.22	0.78	0.88	0.12
kHLT05	0.25	0.75	0.88	0.12
kHLT06	0.07	0.93	0.12	0.88
kHLT07	0.18	0.82	0.00	1.00
kHLT08	0.11	0.89	0.06	0.94
kHLT09	0.58	0.42	0.13	0.87
kHLT10	0.18	0.82	0.18	0.82
kHLT11	0.20	0.80	0.11	0.89
kHLT12	0.30	0.70	0.27	0.73
kHLT13	0.07	0.93	0.35	0.65
kHLT14	0.39	0.61	0.36	0.64
kHLT15	0.11	0.89	0.06	0.94
kHLT16	0.16	0.84	0.55	0.45
kHLT17	0.30	0.70	0.34	0.66
kHLT18	0.08	0.92	0.21	0.79
kHLT19	0.84	0.16	0.33	0.67
kHLT20	0.07	0.93	0.19	0.81
kHLT21	0.27	0.73	0.41	0.59
kHLT22	0.29	0.71	0.19	0.81

Microbial phylotypes		NMR bins	
kIBS prob	kHLT prob	kIBS prob	kHLT prob
0.66	0.34	0.99	0.01
0.56	0.44	0.62	0.38
0.91	0.09	0.39	0.61
0.99	0.01	0.17	0.83
0.50	0.50	0.60	0.40
0.48	0.52	0.62	0.38
0.98	0.02	0.57	0.43
0.47	0.53	0.95	0.05
0.54	0.46	0.61	0.39
0.34	0.66	0.63	0.37
0.47	0.53	0.67	0.33
0.72	0.28	0.59	0.41
0.65	0.35	0.96	0.04
0.25	0.75	0.76	0.24
0.78	0.22	0.45	0.55
0.76	0.24	0.63	0.37
0.99	0.01	0.55	0.45
0.97	0.03	0.96	0.04
0.51	0.49	0.59	0.41
0.70	0.30	0.98	0.02
0.75	0.25	0.55	0.45
0.94	0.06	0.80	0.20
0.28	0.72	0.25	0.75
0.04	0.96	0.05	0.95
0.27	0.73	0.20	0.80
0.37	0.63	0.15	0.85
0.84	0.16	0.84	0.16
0.03	0.97	0.06	0.94
0.31	0.69	0.28	0.72
0.24	0.76	0.19	0.81
0.19	0.81	0.09	0.91
0.15	0.85	0.13	0.87
0.46	0.54	0.43	0.57
0.43	0.57	0.65	0.35
0.26	0.74	0.15	0.85
0.51	0.49	0.31	0.69
0.24	0.76	0.16	0.84
0.10	0.90	0.68	0.32
0.45	0.55	0.25	0.75
0.04	0.96	0.15	0.85
0.91	0.09	0.95	0.05
0.13	0.87	0.19	0.81
0.08	0.92	0.26	0.74
0.17	0.83	0.20	0.80