

S9 Table. LipidFrag's improvement of ranks for training MS/MS spectra in negative ion mode.

	FCP- Threshold	LMGP0601	LMSP0201 LMSP0202	LMGP0101 LMGP0201	LMGP0401	LMGP0301	All
Top 1	0	5	140	20	8	9	182
	0.1	5	129	20	9	9	172
	0.2	5	126	20	9	9	169
	0.3	4	125	20	9	9	167
	0.4	4	120	17	9	9	159
	0.5	3	119	14	9	9	154
	0.6	2	118	14	9	8	151
	0.7	2	117	14	9	8	150
	0.8	2	117	14	4	8	145
	0.9	1	105	14	3	8	131
Median Rank	0	2	1	2	2	2	2
	0.1	2	1	2	2	2	2
	0.2	2	1	2	2	2	2
	0.3	2	1	2	2	2	2
	0.4	2	1	2	2	2	2
	0.5	2	1	2	2	2	2
	0.6	2	1	2	2	2	2
	0.7	2	1	2	2	2	2
	0.8	2	1	2	2	2	2
	0.9	2	1	2	2	2	2
Mean Rank	0	2.55	1.28	2.23	1.83	1.75	1.83
	0.1	2.48	1.25	2.24	1.78	1.75	1.82
	0.2	2.42	1.26	2.24	1.78	1.77	1.82
	0.3	2.42	1.24	2.24	1.78	1.77	1.81
	0.4	2.42	1.24	2.27	1.78	1.77	1.82
	0.5	2.40	1.24	2.29	1.78	1.77	1.81
	0.6	2.39	1.24	2.29	1.78	1.77	1.81
	0.7	2.38	1.14	2.30	1.78	1.76	1.79
	0.8	2.34	1.06	2.30	1.89	1.75	1.78
	0.9	2.31	1.00	2.31	1.89	1.74	1.79
Number spectra	0	78	189	128	41	36	472
	0.1	75	170	125	41	36	447
	0.2	73	167	123	41	36	440
	0.3	71	164	121	41	36	433
	0.4	71	158	118	41	36	424
	0.5	68	157	113	41	36	415

	<i>0.6</i>	<i>62</i>	<i>155</i>	<i>112</i>	<i>41</i>	<i>35</i>	<i>405</i>
	<i>0.7</i>	<i>58</i>	<i>136</i>	<i>110</i>	<i>41</i>	<i>35</i>	<i>380</i>
	<i>0.8</i>	<i>56</i>	<i>125</i>	<i>105</i>	<i>35</i>	<i>35</i>	<i>356</i>
	<i>0.9</i>	<i>51</i>	<i>105</i>	<i>103</i>	<i>27</i>	<i>35</i>	<i>321</i>