

## **SUPPLEMENTARY MATERIAL**

**Table S1.** Accuracy values with different hyperparameters of the models created for the prediction of patients and controls.

### **S1.a. Random Forest.**

<b>mtry</b>	<b>min.node.size</b>	<b>Accuracy</b>
3	2	0.5946620
3	3	0.5965035
3	4	0.5853497
3	5	0.5853846
3	10	0.5941026
3	15	0.5953380
3	20	0.5870047
3	30	0.5937413
4	2	0.5914569
4	3	0.5814103
4	4	0.5907459
4	5	0.5814452
4	10	0.5789044
4	15	0.5675874
4	20	0.5792075
4	30	0.5789510
5	2	0.5712587
5	3	0.5858974
5	4	0.5775408
5	5	0.5774126
5	10	0.5740793
5	15	0.5654662
5	20	0.5735198
5	30	0.5720047
7	2	0.5712821
7	3	0.5661072
7	4	0.5726690
7	5	0.5808741
7	10	0.5769580
7	15	0.5674732
7	20	0.5748834
7	30	0.5804662

**Note.** The table shows the accuracy values in the Random Forest model according to the different hyperparameters tested.

mtry= number of the random features. Number of variables randomly sampled as candidates at each split, min.node.size= minimum node size. Minimum size that a node must have in order to be split.

### S1.b. Support Vector Machine

<b>Sigma</b>	<b>C</b>	<b>Accuracy</b>
0.001	1	0.5334732
0.001	20	0.5925408
0.001	50	0.5974126
0.001	100	0.6041841
0.001	200	0.6015152
0.001	500	0.5939860
0.001	700	0.5891375
0.010	1	0.6027156
0.010	20	0.6029254
0.010	50	0.6151515
0.010	100	0.6205828
0.010	200	0.5914103
0.010	500	0.5748019
0.010	700	0.5891375
0.100	1	0.6308858
0.100	20	0.6468765
0.100	50	0.6369580
0.100	100	0.6282984
0.100	200	0.6282984
0.100	500	0.6282984
0.100	700	0.6282984
0.500	1	0.6323310
0.500	20	0.6477855
0.500	50	0.6477855
0.500	100	0.6477855
0.500	200	0.6477855
0.500	500	0.6477855
0.500	700	0.6477855
1.000	1	0.5870862
1.000	20	0.5972378
1.000	50	0.5972378
1.000	100	0.5972378
1.000	200	0.5972378
1.000	500	0.5972378
1.000	700	0.5972378

**Note.** The table shows the accuracy values in the Support Vector Machine model according to the different hyperparameters tested.

Sigma= radial kernel coefficient, C= cost. Penalties for hyperplane margin violations.

### S1.c. Gradient Boosting

Shrinkage	interaction.depth	n.minobsinnode	n.trees	Accuracy
0.001	1	2	500	0.5605245
0.001	1	2	1000	0.5709674
0.001	1	2	2000	0.5655828
0.001	1	5	500	0.5591375
0.001	1	5	1000	0.5679138
0.001	1	5	2000	0.5620746
0.001	1	15	500	0.5306643
0.001	1	15	1000	0.5514336
0.001	1	15	2000	0.5516900
0.001	2	2	500	0.5744289
0.001	2	2	1000	0.5602564
0.001	2	2	2000	0.5576107
0.001	2	5	500	0.5575874
0.001	2	5	1000	0.5688695
0.001	2	5	2000	0.5662471
0.001	2	15	500	0.5606061
0.001	2	15	1000	0.5501515
0.001	2	15	2000	0.5480769
0.010	1	2	500	0.5491841
0.010	1	2	1000	0.5580769
0.010	1	2	2000	0.5537879
0.010	1	5	500	0.5622028
0.010	1	5	1000	0.5666317
0.010	1	5	2000	0.5591142
0.010	1	15	500	0.5501748
0.010	1	15	1000	0.5422494
0.010	1	15	2000	0.5242308
0.010	2	2	500	0.5525408
0.010	2	2	1000	0.5534499
0.010	2	2	2000	0.5288462
0.010	2	5	500	0.5492075
0.010	2	5	1000	0.5445921
0.010	2	5	2000	0.5203380
0.010	2	15	500	0.5461072
0.010	2	15	1000	0.5308974
0.010	2	15	2000	0.5130536
0.100	1	2	500	0.5277156
0.100	1	2	1000	0.5192075
0.100	1	2	2000	0.5175175
0.100	1	5	500	0.5321795
0.100	1	5	1000	0.5258974
0.100	1	5	2000	0.4966200
0.100	1	15	500	0.4956294
0.100	1	15	1000	0.4834615
0.100	1	15	2000	0.4820163
0.100	2	2	500	0.4965734
0.100	2	2	1000	0.5035431
0.100	2	2	2000	0.4974942
0.100	2	5	500	0.4911655
0.100	2	5	1000	0.4824242
0.100	2	5	2000	0.4916200

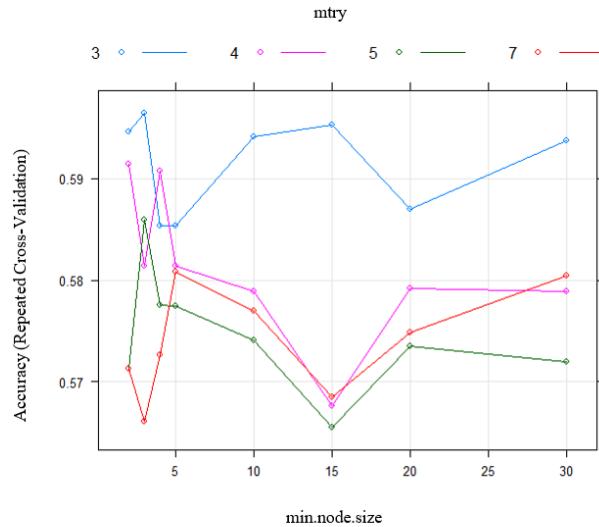
0.100	2	15	500	0.4753030
0.100	2	15	1000	0.4714802
0.100	2	15	2000	0.4714336

**Note.** The table shows the accuracy values in the Gradient Boosting model according to the different hyperparameters tested.

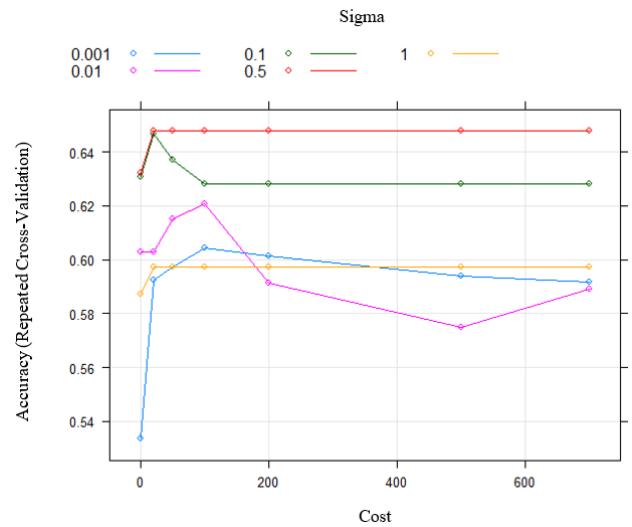
Shrinkage= this parameter, also known as learning rate, controls the influence that each model has on the ensemble as a whole, interaction.depth= maximum nodes per tree, complexity of the trees used as weak learner, in particular, the total number of splits the tree has, n.minobsinnode= number minimum observations in nodes. Minimum number of observations that a node must have in order to be divided, n.trees= number of trees. Number of iterations of the boosting algorithm.

**Figure S1. Accuracy values with different hyperparameters of the models created for the prediction of patients and controls.**

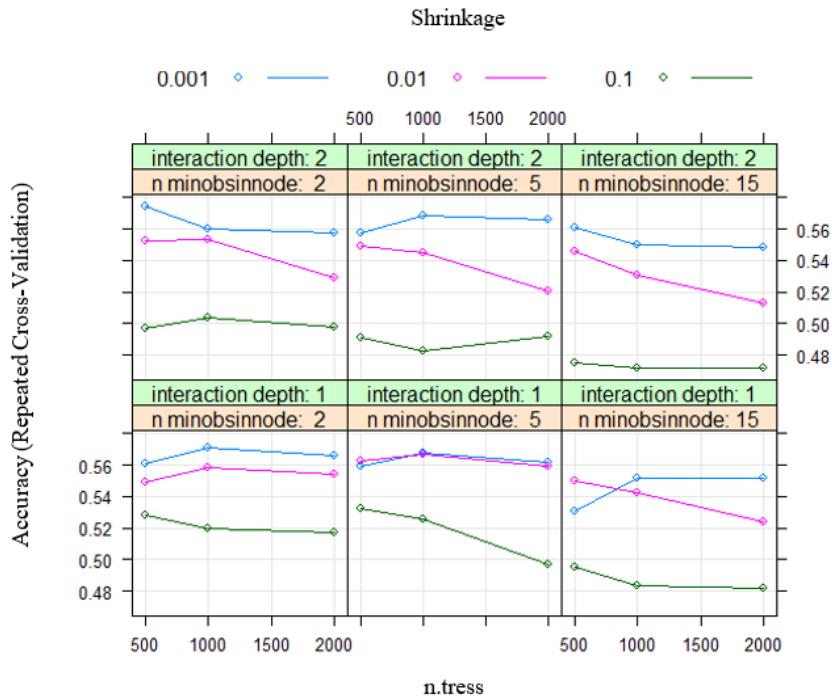
a. Random Forest



b. Support Vector Machine



c. Gradient Boosting



**Note.** Figure S1.a. The x-axis represents the tested values of the `min.node.size` hyperparameter. The y-axis represents the average of the accuracy values of the different replicates of the Cross-Validation. The blue line represents the model average accuracy values when `mtry= 3`. The pink line represents the model average accuracy values when `mtry= 4`. The green line represents the model average accuracy values when `mtry= 5`. The red line represents the model average accuracy values when `mtry= 7`.

mtry= number of the random features. Number of variables randomly sampled as candidates at each split, min.node.size= minimum node size. Minimum size that a node must have in order to be split.

Figure S1.b. The x-axis represents the tested values of the Cost hyperparameter. The y-axis represents the average of the accuracy values of the different replicates of the Cross-Validation. The blue line represents the model average accuracy values when Sigma= 0.001. The pink line represents the model average accuracy values when Sigma= 0. 01. The green line represents the model average accuracy values when Sigma= 0. 1. The red line represents the model average accuracy values when Sigma= 0.5. The red line represents the model average accuracy values when Sigma= 1.

Sigma= radial kernel coefficient, C= cost. Penalties for hyperplane margin violations.

Figure S1.c. The x-axis represents the tested values of the n.trees hyperparameter. The y-axis represents the average of the accuracy values of the different replicates of the Cross-Validation. The blue line represents the model average accuracy values when Shrinkage= 0.001. The pink line represents the model average accuracy values when Shrinkage= 0.01. The green line represents the model average accuracy values when Shrinkage= 0. 1.

Shrinkage= this parameter, also known as learning rate, controls the influence that each model has on the ensemble as a whole, interaction.depth= maximum nodes per tree, complexity of the trees used as weak learner, in particular, the total number of splits the tree has, n.minobsinnode= number minimum observations in nodes. Minimum number of observations that a node must have in order to be divided, n.trees= number of trees. Number of iterations of the boosting algorithm.

**Table S2. Accuracy values 10-fold-cross-validation of the models created for the prediction of patients and controls.**

Resample	Accuracy			
	Logistic Model	Random Forest	SVM	Gradient Boosting
Fold01.Rep1	0.5	0.583333333333333	0.416666666666667	0.583333333333333
Fold01.Rep2	0.615384615384615	0.538461538461538	0.538461538461538	0.461538461538462
Fold01.Rep3	0.545454545454545	0.545454545454545	0.727272727272727	0.454545454545455
Fold01.Rep4	0.538461538461538	0.846153846153846	0.692307692307692	0.692307692307692
Fold01.Rep5	0.416666666666667	0.5	0.75	0.333333333333333
Fold02.Rep1	0.666666666666667	0.833333333333333	0.833333333333333	0.583333333333333
Fold02.Rep2	0.583333333333333	0.5	0.75	0.583333333333333
Fold02.Rep3	0.583333333333333	0.5	0.583333333333333	0.333333333333333
Fold02.Rep4	0.5	0.5	0.583333333333333	0.583333333333333
Fold02.Rep5	0.363636363636364	0.454545454545455	0.636363636363636	0.545454545454545
Fold03.Rep1	0.833333333333333	0.666666666666667	0.75	0.583333333333333
Fold03.Rep2	0.307692307692308	0.615384615384615	0.461538461538462	0.615384615384615
Fold03.Rep3	0.692307692307692	0.615384615384615	0.769230769230769	0.692307692307692
Fold03.Rep4	0.666666666666667	0.583333333333333	0.666666666666667	0.583333333333333
Fold03.Rep5	0.769230769230769	0.692307692307692	0.538461538461538	0.846153846153846
Fold04.Rep1	0.636363636363636	0.727272727272727	0.909090909090909	0.727272727272727
Fold04.Rep2	0.636363636363636	0.636363636363636	0.636363636363636	0.454545454545455
Fold04.Rep3	0.583333333333333	0.333333333333333	0.583333333333333	0.583333333333333
Fold04.Rep4	0.5	0.583333333333333	0.75	0.666666666666667
Fold04.Rep5	0.545454545454545	0.636363636363636	0.636363636363636	0.545454545454545
Fold05.Rep1	0.545454545454545	0.727272727272727	0.727272727272727	0.454545454545455
Fold05.Rep2	0.75	0.75	0.833333333333333	0.5
Fold05.Rep3	0.416666666666667	0.583333333333333	0.666666666666667	0.5
Fold05.Rep4	0.666666666666667	0.416666666666667	0.583333333333333	0.416666666666667
Fold05.Rep5	0.666666666666667	0.666666666666667	0.583333333333333	0.666666666666667
Fold06.Rep1	0.5	0.333333333333333	0.583333333333333	0.583333333333333
Fold06.Rep2	0.5	0.416666666666667	0.5	0.583333333333333
Fold06.Rep3	0.615384615384615	0.461538461538462	0.692307692307692	0.538461538461538
Fold06.Rep4	0.666666666666667	0.75	0.666666666666667	0.666666666666667
Fold06.Rep5	0.833333333333333	0.583333333333333	0.833333333333333	0.583333333333333
Fold07.Rep1	0.615384615384615	0.692307692307692	0.538461538461538	0.692307692307692
Fold07.Rep2	0.416666666666667	0.666666666666667	0.666666666666667	0.75
Fold07.Rep3	0.636363636363636	0.727272727272727	0.636363636363636	0.545454545454545
Fold07.Rep4	0.615384615384615	0.538461538461538	0.538461538461538	0.615384615384615
Fold07.Rep5	0.384615384615385	0.692307692307692	0.461538461538462	0.538461538461538
Fold08.Rep1	0.583333333333333	0.583333333333333	0.666666666666667	0.5
Fold08.Rep2	0.583333333333333	0.666666666666667	0.75	0.583333333333333
Fold08.Rep3	0.615384615384615	0.692307692307692	0.461538461538462	0.692307692307692
Fold08.Rep4	0.5	0.5	0.583333333333333	0.583333333333333
Fold08.Rep5	0.909090909090909	0.727272727272727	0.8181818181818	0.636363636363636
Fold09.Rep1	0.461538461538462	0.538461538461538	0.461538461538462	0.692307692307692
Fold09.Rep2	0.5	0.75	0.583333333333333	0.666666666666667
Fold09.Rep3	0.583333333333333	0.416666666666667	0.75	0.583333333333333
Fold09.Rep4	0.363636363636364	0.454545454545455	0.8181818181818	0.363636363636364
Fold09.Rep5	0.5	0.75	0.75	0.666666666666667
Fold10.Rep1	0.666666666666667	0.583333333333333	0.666666666666667	0.583333333333333
Fold10.Rep2	0.636363636363636	0.727272727272727	0.636363636363636	0.454545454545455

Fold10.Rep3	0.454545454545455	0.545454545454545	0.636363636363636	0.545454545454545
Fold10.Rep4	0.636363636363636	0.454545454545455	0.545454545454545	0.545454545454545
Fold10.Rep5	0.615384615384615	0.538461538461538	0.538461538461538	0.538461538461538

**Note.** The Accuracy values shown from the cross-validation process were those created with the hyperparameters that obtained the best average accuracy.

Foldk= the sample data are divided into K subsets, one being training and the rest test data, Repk= repetition k. Number of the repetition carried out in the cross-validation process, SVM= Support Vector Machine.

**Table S3. Accuracy values with different hyperparameters of the models created for the prediction of melancholic vs non-melancholic patients.**

**S3.a. Random Forest.**

mtry	min.node.size	Accuracy
3	2	0.6661905
3	3	0.6608333
3	4	0.6661905
3	5	0.6604762
3	10	0.6494048
3	15	0.6658333
3	20	0.6719048
3	30	0.6822619
4	2	0.6515476
4	3	0.6579762
4	4	0.6636905
4	5	0.6547619
4	10	0.6497619
4	15	0.6654762
4	20	0.6626190
4	30	0.6686905
5	2	0.6772619
5	3	0.6697619
5	4	0.6683333
5	5	0.6690476
5	10	0.6704762
5	15	0.6651190
5	20	0.6604762
5	30	0.6733333
7	2	0.6694048
7	3	0.6672619
7	4	0.6847619
7	5	0.6858333
7	10	0.6522619
7	15	0.6658333
7	20	0.6736905
7	30	0.6783333

**Note.** The table shows the accuracy values in the Random Forest model according to the different hyperparameters tested.

mtry= number of the random features. Number of variables randomly sampled as candidates at each split, min.node.size= minimum node size. Minimum size that a node must have in order to be split.

### S3.b. Support Vector Machine

<b>Sigma</b>	<b>C</b>	<b>Accuracy</b>
0.001	1	0.7126190
0.001	20	0.7126190
0.001	50	0.7040476
0.001	100	0.6958333
0.001	200	0.6576190
0.001	500	0.6004762
0.001	700	0.6026190
0.010	1	0.7126190
0.010	20	0.6054762
0.010	50	0.6316270
0.010	100	0.6562698
0.010	200	0.6328968
0.010	500	0.6124603
0.010	700	0.5846032
0.100	1	0.7097619
0.100	20	0.6196825
0.100	50	0.5736111
0.100	100	0.5686111
0.100	200	0.5686111
0.100	500	0.5686111
0.100	700	0.5686111
0.500	1	0.7269148
0.500	20	0.7644841
0.500	50	0.7644841
0.500	100	0.7644841
0.500	200	0.7644841
0.500	500	0.7644841
0.500	700	0.7644841
1.000	1	0.7126190
1.000	20	0.7211905
1.000	50	0.7211905
1.000	100	0.7211905
1.000	200	0.7211905
1.000	500	0.7211905
1.000	700	0.7211905

**Note.** The table shows the accuracy values in the Support Vector Machine model according to the different hyperparameters tested.

Sigma= radial kernel coefficient, C= cost. Penalties for hyperplane margin violations.

### S.3.c. Gradient Boosting

<b>Shrinkage</b>	<b>Interaction.depth</b>	<b>n.minobsinnode</b>	<b>n.trees</b>	<b>Accuracy</b>
0.001	1	2	500	0.7126190
0.001	1	2	1000	0.7126190
0.001	1	2	2000	0.7097619
0.001	1	5	500	0.7126190
0.001	1	5	1000	0.7126190
0.001	1	5	2000	0.7129762
0.001	1	15	500	0.7126190
0.001	1	15	1000	0.7126190
0.001	1	15	2000	0.7126190
0.001	2	2	500	0.7126190
0.001	2	2	1000	0.7126190
0.001	2	2	2000	0.6746825
0.001	2	5	500	0.7126190
0.001	2	5	1000	0.7126190
0.001	2	5	2000	0.6853968
0.001	2	15	500	0.7126190
0.001	2	15	1000	0.7126190
0.001	2	15	2000	0.7126190
0.010	1	2	500	0.6486905
0.010	1	2	1000	0.6486905
0.010	1	2	2000	0.6221032
0.010	1	5	500	0.6518254
0.010	1	5	1000	0.6319048
0.010	1	5	2000	0.6211111
0.010	1	15	500	0.6904762
0.010	1	15	1000	0.6704762
0.010	1	15	2000	0.6704762
0.010	2	2	500	0.6469048
0.010	2	2	1000	0.6356746
0.010	2	2	2000	0.6121032
0.010	2	5	500	0.6515476
0.010	2	5	1000	0.6275397
0.010	2	5	2000	0.6107540
0.010	2	15	500	0.6958333
0.010	2	15	1000	0.6733333
0.010	2	15	2000	0.6819048
0.100	1	2	500	0.5988889
0.100	1	2	1000	0.5555740
0.100	1	2	2000	0.5596825
0.100	1	5	500	0.5986111
0.100	1	5	1000	0.5742460
0.100	1	5	2000	0.5624603
0.100	1	15	500	0.6751984
0.100	1	15	1000	0.6580556
0.100	1	15	2000	0.6480556
0.100	2	2	500	0.5938889
0.100	2	2	1000	0.5796032
0.100	2	2	2000	0.5678175
0.100	2	5	500	0.6025397
0.100	2	5	1000	0.5857540

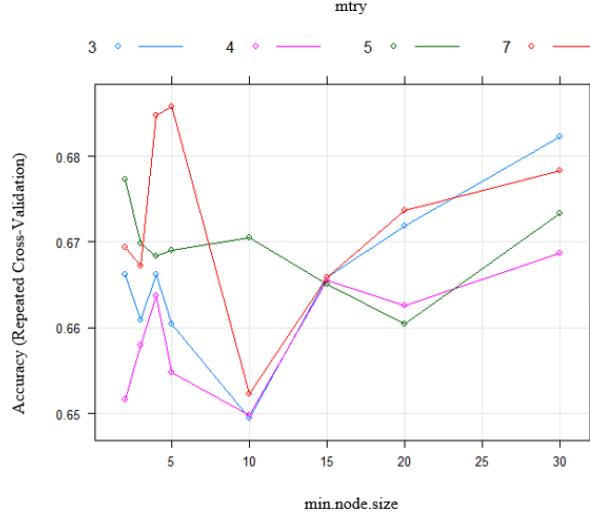
0.100	2	5	2000	0.5771825
0.100	2	15	500	0.6394048
0.100	2	15	1000	0.6341270
0.100	2	15	2000	0.6501984

**Note.** The table shows the accuracy values in the Gradient Boosting model according to the different hyperparameters tested.

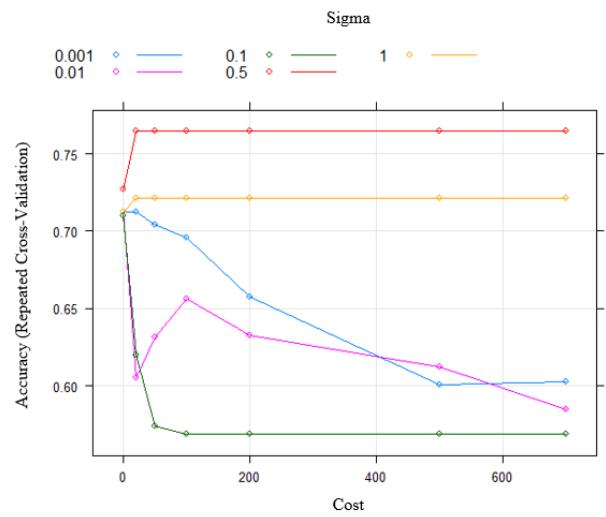
Shrinkage= this parameter, also known as learning rate, controls the influence that each model has on the ensemble as a whole, interaction.depth= maximum nodes per tree, complexity of the trees used as weak learner, in particular, the total number of splits the tree has, n.minobsinnode= number minimum observations in nodes. Minimum number of observations that a node must have in order to be divided, n.trees= number of trees. Number of iterations of the boosting algorithm.

**Figure S2. Accuracy values with different hyperparameters of the models created for the prediction of melancholic vs non-melancholic patients.**

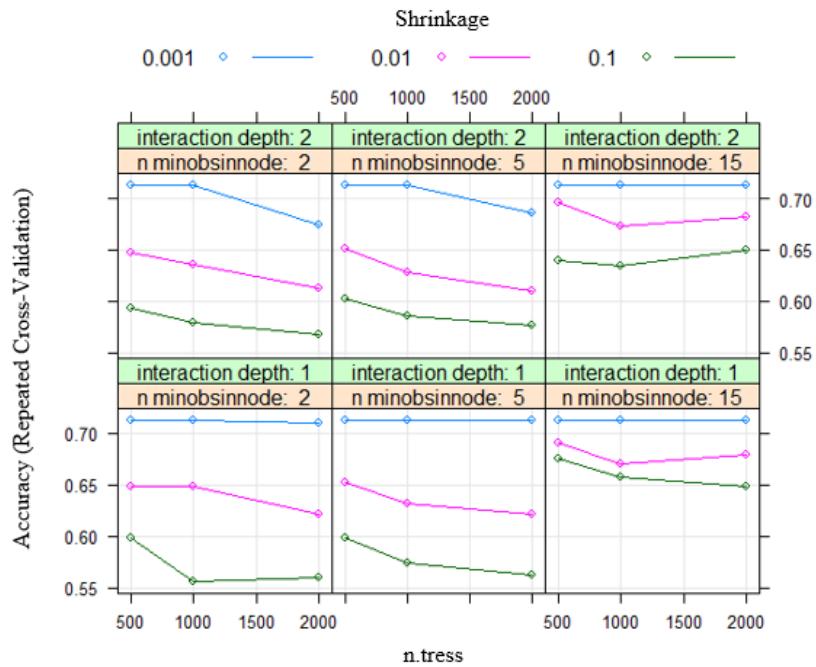
a. Random Forest



b. Support Vector Machine



c. Gradient Boosting



**Note.** Figure S2.a. The x-axis represents the tested values of the `min.node.size` hyperparameter. The y-axis represents the average of the accuracy values of the different replicates of the Cross-Validation. The blue line represents the model average accuracy values when `mtry`= 3. The pink line represents the model average accuracy values when `mtry`= 4. The green line represents the model average accuracy values when `mtry`= 5. The red line represents the model average accuracy values when `mtry`= 7.

`mtry`= number of the random features. Number of variables randomly sampled as candidates at each split, `min.node.size`= minimum node size. Minimum size that a node must have in order to be split.

Figure S2.b. The x-axis represents the tested values of the Cost hyperparameter. The y-axis represents the average of the accuracy values of the different replicates of the Cross-Validation. The blue line represents the model average accuracy values when Sigma= 0.001. The pink line represents the model average accuracy values when Sigma= 0. 01. The green line represents the model average accuracy values when Sigma= 0. 1. The red line represents the model average accuracy values when Sigma= 0.5. The red line represents the model average accuracy values when Sigma= 1.

Sigma= radial kernel coefficient, C= cost. Penalties for hyperplane margin violations.

Figure S2.c. The x-axis represents the tested values of the n.trees hyperparameter. The y-axis represents the average of the accuracy values of the different replicates of the Cross-Validation. The blue line represents the model average accuracy values when Shrinkage= 0.001. The pink line represents the model average accuracy values when Shrinkage= 0.01. The green line represents the model average accuracy values when Shrinkage= 0. 1.

Shrinkage= this parameter, also known as learning rate, controls the influence that each model has on the ensemble as a whole, interaction.depth= maximum nodes per tree, complexity of the trees used as weak learner, in particular, the total number of splits the tree has, n.minobsinnode= number minimum observations in nodes. Minimum number of observations that a node must have in order to be divided, n.trees= number of trees. Number of iterations of the boosting algorithm.

**Table S4. Accuracy values 10-fold-cross-validation of the models created for the prediction of melancholic vs non-melancholic patients.**

Resample	Accuracy			
	Logistic Model	Random Forest	SVM	Gradient Boosting
Fold01.Rep1	0.571428571428571	0.571428571428571	0.857142857142857	0.714285714285714
Fold01.Rep2	0.75	0.75	0.75	0.75
Fold01.Rep3	0.625	0.625	0.875	0.625
Fold01.Rep4	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold01.Rep5	0.428571428571429	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold02.Rep1	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold02.Rep2	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold02.Rep3	0.428571428571429	1	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold02.Rep4	0.714285714285714	0.571428571428571	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold02.Rep5	0.5	0.625	0.625	0.625
Fold03.Rep1	0.625	0.75	0.875	0.75
Fold03.Rep2	0.428571428571429	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold03.Rep3	0.428571428571429	0.428571428571429	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold03.Rep4	0.625	0.625	0.75	0.625
Fold03.Rep5	0.714285714285714	0.857142857142857	0.857142857142857	0.714285714285714
Fold04.Rep1	0.285714285714286	0.571428571428571	0.714285714285714	0.857142857142857
Fold04.Rep2	0.285714285714286	0.428571428571429	0.857142857142857	0.714285714285714
Fold04.Rep3	0.571428571428571	0.428571428571429	1	0.714285714285714
Fold04.Rep4	0.857142857142857	0.571428571428571	0.857142857142857	0.714285714285714
Fold04.Rep5	0.714285714285714	0.857142857142857	0.857142857142857	0.714285714285714
Fold05.Rep1	0.571428571428571	0.714285714285714	0.857142857142857	0.714285714285714
Fold05.Rep2	0.571428571428571	0.857142857142857	0.857142857142857	0.714285714285714
Fold05.Rep3	0.875	0.75	0.75	0.75
Fold05.Rep4	0.625	0.75	0.75	0.75
Fold05.Rep5	0.625	0.625	0.75	0.75
Fold06.Rep1	0.857142857142857	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold06.Rep2	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714

Fold06.Rep3	0.571428571428571	0.571428571428571	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold06.Rep4	0.5	0.625	0.75	0.75
Fold06.Rep5	0.571428571428571	0.857142857142857	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold07.Rep1	0.428571428571429	0.857142857142857	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold07.Rep2	0.571428571428571	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold07.Rep3	0.571428571428571	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold07.Rep4	0.714285714285714	1	0.857142857142857	0.714285714285714
Fold07.Rep5	0.571428571428571	0.714285714285714	0.571428571428571	0.714285714285714
Fold08.Rep1	0.625	0.625	0.875	0.75
Fold08.Rep2	0.571428571428571	0.714285714285714	0.857142857142857	0.714285714285714
Fold08.Rep3	0.75	0.625	0.875	0.625
Fold08.Rep4	0.571428571428571	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold08.Rep5	0.714285714285714	0.714285714285714	1	0.714285714285714
Fold09.Rep1	0.375	0.5	0.5	0.625
Fold09.Rep2	0.571428571428571	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold09.Rep3	0.571428571428571	0.714285714285714	0.571428571428571	0.714285714285714
Fold09.Rep4	0.428571428571429	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold09.Rep5	0.857142857142857	0.571428571428571	0.857142857142857	0.714285714285714
Fold10.Rep1	0.857142857142857	0.571428571428571	0.857142857142857	0.714285714285714
Fold10.Rep2	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.7777777777777778	0.6666666666666667
Fold10.Rep3	0.714285714285714	0.857142857142857	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold10.Rep4	0.571428571428571	0.428571428571429	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold10.Rep5	0.375	0.75	0.75	0.75

**Note.** The Accuracy values shown from the cross-validation process were those created with the hyperparameters that obtained the best average accuracy.

Foldk= the sample data are divided into K subsets, one being training and the rest test data, Repk= repetition k. Number of the repetition carried out in the cross-validation process, SVM= Support Vector Machine.

**Table S5. Accuracy values with different hyperparameters of the models created for the prediction of resistant vs non- resistant patients.**

**S5.a. Random Forest.**

mtry	min.node.size	Accuracy
3	2	0.4801190
3	3	0.4829762
3	4	0.5002381
3	5	0.5016667
3	10	0.5126190
3	15	0.5416667
3	20	0.5578571
3	30	0.6003571
4	2	0.4735714
4	3	0.4719048
4	4	0.4759524
4	5	0.4835714
4	10	0.5002381
4	15	0.5254762
4	20	0.5364286
4	30	0.5626190
5	2	0.4553571
5	3	0.4726190
5	4	0.4711905
5	5	0.4826190
5	10	0.4982143
5	15	0.5110714
5	20	0.5239286
5	30	0.5476190
7	2	0.4496429
7	3	0.4577381
7	4	0.4625000
7	5	0.4682143
7	10	0.4710714
7	15	0.5132143
7	20	0.5169048
7	30	0.5584524

**Note.** The table shows the accuracy values in the Random Forest model according to the different hyperparameters tested.

mtry= number of the random features. Number of variables randomly sampled as candidates at each split, min.node.size= minimum node size. Minimum size that a node must have in order to be split.

## S5.b. Support Vector Machine

<b>Sigma</b>	<b>C</b>	<b>Accuracy</b>
0.001	1	0.6498809
0.001	20	0.6332143
0.001	50	0.6225000
0.001	100	0.5703571
0.001	200	0.5546429
0.001	500	0.5658333
0.001	700	0.5566667
0.010	1	0.6479762
0.010	20	0.5591667
0.010	50	0.5696429
0.010	100	0.5734524
0.010	200	0.5247619
0.010	500	0.5557143
0.010	700	0.5447619
0.100	1	0.5889286
0.100	20	0.5680952
0.100	50	0.5595238
0.100	100	0.5595238
0.100	200	0.5595238
0.100	500	0.5595238
0.100	700	0.5595238
0.500	1	0.6160714
0.500	20	0.6027381
0.500	50	0.6027381
0.500	100	0.6027381
0.500	200	0.6027381
0.500	500	0.6027381
0.500	700	0.6027381
1.000	1	0.6479762
1.000	20	0.6160714
1.000	50	0.6160714
1.000	100	0.6160714
1.000	200	0.6160714
1.000	500	0.6160714
1.000	700	0.6160714

**Note.** The table shows the accuracy values in the Support Vector Machine model according to the different hyperparameters tested.

Sigma= radial kernel coefficient, C= cost. Penalties for hyperplane margin violations.

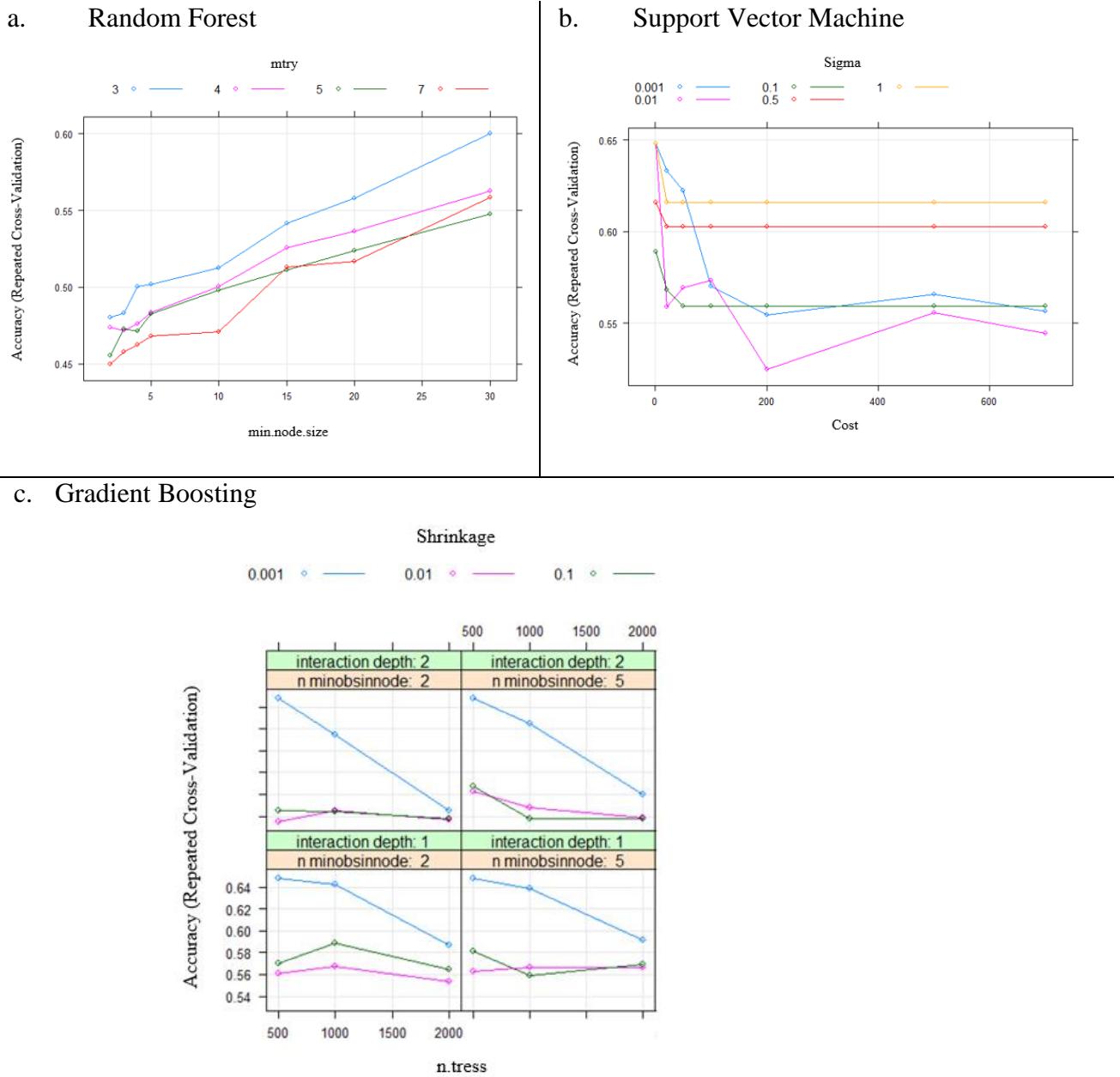
### S5.c. Gradient Boosting

<b>Shrinkage</b>	<b>Interaction.depth</b>	<b>n.minobsinnode</b>	<b>n.trees</b>	<b>Accuracy</b>
0.001	1	2	500	0.6498809
0.001	1	2	1000	0.6422619
0.001	1	2	2000	0.5870238
0.001	1	5	500	0.6479762
0.001	1	5	1000	0.6389286
0.001	1	5	2000	0.5917857
0.001	2	2	500	0.6479762
0.001	2	2	1000	0.6146429
0.001	2	2	2000	0.5450000
0.001	2	5	500	0.6479762
0.001	2	5	1000	0.6246429
0.001	2	5	2000	0.5603571
0.010	1	2	500	0.5608333
0.010	1	2	1000	0.5675000
0.010	1	2	2000	0.5538095
0.010	1	5	500	0.5627381
0.010	1	5	1000	0.5667857
0.010	1	5	2000	0.5666667
0.010	2	2	500	0.5347619
0.010	2	2	1000	0.5453571
0.010	2	2	2000	0.5371429
0.010	2	5	500	0.5630952
0.010	2	5	1000	0.5484524
0.010	2	5	2000	0.5390476
0.100	1	2	500	0.5700000
0.100	1	2	1000	0.5890476
0.100	1	2	2000	0.5644048
0.100	1	5	500	0.5814286
0.100	1	5	1000	0.5590476
0.100	1	5	2000	0.5690476
0.100	2	2	500	0.5455952
0.100	2	2	1000	0.5441667
0.100	2	2	2000	0.5376190
0.100	2	5	500	0.5676190
0.100	2	5	1000	0.5380952
0.100	2	5	2000	0.5380952

**Note.** The table shows the accuracy values in the Gradient Boosting model according to the different hyperparameters tested.

Shrinkage= this parameter, also known as learning rate, controls the influence that each model has on the ensemble as a whole, interaction.depth= maximum nodes per tree, complexity of the trees used as weak learner, in particular, the total number of splits the tree has, n.minobsinnode= number minimum observations in nodes. Minimum number of observations that a node must have in order to be divided, n.trees= number of trees. Number of iterations of the boosting algorithm.

**Figure S3. Accuracy values with different hyperparameters of the models created for the prediction of resistant vs non-resistant patients.**



**Note.** Figure S3.a. The x-axis represents the tested values of the min.node.size hyperparameter. The y-axis represents the average of the accuracy values of the different replicates of the Cross-Validation. The blue line represents the model average accuracy values when mtry= 3. The pink line represents the model average accuracy values when mtry= 4. The green line represents the model average accuracy values when mtry= 5. The red line represents the model average accuracy values when mtry= 7.

mtry= number of the random features. Number of variables randomly sampled as candidates at each split, min.node.size= minimum node size. Minimum size that a node must have in order to be split.

Figure S3.b. The x-axis represents the tested values of the Cost hyperparameter. The y-axis represents the average of the accuracy values of the different replicates of the Cross-Validation. The blue line represents the model average accuracy values when Sigma= 0.001. The pink line represents the model average accuracy values when Sigma= 0. 01. The green line represents the model average accuracy values when Sigma= 0. 1. The red line represents the model average accuracy values when Sigma= 0.5. The red line represents the model average accuracy values when Sigma= 1.

Sigma= radial kernel coefficient, C= cost. Penalties for hyperplane margin violations.

Figure S3.c. The x-axis represents the tested values of the n.trees hyperparameter. The y-axis represents the average of the accuracy values of the different replicates of the Cross-Validation. The blue line represents the model average accuracy values when Shrinkage= 0.001. The pink line represents the model average accuracy values when Shrinkage= 0.01. The green line represents the model average accuracy values when Shrinkage= 0. 1.

Shrinkage= this parameter, also known as learning rate, controls the influence that each model has on the ensemble as a whole, interaction.depth= maximum nodes per tree, complexity of the trees used as weak learner, in particular, the total number of splits the tree has, n.minobsinnode= number minimum observations in nodes. Minimum number of observations that a node must have in order to be divided, n.trees= number of trees. Number of iterations of the boosting algorithm.

**Table S6. Accuracy values 10-fold-cross-validation of the models created for the prediction of melancholic vs non-melancholic patients.**

Resample	Accuracy				
	Logistic Model	Random Forest	SVM	Gradient Boosting	
Fold01.Rep1	0.6666666666666667	0.5	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667
Fold01.Rep2	0.833333333333333	0.5	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667
Fold01.Rep3	0.571428571428571	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold01.Rep4	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667
Fold01.Rep5	0.5	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667
Fold02.Rep1	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667
Fold02.Rep2	0.833333333333333	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667
Fold02.Rep3	0.714285714285714	0.714285714285714	0.571428571428571	0.571428571428571	0.571428571428571
Fold02.Rep4	0.333333333333333	0.333333333333333	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667
Fold02.Rep5	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667
Fold03.Rep1	0.285714285714286	0.571428571428571	0.571428571428571	0.571428571428571	0.571428571428571
Fold03.Rep2	0.571428571428571	0.428571428571429	0.571428571428571	0.571428571428571	0.571428571428571
Fold03.Rep3	0.857142857142857	0.857142857142857	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold03.Rep4	0.571428571428571	0.571428571428571	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold03.Rep5	0.285714285714286	0.428571428571429	0.571428571428571	0.571428571428571	0.571428571428571
Fold04.Rep1	0.333333333333333	0.5	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667
Fold04.Rep2	0.714285714285714	0.571428571428571	0.571428571428571	0.571428571428571	0.571428571428571
Fold04.Rep3	0.6666666666666667	0.5	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667
Fold04.Rep4	0.142857142857143	0.571428571428571	0.571428571428571	0.571428571428571	0.571428571428571
Fold04.Rep5	1	0.571428571428571	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold05.Rep1	0.5	0.5	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667
Fold05.Rep2	0.5	0.5	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667
Fold05.Rep3	0.5	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667
Fold05.Rep4	0.75	0.625	0.625	0.625	0.625
Fold05.Rep5	0.571428571428571	0.857142857142857	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold06.Rep1	0.5	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667
Fold06.Rep2	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667	0.6666666666666667

Fold06.Rep3	0.571428571428571	0.428571428571429	0.571428571428571	0.571428571428571
Fold06.Rep4	0.833333333333333	0.666666666666667	0.666666666666667	0.666666666666667
Fold06.Rep5	0.333333333333333	0.333333333333333	0.666666666666667	0.666666666666667
Fold07.Rep1	0.833333333333333	0.666666666666667	0.666666666666667	0.666666666666667
Fold07.Rep2	0.142857142857143	0.571428571428571	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold07.Rep3	0.333333333333333	0.666666666666667	0.666666666666667	0.666666666666667
Fold07.Rep4	0.571428571428571	0.285714285714286	0.571428571428571	0.571428571428571
Fold07.Rep5	0.5	0.666666666666667	0.666666666666667	0.666666666666667
Fold08.Rep1	1	0.625	0.625	0.625
Fold08.Rep2	0.714285714285714	0.571428571428571	0.571428571428571	0.571428571428571
Fold08.Rep3	0.666666666666667	0.5	0.666666666666667	0.666666666666667
Fold08.Rep4	0.833333333333333	0.666666666666667	0.666666666666667	0.666666666666667
Fold08.Rep5	0.714285714285714	0.714285714285714	0.571428571428571	0.571428571428571
Fold09.Rep1	0.5	0.625	0.625	0.625
Fold09.Rep2	0.571428571428571	0.714285714285714	0.714285714285714	0.714285714285714
Fold09.Rep3	0.833333333333333	0.833333333333333	0.666666666666667	0.666666666666667
Fold09.Rep4	0.166666666666667	0.5	0.666666666666667	0.666666666666667
Fold09.Rep5	0.857142857142857	0.571428571428571	0.571428571428571	0.571428571428571
Fold10.Rep1	0.5	0.833333333333333	0.666666666666667	0.666666666666667
Fold10.Rep2	0.833333333333333	0.5	0.666666666666667	0.666666666666667
Fold10.Rep3	0.142857142857143	0.428571428571429	0.571428571428571	0.571428571428571
Fold10.Rep4	0.833333333333333	0.666666666666667	0.666666666666667	0.666666666666667
Fold10.Rep5	0.333333333333333	0.833333333333333	0.666666666666667	0.666666666666667

**Note.** The Accuracy values shown from the cross-validation process were those created with the hyperparameters that obtained the best average accuracy.

Foldk= the sample data are divided into K subsets, one being training and the rest test data, Repk= repetition k. Number of the repetition carried out in the cross-validation process, SVM= Support Vector Machine.