

Supplementary Materials:

Table S1: Concentrations (µM) for all 259 metabolites. Values below the limit of detection (LOD) were replaced with < LOD.

Calf	2031	2037	2038	2039	2043	2044	2048	2051	2052	2056	2059	2060	2064	2065	2068	2069	2070	2078	2080	2089	2090	2102	2104	2107	2108	2109	2110																					
mTHI class	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2																					
Metabolite																																																
Carnitine	11.40	11.69	18.20	12.49	16.19	7.76	17.16	12.63	12.08	7.83	17.09	23.18	21.56	9.19	9.80	12.69	7.61	6.85	18.99	16.80	10.65	21.57	17.41	15.02	9.86	50.05	5.46	12.20	7.55	17.48	16.45	14.64	11.12	11.44	9.57	11.33	12.73	19.75	11.60	30.73	12.30	19.68	8.56	15.14	16.17	9.49	11.21	
Acetyl carnitine	1.81	1.56	2.61	1.42	1.60	0.99	2.31	1.94	1.26	0.98	2.97	2.59	1.64	0.96	1.32	1.75	1.31	1.15	2.03	1.63	1.03	4.09	1.56	4.56	0.95	7.84	0.53	0.95	0.89	2.02	0.99	1.19	1.14	1.04	0.92	0.91	1.14	1.40	2.01	1.29	2.82	1.64	2.60	0.84	1.39	2.05	1.12	1.12
Propionyl carnitine	0.19	0.19	0.18	< LOD	0.19	< LOD	0.35	< LOD	< LOD	< LOD	0.27	0.50	0.34	< LOD	0.19	0.28	0.14	0.08	0.25	0.24	0.10	0.29	0.18	0.24	0.13	0.56	0.07	< LOD	< LOD	0.18	0.19	0.18	0.25	< LOD	< LOD	0.19	0.33	< LOD	< LOD	0.42	0.26	0.23	< LOD	< LOD	0.27	< LOD	0.23	0.23
Butyryl carnitine	0.15	0.10	0.25	0.12	0.17	0.10	0.28	0.14	0.15	0.14	0.42	0.39	0.28	0.12	0.29	0.33	0.16	< LOD	0.28	0.15	0.10	< LOD	0.55	< LOD	0.24	0.14	0.34	< LOD	0.12	0.15	0.17	0.26	0.19	0.30	0.13	0.18	0.09	0.17	0.32	0.13	0.30	0.29	0.27	0.10	0.13	0.19	0.12	0.18
Trimethylthiazine N-oxide	8.90	6.50	2.56	55.92	39.72	1.97	14.7	4.85	26.80	5.99	4.72	3.77	4.57	23.54	3.03	6.11	5.61	3.79	1.34	5.36	12.90	9.27	5.39	2.28	8.45	2.83	2.59	10.39	2.75	8.24	6.12	1.67	3.46	5.69	3.93	5.31	5.93	6.61	15.15	18.17	16.30	2.72	15.52	7.25	5.67	4.01		
1-Methylhistidine	1.64	2.75	10.97	4.80	5.83	1.82	2.17	2.43	5.47	2.41	3.00	3.41	2.24	3.82	6.15	4.91	3.56	3.80	6.84	3.66	4.20	30.75	5.80	9.40	2.72	3.36	3.42	5.46	4.70	3.47	2.18	17.68	2.72	2.64	2.42	2.41	2.79	2.90	5.77	3.93	4.20	15.41	2.91	3.54	2.81	3.78	3.15	
3-Methylhistidine	1.20	2.02	7.25	2.47	3.18	1.36	1.11	1.72	3.04	1.75	2.36	1.58	1.09	2.39	2.60	2.69	1.65	1.71	4.16	2.13	2.20	10.14	3.71	7.09	1.30	1.45	2.16	3.52	2.69	2.25	1.11	5.12	1.37	1.36	1.42	1.54	1.84	1.79	3.40	2.34	3.11	8.05	1.62	1.75	1.82	2.58	2.45	
5-Aminovaleric acid	0.44	0.29	0.47	0.84	0.35	0.14	0.25	0.38	0.15	0.45	0.54	0.54	0.25	0.73	0.34	0.36	0.24	0.67	0.63	0.10	0.17	0.47	0.32	0.20	2.00	0.46	1.21	0.96	0.62	2.29	0.24	0.24	1.33	2.40	0.37	0.41	0.47	0.25	1.12	0.13	0.13	0.10	0.10	0.10	0.10	0.10	0.10	
α-Aminobutyric acid	2.44	2.85	2.29	9.80	10.68	4.08	6.85	3.90	6.73	2.79	5.76	7.80	7.20	6.24	6.14	1.13	3.80	6.25	14.77	8.30	7.46	5.82	4.70	3.78	9.34	5.22	4.24	11.07	3.80	4.89	4.44	2.59	7.05	3.08	6.17	4.03	4.85	14.04	8.50	8.40	10.30	7.07	6.31	4.38	5.29	6.34	6.88	
Asymmetric dimethylarginine	0.93	1.49	0.65	1.57	2.58	0.91	1.84	1.26	2.08	1.48	1.75	1.73	1.35	1.29	1.84	1.53	1.36	1.12	1.15	2.21	1.45	0.92	1.72	1.23	1.42	1.95	1.25	2.11	0.62	1.40	1.05	0.45	1.71	1.48	1.46	1.31	1.79	2.29	1.90	2.29	1.70	1.20	2.04	1.85	2.14	2.16	1.78	
α-Aminoadipic acid	1.15	2.34	0.65	1.32	2.06	2.01	4.28	1.41	2.64	2.98	2.56	3.17	3.21	1.81	4.35	4.08	1.77	1.38	1.84	2.65	1.08	4.09	2.47	0.70	2.88	2.02	1.06	1.75	0.90	2.45	1.29	0.86	3.76	3.11	3.89	2.03	2.61	3.12	1.67	2.97	3.02	2.13	3.67	1.62	2.59	2.51	3.92	
Anserine	0.20	0.28	0.29	0.31	0.28	0.17	0.20	0.19	0.24	0.15	0.27	0.26	0.14	0.26	0.24	0.14	0.24	0.19	0.21	0.26	0.23	0.33	0.25	0.31	0.23	0.25	0.27	0.23	0.13	0.13	0.37	0.21	0.21	0.27	0.18	0.12	0.20	0.13	0.53	0.22	0.27	0.35	0.26	0.25	0.38	0.31	0.34	
β-Aminobutyric acid	0.05	0.06	0.04	0.05	0.08	0.08	0.03	0.04	0.05	0.11	0.31	0.16	0.04	0.22	0.13	0.11	0.31	0.16	0.04	0.22	0.13	0.10	0.24	0.34	< LOD	< LOD	0.07	0.06	0.28	0.15	0.37	0.45	0.17	0.05	0.15	0.04	0.03	0.06	0.07	0.11	0.24	0.85	< LOD	0.05	0.06	0.04	0.07	
Betaine	66.98	140.87	182.97	95.57	200.42	83.57	98.78	87.28	175.03	105.10	125.28	120.80	129.70	121.77	96.77	105.27	69.61	68.71	50.69	97.33	93.02	171.27	104.00	60.81	65.68	97.58	49.86	257.84	107.98	152.80	122.54	162.11	140.50	143.02	153.61	175.18	139.25	159.27	136.83	296.08	106.21	231.37	133.82	176.60	144.53	176.83	107.17	
Carnosine	4.91	5.78	6.21	8.12	9.61	4.86	6.18	5.62	7.98	5.83	7.97	7.24	5.58	12.84	8.74	6.81	7.41	8.52	5.90	8.57	8.16	16.00	8.14	10.66	11.63	8.74	8.73	9.43	3.30	12.53	4.74	4.81	12.43	10.51	5.33	7.91	5.36	9.00	22.34	12.43	9.02	9.03	9.54	10.41	12.84	14.05	10.71	
Citrulline	40.52	71.27	36.13	19.99	39.69	25.48	65.34	34.37	48.98	64.24	39.56	104.32	118.60	45.90	148.24	107.01	63.71	57.43	42.21	70.78	34.36	79.31	70.88	61.45	86.98	84.03	42.21	49.96	48.21	75.55	84.88	31.32	159.23	49.42	110.91	91.47	95.10	47.77	44.99	161.72	74.12	103.66	83.04	45.72	105.74	86.87	82.52	
Crotonine	49.72	62.91	103.47	64.33	79.48	3.39	51.68	49.17	88.31	67.82	88.97	62.80	53.97	75.77	95.65	78.30	101.92	66.45	79.28	83.11	63.80	183.27	75.80	80.95	67.13	79.28	74.90	72.39	74.25	53.42	98.45	64.00	62.69	63.78	46.45	60.51	52.12	80.28	75.86	69.48	115.81	64.87	70.07	85.58	80.38	72.53		
Cystine	11.61	30.15	12.84	19.75	31.35	13.95	28.41	19.41	37.03	24.58	18.72	17.26	18.88	20.18	26.58	26.30	16.37	15.87	11.61	27.86	18.42	17.81	28.74	24.91	24.23	17.51	13.00	35.76	11.66	19.74	19.30	10.18	20.78	27.62	20.90	27.59	34.88	37.04	32.56	30.54	30.84	20.91	30.91	34.54	30.65	30.51	27.64	
Homoarginine	2.82	4.08	2.34	2.05	5.74	2.45	2.65	2.53	1.64	2.35	4.49	3.94	2.45	2.27	3.64	2.01	1.51	1.97	2.38	6.43	2.76	7.19	0.97	6.43	4.03	4.28	1.47	1.23	1.91	0.87	3.46	4.41	5.13	5.45	5.07	2.69	3.16	3.98	4.29	5.11	3.58	4.29	5.11	3.58	4.29	5.11	3.58	4.29
Homocysteine	3.20	8.44	6.98	4.94	8.81	4.77	5.64	4.29	7.59	7.08	8.33	6.05	5.31	6.68	8.37	6.69	6.50	7.97	9.42	14.52	3.72	8.00	10.51	6.54	12.08	10.97	5.58	6.99	3.92	5.94	5.75	3.55	9.77	17.84	4.80	9.89	11.51	8.76	8.33	9.69	9.06	12.64	8.80	8.60	13.49	10.89	7.05	
Kynurenine	2.74	7.71	1.16	5.63	7.84	1.98	3.21	1.82	5.72	2.88	2.37	2.44	2.10	5.39	3.65	2.90	4.18	1.90	1.47	4.63	3.65	2.94	5.81	0.74	2.47	3.24	2.23	7.79	2.05	2.73	2.82	1.58	3.18	3.61	2.65	1.78	2.43	4.40	1.017	2.49	2.71	2.29	2.51	2.42	2.92	3.08		
Methionine sulfoxide	0.91	2.63	0.77	0.64	2.40	0.87	1.08	0.70	1.59	1.07	2.78	2.24	4.60	1.55	2.54	2.52	1.26	0.57	1.61	3.62	3.39	1.95	3.77	0.59	1.51	3.99	0.64	2.36	0.48	1.26	0.85	0.37	1.75	1.93	1.40	2.77	3.08	2.78	1.67	3.46	2.71	1.88	1.71	1.49	3.15	1.96	1.30	
Oxithione	49.05	88.22	27.93	46.33	120.36	53.48	94.35	62.34	85.16	107.07	73.80	163.50	189.62	102.76	188.95	150.26	78.01	67.12	73.51	100.78	41.93	40.76	105.27	97.18	105.88	167.17	65.59	64.33	42.24	64.04	82.77	147.49	241.85	79.71	140.79	152.15	137.39	94.47	76.10	152.21	199.13	87.47	115.64	94.29	125.52	132.44	142.32	
Phenylacetyl glycine	0.23	0.32	0.73	0.17	0.58	0.05	0.08	0.24	0.21	0.36	0.19	0.13	0.31	0.16	0.34	0.34	0.44	0.17	0.46	0.32	0.07	0.16	0.77	0.81	0.35	0.22	0.09	0.21	0.56	0.22	0.11	0.36	0.34	0.51	0.15	0.47	0.22	0.25	0.10	1.21	0.35	0.35	0.12	0.37	0.62	0.49	0.09	
Pro Betaine	0.10	0.34	0.14	0.11	0.11	0.09	0.07	0.13	0.20	0.16	0.18	0.15	0.13	0.11	0.13	0.13	0.17	0.11	0.17	0.25	0.11	0.37	0.25	0.14	0.12	0.27	0.07	0.20	0.13	0.18	0.12	0.14	0.09	0.22	0.11	0.26	0.21	0.12	0.30	0.21	0.11	0.41	0.12	0.18	0.36	0.16	0.15	
Sarcosine	1.33	3.59	2.23	2.89	6.05	1.98	2.56	4.70	12.52	3.91	2.50	4.49	3.30	5.89	6.33	5.21	2.33	2.77	3.47	7.46	4.44	3.04	10.07	2.09	4.02	2.93	1.92	8.34	1.70	4.44	2.57	1.24	4.66	3.80	4.88	6.67	6.26	4.96	7.35	5.55	4.35	4.65	4.83	12.14	7.66	6.42		

p-Cresol sulfate	0.72	1.39	0.69	0.37	1.97	0.20	0.17	0.32	0.91	2.41	0.27	0.14	0.17	0.65	3.80	1.78	1.85	1.19	0.60	1.52	0.09	1.58	6.12	0.38	1.18	0.93	0.07	0.83	1.59	0.75	1.09	1.84	0.41	5.30	0.45	3.11	0.90	0.74	5.26	6.07	0.62	0.61	1.45	2.01	5.11	6.21	0.12
DG(16:0_18:1)	1.21	0.74	0.80	<LOD	0.87	2.00	1.05	0.52	0.53	1.13	1.97	2.69	0.81	0.95	1.28	1.42	4.18	2.23	0.23	1.18	0.51	1.42	0.94	3.26	0.72	0.66	1.10	0.67	<LOD	2.33	0.83	<LOD	2.48	1.01	1.21	2.55	3.00	1.34	0.83	2.26	1.82	1.09	1.85	1.56	2.28	1.95	2.89
HexCer(18:1/16:0)	0.32	0.72	0.29	0.46	0.42	0.42	0.44	0.40	0.54	0.62	0.74	0.57	0.45	0.44	0.35	0.36	0.47	0.50	0.38	0.47	0.72	0.38	0.54	0.42	0.46	0.54	0.63	0.58	0.35	0.56	0.34	0.32	0.41	0.44	0.44	0.74	0.68	0.76	0.40	0.50	0.28	0.42	0.51	0.67	0.77	0.70	0.74
Hex2Cer(18:1/24:1)	<LOD	1.07	0.04	0.06	0.07	<LOD	0.05	0.05	0.07	<LOD	0.08	0.08	<LOD	0.08	0.06	0.08	0.02	0.03	0.05	0.05	0.09	0.05	0.04	0.07	0.06	0.06	0.08	0.04	0.06	0.04	0.06	0.07	0.05	<LOD	0.05	0.06	0.08	0.08	0.07	0.06	0.05	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08
Docosahexaenoic acid (FA(22:6n3))	0.85	1.89	1.64	2.11	1.50	1.01	0.67	0.47	1.74	0.59	1.99	1.23	0.90	2.16	<LOD	1.55	1.40	1.36	1.50	1.23	1.33	1.14	1.25	2.70	1.07	1.78	0.96	0.76	0.64	1.35	0.66	0.54	0.81	1.36	0.47	0.76	1.28	1.88	2.34	1.82	1.44	2.85	1.16	1.42	1.81	0.70	1.08
Eicosapentaenoic acid (FA(25:5n3))	0.14	0.36	0.29	0.35	0.26	0.21	0.11	<LOD	0.27	0.15	0.44	0.19	0.17	0.54	<LOD	<LOD	0.17	0.18	0.21	0.38	0.23	0.15	0.24	0.54	0.34	0.38	0.17	0.10	0.09	0.29	0.13	<LOD	0.18	0.20	<LOD	0.09	0.20	0.28	0.36	0.31	0.25	0.30	0.17	0.47	0.30	0.20	0.14
Octadecenoic acid	47.49	65.43	62.25	83.93	119.12	86.25	55.01	<LOD	70.99	45.04	159.86	70.53	<LOD	115.44	91.24	196.52	174.75	148.28	<LOD	<LOD	<LOD	110.17	<LOD	141.08	<LOD	71.31	82.12	29.73	78.27	81.13	28.31	<LOD	78.27	62.10	30.74	62.44	76.72	54.58	93.03	95.75	148.53	138.98	103.19	62.38	149.57	109.92	72.76
HexCer(18:1/16:0)	0.14	0.31	0.08	0.14	0.22	0.14	0.17	0.17	0.20	0.14	0.17	0.22	0.18	0.14	0.17	0.22	0.18	0.14	0.17	0.22	0.18	0.20	0.30	0.29	0.25	0.26	0.31	0.24	0.19	0.21	0.10	0.15	0.22	0.21	0.19	0.24	0.26	0.19	0.25	0.22	0.31	0.27	0.26	0.28	0.31		
HexCer(18:1/18:0)	0.04	0.05	<LOD	<LOD	0.05	0.04	<LOD	0.04	0.05	0.05	0.08	0.04	<LOD	<LOD	0.05	0.06	0.04	0.04	0.05	0.06	0.04	0.08	0.04	0.06	0.04	0.05	0.04	<LOD	<LOD	0.05	<LOD	<LOD	<LOD	<LOD	0.03	0.05	0.05	<LOD	0.09	0.05	0.05	0.05	0.10	0.08			
HexCer(18:1/22:0)	<LOD	0.35	<LOD	0.21	0.33	0.23	0.25	<LOD	0.32	0.32	0.33	0.24	<LOD	<LOD	0.23	0.13	0.21	0.23	0.25	0.42	0.24	0.32	0.33	0.23	0.23	0.28	0.27	0.40	0.33	0.24	<LOD	0.28	0.39	0.34	0.22	0.25	0.36	0.38	0.31	0.25	<LOD	0.25	0.48	0.42	0.36	0.31	0.29
Indoyl sulfate	0.34	0.14	1.01	1.01	1.18	0.34	0.17	0.36	0.11	0.15	0.73	0.45	<LOD	<LOD	1.01	0.54	0.65	0.56	1.31	0.47	0.87	0.63	0.34	0.42	0.73	0.20	0.17	0.68	0.10	1.16	1.20	0.22	0.19	0.60	0.32	<LOD	0.46	1.12	0.11	0.26	0.13	0.34	0.32	0.33	<LOD		
lysoPC a C14:0	7.10	6.41	<LOD	3.19	3.39	3.68	7.82	2.69	2.70	6.85	12.91	9.37	5.99	4.63	4.18	2.29	9.58	8.12	4.03	5.31	<LOD	8.06	6.18	7.73	7.17	9.71	5.33	2.99	2.33	5.18	3.58	<LOD	7.63	4.65	4.31	4.96	5.17	4.41	4.58	10.62	4.12	8.10	6.10	3.80	6.84	4.50	5.31
lysoPC a C16:0	9.20	21.23	4.08	8.50	16.00	10.89	19.11	10.23	17.47	30.29	31.32	24.25	13.78	21.99	10.52	5.12	17.70	12.19	24.93	5.26	14.31	30.53	16.51	26.66	21.75	14.30	17.17	6.87	15.93	8.09	4.11	15.44	20.12	8.31	23.97	23.31	19.95	23.08	25.35	8.38	17.57	27.86	22.30	27.43	17.86	16.81	
lysoPC a C16:1	1.92	1.92	1.78	1.59	2.73	2.05	3.47	1.64	0.93	2.21	6.69	3.39	2.33	1.45	2.29	1.16	4.70	1.45	2.55	0.61	4.41	1.91	4.82	3.34	4.95	4.05	1.57	1.35	2.91	1.42	0.70	4.03	0.94	1.63	1.09	1.60	2.12	1.45	5.00	1.37	3.98	1.15	1.12	0.98	1.61	2.96	
lysoPC a C17:0	0.46	0.61	0.26	0.40	0.62	0.47	0.81	0.58	0.35	1.29	1.12	0.82	0.65	0.83	0.39	1.23	0.81	0.83	0.49	1.34	0.30	1.58	0.71	0.74	1.22	0.99	0.68	0.52	0.28	1.03	0.36	0.22	0.60	0.62	0.29	0.57	0.83	0.78	0.54	0.77	0.36	0.70	0.61	0.43	0.55	0.79	0.94
lysoPC a C18:0	5.05	11.31	2.02	4.26	10.71	6.95	12.28	8.53	11.35	28.09	15.00	13.21	7.96	10.62	5.55	2.67	9.78	11.69	5.68	22.68	4.38	4.62	11.83	18.73	14.33	10.35	10.36	3.51	13.45	3.27	2.18	7.68	13.57	4.04	19.15	18.04	12.75	14.27	14.38	4.92	6.27	1.74	13.71	18.08	16.51	13.75	
lysoPC a C18:1	15.77	22.97	4.29	13.16	22.96	20.95	27.70	18.25	10.80	30.45	42.36	33.89	19.36	19.77	10.24	4.81	35.49	41.19	13.33	37.06	4.45	19.62	25.31	49.66	41.17	34.34	37.29	14.24	5.77	33.58	6.55	35.2	26.17	19.15	8.38	21.20	28.22	22.44	16.89	39.81	9.72	22.41	28.43	17.50	25.11	33.13	
lysoPC a C18:2	12.83	48.12	<LOD	10.16	15.64	12.57	15.50	8.73	12.26	24.44	27.09	18.23	8.28	22.12	3.75	1.97	21.05	26.48	3.08	47.67	2.44	6.86	48.41	17.84	46.82	26.27	32.27	13.11	<LOD	30.26	2.53	<LOD	11.42	39.05	37.5	43.80	50.14	13.07	29.22	24.96	5.65	8.60	75.13	34.69	75.27	47.38	23.15
lysoPC a C20:3	0.25	0.25	0.25	0.63	1.46	1.35	1.52	0.56	0.75	1.59	2.02	2.16	1.35	1.07	0.61	0.48	2.04	2.58	0.71	2.22	0.28	1.21	1.61	2.38	3.74	2.20	2.04	1.01	0.44	1.75	0.39	0.31	1.39	1.05	0.50	1.43	1.51	1.76	1.11	0.15	0.75	1.63	1.56	1.08	1.39	22.1	1.35
lysoPC a C20:4	1.23	2.32	0.33	1.09	2.71	1.82	2.39	0.76	0.96	2.10	3.56	2.59	1.76	1.78	0.63	0.47	1.85	3.19	0.76	3.33	0.36	1.79	2.36	2.15	6.59	3.37	2.98	2.07	0.62	2.24	0.41	0.48	1.85	1.46	0.53	2.06	2.43	2.26	2.13	0.77	0.63	1.77	2.99	1.96	2.50	2.64	1.37
lysoPC a C28:1	<LOD	0.14	<LOD	<LOD	<LOD	<LOD	0.32	0.10	0.09	0.24	0.36	0.20	0.20	<LOD	<LOD	<LOD	0.18	0.23	0.17	0.25	<LOD	<LOD	0.16	0.18	0.17	0.38	0.18	<LOD	0.30	<LOD	0.32	<LOD	<LOD	0.25	0.16	<LOD	0.26	0.24	0.19	0.13	0.21	<LOD	<LOD	0.27	0.10	0.17	0.18
PC aa C28:1	0.63	1.18	0.22	0.62	0.53	0.44	1.15	0.97	0.79	1.57	1.63	1.09	0.67	0.94	0.65	0.59	1.45	1.24	0.53	1.82	0.88	0.54	1.36	0.95	2.13	1.04	1.14	1.21	0.34	1.32	0.40	0.33	1.03	1.17	0.49	2.19	1.39	1.08	1.25	1.26	0.41	0.43	1.90	1.52	1.84	2.03	1.71
PC aa C30:0	2.96	4.16	1.82	2.16	2.06	1.71	3.35	2.54	2.63	3.95	6.46	4.54	2.39	2.92	3.10	3.39	6.02	4.65	1.87	5.25	2.31	3.91	3.21	4.29	4.88	3.44	2.94	3.04	2.15	3.66	2.82	1.34	4.38	3.35	2.56	4.98	4.74	5.08	4.15	5.60	2.10	3.91	5.00	4.16	5.98	5.72	5.05
PC aa C30:1	2.91	7.57	1.57	3.84	3.72	3.68	4.04	3.12	4.17	4.99	11.62	8.49	3.72	4.99	1.16	3.24	4.69	7.51	3.57	1.80	6.41	3.24	4.49	5.70	6.27	4.80	3.20	3.20	2.66	3.57	6.95	4.99	3.27	3.35	5.57	4.20	6.26	4.70	6.97	6.06	6.43	6.22	6.30	7.21	7.90	7.96	
PC aa C32:1	5.97	7.02	0.63	4.60	4.06	3.93	9.35	4.87	3.22	4.45	17.49	12.12	6.42	3.44	15.44	16.21	14.66	12.80	9.75	8.11	5.50	17.60	5.05	17.95	10.31	1.99	7.36	4.16	7.87	6.66	8.75	5.61	14.94	3.31	11.73	7.34	12.28	7.43	3.94	12.64	6.19	12.59	4.96	5.75	4.64	6.57	11.61
PC aa C32:2	2.14	3.97	0.92	0.99	0.88	1.00	1.96	1.72	0.57	1.59	4.50	3.18	1.30	1.31	1.20	1.26	2.35	1.83	0.72	2.22	0.83	1.40	1.22	1.77	2.14	1.50	1.33	0.83	0.97	1.96	1.60	0.63	2.97	2.29	2.09	4.36	3.22	1.49	1.66	2.37	1.17	1.74	3.66	1.82	3.54	3.24	3.33
PC aa C32:3	0.39	1.27	0.08	0.28	0.21	0.26	0.27	0.41	0.44	0.51	0.63	0.44	0.19	0.52	0.19	0.14	0.69	0.61	0.16	1.60	0.52	0.60	0.35	1.16	0.54	0.67	0.30	0.15	0.78	0.14	0.08	0.39	0.91	0.19	1.45	1.10	0.47	1.33	0.56	0.18	0.19	1.62	1.08	1.71	1.31	1.11	
PC aa C34:1	46.35	78.44	59.33	40.32	46.52	44.49	109.09	66.78	47.41	81.07	124.72	118.29	61.03	49.34	113.57	108.27	108.67	110.14	98.65	109.60	59.06	125.31	66.68	143.29	104.10	82.65	62.64	55.73	70.91	66.43	66.42	67.47	113.39														

SM(OH)C161	1.10	1.78	0.74	1.19	1.03	0.79	1.30	1.55	1.17	2.51	1.94	1.85	1.14	1.81	1.40	1.36	2.16	2.15	1.60	3.80	2.04	1.36	2.10	1.88	3.42	1.89	1.99	1.95	0.95	1.65	0.82	0.90	1.51	1.99	1.19	2.33	2.00	1.69	2.04	2.40	0.94	1.12	2.48	2.20	3.08	3.25	3.48	
SM(OH)C161	0.51	0.74	0.35	0.65	0.50	0.38	0.49	0.80	0.53	1.12	0.75	0.76	0.48	0.73	0.68	0.69	0.97	0.99	0.81	1.63	1.08	0.71	0.71	0.82	1.52	0.81	1.20	1.17	0.50	0.98	0.37	0.41	0.60	0.80	0.50	0.80	0.89	0.74	0.94	0.44	0.65	0.87	0.94	1.14	1.56	1.51		
SM(OH)C221	0.87	2.39	0.50	1.35	1.79	0.61	1.06	1.78	2.23	2.27	1.77	1.32	0.93	3.09	1.07	1.13	2.17	1.88	1.30	3.92	2.04	0.87	3.20	1.45	2.71	1.62	1.92	3.92	0.87	1.80	0.67	0.81	1.20	2.45	0.80	3.31	2.59	4.32	4.25	1.93	0.90	0.95	2.98	3.38	4.84	4.90	4.20	
SM(OH)C222	0.58	1.04	0.35	0.87	0.84	0.40	0.70	0.97	1.28	0.90	0.86	0.64	1.44	0.77	0.79	1.29	1.12	1.09	2.11	1.35	0.67	1.43	1.17	1.49	1.06	1.12	1.79	0.56	1.10	0.45	0.54	0.79	1.16	0.54	1.26	1.07	1.06	1.64	1.37	0.58	0.72	1.46	1.59	1.98	2.27	2.04		
SM(OH)C241	0.07	0.22	0.07	0.13	0.18	0.09	0.10	0.14	0.22	0.17	0.13	0.10	0.08	0.27	0.10	0.28	0.13	0.22	0.19	0.13	0.34	0.11	0.29	0.13	0.19	0.17	0.15	0.43	0.08	0.15	0.07	0.29	0.22	0.10	0.30	0.25	0.21	0.34	0.17	0.09	0.12	0.27	0.39	0.40	0.47	0.44		
SMC160	17.61	31.00	10.91	20.13	20.42	14.25	20.02	24.76	25.65	37.25	31.78	27.45	16.06	27.17	23.15	22.85	32.25	35.33	23.93	47.11	32.61	20.47	33.85	28.51	46.97	31.55	37.48	40.69	17.61	27.84	13.89	12.91	23.73	29.23	18.72	47.52	32.94	28.27	38.43	37.76	63.53	21.46	45.07	50.68	60.89	55.50	52.25	
SMC161	2.11	4.25	1.33	2.62	2.75	1.62	2.80	3.39	3.03	4.61	4.08	3.42	2.17	3.45	2.49	3.01	3.70	4.19	3.54	6.37	3.25	2.26	4.45	3.48	5.63	4.25	4.28	4.95	1.97	3.39	2.15	3.28	2.89	3.69	2.02	5.34	4.91	3.75	5.23	4.69	1.72	2.45	7.43	5.71	8.24	7.04	7.32	
SMC180	2.14	3.48	1.32	3.06	3.14	1.92	2.33	3.53	3.27	4.31	4.43	3.24	1.74	3.53	2.63	3.88	4.53	4.69	3.93	5.76	4.87	3.91	3.95	4.20	5.70	3.92	5.71	5.79	2.89	4.37	1.53	1.28	2.58	3.24	2.68	4.92	4.04	3.91	4.44	4.15	2.35	3.22	4.70	6.14	5.93	7.89	5.75	
SMC181	0.80	1.28	0.53	1.07	1.06	0.70	0.93	1.19	1.17	1.72	1.79	1.16	0.85	1.35	1.21	1.51	1.43	1.50	1.37	2.39	1.64	1.22	1.54	1.67	2.24	1.57	1.96	1.96	0.98	1.54	0.62	0.69	0.87	1.34	0.91	2.05	1.54	1.53	1.62	1.71	0.87	1.32	1.99	2.28	2.63	2.94	2.35	
SMC202	0.04	0.05	<LOD	0.02	0.05	<LOD	0.04	0.02	0.06	0.03	0.02	0.05	0.02	0.02	0.09	0.18	0.15	0.07	0.19	0.08	0.09	0.08	0.19	0.23	0.15	0.13	0.08	0.04	0.02	0.02	<LOD	0.03	0.05	<LOD	0.07	0.05	0.05	0.07	0.09	0.02	0.04	0.07	0.10	0.08	0.11	0.08		
SMC240	1.69	4.05	1.53	2.60	3.44	1.41	2.61	2.71	4.58	3.98	3.62	2.86	2.40	5.23	3.09	3.03	5.24	3.78	3.98	6.81	3.70	2.63	5.90	3.55	4.45	3.34	3.32	6.59	2.63	4.32	1.63	2.08	2.98	4.27	2.24	6.17	5.13	5.40	7.24	4.38	2.44	2.87	5.65	6.36	7.53	7.06	7.06	
SMC241	2.87	4.81	2.21	4.08	4.79	2.09	3.24	4.11	5.60	4.02	5.58	4.57	3.51	5.67	4.57	4.99	5.42	5.22	6.01	6.84	5.66	3.62	6.42	6.21	6.34	6.15	5.14	8.60	3.39	4.52	2.66	3.13	3.79	4.75	3.77	5.20	4.98	5.82	7.45	6.87	2.99	4.04	5.90	7.75	9.39	8.46	9.13	
SMC260	0.02	0.05	0.05	0.04	0.03	0.02	0.04	0.04	0.05	0.07	0.03	0.03	0.01	0.06	<LOD	0.04	0.05	0.04	0.03	0.10	0.05	0.03	0.08	0.05	0.06	0.06	0.11	0.03	0.05	<LOD	<LOD	0.04	0.07	0.02	0.09	0.08	0.06	0.10	0.04	0.02	0.01	0.07	0.09	0.09	0.08	0.11		
SMC261	0.05	0.11	0.06	0.09	0.12	0.02	0.08	0.06	0.13	0.13	0.10	0.06	0.04	0.10	0.06	0.04	0.11	0.06	0.06	0.11	0.09	0.05	0.10	0.09	0.10	0.07	0.10	0.22	0.07	0.08	0.03	0.04	0.05	0.14	0.04	0.18	0.15	0.11	0.25	0.09	0.04	0.04	0.16	0.25	0.21	0.30	0.30	
TG(140_322)	1.42	1.39	0.66	<LOD	<LOD	1.39	0.79	<LOD	<LOD	1.52	2.57	<LOD	<LOD	0.61	1.08	1.98	3.65	1.81	0.39	1.02	0.46	0.93	1.59	2.22	0.80	1.18	1.21	<LOD	<LOD	1.64	0.98	<LOD	3.43	1.09	1.77	2.32	2.45	1.19	0.88	2.36	3.19	1.46	1.03	1.14	2.12	1.86	3.31	
TG(140_340)	8.89	30.1	12.02	<LOD	1.46	7.11	4.85	2.14	1.02	2.96	6.62	14.39	2.68	2.01	4.37	8.82	5.24	15.74	10.4	40.2	8.81	2.79	3.46	16.86	2.90	4.02	8.78	1.04	<LOD	9.95	3.78	<LOD	14.91	3.37	10.39	6.78	8.65	6.39	1.22	11.36	9.72	3.75	2.73	3.58	4.91	4.56	18.57	
TG(140_341)	26.67	21.75	12.02	3.66	6.77	27.86	14.41	6.46	4.86	20.01	27.09	56.68	11.20	9.02	17.66	32.51	81.79	48.93	3.86	19.20	3.92	13.04	22.96	57.83	14.37	14.92	24.84	5.34	3.00	34.23	16.32	2.78	59.37	19.20	33.45	52.18	59.59	23.57	9.47	40.27	10.89	17.24	25.81	35.17	31.02	66.87		
TG(140_342)	5.09	5.75	2.40	<LOD	1.61	5.40	2.68	1.26	1.67	4.06	5.12	9.86	2.52	2.62	2.95	5.25	11.44	6.79	0.74	4.06	1.30	2.60	4.84	9.42	2.90	2.50	3.97	1.77	<LOD	7.33	3.39	<LOD	10.79	4.49	5.79	10.48	11.81	4.85	2.55	6.46	7.34	4.06	5.01	6.75	8.22	8.03	11.66	
TG(140_361)	6.06	2.94	2.21	<LOD	2.27	7.12	3.81	2.12	<LOD	2.94	3.93	9.73	1.98	1.61	2.20	2.77	16.86	11.05	<LOD	3.03	1.12	2.36	2.26	11.24	2.21	2.17	5.48	1.31	<LOD	8.81	2.15	<LOD	11.13	3.25	4.61	6.83	7.90	5.24	1.53	6.22	4.42	2.13	1.97	3.29	4.18	4.47	16.85	
TG(140_362)	10.38	10.70	6.41	2.28	4.03	14.25	6.35	3.59	3.06	4.86	8.35	17.36	3.89	5.37	3.94	6.16	25.52	15.61	1.03	8.42	2.65	5.38	10.22	21.95	4.71	5.17	9.25	2.83	<LOD	18.44	4.77	<LOD	19.29	9.67	6.97	25.89	29.69	9.40	4.75	11.85	9.04	4.95	7.68	11.04	16.26	14.51	25.80	
TG(160_342)	2.61	4.77	1.34	<LOD	<LOD	2.35	1.37	<LOD	1.52	2.79	1.74	4.04	<LOD	2.13	0.79	1.23	3.86	2.43	0.33	2.72	0.64	0.96	3.91	3.63	1.47	1.22	1.51	1.18	<LOD	3.55	1.52	<LOD	3.99	3.99	2.42	8.87	9.78	1.94	2.13	2.15	2.40	1.84	3.31	4.33	5.49	15.8	4.39	
TG(160_281)	8.98	3.83	2.25	0.70	1.05	5.81	4.27	1.64	0.72	4.57	6.19	14.59	2.06	2.35	2.83	6.51	15.46	9.58	0.75	4.32	1.03	3.02	4.00	11.38	25.1	3.52	6.26	0.64	<LOD	8.12	3.48	<LOD	15.95	4.00	8.70	8.43	8.68	4.93	1.69	5.71	8.11	3.15	3.38	4.01	6.31	6.01	18.05	
TG(160_282)	1.14	0.96	<LOD	<LOD	<LOD	0.52	0.47	<LOD	0.80	0.70	1.53	0.31	0.47	0.44	0.70	1.51	1.07	<LOD	0.69	0.23	0.62	0.91	1.15	0.48	0.42	0.71	<LOD	<LOD	1.02	0.42	<LOD	1.65	1.04	0.94	1.62	1.82	0.51	0.31	0.65	0.97	0.46	0.55	0.84	1.17	1.21	1.84		
TG(160_302)	1.67	12.39	0.50	<LOD	1.19	1.17	0.84	<LOD	1.28	2.23	2.27	1.57	1.32	0.93	3.09	1.07	1.13	2.17	1.88	1.30	3.92	2.04	0.87	3.20	1.45	2.71	1.62	1.92	3.92	0.87	1.80	0.67	0.81	1.20	2.45	0.80	3.31	2.59	4.32	4.25	1.93	0.90	0.95	2.98	3.38	4.84	4.90	4.20
TG(160_320)	33.84	29.78	10.38	4.20	8.96	37.45	21.62	9.41	7.62	33.44	49.47	89.66	16.57	10.93	45.48	78.31	127.79	82.34	7.45	38.57	3.62	17.45	35.76	94.04	16.48	18.88	35.90	8.42	5.84	39.69	24.27	4.59	86.29	29.88	73.50	77.11	98.69	35.88	11.66	62.72	61.94	33.61	39.22	44.47	63.07	65.85	99.94	
TG(160_321)	34.16	24.63	14.18	4.83	9.51	39.58	21.50	9.70	7.74	30.45	42.15	78.85	16.16	11.22	30.84	78.31	145.99	66.62	6.16	21.96	5.12	19.35	32.02	78.60	14.84	18.72	37.98	8.91	4.83	47.66	25.87	5.04	84.54	22.16	52.63	56.85	64.95	33.58	9.56	48.24	50.20	29.98	20.13	29.78	38.02	41.91	92.88	
TG(160_322)	4.85	5.66	2.32	<LOD	1.81	6.44	3.08	1.46	1.87	4.01	5.65	9.83	2.40	2.89	4.44	7.13	12.41	7.10	0.97	4.23	1.28	3.20	4.89	10.02	1.72	2.97	4.22	2.01	<LOD	7.03	3.93	<LOD	11.30	4.42	7.17	11.57	11.74	4.75	2.36	6.52	9.00	5.45	4.72	7.08	7.60	7.08	11.25	
TG(160_341)	5.22	1.43	2.61	<LOD	1.49	4.64	2.66	1.59	<LOD	2.52	5.12	9.55	2.51	1.19	4.39	3.68	15.88	9.18	1.01	2.88	1.03	3.46	0.93	13.46	1.72	3.09	4.93	1.04	<LOD	7.63	3.29	<LOD	9.63	1.12	6.18	1.69</												