

Integrated Metabolomics and Metallomics analysis in Acute Coronary Syndrome

Patients

Xuejiao Yin ^a, Leonardo Pinto de Carvalho ^b, Mark Chan ^c, Sam Fong Yau Li ^{a, d*}

^aDepartment of Chemistry, 3 Science Drive 3, National University of Singapore,
Singapore 117543

^bYong Loo Lin School of Medicine, National University of Singapore, Singapore 119228

^cNational University Heart Centre, Singapore 119074

^dNUS Environmental Research Institute, 5A Engineering Drive 1, T-Lab Building,
National University of Singapore, Singapore 117411

* Corresponding Author:

Email: chmlifys@nus.edu.sg. Tel: (65)-6516-2681. Fax: (65)-6779-1691.

Supplementary Table 1: intensity of m/z with VIP>1 in positive mode

m/z	NACS 260	NACS 274	NACS 292	NACS 304	NACS 305	NACS 308	NACS 315	NACS 321
363.2147	28490	83233	41175	85313	90470	87469	106071	93659
121.028	11232	3164	78589	63032	98356	113817	104986	160291
181.0714	63769	24968	19575	75529	210540	244336	62556	35037
203.0516	862861	889200	595838	608410	468033	663336	984206	410659
139.0383	7961	1148	59192	47805	71195	95175	81274	110770
195.087	37642	10081	8685	28815	51692	283709	70969	30916
328.1094	13794	186732	56754	306037	282231	52326	6030	59695
495.3258	158915	270429	199465	318077	119104	217259	290959	242478
255.2302	272602	254575	129300	104853	87073	146197	289487	275863
482.3583	293889	349527	187566	337022	178856	292163	154793	245289
237.2204	439116	535811	328947	251349	254093	346858	491143	425878
480.3426	270978	380045	305569	311843	198169	255703	179082	296929
496.3386	2850261	2176661	2032382	2386771	847848	1973770	1550561	1527071
703.5723	1238583	1265540	1301092	919035	1042697	1567583	641126	729808
510.3537	296736	243249	258307	197740	104466	244218	92711	196772
497.3425	7144310	5572869	5954958	5712213	3260840	7146080	3593472	4813731
569.3392	328054	192727	252766	120979	55747	164391	155834	231175
424.3406	293003	178007	96342	138279	83344	190541	52216	197944
302.1953	913627	336996	596362	829946	912573	797420	789518	448826
546.3528	408170	535598	590847	571153	301158	714978	303447	555329
497.3415	753417	648521	500261	764988	322784	885327	302633	485289
494.3224	573094	678409	684208	1354469	431346	914874	972576	785174
704.5753	819254	580736	370017	441613	540314	698725	275009	675441
526.2893	279774	339765	265171	153506	146945	214282	280178	323951
547.3555	145477	186487	245466	188881	123557	232352	92673	180219
702.5605	1837358	980987	833389	978484	984118	1100679	610173	793900
426.3564	611782	276227	213327	243197	184813	258315	155478	309056
991.6705	2255668	1914554	1826240	1795186	771723	1834747	947034	1702627
544.338	1479950	1289268	1739505	1122352	1085019	967995	817950	1266055
523.357	1660021	2192307	2389981	2446652	797654	2522657	976341	1619839
342.7775	643928	397214	353313	322685	188559	554536	219584	328224
498.3426	1104034	1048241	970764	978148	645679	989364	693990	825546
188.0699	2883313	1979094	1213503	1772129	1688954	932946	1312843	882724
342.2765	1251874	925886	663382	692141	381159	1213647	388037	732480
343.2841	216406	319868	275860	193660	231655	339587	292003	250321
992.6735	1076328	904417	971847	850345	431724	939352	441402	849433
568.3371	810159	429891	495079	250625	135528	435466	357850	616838
689.5561	363715	388296	243735	254806	172522	320343	217101	185474
524.359	359648	416192	508920	485634	175685	485238	126491	296760
783.5698	308867	320555	839456	466648	682698	567005	267738	493939
329.2686	403444	419564	392259	432973	184242	715418	384611	385046
305.2458	535192	338909	286340	300752	255674	193578	361185	250368
310.0465	166973	827129	196606	327511	372579	403330	333013	1158812
586.2716	804897	315898	145795	552139	839888	166027	346646	560238
308.0503	475829	2269544	499102	825274	927003	1084275	711012	3144234

m/z	NACS 386	NACS 390	NACS 393	NACS 396	NACS 398	NACS 403	NACS 448	NACS 451
363.2147	98248	149445	129088	66497	135156	28671	155071	68109
121.028	39663	163449	42039	32933	8829	112132	244913	372971
181.0714	61919	95820	67190	521640	278926	390361	185048	130704
203.0516	1426374	693514	801240	689202	919317	692883	914430	1030995
139.0383	35731	148890	27108	23992	5448	81387	199464	295526
195.087	35838	52655	38531	847769	944070	259179	138298	75958
328.1094	268847	145611	50447	59531	311072	637371	7209	401103
495.3258	179960	222216	306559	258102	315568	130834	345591	304699
255.2302	226568	246779	105006	410210	347918	128323	308380	89774
482.3583	213763	359168	322933	240916	224778	285736	501511	325506
237.2204	493974	416491	222367	922992	794111	383791	734858	230314
480.3426	145001	298031	391330	248775	292722	245154	474258	361170
496.3386	1744647	3865848	3468389	2349397	2094662	2627316	2218102	3194858
703.5723	1294146	1408009	1037824	1243229	1204438	1284169	1999185	2000451
510.3537	157598	259303	362066	228873	145277	280210	414470	322217
497.3425	5353211	5651066	7139039	4669786	5446204	4850434	8214488	7016774
569.3392	132721	240518	264452	217514	143301	205370	405130	255209
424.3406	171906	207227	173619	387384	275327	281460	326823	154809
302.1953	229413	425740	777458	666778	448584	1060712	263468	440006
546.3528	563765	565669	1061691	352237	504817	692802	645337	415547
497.3415	474607	2202972	872566	659278	801934	754390	859480	1340614
494.3224	540449	821717	1155218	863803	676398	833837	816723	1019297
704.5753	590694	1139696	487529	639729	480655	646380	1528393	817311
526.2893	238375	304411	301516	321383	297412	197819	376932	299201
547.3555	203460	202368	614781	101868	196557	272629	211421	160255
702.5605	893133	1533159	1525935	998826	692620	893915	2144429	1473074
426.3564	436986	469667	277920	587546	650013	517667	540428	257942
991.6705	1188113	2138872	2486584	1387354	1095756	1652216	2944410	2010277
544.338	1228328	1661104	4000953	1362839	1627343	2023722	2189144	1380920
523.357	1380408	1506639	2072365	1707469	1478859	1611538	2679665	1775767
342.7775	1029618	786949	353232	528540	399598	557923	860419	658874
498.3426	855718	1387425	1052725	983354	773163	943735	1274730	1155511
188.0699	1320965	2174466	773959	1446735	1849982	1867528	960947	1065182
342.2765	1358547	1545462	783796	1193217	818775	1101146	1680130	1252932
343.2841	391834	790572	467294	219129	285090	420299	592861	704848
992.6735	597407	1477045	1742647	725673	544926	767603	1249015	1044612
568.3371	364815	382871	715926	608528	437565	590568	1049690	706994
689.5561	410274	546025	291662	228981	352340	332844	689242	506160
524.359	309813	304462	417417	317310	270696	340209	531939	322992
783.5698	682663	1115690	661674	353137	352935	933814	851006	942609
329.2686	666695	630779	492744	460070	448205	444403	854062	635804
305.2458	420989	568582	455128	453627	715139	509748	671076	284053
310.0465	228227	535615	2140494	1376	859702	1892080	1023235	3300350
586.2716	1549868	610764	441773	260070	650732	768590	384926	338012
308.0503	516767	1403661	5649070	1752	2234183	4987201	2776403	7127638

m/z	NACS 463	NACS 484	NACS 486	NACS 488	ACS 114	ACS 151	ACS 170	ACS 172	ACS 175
363.2147	6651	84326	59446	55410	162348	134809	74861	200399	155387
121.028	32241	107094	65211	121064	152925	437294	454687	414765	213206
181.0714	32323	13018	154843	278070	21986	199494	305852	831947	99970
203.0516	685260	820942	931665	769452	695339	1385348	1035509	1368274	687806
139.0383	20695	73338	37588	89434	102666	347738	334517	288939	184256
195.087	63808	6392	339376	199699	8329	375815	588965	1025181	60703
328.1094	84004	86833	126924	7562	3395	3273	6631	12245	3719
495.3258	317100	196120	117312	429365	107013	238926	49587	203642	124835
255.2302	302978	150181	113667	317988	164283	122117	104602	110527	136349
482.3583	224245	327535	188677	363217	118079	211967	109878	207481	299421
237.2204	674016	334312	232939	734884	346783	138413	288968	237959	347234
480.3426	270177	251395	146179	304543	142312	212013	128656	282651	270784
496.3386	1232045	2525367	988257	2807922	992837	2001108	558977	1670707	2156528
703.5723	1330550	1345644	678654	1683308	1131791	850094	419204	506317	1278214
510.3537	145104	219895	108482	233538	141076	149847	72575	187417	188798
497.3425	4467170	5607364	3128223	5901246	3510955	5807791	2803890	4379659	5089142
569.3392	261861	245327	66892	270902	80628	161774	78054	157559	211614
424.3406	149412	218882	136501	295973	125300	85044	111031	97088	94445
302.1953	606236	561133	271545	434003	925195	382776	586214	835826	675153
546.3528	383632	322477	266334	934873	95240	726478	59535	198131	563370
497.3415	327108	1040436	302755	859475	286652	1116354	152993	496752	648497
494.3224	1008628	547866	764399	1178323	395816	1485222	194919	573789	561836
704.5753	618695	246760	324509	748897	515173	420052	200287	259546	613687
526.2893	382592	289677	117381	396555	149188	227611	189382	235709	193876
547.3555	155500	132532	119236	308698	55096	227041	30922	88466	203586
702.5605	1145153	904922	428271	1257013	692421	718456	977115	785400	810462
426.3564	435703	399182	383592	611469	232078	181330	283152	285342	218553
991.6705	1322558	1511633	779596	2127950	674062	1770214	538349	1278644	1476631
544.338	912059	1176972	1171411	2986547	466545	1991776	385293	1171854	1520178
523.357	1575508	1853155	1307479	2920558	768232	1972865	542818	1700765	2464917
342.7775	512539	477444	149167	249943	311823	198075	408848	254328	282276
498.3426	842517	928433	549652	964608	602831	931580	534184	784507	892232
188.0699	1680845	2242944	1942287	1449510	1057736	1340113	1798189	776004	1348790
342.2765	1077322	794514	270933	594150	631283	564884	852715	572371	556098
343.2841	277277	273977	233930	342772	403453	151698	214028	252001	180259
992.6735	885048	814590	451401	1171422	376456	941253	304707	650095	774061
568.3371	659585	590774	180886	729928	225014	491239	222099	406326	591909
689.5561	385802	228996	104894	215963	357023	180041	237753	235933	291235
524.359	300274	278653	242837	551586	174240	352943	115136	333886	347138
783.5698	297520	250025	612586	398586	243583	323622	341924	621130	158447
329.2686	299913	474228	142993	400345	242482	456788	383264	140714	529128
305.2458	258101	193752	247124	360394	322708	402431	157377	201850	415529
310.0465	1229607	6985422	79619	1052572	2039	795	557	1514	1173
586.2716	126613	376806	322235	422686	163994	289895	828508	189324	276173
308.0503	3048898	19569902	246867	2874171	1778	1769	2376	2376	2149

m/z	ACS 188	ACS 190	ACS 200	ACS 202	ACS 233	ACS 245	ACS 263	ACS 277	ACS 280
363.2147	152527	37957	199504	117396	150951	86411	208831	185709	123761
121.028	234854	401026	278635	511802	472252	265190	255344	359730	167830
181.0714	184694	275381	461209	547670	226883	459962	1192763	337173	368506
203.0516	1935150	2413420	1096216	1085956	730369	1920397	1025353	1060710	1063700
139.0383	147865	287154	204719	324132	335940	203819	184131	274707	129344
195.087	215015	497861	969440	475452	349589	381024	1557920	683617	308824
328.1094	14534	8885	4426	5062	28671	20160	5013	8965	4784
495.3258	114572	129135	95668	117271	119062	93021	298206	137241	209143
255.2302	43669	126696	41499	129366	123957	61224	225706	270489	155348
482.3583	169943	289318	165696	327885	232385	152539	311073	245635	186909
237.2204	130683	264692	62931	328616	260856	152681	631938	512874	325309
480.3426	80343	324580	141271	248901	264009	150321	420535	205627	162563
496.3386	1181697	2458592	944567	1842697	1807311	1111250	2482476	1660549	1280454
703.5723	519414	976271	1247981	1245344	408643	1255886	880440	1374717	495988
510.3537	106232	253095	86921	189612	299512	141805	196842	161301	122786
497.3425	3864053	6687664	3681372	5473008	4298661	3884305	4989024	4703484	4203601
569.3392	59176	194710	63744	222627	194929	68096	174019	118773	35021
424.3406	124785	248318	70010	153907	183442	127483	184626	154643	178598
302.1953	776667	721150	474298	861999	498848	739753	861624	841315	922933
546.3528	142870	176844	113024	153042	392294	284647	659934	274753	508018
497.3415	271946	688471	293676	533966	656789	310544	596089	660039	398654
494.3224	253344	716440	332733	455879	370027	349409	1007574	483918	814566
704.5753	414396	178690	516264	563169	253708	579589	401138	603368	155020
526.2893	122211	313277	112532	208999	191796	130765	253627	182619	86093
547.3555	29139	89740	50978	86449	126958	101502	228750	112468	148056
702.5605	806864	1363034	721197	1616350	685429	675066	950805	1023522	707662
426.3564	290017	535600	212101	467414	331022	289190	296314	363707	249974
991.6705	1116750	2207526	856225	1831044	1409059	896908	1762242	1698843	1169831
544.338	646674	721772	516963	1257472	1201327	669664	1713199	1174256	961634
523.357	562363	1783384	932219	1494292	1717953	764037	1979133	999156	1270127
342.7775	154896	516024	315381	355676	352969	220854	450027	517390	320071
498.3426	665694	1081980	683984	891098	831016	814776	921206	896937	1131853
188.0699	2476837	765638	920242	800588	1163190	720076	1018700	1312687	1183788
342.2765	320734	1123405	674064	900626	713733	405113	772180	1128566	712011
343.2841	236027	274184	350069	134099	115837	201220	297866	410704	315431
992.6735	564426	1216738	480149	920804	716011	455224	924840	910898	578814
568.3371	143303	461708	140427	580259	540144	196160	424694	293600	95265
689.5561	270930	268551	115771	260296	194416	372681	323025	254538	204125
524.359	104925	302268	206301	322084	361075	179307	409753	201863	245242
783.5698	230699	337432	506631	357972	233791	189055	753924	345612	567170
329.2686	108274	418119	212882	282080	557823	343330	351267	364022	218748
305.2458	224576	257459	112429	350099	311609	272175	419396	494837	234464
310.0465	1166	369	1332	1157	1497	1658	814	2863	1088
586.2716	393341	94713	367814	209473	126229	327934	430117	655540	162450
308.0503	2458	2161	2345	1437	2238	1435	2679	2034	2156

m/z	ACS 354	ACS 356	ACS 360	ACS 410	ACS 56	ACS 87
363.2147	192701	81038	138249	141105	148479	257544
121.028	183032	39686	261568	97869	110115	3531
181.0714	288692	65540	299673	532272	654024	776845
203.0516	1097026	971406	913023	1548196	1484391	988337
139.0383	161388	34730	205649	60063	79222	914
195.087	132299	25231	437219	585766	1233186	1336471
328.1094	3801	4690	3951	3968	4256	5125
495.3258	202601	200940	88711	179529	152579	185230
255.2302	86591	206334	49315	205501	63004	138215
482.3583	254059	276502	188846	172707	111365	258075
237.2204	201969	584756	112986	402205	121880	227830
480.3426	205908	351496	239523	226220	85711	229425
496.3386	1783063	2566488	1189943	1528073	1176531	1833387
703.5723	1300646	1429818	698386	955937	484746	1722366
510.3537	133819	192895	109310	194016	70338	264456
497.3425	3823949	5173958	4939955	5251327	3065970	4862192
569.3392	159772	239724	138440	217874	94614	182750
424.3406	130458	282844	185156	90746	60230	104334
302.1953	981783	536596	663288	610077	818123	820807
546.3528	470759	595814	304425	383204	246188	454021
497.3415	423584	665331	190233	481233	400469	483333
494.3224	716366	897437	448719	702776	601481	586745
704.5753	635306	745065	724607	430102	177690	832935
526.2893	164606	524840	174358	342467	121249	294589
547.3555	179378	235873	127812	122243	95550	203764
702.5605	604221	1083618	477419	737591	345432	893977
426.3564	230509	507269	246280	178765	199318	209684
991.6705	1154662	1537009	947616	1296551	502050	1416123
544.338	1846482	1704755	1405020	848487	752155	1108287
523.357	1879173	1614793	1167233	1912426	988356	1480228
342.7775	400278	539597	246180	238318	131611	579072
498.3426	767271	844449	726071	781206	526093	840183
188.0699	1865484	1578805	801284	846545	1262279	1364122
342.2765	779148	1274804	510938	607243	263023	957344
343.2841	84509	449361	297385	229370	220219	314398
992.6735	546277	711457	563430	707252	317771	729826
568.3371	459541	659202	387996	592422	265195	560201
689.5561	227786	272968	176213	236456	112310	219478
524.359	327091	509231	165959	402424	185238	277055
783.5698	699973	718536	344104	155074	259850	727540
329.2686	263068	614866	382561	420551	254409	594127
305.2458	211861	422934	297149	164747	141529	404395
310.0465	1031	309905	218817	1177	153755	433447
586.2716	291543	704114	372042	155666	116781	283856
308.0503	3983	799178	597736	1485	388584	1306868

Supplementary Table 2: intensity of m/z with VIP>1 in negative mode

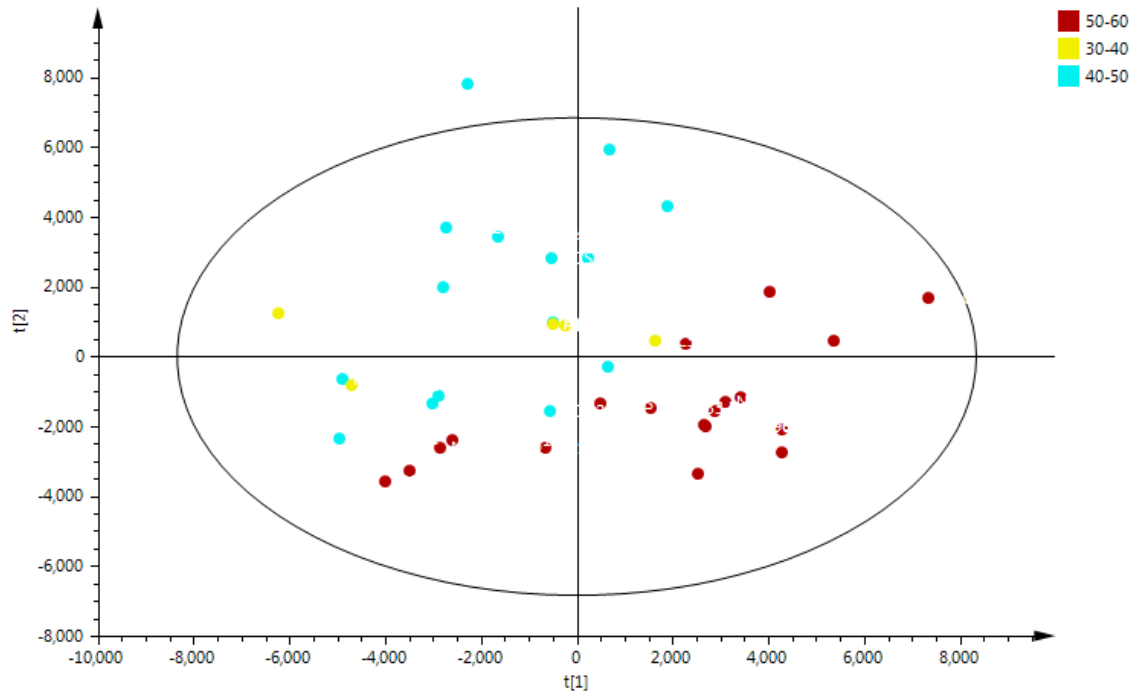
m/z	NACS 260	NACS 274	NACS 292	NACS 304	NACS 305	NACS 308	NACS 315	NACS 321
541.2624	41590	44284	2461	47519	35724	44950	35787	18337
525.2666	24181	13892	6164	27003	8090	47072	16646	2910
215.0331	152844	268622	229270	231966	180586	236174	258147	161149
137.0265	36673	7846	1220	327279	473752	486251	454666	784736
413.1968	91892	52263	110627	376850	92500	13638	58084	81079
541.2630	104571	94905	20125	165265	76967	114307	51953	115287
93.0374	116584	35621	2769	138077	228423	159104	189581	330405
217.0296	80698	69112	80608	82591	74740	73681	97651	57739
542.2655	20533	35278	8125	12970	7055	42511	19643	5350
194.0465	24057	4191	2286	112347	163541	179006	110006	2821
204.0853	7161	13780	67060	7103	15708	34627	4306	67188
540.2495	65014	34598	2564	63827	33939	61531	36009	4048
539.2473	167565	117396	3314	159845	113055	216223	116548	68745
150.0574	11934	899	752	20195	86255	88692	44429	18214
481.3115	1087550	1455636	1748384	1427744	1030592	1322565	562126	1391717
482.3124	188270	309760	339467	297566	173000	281078	91814	285152
378.2399	273029	240817	418740	355708	312783	326712	201308	269495
253.2167	208557	421047	235034	116379	117583	118912	216357	183071
590.3422	123201	241372	359974	335997	224138	405036	195625	247684
331.1743	11978	43041	2176	18104	12658	48048	9643	6448
502.2913	69920	180988	126073	259729	125664	167508	65144	114562
370.0763	375151	3422	513568	428047	302973	225032	129808	604151
203.0835	570963	588664	1914	740521	551350	477067	394780	496636
540.3279	837425	1263945	1176208	1483053	730841	1177739	649227	1189449
484.0631	8946	137742	997	50961	65501	19654	15827	15651
588.3279	475680	411313	604538	655112	565217	465696	354979	416843
541.3302	274025	335786	364133	478376	253861	380034	198771	360482
612.3270	280921	193587	168890	149311	106247	216421	163959	252329
482.0658	34404	330496	35843	45320	110641	62531	12993	15878

m/z	NACS 386	NACS 390	NACS 393	NACS 396	NACS 398	NACS 403	NACS 448	NACS 451
541.2624	68111	124542	105658	34628	64522	45147	39041	83108
525.2666	25316	87475	92510	20802	22662	20968	34136	37693
215.0331	335255	228973	256145	207054	209248	194283	314912	266746
137.0265	184548	632830	212366	134604	38252	491904	301037	1583546
413.1968	7573	8191	202081	20387	8795	5495	89359	9608
541.2630	153487	333131	204535	72531	262161	136466	164541	151903
93.0374	71910	213202	236960	88014	15193	122718	450388	399629
217.0296	166081	106791	99817	60702	75919	61002	125247	134028
542.2655	34619	111864	68581	28928	56413	37379	48968	57118
194.0465	159680	104430	109390	94253	16904	154482	90894	329205
204.0853	64636	44125	23431	69002	91924	67048	68146	70004
540.2495	55420	156485	88004	15083	40039	59745	34617	78924
539.2473	183921	435034	237305	22291	111269	157712	115093	346894
150.0574	62843	30712	41012	34826	3362	43031	20297	190569
481.3115	1352310	1753914	1545932	1620896	1157012	1381434	1194900	1482974
482.3124	274476	319214	266162	292584	244202	290335	254801	294864
378.2399	420185	592900	424426	268929	272089	382099	342767	436942
253.2167	269131	87733	76477	340426	392207	118511	282958	82719
590.3422	297197	355998	599893	157040	360340	364505	269606	330558
331.1743	17790	20133	9548	61740	29271	22058	3929	33065
502.2913	165346	143248	206090	90000	195757	126863	133961	115334
370.0763	343152	263600	628899	527755	66359	423401	198440	1171911
203.0835	22118	3621	611327	478507	5459	1748	4551	1785
540.3279	1286517	1805064	1833214	1177749	1043574	1389812	1987294	1981410
484.0631	22615	24527	945005	824	69796	306666	114314	138925
588.3279	703249	940847	1448859	615843	936572	971728	859674	742875
541.3302	422860	648896	638832	692193	332363	408404	590051	988028
612.3270	228628	416001	263829	271402	227576	290833	423975	402795
482.0658	30314	42909	911440	1231	100371	729585	265307	329475

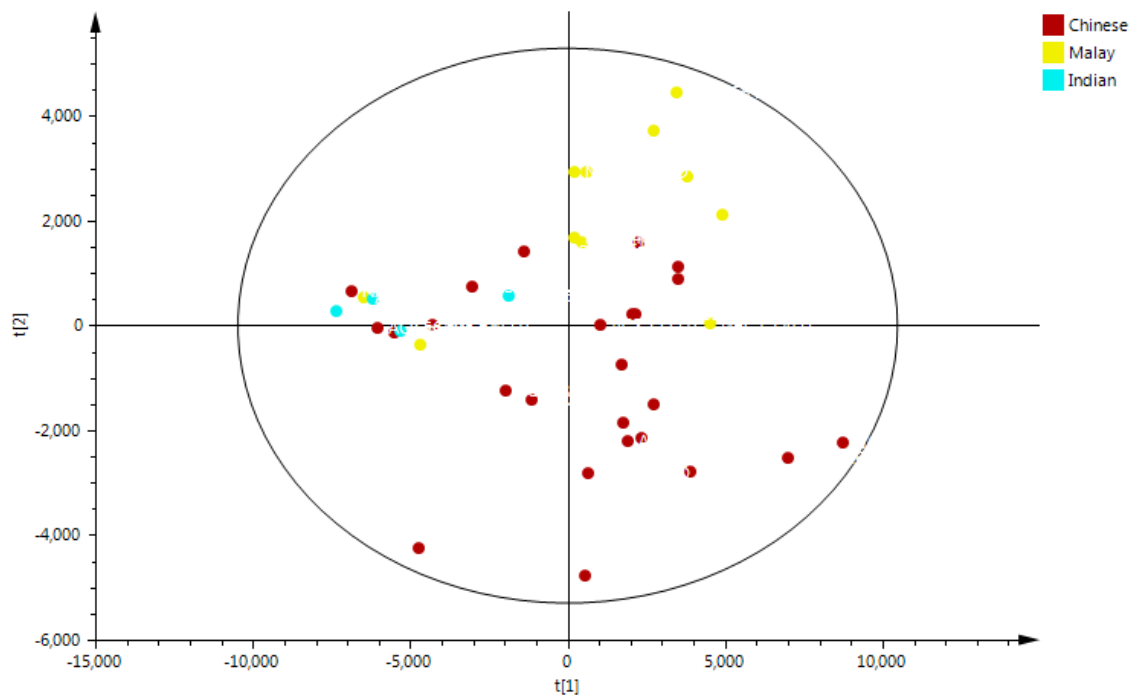
m/z	NACS 463	NACS 484	NACS 486	NACS 488	ACS 114	ACS 151	ACS 170	ACS 172
541.2624	6992	49651	10141	38449	142829	95175	50309	158281
525.2666	3914	33795	11099	25373	123594	118623	30917	269972
215.0331	264962	269383	169273	291465	291681	412667	276050	388572
137.0265	126108	501210	127690	843408	709523	1681483	2137127	1674630
413.1968	21276	160473	48498	99606	684105	629831	316987	920440
541.2630	18608	227609	43977	81734	357651	139376	120647	370311
93.0374	48754	203857	26869	276707	285546	893882	889852	587630
217.0296	115825	108439	67967	97819	123470	166780	84614	134694
542.2655	6437	58317	6314	12319	105265	11971	37921	134290
194.0465	26810	248286	26892	61167	125223	526857	289387	400812
204.0853	52699	30262	74434	18002	2368	22493	3900	3432
540.2495	16311	91084	6022	39670	169715	96992	41967	85416
539.2473	19005	234824	75036	149258	577338	323045	133157	245302
150.0574	7449	103096	17169	18870	51617	221827	169351	160652
481.3115	1273154	1468656	994224	1126606	1045326	573524	698687	738420
482.3124	224496	277171	169938	268610	209142	250634	143738	172951
378.2399	208009	487161	245744	497365	98175	349675	227722	266352
253.2167	256408	180235	112979	172669	125794	165099	134987	204544
590.3422	120053	273934	139079	486503	93843	410622	78587	124763
331.1743	5882	28092	131284	3293	5508	7227	28697	390195
502.2913	52480	101208	73600	331965	30244	156775	38953	55594
370.0763	115684	652605	85283	15269	43354	739509	297767	305910
203.0835	95698	665883	3035	549288	289997	559576	617041	439592
540.3279	509696	1491230	520303	1857758	526032	1778683	635946	735530
484.0631	94755	874116	1390	37001	1596	1368	2409	1169
588.3279	278824	684914	391503	1329651	289329	890457	238238	435403
541.3302	176659	456172	170668	578609	165875	568028	189493	246454
612.3270	227414	378291	80982	384183	169035	245019	141371	124550
482.0658	294518	2020069	455	73964	601	612	1684	2338

m/z	ACS 175	ACS 188	ACS 190	ACS 200	ACS 202	ACS 233	ACS 245	ACS 263
541.2624	53289	106120	15959	103466	177474	95900	48934	138918
525.2666	109725	84471	2744	125036	128209	115091	63439	142164
215.0331	211016	388333	440203	358104	270039	229808	488413	345525
137.0265	1096131	776539	1381767	1186852	1841868	2121951	1176148	1205487
413.1968	410612	308704	15559	719360	650005	222062	289717	339795
541.2630	227476	284524	13755	279463	264127	229517	159855	210913
93.0374	387190	331971	616081	321026	550434	902955	458335	518596
217.0296	81340	123180	198847	152538	131538	84140	189746	117762
542.2655	76717	77888	7487	23062	84117	68555	47406	56248
194.0465	105358	90558	250454	267992	348278	128013	117923	338573
204.0853	3227	7930	10707	25810	30806	6168	6201	9933
540.2495	42429	52436	10798	47471	101712	77388	74888	83006
539.2473	190955	179787	43768	216646	362481	240169	139645	213720
150.0574	39308	44193	143526	107636	149978	7145	55054	163699
481.3115	1207531	911070	1889956	1293102	1126541	1321080	1182867	940845
482.3124	234790	152495	244465	252039	172387	285307	248396	179821
378.2399	151711	155124	364081	280642	274713	254053	324564	415262
253.2167	167507	43683	150717	37472	126934	130838	85368	337833
590.3422	324089	66707	102545	132599	108326	209951	185497	52898
331.1743	6850	8699	86426	152975	342464	5417	43592	645485
502.2913	94477	30624	105642	42183	70611	85639	106418	257271
370.0763	9972	40665	151039	141381	289126	94689	52013	330768
203.0835	452193	430520	433893	601134	99841	558816	444249	460865
540.3279	925825	493714	1063112	887333	1012691	1239601	913190	1274513
484.0631	2118	1680	1020	1268	1361	2134	1397	2896
588.3279	643680	311611	372394	384176	380686	381763	323825	798707
541.3302	289736	161139	373192	301329	332607	460586	210983	491527
612.3270	280430	83956	217020	122426	205020	264653	115213	228315
482.0658	824	544	617	453	725	2306	892	1240

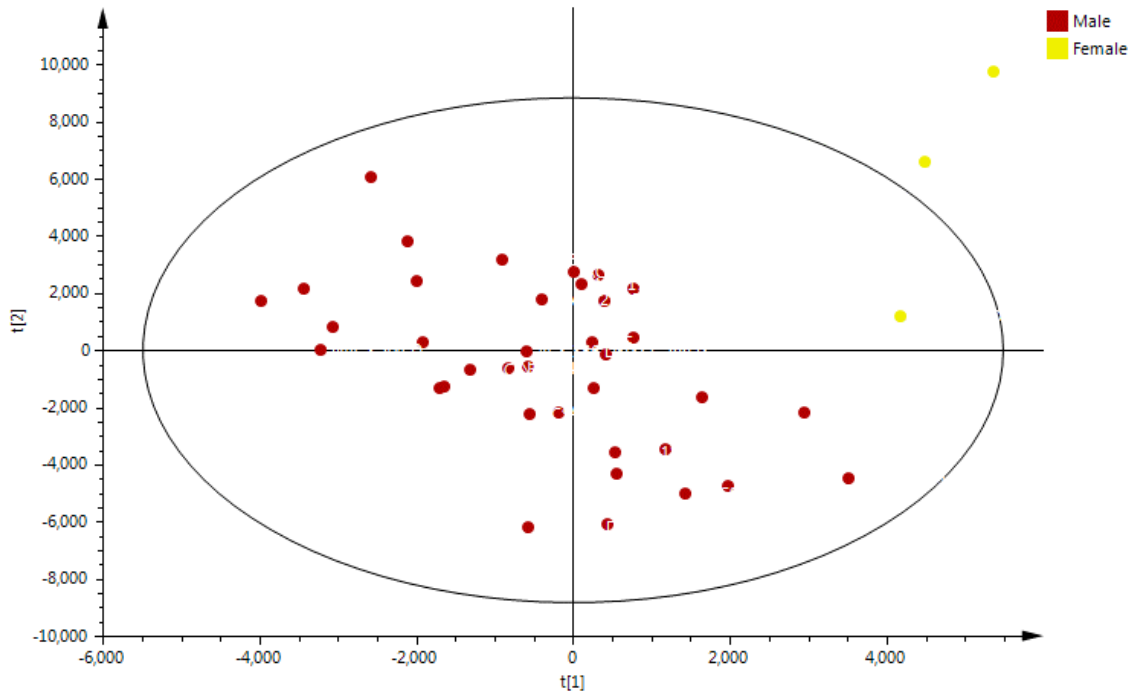
m/z	ACS 277	ACS 280	ACS 354	ACS 356	ACS 360	ACS 410	ACS 56	ACS 87
541.2624	173057	70920	143555	156412	159584	193783	79747	141057
525.2666	232390	33265	67912	60430	192755	109412	92714	390171
215.0331	402603	319278	471287	230436	311275	469514	411338	253958
137.0265	1927264	845844	1166714	167833	1135649	380398	592204	9534
413.1968	929701	295600	569748	7489	10230	273580	386618	23954
541.2630	385970	203340	198405	230725	353560	353448	114868	425179
93.0374	667587	274162	447671	53778	345280	222821	162387	8784
217.0296	134944	116463	169765	88521	132626	176189	160853	123609
542.2655	137021	21573	64369	69576	109441	119992	41543	137945
194.0465	453691	156449	375808	160321	186671	61881	158547	638
204.0853	10261	5115	6612	41865	36789	7904	2296	37986
540.2495	157097	35940	109269	62807	136319	69286	48223	142267
539.2473	464765	105142	308275	211831	434889	219287	144249	415038
150.0574	186571	53769	162214	64402	83447	27206	65375	638
481.3115	1317164	922636	730658	1211147	1054292	631068	939511	1158314
482.3124	273940	157089	238312	223154	239553	123521	176055	233734
378.2399	347959	288217	280011	187609	278151	308485	259944	180054
253.2167	223014	152082	108068	142143	33975	162317	83894	73979
590.3422	197259	373017	398490	214620	296226	209354	170175	281601
331.1743	30380	46544	5562	20236	81257	642103	14610	19267
502.2913	95274	127407	105942	147086	59522	189391	60143	116479
370.0763	673231	41532	186937	264125	88341	51189	47079	4968
203.0835	893336	493579	688552	1497	2992	422857	450761	491926
540.3279	1321242	806484	1160990	1050575	1085455	1101501	618638	935287
484.0631	1223	1177	1502	18024	8337	881	4305	9209
588.3279	541278	496389	978939	696193	823612	477290	462583	479717
541.3302	420149	276240	388592	391018	330606	379043	251050	295483
612.3270	205267	66298	271157	334953	196683	219811	138515	218371
482.0658	1567	382	1426	45027	10178	641	1136	11229



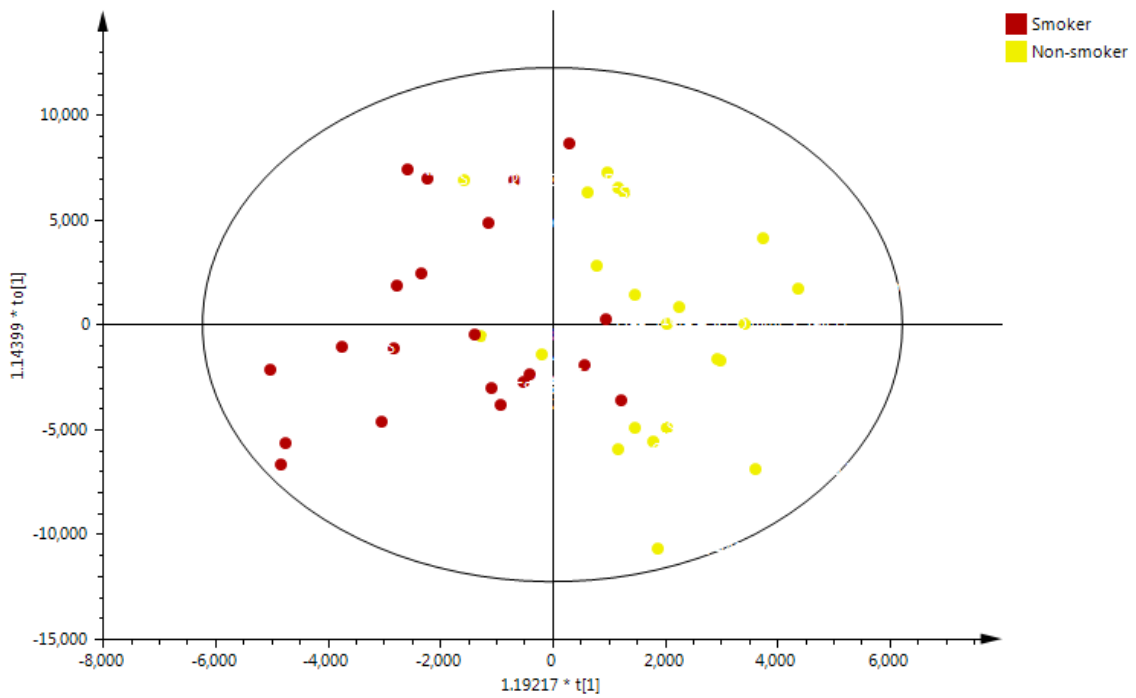
Supplementary Figure 1: OPLS-DA score plot according to age



Supplementary Figure 2: OPLS-DA score plot according to race



Supplementary Figure 3: OPLS-DA score plot according to gender



Supplementary Figure 4: OPLS-DA score plot according to smoking/non-smoking