

Table S1. Metabolites identified by Chenomx 8.2.

	Label	3-Hydroxybut	3-Hydroxyiso	Acetate	Acetone	Alanine	Arginine	Asparagine	Aspartate
1	TCG	0,02912	0,01708	0,07056	0,02072	1,53496	0,79408	0,31752	0,94332
2	TCG	0,02408	0,021	0,07056	0,01288	1,5862	0,91532	0,51408	1,085
3	TCG	0,01456	0,01708	0,02996	0,0308	0,18648	0,17556	0,17556	0,04928
4	TCG	0,06132	0,02436	0,23884	0,02688	2,01964	0,91616	0,43148	1,56772
5	TCG	0,02828	0,014	0,00812	0,00924	0,25088	0,1288	0,1288	0,161
6	TCG	0,0434	0,01932	0,23604	0,0112	1,9236	0,86828	0,47964	1,1466
7	TCG	0,0252	0,021	0,1834	0,01148	1,54056	0,77224	0,3402	1,09844
8	TCG	0,04032	0,02688	0,2716	1,00E-08	2,0342	1,18608	0,78148	1,40952
9	TCG	0,02093	0,014168	0,13685	0,011592	1,496012	0,59248	0,417956	1,111544
10	TCG	1,00E-08	0,01428	0,09072	0,01008	1,38096	0,65212	0,33432	0,89348
11	TCG	0,0378	0,00616	0,06636	0,0084	0,13748	0,02968	1,00E-08	0,021
14	TCG	0,0826	0,01932	0,13496	0,01344	1,36164	0,91392	0,4186	1,09284
15	TCG	1,00E-08	0,0224	0,04172	0,02492	0,83356	0,46648	0,2408	0,30128
16	TCG	1,00E-08	0,01764	0,0574	0,0084	0,7714	0,51268	0,30548	0,40124
17	TCG	1,00E-08	0,00616	0,01568	0,00168	0,28532	0,15204	0,0868	0,26376
101	Control	1,00E-08	0,01596	0,06244	0,0042	0,14924	0,0896	0,09044	1,00E-08
102	Control	1,00E-08	0,2464	0,10472	0,00588	0,119	0,04424	0,01372	1,00E-08
103	Control	1,00E-08	0,01596	0,04424	0,007	0,16632	0,06888	1,00E-08	0,0714
104	Control	1,00E-08	0,01232	0,04844	0,00448	0,07168	0,03556	1,00E-08	1,00E-08
105	Control	1,00E-08	0,0098	0,02716	0,00504	0,16324	0,10948	0,13608	1,00E-08
106	Control	1,00E-08	0,02128	0,01736	0,00728	0,14728	0,07868	1,00E-08	0,04088
107	Control	1,00E-08	0,01484	0,0378	0,0056	0,04564	0,05992	1,00E-08	1,00E-08
108	Control	1,00E-08	0,0056	0,03724	0,0112	0,10192	0,08288	0,05292	0,05124
109	Control	1,00E-08	0,0126	0,02716	0,00532	0,05964	0,03024	0,05796	0,04732
110	Control	1,00E-08	0,0056	0,0126	0,00812	0,0406	0,0196	0,01932	0,02716
111	Control	1,00E-08	0,00812	0,01792	0,0014	0,04788	0,04032	1,00E-08	1,00E-08
112	Control	1,00E-08	0,0084	0,04144	0,01008	0,09604	0,07504	1,00E-08	0,02996
113	Control	1,00E-08	0,00672	0,02884	0,00392	0,13636	0,06356	1,00E-08	0,03332
114	Control	1,00E-08	0,00756	0,04984	0,00252	0,03248	0,0238	1,00E-08	0,02296
115	Control	1,00E-08	0,00728	0,01652	0,00252	0,091	0,03612	1,00E-08	0,03052

Table S1. Continuation...

Carnitine	Choline	Citrate	Creatine	Creatinine	Dihydroxyace	Ethanol	Ethanolamine	Formate
0,035	0,85148	1,00E-08	0,39032	0,105	0,05152	0,22596	0,6202	0,07588
0,09492	0,97244	1,00E-08	0,35952	0,08232	0,049	0,26544	0,76748	0,06888
0,02828	0,10696	0,1484	0,02492	0,01204	1,00E-08	0,17192	0,02128	0,0756
0,13076	1,799	1,00E-08	0,86016	0,10668	0,00952	0,1092	1,24264	0,10192
0,02632	0,0756	0,0098	0,02716	0,02016	0,01624	0,11508	0,06608	0,06328
0,1008	0,40404	0,09548	0,31192	0,06104	0,02968	0,29596	0,5432	0,07672
0,19404	1,22892	1,00E-08	0,4326	0,47656	0,03948	0,36288	0,91476	0,07924
0,21308	1,06036	1,00E-08	0,60228	0,0924	0,04032	0,20524	1,0948	0,0812
0,098532	0,94024	0,05313	0,360318	0,052486	0,029624	0,605682	0,673624	0,079856
0,07	0,83412	0,03668	0,26208	0,13748	0,00896	0,5054	0,37268	0,09632
0,00448	0,03584	1,00E-08	0,00504	0,00476	0,00168	0,4186	0,01708	0,09464
0,0588	0,76412	0,03472	0,3248	0,07084	0,04872	0,41916	0,68124	0,05908
0,0714	0,21896	1,00E-08	0,11144	0,10472	0,06328	0,26852	0,2086	0,18032
0,028	0,20804	0,0364	0,15148	0,05712	0,02296	1,85892	0,1596	0,10528
0,01708	0,18592	1,00E-08	0,12012	0,01036	0,0126	0,06048	0,18984	0,0266
0,00644	0,08596	0,09492	0,26208	1,00E-08	1,00E-08	0,1918	1,00E-08	0,05964
0,00616	0,0714	0,00392	0,014	0,00392	1,00E-08	0,28616	1,00E-08	0,0518
0,00672	0,06356	0,14588	0,0042	0,00588	1,00E-08	0,20664	1,00E-08	0,07784
0,00336	0,0518	0,09744	0,01484	0,0056	1,00E-08	0,19208	1,00E-08	1,00E-08
0,00672	0,09492	0,06972	0,01904	0,01904	1,00E-08	0,14924	1,00E-08	0,06356
0,00588	0,05096	0,07756	0,01876	0,0098	1,00E-08	0,18088	1,00E-08	0,05684
0,00504	0,0392	0,1554	0,00616	0,01708	1,00E-08	0,2072	1,00E-08	0,06916
0,00252	0,04788	0,07588	0,01568	0,02492	1,00E-08	0,20328	1,00E-08	0,07616
0,00532	0,04368	0,06104	0,00476	0,02296	1,00E-08	0,17724	1,00E-08	0,07336
0,00224	0,01876	0,0378	0,00252	0,00168	1,00E-08	0,1666	1,00E-08	0,02268
0,00756	0,04004	0,063	0,01372	0,00308	1,00E-08	0,13916	1,00E-08	0,03276
1,00E-08	0,04116	0,06048	0,01764	0,00532	1,00E-08	0,20496	1,00E-08	0,02968
0,00952	0,09128	0,05936	0,02492	0,00476	1,00E-08	0,11004	1,00E-08	0,03556
0,0028	0,03192	0,04256	0,00476	0,0056	1,00E-08	0,08764	1,00E-08	0,02408
0,0056	0,0364	0,05544	0,01596	0,00364	1,00E-08	0,12096	1,00E-08	0,02968

Table S1. Continuation...

Fumarate	Glucose	Glutamate	Glutamine	Glycylproline	Glycine	glycolate	Histidine	Hypoxanthine
0,01876	0,9072	3,09624	0,97832	0,315	1,74748	1,00E-08	0,15008	0,47768
0,01288	0,9044	4,34504	0,89152	1,00E-08	1,60104	1,00E-08	0,21112	0,34132
1,00E-08	0,17696	0,1442	0,04732	1,00E-08	0,10052	1,00E-08	0,01708	0,042
0,01176	0,26404	5,75456	0,70084	1,00E-08	2,81372	1,00E-08	0,21924	0,53536
1,00E-08	0,34524	0,61516	0,18816	1,00E-08	0,34692	1,00E-08	0,042	0,08932
0,01288	0,69244	2,36348	1,01892	1,00E-08	2,65104	0,08708	0,315	0,43064
0,01204	0,57008	3,72204	0,68068	1,00E-08	2,02832	1,00E-08	0,18788	0,33936
0,01344	1,1144	6,22552	1,88216	1,00E-08	2,22824	1,00E-08	1,00E-08	0,66164
0,01771	0,895804	3,894912	0,725788	1,00E-08	2,254	1,00E-08	0,242144	0,492338
1,00E-08	0,21392	2,4234	0,13076	1,00E-08	1,68896	1,00E-08	0,16072	0,34216
1,00E-08	0,02604	0,05824	0,02184	1,00E-08	0,1176	1,00E-08	0,00728	0,02688
0,01176	0,82992	2,69696	0,57456	0,1428	2,06612	0,10248	0,26684	0,44772
1,00E-08	0,75824	1,1732	0,40432	0,24528	0,81956	0,07616	0,08456	0,1064
1,00E-08	1,00E-08	1,21856	0,69916	1,00E-08	0,924	1,00E-08	0,10388	0,12656
1,00E-08	0,20832	0,83776	0,18872	1,00E-08	0,53368	1,00E-08	0,0574	0,13888
1,00E-08	0,19068	0,133	0,0658	1,00E-08	0,29484	1,00E-08	1,00E-08	0,0266
1,00E-08	1,00E-08	0,03976	0,04312	1,00E-08	0,11144	1,00E-08	0,0168	0,0224
1,00E-08	1,00E-08	0,05208	0,13776	1,00E-08	0,17864	1,00E-08	0,02352	0,03136
1,00E-08	1,00E-08	0,02436	1,00E-08	1,00E-08	1,00E-08	1,00E-08	1,00E-08	1,00E-08
1,00E-08	1,00E-08	0,13468	0,07952	1,00E-08	0,1204	1,00E-08	0,02044	0,0364
1,00E-08	1,00E-08	0,09688	0,05684	1,00E-08	0,12684	1,00E-08	0,01708	0,02296
1,00E-08	1,00E-08	0,04368	0,049	1,00E-08	0,09716	1,00E-08	1,00E-08	1,00E-08
1,00E-08	1,00E-08	0,0658	0,05908	1,00E-08	0,10892	1,00E-08	1,00E-08	0,02436
1,00E-08	1,00E-08	0,06244	0,10136	1,00E-08	0,29316	1,00E-08	1,00E-08	1,00E-08
1,00E-08	1,00E-08	0,06132	0,02968	1,00E-08	0,0728	1,00E-08	0,01428	0,01428
1,00E-08	1,00E-08	0,04564	0,04816	1,00E-08	0,0994	1,00E-08	1,00E-08	1,00E-08
1,00E-08	1,00E-08	0,09688	0,07	1,00E-08	0,06104	1,00E-08	1,00E-08	0,021
1,00E-08	1,00E-08	0,16352	0,02268	1,00E-08	0,02912	1,00E-08	0,01624	0,03052
1,00E-08	1,00E-08	0,02268	0,03192	1,00E-08	0,04312	1,00E-08	1,00E-08	0,007
1,00E-08	1,00E-08	0,07336	0,0532	1,00E-08	0,07504	1,00E-08	1,00E-08	0,01876

Table S1. Continuation...

Isobutyrate	Isoleucine	Isopropanol	Lactate	Leucine	Lysine	Methanol	L-methionine	methylmalonate
1,00E-08	0,29512	0,0042	3,47676	0,63896	1,1634	0,44912	0,2464	0,0056
1,00E-08	0,35336	0,00392	6,0284	0,83188	1,12252	0,22652	0,29708	0,03136
1,00E-08	0,04088	0,00364	0,47712	0,10948	0,06468	0,60928	0,02268	1,00E-08
1,00E-08	0,48468	1,00E-08	4,63232	1,05392	1,36696	0,22288	0,35504	0,03528
1,00E-08	0,06664	1,00E-08	0,96012	0,1484	0,3542	0,48776	0,04088	1,00E-08
1,00E-08	0,45276	0,00588	4,44304	1,16928	1,46832	0,09912	0,2884	0,03388
1,00E-08	0,3584	1,00E-08	3,72176	0,79296	1,03488	0,71512	0,3066	0,0266
1,00E-08	0,69048	0,01596	10,94156	1,48372	1,49156	0,23184	0,54516	1,00E-08
1,00E-08	0,43148	0,027692	6,559784	0,906108	1,174334	0,099498	0,297528	0,126224
1,00E-08	0,33264	0,25088	1,09508	0,91812	1,19084	0,11648	0,27524	0,0238
1,00E-08	0,02492	2,33156	0,17276	0,05908	0,16296	0,049	0,0098	1,00E-08
1,00E-08	0,37716	0,01708	3,54452	0,81648	1,14352	0,07616	0,28504	0,03948
1,00E-08	0,31136	0,12964	1,86116	0,69944	0,63084	0,05964	0,22988	0,02492
1,00E-08	0,18368	1,00E-08	0,56252	0,46032	0,75684	1,00E-08	0,18396	0,01288
1,00E-08	0,08036	1,00E-08	0,93156	0,1638	0,29708	0,01484	0,06944	0,0084
1,00E-08	0,02352	1,00E-08	0,47404	0,049	0,1008	0,0182	0,01708	1,00E-08
0,02324	0,01708	0,00672	0,28532	0,0434	0,08232	0,0518	0,01288	1,00E-08
0,01008	0,03192	0,09408	0,8862	0,07056	0,19684	0,04088	0,01568	1,00E-08
1,00E-08	0,0042	1,00E-08	0,30996	0,01148	1,00E-08	0,03612	0,00728	1,00E-08
0,00336	0,02408	0,01092	0,48216	0,02408	0,09828	0,01736	0,021	1,00E-08
1,00E-08	0,02268	0,00588	0,4732	0,0588	0,08428	0,01988	0,01932	1,00E-08
0,00448	0,00532	0,00504	0,25704	0,01008	0,04284	0,01428	0,00392	1,00E-08
1,00E-08	0,01904	0,00588	0,35336	0,03164	0,07448	0,01652	0,01148	1,00E-08
1,00E-08	0,01148	0,00952	0,15568	0,02576	0,448	0,02296	0,0098	1,00E-08
1,00E-08	0,01092	1,00E-08	0,16688	0,02184	0,056	0,01372	0,00644	1,00E-08
1,00E-08	0,007	0,00644	0,2464	0,01876	0,02968	3,02596	0,00476	1,00E-08
0,01176	0,01652	1,00E-08	0,5124	0,01876	0,08652	0,3206	0,00728	1,00E-08
0,00224	0,0168	0,00532	0,45836	0,04116	0,06216	0,01596	0,01036	1,00E-08
0,02968	0,00476	0,00532	0,14476	0,01204	0,01876	0,0546	0,00196	1,00E-08
1,00E-08	0,01596	0,0042	0,1792	0,03192	0,05656	0,01148	0,01288	1,00E-08

Table S1. Continuation...

Myo-inositol	O-phosphoch	Phenylalanine	Proline	Pyroglutamic-	Serine	Taurine	Threonine	Tryptophan
0,76888	0,05152	0,09772	0,67116	0,25116	1,21548	1,25384	0,62356	0,04816
1,11832	0,0714	0,39004	0,9618	0,38724	1,35884	1,38012	0,80836	0,0742
0,2926	1,00E-08	0,03948	0,0672	1,00E-08	0,11872	0,1946	0,09548	0,01652
0,86464	0,06776	0,3584	1,561	0,44464	1,43724	2,97136	0,78652	0,07784
0,10808	0,02856	0,05488	0,12712	0,09324	0,30408	0,21784	0,16604	0,03892
0,72576	0,03164	0,43988	1,11664	1,00E-08	1,89112	1,61224	0,81312	0,10136
1,12196	0,05404	0,30184	0,95648	0,31024	1,26924	1,7612	0,735	0,0588
2,5382	0,08596	0,53284	0,9996	1,00E-08	0,81256	2,42564	1,20456	0,12572
0,927682	0,031556	0,380604	0,865214	1,00E-08	1,397802	1,217804	0,71001	0,074704
0,56	0,0504	0,29792	0,9996	1,00E-08	1,03292	1,015	0,71876	0,0658
0,02996	0,00224	0,01904	0,05012	1,00E-08	0,04228	0,02828	0,08484	1,00E-08
0,77616	0,03612	0,34552	0,93324	1,00E-08	1,06372	1,06176	0,7728	0,07252
0,21616	0,03472	0,23884	0,50596	1,00E-08	0,52164	0,53648	0,35532	0,0644
0,17612	1,00E-08	0,16184	0,4102	1,00E-08	0,72436	0,3864	0,38164	0,02772
0,2086	1,00E-08	0,07896	0,17528	1,00E-08	0,2632	0,2954	0,18088	0,01876
0,24332	1,00E-08	0,2772	0,07952	1,00E-08	0,11256	0,0756	0,07112	1,00E-08
0,17052	0,00728	0,04536	0,06552	1,00E-08	0,04704	0,03248	0,05208	1,00E-08
0,18312	0,0056	0,03024	0,1022	1,00E-08	0,12796	0,09156	0,09268	1,00E-08
0,12544	0,0224	1,00E-08	1,00E-08	1,00E-08	1,00E-08	0,02044	1,00E-08	1,00E-08
0,20972	0,00728	0,0266	0,07784	1,00E-08	0,10584	0,04928	0,07364	1,00E-08
0,08568	0,00504	0,03808	0,03808	1,00E-08	0,09632	0,04116	0,05964	1,00E-08
0,08428	0,00336	0,01708	1,00E-08	1,00E-08	1,00E-08	0,02632	0,02268	1,00E-08
0,08344	0,00448	0,02044	0,07224	1,00E-08	0,04088	0,021	0,05068	1,00E-08
0,11256	0,00364	0,021	0,10976	1,00E-08	1,00E-08	0,05432	0,03584	1,00E-08
0,03724	0,0014	0,01008	0,03836	1,00E-08	0,02352	0,01036	1,00E-08	1,00E-08
0,10276	0,00308	1,00E-08	0,02072	1,00E-08	0,04648	1,00E-08	0,02072	1,00E-08
0,0882	0,00476	0,03388	0,04088	1,00E-08	0,0336	0,0252	0,05628	1,00E-08
0,15232	0,00196	0,0182	0,07112	1,00E-08	0,06524	0,05908	0,04256	1,00E-08
0,06104	0,00112	0,00616	0,00924	1,00E-08	0,02212	0,01204	0,01372	1,00E-08
0,10472	0,0028	0,021	0,0518	1,00E-08	0,05376	0,01456	0,04256	1,00E-08

Table S1. Continuation...

Tyrosine	Uracil	Uridine	Valine
0,29848	0,25004	0,02632	0,54964
0,36064	0,25676	0,03584	0,71176
0,0434	1,00E-08	0,05656	0,08008
0,38276	0,37744	0,1526	0,80332
0,05768	0,0406	0,03332	0,1204
0,41888	0,20468	0,0896	0,94136
0,34804	0,21448	0,05488	0,6804
0,48636	0,33796	0,07056	0,96264
0,378994	0,228298	0,027048	0,830116
0,3304	0,07	0,22624	0,6426
0,02548	1,00E-08	0,06664	0,05376
0,35952	0,20832	0,02884	0,71568
0,25032	0,05264	0,22876	0,4816
0,19124	0,08204	0,04536	0,3976
0,07784	0,07476	1,00E-08	0,1456
0,02016	1,00E-08	0,02436	0,0462
0,02296	1,00E-08	0,02716	0,03332
0,0294	1,00E-08	0,02884	0,06776
1,00E-08	1,00E-08	1,00E-08	0,01792
0,028	1,00E-08	0,035	0,04592
0,02576	1,00E-08	0,01736	0,04844
1,00E-08	1,00E-08	0,0252	0,0098
0,021	1,00E-08	0,01848	0,0392
1,00E-08	1,00E-08	0,01344	0,02772
0,00868	1,00E-08	0,01064	0,00868
1,00E-08	1,00E-08	0,2772	0,01708
0,0196	1,00E-08	0,02016	0,03248
0,01988	1,00E-08	0,0196	0,0392
0,00504	1,00E-08	0,0084	0,01092
0,01848	1,00E-08	0,02044	0,02968

Table S2. HiFSA parameters for one selected GCTB simple

* NEW: the lines beginning by * are comment lines !
 * To keep all the chemical shifts fixed during iteration
 * replace "CHEMICAL SHIFTS(HZ):" by "..SHIFTS(HZ): fixed"
 * The couplings can be fixed in the same way

NMR-data: C:\Archivos de programa\PERCH\NURY C\Metabolitos\Muestras
 #Sú Date 22. 8.2017; Time 3:13: 4 tcq1.pms

CHEMICAL SHIFTS(PPM):

```
DSS      2*SPIN= 1 SPECIES=1H      POPULATION(Y)= 0.02850
1-H1_7_8/ 1      -0.000339 1*1*9  STAT=Y  PRED= 0.089 RANGE= 0.135 WIDTH(Y)= 1.259 RESP(Y)= 0.4448 HSQC= C1_7_8
1-H9      / 1      11.484000 1*1*1  STAT=Y  PRED= 11.484 RANGE= 1.784 WIDTH(Y)= 1.481 RESP(Y)= 0.4448
1-H3A     / 1      0.625881 1*1*1  STAT=Y  PRED= 0.949 RANGE= 0.100 WIDTH(Y)= 1.415 RESP(Y)= 0.5221 HSQC= C3
1-H3B     / 1      0.625881 1*1*1  STAT=Y  PRED= 0.949 RANGE= 0.100 WIDTH(Y)= 1.750 RESP(Y)= 0.6234 HSQC= C3
1-H4A     / 1      1.716250 1*1*1  STAT=Y  PRED= 1.732 RANGE= 0.164 WIDTH(Y)= 1.714 RESP(Y)= 1.0000 HSQC= C4
1-H4B     / 1      1.716250 1*1*1  STAT=Y  PRED= 1.695 RANGE= 0.184 WIDTH(Y)= 1.570 RESP(Y)= 0.4562 HSQC= C4
1-H5A     / 1      2.926070 1*1*1  STAT=Y  PRED= 2.861 RANGE= 0.344 WIDTH(Y)= 1.530 RESP(Y)= 0.2782 HSQC= C5
1-H5B     / 1      2.906771 1*1*1  STAT=Y  PRED= 2.813 RANGE= 0.335 WIDTH(Y)= 2.035 RESP(Y)= 0.3018 HSQC= C5
Lactate   2*SPIN= 1 SPECIES=1H      POPULATION(Y)= 0.35392
2-H1      / 2      1.314646 1*1*3  STAT=Y  PRED= 1.440 RANGE= 0.108 WIDTH(Y)= 1.285 RESP(Y)= 1.0000 HSQC= C1
2-H2      / 2      4.098490 1*1*1  STAT=Y  PRED= 4.174 RANGE= 0.192 WIDTH(Y)= 1.822 RESP(Y)= 0.5956 HSQC= C2
2-H4      / 2      11.000000 1*1*1  STAT=Y  PRED= 11.052 RANGE= 2.381 WIDTH(Y)= 2.035 RESP(Y)= 1.0000
2-H5      / 2      4.813936 1*1*1  STAT=Y  PRED= 4.844 RANGE= 1.920 WIDTH(Y)= 102.800 RESP(Y)= 1.0000
Citrate   2*SPIN= 1 SPECIES=1H      POPULATION(Y)= 0.00000
3-H1_7    / 3      11.178730 2*1*1  STAT=Y  PRED= 11.189 RANGE= 1.464 WIDTH(Y)= 1.233 RESP(Y)= 0.3240
3-H9      / 3      11.231863 1*1*1  STAT=Y  PRED= 11.199 RANGE= 1.696 WIDTH(Y)= 1.577 RESP(Y)= 0.3240
3-H10     / 3      4.829564 1*1*1  STAT=Y  PRED= 3.604 RANGE= 2.997 WIDTH(Y)= 1.225 RESP(Y)= 0.3240
3-H1      / 3      2.669653 1*1*1  STAT=Y  PRED= 2.645 RANGE= 0.200 WIDTH(Y)= 1.602 RESP(Y)= 1.0000 HSQC= C3_5
3-H4      / 3      2.518464 1*1*1  STAT=Y  PRED= 2.543 RANGE= 0.412 WIDTH(Y)= 1.580 RESP(Y)= 0.9935 HSQC= C3_5
3-H3      / 3      2.518464 1*1*1  STAT=Y  PRED= 2.530 RANGE= 0.380 WIDTH(Y)= 1.581 RESP(Y)= 0.9935 HSQC= C3_5
3-H2      / 3      2.669653 1*1*1  STAT=Y  PRED= 2.892 RANGE= 0.188 WIDTH(Y)= 1.603 RESP(Y)= 1.0000 HSQC= C3_5
Valine     2*SPIN= 1 SPECIES=1H      POPULATION(Y)= 0.05595
4-H1      / 4      0.952826 1*1*3  STAT=Y  PRED= 1.108 RANGE= 0.168 WIDTH(Y)= 2.714 RESP(Y)= 0.9651 HSQC= C1
4-H2      / 4      2.341180 1*1*1  STAT=Y  PRED= 2.208 RANGE= 0.320 WIDTH(Y)= 1.605 RESP(Y)= 1.0000 HSQC= C2
4-H3      / 4      1.029334 1*1*3  STAT=Y  PRED= 1.013 RANGE= 0.196 WIDTH(Y)= 1.713 RESP(Y)= 0.9594 HSQC= C3
4-H4      / 4      3.647191 1*1*1  STAT=Y  PRED= 3.416 RANGE= 0.300 WIDTH(Y)= 0.635 RESP(Y)= 0.7554 HSQC= C4
4-H6      / 4      11.972030 1*1*1  STAT=Y  PRED= 11.955 RANGE= 2.973 WIDTH(Y)= 0.004 RESP(Y)= 0.9651
4-H7      / 4      1.893458 1*1*2  STAT=Y  PRED= 3.255 RANGE= 2.369 WIDTH(Y)= 3.712 RESP(Y)= 1.0000
Alanine    2*SPIN= 1 SPECIES=1H      POPULATION(Y)= 0.15626
5-H1      / 5      1.465665 1*1*3  STAT=Y  PRED= 1.495 RANGE= 0.120 WIDTH(Y)= 1.373 RESP(Y)= 1.0000 HSQC= C1
5-H2      / 5      3.746917 1*1*1  STAT=Y  PRED= 3.559 RANGE= 0.352 WIDTH(Y)= 1.008 RESP(Y)= 0.8412 HSQC= C2
5-H4      / 5      5.103517 1*1*1  STAT=Y  PRED= 12.346 RANGE= 0.976 WIDTH(Y)= 126.100 RESP(Y)= 1.0000
5-H5      / 5      4.805865 1*1*2  STAT=Y  PRED= 3.278 RANGE= 2.237 WIDTH(Y)= 109.000 RESP(Y)= 1.0000
AlfaGlu   2*SPIN= 1 SPECIES=1H      POPULATION(Y)= 0.01503
6-H2      / 6      5.220174 1*1*1  STAT=Y  PRED= 4.923 RANGE= 0.339 WIDTH(Y)= 2.243 RESP(Y)= 1.0000 HSQC= C7
6-H3      / 6      3.560539 1*1*1  STAT=Y  PRED= 3.667 RANGE= 0.279 WIDTH(Y)= 1.481 RESP(Y)= 1.0000 HSQC= C9
6-H4      / 6      3.646384 1*1*1  STAT=Y  PRED= 3.875 RANGE= 0.280 WIDTH(Y)= 1.837 RESP(Y)= 1.0000 HSQC= C5
6-H5      / 6      3.400400 1*1*1  STAT=Y  PRED= 3.901 RANGE= 0.280 WIDTH(Y)= 0.099 RESP(Y)= 1.0000 HSQC= C2
6-H6      / 6      3.831749 1*1*1  STAT=Y  PRED= 4.727 RANGE= 0.252 WIDTH(Y)= 1.418 RESP(Y)= 1.0000 HSQC= C1
6-H11A    / 6      3.834984 1*1*1  STAT=Y  PRED= 3.563 RANGE= 0.256 WIDTH(Y)= 1.454 RESP(Y)= 1.0000 HSQC= C4
6-H11B    / 6      3.755211 1*1*1  STAT=Y  PRED= 3.305 RANGE= 0.232 WIDTH(Y)= 2.013 RESP(Y)= 1.0000 HSQC= C4
BetaGlu   2*SPIN= 1 SPECIES=1H      POPULATION(Y)= 0.07516
7-H2      / 7      4.632691 1*1*1  STAT=Y  PRED= 4.923 RANGE= 0.339 WIDTH(Y)= 2.873 RESP(Y)= 1.0000 HSQC= C7
7-H3      / 7      3.231254 1*1*1  STAT=Y  PRED= 3.667 RANGE= 0.279 WIDTH(Y)= 0.868 RESP(Y)= 1.0000 HSQC= C9
7-H4      / 7      3.541100 1*1*1  STAT=Y  PRED= 3.875 RANGE= 0.280 WIDTH(Y)= 4.361 RESP(Y)= 1.0000 HSQC= C5
7-H5      / 7      3.448779 1*1*1  STAT=Y  PRED= 3.901 RANGE= 0.280 WIDTH(Y)= 2.270 RESP(Y)= 1.0000 HSQC= C2
7-H6      / 7      3.515643 1*1*1  STAT=Y  PRED= 4.727 RANGE= 0.252 WIDTH(Y)= 3.678 RESP(Y)= 1.0000 HSQC= C1
7-H11A    / 7      3.885574 1*1*1  STAT=Y  PRED= 3.563 RANGE= 0.256 WIDTH(Y)= 2.233 RESP(Y)= 1.0000 HSQC= C4
7-H11B    / 7      3.744713 1*1*1  STAT=Y  PRED= 3.563 RANGE= 0.256 WIDTH(Y)= 0.801 RESP(Y)= 1.0000 HSQC= C4
Glutamate 2*SPIN= 1 SPECIES=1H      POPULATION(Y)= 0.31518
8-H2A     / 8      2.349478 1*1*1  STAT=Y  PRED= 2.471 RANGE= 0.236 WIDTH(Y)= 1.780 RESP(Y)= 0.9498 HSQC= C2
8-H2B     / 8      2.331868 1*1*1  STAT=Y  PRED= 2.531 RANGE= 0.228 WIDTH(Y)= 1.993 RESP(Y)= 0.8968 HSQC= C2
8-H3A     / 8      2.118632 1*1*1  STAT=Y  PRED= 2.100 RANGE= 0.236 WIDTH(N)= 1.800 RESP(Y)= 1.0000 HSQC= C3
8-H3B     / 8      2.042775 1*1*1  STAT=Y  PRED= 2.067 RANGE= 0.272 WIDTH(N)= 1.800 RESP(Y)= 0.9399 HSQC= C3
8-H4      / 8      3.748786 1*1*1  STAT=Y  PRED= 3.578 RANGE= 0.640 WIDTH(Y)= 2.911 RESP(Y)= 0.7147 HSQC= C4
8-H6      / 8      11.454001 1*1*1  STAT=Y  PRED= 11.454 RANGE= 2.269 WIDTH(Y)= 16.040 RESP(Y)= 0.9498
8-H7      / 8      10.000000 1*1*2  STAT=Y  PRED= 3.715 RANGE= 2.929 WIDTH(Y)= 21.040 RESP(Y)= 0.9498
8-H8      / 8      10.000000 1*1*1  STAT=Y  PRED= 11.884 RANGE= 2.052 WIDTH(Y)= 16.040 RESP(Y)= 0.9498
```

Table S2. Continuation...

COUPLING CONSTANTS(HZ):

52	0.0000	J	1-H1_7_8	8-H8	STAT=Y	
J15_16	-5.8843	J	1-H3A	1-H3B	STAT=Y	PRED= -17.100 RANGE= 1.100
J15_18	5.8583	J	1-H3A	1-H4A	STAT=Y	PRED= 1.580 RANGE= 1.700
J15_17	9.9253	J	1-H3A	1-H4B	STAT=Y	PRED= 14.400 RANGE= 1.700
J16_18	15.8228	J	1-H3B	1-H4A	STAT=Y	PRED= 14.430 RANGE= 1.700
J16_17	2.2123	J	1-H3B	1-H4B	STAT=Y	PRED= 1.700 RANGE= 1.700
J18_17	-12.7863	J	1-H4A	1-H4B	STAT=Y	PRED= -14.990 RANGE= 0.800
J18_20	1.6216	J	1-H4A	1-H5A	STAT=Y	PRED= 13.940 RANGE= 1.700
J18_19	7.7167	J	1-H4A	1-H5B	STAT=Y	PRED= 2.650 RANGE= 1.700
J17_20	9.6061	J	1-H4B	1-H5A	STAT=Y	PRED= 2.640 RANGE= 1.700
J17_19	13.8338	J	1-H4B	1-H5B	STAT=Y	PRED= 13.940 RANGE= 1.700
J20_19	-24.9799	J	1-H5A	1-H5B	STAT=Y	PRED= -19.680 RANGE= 1.790
J7_10	6.8863	J	2-H1	2-H2	STAT=Y	PRED= 6.930 RANGE= 0.400
J10_12	0.0738	J	2-H2	2-H5	STAT=Y	PRED= 4.300 RANGE= 0.500
J30_31	-15.9194	J	3-H1	3-H4	STAT=Y	PRED= -17.650 RANGE= 1.500
J32_33	-15.9194	J	3-H3	3-H2	STAT=Y	PRED= -17.640 RANGE= 1.500
J48_411	7.8891	J	4-H1	4-H2	STAT=Y	PRED= 6.640 RANGE= 0.100
J411_412	7.0575	J	4-H2	4-H3	STAT=Y	PRED= 6.640 RANGE= 0.100
J411_416	4.2865	J	4-H2	4-H4	STAT=Y	PRED= 3.000 RANGE= 2.000
J57_510	7.2474	J	5-H1	5-H2	STAT=Y	PRED= 7.260 RANGE= 0.440
J619_21	4.7559	J	6-H2	6-H3	STAT=Y	PRED= 4.240 RANGE= 1.700
J617_21	11.1976	J	6-H3	6-H4	STAT=Y	PRED= 2.740 RANGE= 1.280
J614_17	0.4523	J	6-H4	6-H5	STAT=Y	PRED= 2.710 RANGE= 1.280
J613_14	5.3666	J	6-H5	6-H6	STAT=Y	PRED= 4.560 RANGE= 1.700
J613_15	5.7280	J	6-H6	6-H11A	STAT=Y	PRED= 7.780 RANGE= 1.700
J613_16	2.9900	J	6-H6	6-H11B	STAT=Y	PRED= 1.200 RANGE= 1.280
J615_16	-19.7270	J	6-H11A	6-H11B	STAT=Y	PRED= -12.300 RANGE= 0.300
J719_21	7.6244	J	7-H2	7-H3	STAT=Y	PRED= 4.240 RANGE= 1.700
J717_21	14.8426	J	7-H3	7-H4	STAT=Y	PRED= 2.740 RANGE= 1.280
J714_17	8.6377	J	7-H4	7-H5	STAT=Y	PRED= 2.710 RANGE= 1.280
J713_14	15.0575	J	7-H5	7-H6	STAT=Y	PRED= 4.560 RANGE= 1.700
J713_15	3.4558	J	7-H6	7-H11A	STAT=Y	PRED= 7.780 RANGE= 1.700
J716	15.9073	J	7-H6	7-H11B	STAT=Y	
J715	-14.7269	J	7-H11A	7-H11B	STAT=Y	
J811_12	-15.9359	J	8-H2A	8-H2B	STAT=N	PRED= -17.600 RANGE= 1.500
J811_13	7.4534	J	8-H2A	8-H3A	STAT=N	PRED= 4.760 RANGE= 3.200
J811_14	7.8272	J	8-H2A	8-H3B	STAT=Y	PRED= 8.040 RANGE= 3.400
J812_13	6.9385	J	8-H2B	8-H3A	STAT=Y	PRED= 6.150 RANGE= 2.560
J812_14	8.1121	J	8-H2B	8-H3B	STAT=Y	PRED= 4.840 RANGE= 3.200
J813_14	-14.3808	J	8-H3A	8-H3B	STAT=Y	PRED= -14.650 RANGE= 0.800
J813_15	4.5840	J	8-H3A	8-H4	STAT=Y	PRED= 4.910 RANGE= 4.000
J814_15	7.2134	J	8-H3B	8-H4	STAT=Y	PRED= 11.330 RANGE= 3.000

CONTROL PARAMETERS:

Solvent = none (def. 99% enriched)
 1.000 = Concentration (vol%, def=1.0%)
 0.00100000 = Minimum line-intensity
 0.00100000 = Diagonalization criterium (not in use)
 14.74010618 = Left frequency (ppm)
 -5.28548676 = Right frequency (ppm)
 0.000 = Acquisition time (s, for QMTLS)
 0.004 = Line-width (for modes D, P & T, 0=use defaults)
 0.228885328 = Data-point resolution (Hz)
 30.251 = GAUSSIAN (%; 0=use default from INF)
 21.349 = Dispersion contribution (%; 0=use default from INF)
 0.00000000 = Decoupling frequency (for DORES)

CONSTRAINTS (in equations X0 = 1.0)...use no empty lines

EQUAL 1-H5A = 1-H5B
 EQUAL 1-H3A = 1-H3B
 EQUAL 1-H4A = 1-H4B
 EQUAL 3-H1 = 3-H2
 EQUAL 3-H4 = 3-H3
 EQUAL 8-H7 = 8-H8

END of FILE

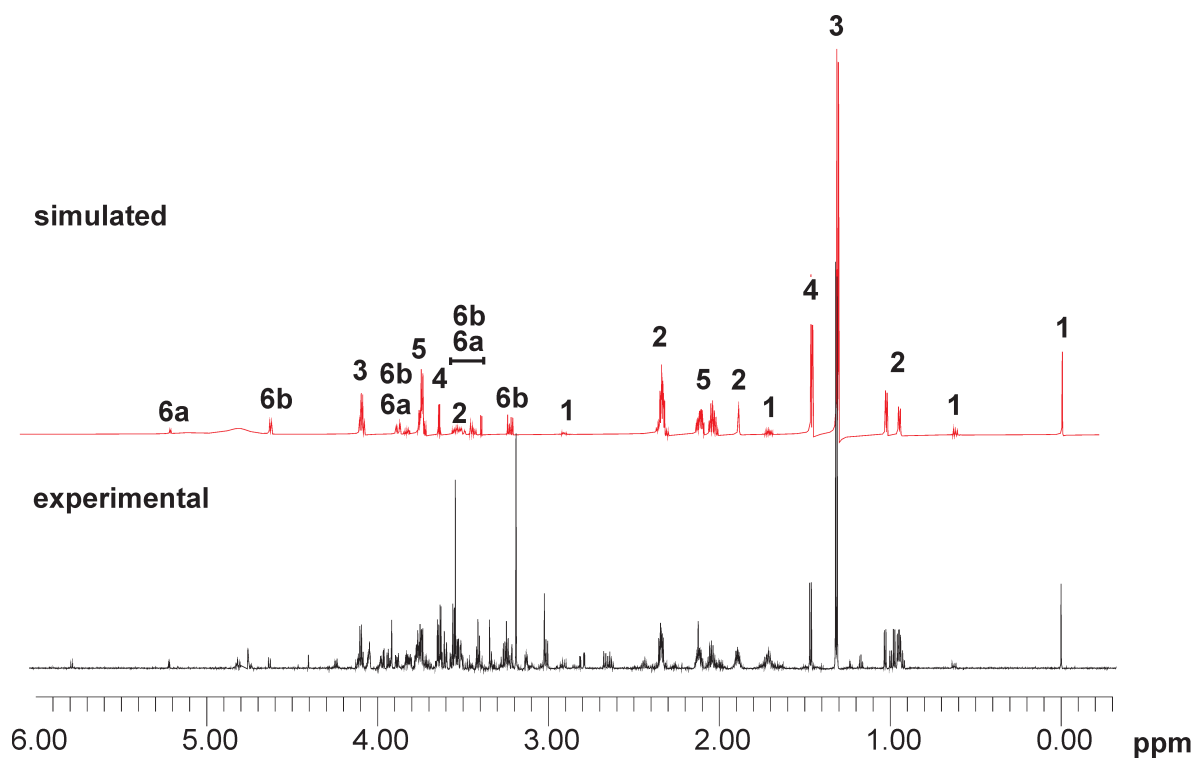


Fig. S1. Simulated HiFSA and experimental ¹H NMR spectra of tissue of one selected GCTB. 1-DSS (4,4-dimethyl-4-silapentane-1-sulfonic acid, 2-valine, 3-lactate, 4-alanine, 5-glutamate, 6a- α -glucose and 6b- β -glucose).

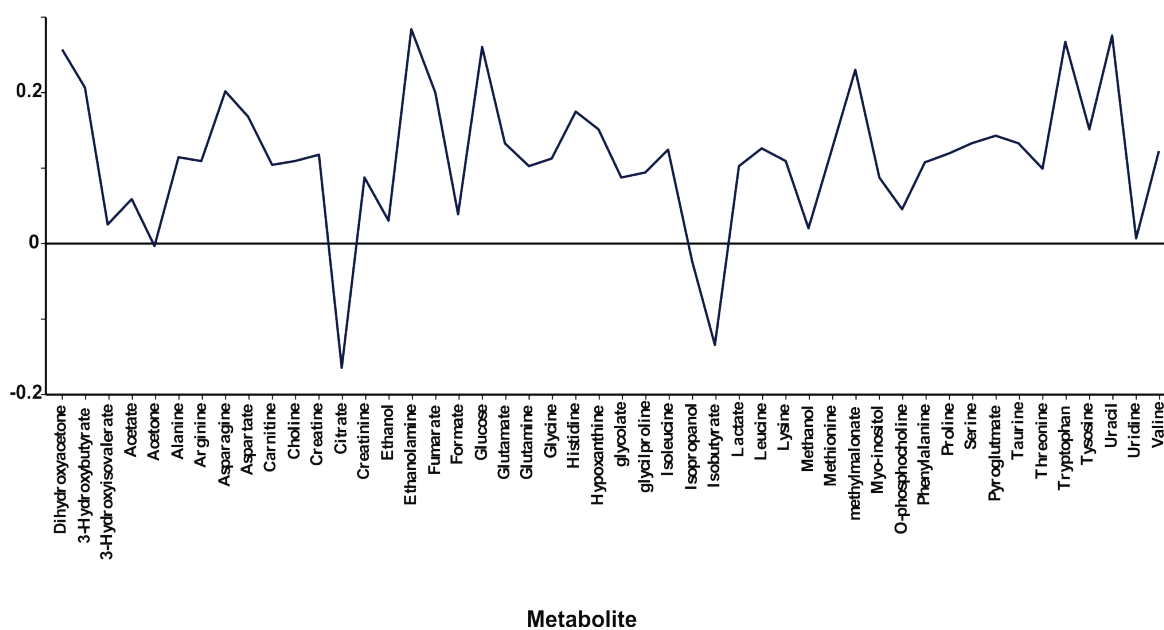


Fig. S2. PC-1 Loading plots.