

**Table S13.** A summary of final PLS-DA models, separating SBS cases and controls, achieved with different adsorbents after peaks with no influence on separation has been removed in respective model.

Adsorbent	A	R2X	R2X(cum)	Eigen values	R2Y	R2Y(cum)	Q2	Q2(cum)
Carbopack B	1	0,113	0,113	2,25	0,35	0,35	0,183	0,183
Chromosorb 106	1	0,186	0,186	4,65	0,279	0,279	0,0384	0,0384
	2	0,225	0,411	5,64	0,131	0,41	0,0289	0,0662
	3	0,134	0,546	3,36	0,104	0,515	0,0582	0,121
Tenax TA	1	0,145	0,145	8,54	0,348	0,348	0,0255	0,0255
	2	0,12	0,265	7,1	0,299	0,647	0,28	0,298
	3	0,0663	0,331	3,91	0,163	0,81	0,162	0,412
Carbopack B+	1	0,155	0,155	9,13	0,384	0,384	0,131	0,131
Tenax TA	2	0,153	0,308	9,03	0,268	0,652	0,292	0,385
	3	0,0816	0,389	4,81	0,165	0,817	0,295	0,567
Carbopack B+	1	0,169	0,169	9,98	0,494	0,494	0,365	0,365
Chromosorb 106+	2	0,166	0,335	9,77	0,23	0,724	0,352	0,589
Tenax TA								

A=Component

R2X=Explained variation in X by the component (0-1)

R2Y=Explained variation in Y by the component (0-1)

(cum)=Cumulative

Q2=Predictive ability (0-1)