

TABLE 1

NO.	Canadian	Shangri-La of Yunnan
1	Pillitteri	Pabala Chateau
2	Inniskillin	Heili Chateau
3	Kittling Ridge	Hada Chateau
4	Chateau des Charmes	Gegu Chateau
5	CHATEAU LA PRISE	Yundin Chateau
6	Magnotta	Xinwei Chateau

TABLE 2

Number	MS2 name	MEAN C-2016	MEAN Y-2016	VIP	P-VALUE
1	DAG(14:0/20:0)	0,24	0,14	1,26	0,03
2	FFA(24:6)	1,21	2,66	1,16	0,01
3	FFA(18:3)	3,05	5,75	1,86	0,00
4	FFA(20:0)	39,13	79,21	1,75	0,02
5	FFA(18:1)	111,26	203,44	1,81	0,00
6	FFA(24:0)	11,90	0,03	1,56	0,03
7	FFA(18:2)	31,39	54,53	1,78	0,00
8	FFA(20:4)	0,65	1,25	1,49	0,01
9	FFA(22:0)	10,06	17,99	1,49	0,04
10	TAG(51:1)_FA17:0	0,99	1,89	1,50	0,04
11	TAG(51:2)_FA16:1	0,93	1,98	1,62	0,05
12	TAG(42:1)_FA14:0	0,53	0,89	1,33	0,03
13	TAG(54:1)_FA18:0	1,06	4,35	1,67	0,00
14	TAG(54:1)_FA18:1	0,03	1,40	1,64	0,03
15	TAG(51:3)_FA18:2	0,46	0,85	1,48	0,04
16	TAG(52:2)_FA16:1	1,07	2,43	1,27	0,05
17	TAG(54:2)_FA18:2	0,46	0,63	1,39	0,03

TABLE 3

name	DAG(14:0/20:0)	FFA(24:6)	FFA(18:3)	FFA(20:0)	FFA(18:1)	FFA(24:0)	FFA(18:2)	FFA(20:4)	FFA(22:0)	TAG(51:1)_FA17:0	TAG(51:2)_FA16:1	TAG(42:1)_FA14:0	TAG(54:1)_FA18:0
DAG(14:0/20:0)	1	-0,608610009	-0,55197931	-0,574229083	-0,5529205	0,401814453	-0,508182575	-0,557393949	-0,3812892	-0,441453339	-0,412116368	-0,554895726	-0,615847734
FFA(24:6)	-0,608610009	1	0,759800767	0,81092873	0,89201594	-0,58893829	0,756089715	0,745822887	0,57467164	0,565812408	0,65073763	0,497425977	0,759586187
FFA(18:3)	-0,551979308	0,759800767	1	0,765787879	0,9289811	-0,409999905	0,965170794	0,706369373	0,73788343	0,608188343	0,490095326	0,57730273	0,671782774
FFA(20:0)	-0,574229083	0,81092873	0,765787879	1	0,87992088	-0,369771883	0,778502315	0,880675099	0,89803346	0,589477129	0,475315322	0,409795778	0,742093389
FFA(18:1)	-0,552920498	0,892015939	0,928981097	0,879920881	1	-0,36837705	0,91299727	0,777670318	0,7776388	0,645845599	0,572757066	0,51559643	0,714029291
FFA(24:0)	0,401814453	-0,58893829	-0,4099999	-0,369771883	-0,3683771	1	-0,38932266	-0,332744716	-0,1753303	-0,447269931	-0,59898719	-0,601215829	-0,650429917
FFA(18:2)	-0,508182575	0,756089715	0,965170794	0,778502315	0,91299727	-0,38932266	1	0,810351513	0,795912	0,602537965	0,517270237	0,496822325	0,720508228
FFA(20:4)	-0,557393949	0,745822887	0,706369373	0,880675099	0,77767032	-0,332744716	0,810351513	1	0,84846471	0,434271481	0,393109841	0,210479682	0,698532743
FFA(22:0)	-0,381289247	0,574671643	0,737883432	0,898033455	0,7776388	-0,175330278	0,795911998	0,848464708	1	0,489892597	0,303637828	0,238528934	0,578540928
TAG(51:1)_FA17:0	-0,441453339	0,565812408	0,608188343	0,589477129	0,6458456	-0,447269931	0,602537965	0,434271481	0,4898926	1	0,920737684	0,872041399	0,827982915
TAG(51:2)_FA16:1	-0,412116368	0,65073763	0,490095326	0,475315322	0,57275707	-0,59898719	0,517270237	0,393109841	0,30363783	0,920737684	1	0,817261904	0,846776549
TAG(42:1)_FA14:0	-0,554895726	0,497425977	0,57730273	0,409795778	0,51559643	-0,601215829	0,496822325	0,210479682	0,23852893	0,872041399	0,817261904	1	0,753165382
TAG(54:1)_FA18:0	-0,615847734	0,759586187	0,671782774	0,742093389	0,71402929	-0,650429917	0,720508228	0,698532743	0,57854093	0,827982915	0,846776549	0,753165382	1
TAG(54:1)_FA18:1	-0,91819467	0,697103305	0,567696253	0,769085797	0,61803642	-0,475691563	0,552582786	0,717210394	0,56575983	0,541422078	0,495839256	0,556650811	0,750068514
TAG(51:3)_FA18:2	-0,451027948	0,432456414	0,547267974	0,431056993	0,52574402	-0,435021061	0,57135242	0,356871798	0,40996042	0,94671179	0,884565337	0,860577043	0,763290668
TAG(52:2)_FA16:1	-0,627595738	0,587383988	0,555133244	0,408324085	0,507854	-0,360053238	0,516369024	0,437896655	0,19952494	0,499172603	0,540376977	0,536251386	0,651533002
TAG(54:2)_FA18:2	-0,754425422	0,722594794	0,533219654	0,550218461	0,6277802	-0,26939704	0,597579961	0,705693425	0,38678004	0,50709227	0,588301929	0,385948741	0,633293178

AG(54:1)_FA18	AG(51:3)_FA18	AG(52:2)_FA18	AG(54:2)_FA18
-0,91819467	-0,451027948	-0,627595738	-0,754425422
0,697103305	0,432456414	0,587383988	0,722594794
0,567696253	0,547267974	0,555133244	0,533219654
0,769085797	0,431056993	0,408324085	0,550218461
0,618036425	0,525744017	0,507854	0,627780204
-0,475691563	-0,435021061	-0,360053238	-0,26939704
0,552582786	0,57135242	0,516369024	0,597579961
0,717210394	0,356871798	0,437896655	0,705693425
0,565759832	0,409960424	0,199524944	0,386780042
0,541422078	0,94671179	0,499172603	0,50709227
0,495839256	0,884565337	0,540376977	0,588301929
0,556650811	0,860577043	0,536251386	0,385948741
0,750068514	0,763290668	0,651533002	0,633293178
1	0,471964144	0,637976605	0,732171931
0,471964144	1	0,40701488	0,499666821
0,637976605	0,40701488	1	0,684011813
0,732171931	0,499666821	0,684011813	1

TABLE 4

id	met	C.2016.1.1	C.2016.6.1	C.2016.5.1	C.2016.4.1	C.2016.2.1	C.2016.3.1	Y.2016.1.1	Y.2016.3.1	Y.2016.6.1	Y.2016.5.1	Y.2016.2.1	Y.2016.4.1
9	DAG(14:0/20:0)	0,266687524	0,2482499	0,252160804	0,256319446	0,23122719	0,210384071	0,11750582	0,03068721	0,23492958	0,240183306	0,118686587	0,090908748
21	FFA(24:0)	0,030687215	0,0306872	21,44965528	15,63654053	12,0982301	22,15353573	0,030687215	0,03068721	0,03068721	0,030687215	0,030687215	0,030687215
17	FFA(18:1)	93,33410182	70,027055	111,9235708	140,4627724	129,035821	122,786269	152,0008522	166,670066	142,702426	239,9331705	265,4399545	253,9171816
14	FFA(18:3)	2,680881342	2,2091604	3,929033021	3,403707012	3,08845194	3,012610045	4,545092701	5,52934785	3,96382893	7,270729351	7,617144197	5,597958431
24	FFA(18:2)	29,00494786	22,407457	37,51887966	37,37717073	28,428835	33,58560395	50,20611645	49,3677673	37,7863329	72,19999839	62,31504115	55,30052899
25	FFA(20:4)	0,438347217	0,5756361	0,73959854	0,719796885	0,54510825	0,898957631	1,608459247	0,79364987	0,75491415	1,420808447	1,251336048	1,661698004
15	FFA(20:0)	32,16842928	30,852255	53,20228405	47,75794193	33,8854641	36,91601944	78,77656086	46,6496466	49,2856649	74,0380145	103,4365969	123,0476765
27	FFA(22:0)	8,700886689	5,1909424	19,84793209	9,868315697	7,16525426	9,557464857	18,46020717	10,0183124	11,0353154	21,86284082	19,8132747	26,76385736
66	TAG(42:1)_FA14:0	0,764301711	0,3881748	0,475151821	0,856382187	0,63725465	0,030687215	0,772284043	1,18692823	0,78688783	0,709743018	1,078914471	0,802506379
54	TAG(51:2)_FA16:1	1,925267683	0,0306872	0,030687215	1,982415719	1,56911143	0,030687215	2,043500112	1,94345642	1,89646051	1,856193907	1,910212173	2,22722538
50	TAG(51:1)_FA17:0	1,464282103	0,0306872	1,023655367	1,914743109	1,45244921	0,030687215	1,874753765	1,84161707	1,80133133	1,664461021	2,063874724	2,074303277
122	TAG(51:3)_FA18:2	0,706364162	0,0306872	0,525948871	0,838622009	0,65148874	0,030687215	0,866686333	1,04495769	0,78900399	0,853208868	0,698679458	0,86617404
12	FFA(24:6)	1,440275164	1,1814298	0,030687215	1,486548916	1,65674356	1,473572874	2,212765344	2,06597131	1,52660416	2,889085492	3,559905058	3,712096995
77	TAG(54:1)_FA18:0	2,846445708	0,0306872	0,030687215	3,367900733	0,03068721	0,030687215	5,22928596	3,8566847	3,19290178	3,645239268	4,825689025	5,347909386
134	TAG(52:2)_FA16:1	1,78530836	0,0306872	0,030687215	1,382296065	1,23304481	1,962065462	3,426244285	2,75021221	1,5178542	1,483776144	4,171909727	1,230940762
79	TAG(54:1)_FA18:1	0,030687215	0,0306872	0,030687215	0,030687215	0,03068721	0,030687215	2,201285938	1,78465176	0,03068721	0,030687215	1,929248234	2,41170923
140	TAG(54:2)_FA18:2	0,403821821	0,3405046	0,318287091	0,514615203	0,59303755	0,580861784	0,747875252	0,67503432	0,44621563	0,595138481	0,601998253	0,68690332

TABLE 5

DAG(14:0/20:0)	FFA(24:6)	FFA(18:3)	FFA(20:0)	FFA(18:1)	FFA(24:0)	FFA(18:2)	FFA(20:4)	FFA(22:0)	AG(51:1)_FA17:
8,6	8,6	8,6	8,6	8,6	8,6	8,6	8,6	8,6	8,6
-1,14	-1,14	-1,14	-1,14	-1,14	-1,14	-1,14	-1,14	-1,14	-1,14
0,814711795	-1,1351617	-0,9138817	-1,01731432	-0,87067558	8,59909472	-0,79685758	-0,93521958	-0,83944761	-0,936100528

TABLE 6

Compound	score	RT	Class	C-2016-1-1	C-2016-2-1	C-2016-3-1	C-2016-4-1	C-2016-5-1	C-2016-6-1	Y-2016-1-1	Y-2016-2-1	Y-2016-3-1	Y-2016-4-1	Y-2016-5-1
Cer(18:1/2)	1	11,92	CER	0,517893	0,391568	0,449107	0,304012	0,200747	0,213523	0,509577	0,352537	0,369176	0,54072	0,203657
Cer(18:1/2)	1	12,29	CER	0,398038	0,475862	0,48857	0,254451	0,182427	0,243176	0,500152	0,342316	0,223497	0,59843	0,263547
Cer(18:1/2)	1	10,94	CER	0,213423	0,152902	0,131664	0,148348	0,090845	0,061374	0,173557	0,201563	0,143799	0,273073	0,140875
Cer(18:1/2)	1	11,65	CER	0,700209	0,485019	0,509096	0,467897	0,330425	0,262674	0,691447	0,552482	0,427357	0,821888	0,441662
Cer(18:1/1)	1	8,25	CER	0,233503	0,123917	0,196411	0,332429	0,095602	0,109511	0,360076	0,251543	0,132021	0,46182	0,111847
Cer(18:1/2)	1	11,25	CER	0,428413	0,361402	0,407324	0,338529	0,225054	0,199936	0,474122	0,298192	0,381396	0,644075	0,268957
DAG(16:0/)	1	9,38	DAG	0,498029	0,527046	0,406791	0,281041	0,179517		0,464875	0,786477	0,284242	0,431703	0,301835
DAG(16:0/)	1	9,96	DAG	52,13474	48,14978	49,53553	47,65638	49,04411	47,98662			47,38768		45,91914
DAG(14:0/)	1	10,7	DAG	0,266688	0,231227	0,210384	0,256319	0,252161	0,24825	0,117506	0,118687	0,357182	0,090909	0,240183
DAG(16:0/)	1	10,7	DAG	97,40354	75,01667	69,63751	89,70638	84,40837	71,81848			83,1008		74,24158
DAG(16:1/)	1	8,79	DAG	0,345632	0,401249	0,363393	0,189231	0,127374	0,103166	0,289122	0,34219	0,202981	0,302531	0,181973
FFA(24:6)	1	4,73	FFA	1,440275	1,656744	1,473573	1,486549	14,89774	1,18143	2,212765	3,559905	2,065971	3,712097	2,889085
FFA(18:0)	1	5,58	FFA	2308,577	2590,601	2341,762	2961,278	2978,263	2128,288	4019,241	6522,952	3184,621	6764,766	4585,707
FFA(18:3)	1	3,54	FFA	2,680881	3,088452	3,01261	3,403707	3,929033	2,20916	4,545093	7,617144	5,529348	5,597958	7,270729
FFA(20:0)	1	6,41	FFA	32,16843	33,88546	36,91602	47,75794	53,20228	30,85226	78,77656	103,4366	46,64965	123,0477	74,03801
FFA(14:0)	1	3,57	FFA	53,22658	53,60811	77,07557	78,83224	65,30075	39,40653	78,12374	97,77873	92,91478	157,8364	126,3385
FFA(18:1)	1	4,95	FFA	93,3341	129,0358	122,7863	140,4628	111,9236	70,02706	152,0009	265,44	166,6701	253,9172	239,9332
FFA(16:0)	1	4,76	FFA	1495,882	1927,867	1690,826	1946,773	1658,479	1292,522	2268,752	3742,396	2337,466	4553,042	2568,105
FFA(22:1)	1	6,45	FFA	29,88093	40,3593	22,52212	36,45255	41,87499	17,11729	49,01375	103,9222	55,48943	69,70064	79,7874
FFA(16:1)	1	4,01	FFA	24,32827	19,30871	28,59313	41,47666	30,93848	20,87588	26,55061	33,82511	33,45172	43,44227	55,33393
FFA(24:0)	1	8,28	FFA		12,09823	22,15354	15,63654	21,44966						
FFA(20:5)	1	3,84	FFA	3,816062	3,569803	4,593061	4,033635	3,820531	4,163255	3,189803	4,934068	2,724415	5,510785	7,481146
FFA(28:0)	1	10,16	FFA	1,170995	0,944014	2,615688	1,138918	1,346327		3,12018	2,47904	1,300414	3,284984	1,863522
FFA(18:2)	1	4,25	FFA	29,00495	28,42883	33,5856	37,37717	37,51888	22,40746	50,20612	62,31504	49,36777	55,30053	72,2
FFA(20:4)	1	4,06	FFA	0,438347	0,545108	0,898958	0,719797	0,739599	0,575636	1,608459	1,251336	0,79365	1,661698	1,420808
FFA(20:1)	1	5,69	FFA	7,503666	10,89361	5,45106	6,833826	11,23266	2,65569	4,925432	25,6329	12,13526	6,704744	15,03889
FFA(22:0)	1	7,32	FFA	8,700887	7,165254	9,557465	9,868316	19,84793	5,190942	18,46021	19,81327	10,01831	26,76386	21,86284
FFA(20:2)	1	5,23	FFA	0,290636	0,379999	0,46084	0,311439	0,186983	0,135381	0,550153	0,977385	0,371434	0,755596	0,481038
FFA(26:0)	1	9,24	FFA	4,842667	4,53819	7,689256		7,993119					21,51163	12,90413
SM(14:0)	1	6,35	SM	9,448579	6,585291	10,16591	7,131698	8,499589	7,089515	5,593269	6,714355	8,507883	8,525354	8,91556
TAG(50:0)_	1	14,59	TAG	19,4882	16,41779	18,99941	45,70096	14,29766	19,17993	18,60968	17,51906	22,97112	20,83757	16,47253

TAG(51:0)_	1	14,75	TAG	1,222869	1,408731	1,731071	1,829501	0,542666	0,840825	1,568063	1,498099	1,366801	1,853055	1,138944
TAG(47:1)_	1	13,55	TAG	1,261249	1,330642	1,716074	1,712717	0,667105	0,640915	1,573988	0,966178	1,188699	1,523333	0,809858
TAG(49:0)_	1	14,39	TAG	2,325414	2,51862	3,200325	2,949957	1,339309	0,97734	2,872341	2,454183	2,564284	2,362658	1,922017
TAG(52:0)_	1	14,93	TAG	40,64619	35,44607	41,9096	68,57615	35,48737	40,08725	30,63328	25,67456	42,55821	30,14261	35,09219
TAG(48:1)_	1	13,85	TAG	9,361006	8,941157	13,50805	10,99045	5,234907	4,771928	11,08786	9,257656	10,54007	9,873962	11,34242
TAG(44:0)_	1	13,36	TAG	0,549556	0,470575	0,89287				0,69115	1,015052	0,625082	0,519996	
TAG(44:1)_	1	12,89	TAG	2,545258	1,986712	3,688043	2,458298	1,147393	1,269306	2,711443	2,970429	3,073959	2,988375	2,350031
TAG(46:0)_	1	13,79	TAG	17,72489	13,26952	18,2198	23,21929	8,782837	9,358759	15,99856	16,68573	15,65379	15,86906	12,89304
TAG(47:1)_	1	13,59	TAG	2,019341	1,708035	3,271779	2,61372	1,416882	1,458206	2,66426	2,47398	2,594145	2,205611	2,08299
TAG(45:0)_	1	13,56	TAG	7,490967	6,854723	9,528064	10,47165	4,70724	4,55089	8,436957	8,487198	8,989445	8,024552	6,521974
TAG(50:0)_	1	14,59	TAG	36,7166	30,2859	34,78473	101,8403	26,19368	32,46898	32,65402	33,89436	40,18079	43,13093	27,42249
TAG(54:0)_	1	15,26	TAG	1,869023	1,794049	2,172081	2,398568	1,1866	1,165065	1,933931	1,558494	1,750241	1,944095	1,444075
TAG(48:0)_	1	14,2	TAG	32,98843	30,92005	39,54635	75,08397	22,78293	26,2558	39,63829	34,94241	35,69201	41,42183	30,68217
TAG(45:0)_	1	13,55	TAG	5,729424	4,488078	7,953903	7,327728	3,127675	3,011859	7,00882	6,990071	6,086342	7,113278	4,974818
TAG(50:2)_	1	13,81	TAG	1,249178		1,928471					1,510286	1,50241		1,281707
TAG(46:1)_	1	13,41	TAG	5,347365	5,872903	7,542911	6,448939	2,595702	2,767214	6,456996	5,616029	5,746046	5,868722	4,41401
TAG(54:7)_	1	12,71	TAG	0,630262	0,743618	0,806644	0,766494	0,322565		0,601819	0,69293		0,848521	0,612348
TAG(49:3)_	1	13,28	TAG	2,745311	2,412746	3,117132	1,870277	1,17148	1,199088	2,305687	2,125475	2,431422	1,815464	2,26956
TAG(51:1)_	1	14,38	TAG	1,464282	1,452449	2,896526	1,914743	1,023655	0,703207	1,874754	2,063875	1,841617	2,074303	1,664461
TAG(54:0)_	1	15,25	TAG	34,04912	25,81216	30,12965	43,51664	27,13538	29,04263	15,62279	13,62063	27,83312	15,17711	23,79703
TAG(48:2)_	1	13,48	TAG	11,30803	11,1229	17,05317	12,33466	6,562523	6,018262	14,82563	11,34614	13,15698	11,98339	10,30842
TAG(49:2)_	1	13,67	TAG	6,640098	5,975322	9,540644	7,70609	3,581542	3,57	7,213561	7,115988	7,481447	7,826617	6,150012
TAG(51:2)_	1	14,07	TAG	1,925268	1,569111	2,714692	1,982416	0,578661	0,936165	2,0435	1,910212	1,943456	2,227225	1,856194
TAG(49:2)_	1	13,65	TAG	2,602934	2,430906	5,35273	3,884534	1,466978	1,381292	2,522061	3,330486	3,105052	3,425473	2,16714
TAG(48:2)_	1	13,44	TAG	2,354528	2,789622	3,694037	3,089578	1,853359	1,759719	3,211625	2,312221	3,054489	2,447624	2,515079
TAG(51:0)_	1	14,75	TAG	2,064801	1,668907	2,518892	2,771794	1,032985	1,00615	2,362245	2,022325	1,904333	2,167008	1,809776
TAG(48:1)_	1	13,84	TAG	11,12453	11,26213	15,68595	12,94679	6,017849	5,662457	11,78725	9,936021	12,61579	11,14135	10,01859
TAG(47:0)_	1	13,95	TAG	3,578809	2,918283	5,627803	5,36066	1,765335	1,454424	3,793338	4,251024	3,464289	3,700909	2,666437
TAG(56:1)_	1	15,27	TAG	0,991873	0,90809	1,144879	1,186002	0,622593	0,675097	1,26064	1,098986	1,062433	1,202622	0,927063
TAG(51:0)_	1	14,75	TAG	1,790125	1,583078	2,062625	2,175043	1,058034	1,409265	1,703952	1,597296	1,846696	1,811927	1,18007
TAG(49:1)_	1	14,02	TAG	6,352809	5,712828	8,323755	6,403828	3,481144	3,532756	6,677757	6,040519	6,232831	6,874671	4,55535
TAG(49:0)_	1	14,39	TAG	7,739635	7,575618	8,590701	11,3394	4,193834	5,510853	10,62857	8,102301	8,155474	10,01812	6,555247
TAG(47:2)_	1	13,23	TAG	6,761757	6,766935	10,61544	8,268014	3,534752	3,29751	7,545056	7,991615	7,715965	7,829468	7,011786



TAG(44:2)_	1	12,43	TAG	2,477406	2,621011	3,969347	2,939937	1,275679	1,419066	2,607715	2,63855	2,82218	2,348988	2,273882
TAG(42:1)_	1	12,32	TAG	0,764302	0,637255	1,242678	0,856382	0,475152	0,388175	0,772284	1,078914	1,186928	0,802506	0,709743
TAG(56:1)_	1	15,26	TAG	0,598846	0,542373	0,953	0,83984	0,489068		0,807473	0,652511	0,715196	0,78284	0,597364
TAG(53:0)_	1	15,1	TAG	0,966638	0,93145	1,086976	1,101358	0,646325	0,597854	1,182763	0,961062	1,02389	1,026529	0,741364
TAG(46:0)_	1	13,79	TAG	7,507584	7,220578	9,669468	11,93036	4,70442	4,302791	7,607971	7,528609	6,782831	9,327345	6,462274
TAG(52:4)_	1	13,49	TAG		4,32911	5,636865	5,055285			4,848168	4,174584	4,235941	4,820513	4,084192
TAG(47:0)_	1	14	TAG	11,715	12,30763	17,68726	20,05554	7,138839	7,544387	17,02716	15,323	14,63617	18,35871	11,2502
TAG(54:5)_	1	13,5	TAG	7,727641						9,054171			8,381113	
TAG(48:1)_	1	13,81	TAG	3,695429	2,58508	5,194315	3,164668	1,785116		3,370973	4,018258	4,171383	2,842788	3,216424
TAG(52:0)_	1	14,94	TAG	0,764166	0,668374	0,706558	1,29113	0,49752	0,532552	0,854055	0,836318	0,799143	0,775918	0,617462
TAG(52:0)_	1	14,93	TAG	19,00021	17,95389	18,91628	38,52184	15,02097	17,45967	14,37248	13,8688	20,41281	15,93676	17,4533
TAG(49:1)_	1	14,02	TAG	5,057542	4,075382	7,350748	5,543433	2,264331	2,397826	6,12925	5,967134	5,600391	5,322051	3,934139
TAG(54:1)_	1	14,93	TAG	2,846446		9,654827	3,367901			5,229286	4,825689	3,856685	5,347909	3,645239
TAG(51:1)_	1	14,39	TAG	1,753515	2,168467	2,756544	1,809759	1,20866	1,296738	2,05827	2,265777	2,17772	2,249177	2,038639
TAG(54:1)_	1	14,93	TAG			3,615819				2,201286	1,929248	1,784652	2,411709	
TAG(44:2)_	1	12,43	TAG	0,501097	0,370446	0,712765	0,778354	0,258627		0,459465	0,42616	0,450766	0,31836	0,393159
TAG(48:1)_	1	13,8	TAG	5,120983	3,932819	6,820586	5,844042	2,999109	2,451747	5,528465	5,683929	4,963066	5,430198	5,029583
TAG(46:1)_	1	13,36	TAG	2,682596	2,005251	2,409294	1,880501	1,261446	1,194616	1,97817	2,543317	2,09304	1,786068	2,042497
TAG(52:4)_	1	13,49	TAG	5,842726	4,532387	6,202907	5,078217			6,076455	5,896972	4,768862	6,091439	5,225352
TAG(54:6)_	1	13,11	TAG	5,489917	5,28684	6,776081	5,882584	3,957089	3,51451	7,511502	5,322751	5,582417	6,520613	4,79622
TAG(50:2)_	1	13,84	TAG	7,660157	6,261944	8,662084	6,922767			7,688409	9,655458	6,299852	7,207615	5,777792
TAG(49:0)_	1	14,38	TAG	3,734892	4,193134	7,470106	6,299525	3,122118	3,006138	5,351138	5,216124	4,736131	5,902384	3,525699
TAG(51:2)_	1	14,05	TAG	0,507113	0,879483	1,308292	0,69199	0,444855	0,521024	1,258152	1,005761	0,653284	0,74427	0,560353
TAG(48:0)_	1	14,21	TAG	2,205215	1,890464	2,639376	3,899022	1,637946	1,362792	2,300724	2,511048	2,054751	2,657292	1,953737
TAG(44:0)_	1	13,33	TAG	6,220442	6,351579	7,553039	7,892148	3,524787	3,545111	7,684995	6,94682	7,87767	7,535802	5,210436
TAG(50:2)_	1	13,88	TAG	7,460809	7,131793	9,397274	8,725264	5,124618		9,048535	10,86498	8,250616	8,444781	7,60369
TAG(46:2)_	1	13	TAG	1,37253	1,710917	2,049168	1,962076	0,734545	0,746819	1,931828	2,045927	1,560149	1,171637	1,224657
TAG(48:3)_	1	13,08	TAG	3,843736	3,61833	6,393057	5,219558	1,554349	1,818345	4,611194	5,149862	4,741046	5,488794	3,578724
TAG(46:1)_	1	13,39	TAG	4,230234	3,838981	5,811224	5,375697	2,809593	3,127363	3,518315	5,273443	5,088955	5,105787	5,160122
TAG(47:1)_	1	13,62	TAG	9,301675	9,491751	12,87011	10,83342	4,372366	5,468915	11,13588	9,617967	8,936755	8,361055	8,210351
TAG(44:0)_	1	13,34	TAG	5,856925	5,410504	7,029405	8,196543	4,063848	3,852642	7,320534	6,87706	5,799795	6,271167	4,099543
TAG(50:3)_	1	13,49	TAG	5,427607	4,367314	6,901517	5,016241		2,823986	8,1048	8,640733	5,760794	5,219812	4,30083
TAG(44:1)_	1	12,86	TAG	0,682677	0,594238						0,933909	0,700774	0,46633	0,625572

TAG(46:1)_	1	13,4 TAG	8,798953	10,06909	16,43952	12,46307	4,865767	4,921487	9,317224	12,01726	11,14752	11,51626	10,21432
TAG(51:1)_	1	14,38 TAG	2,018074	2,337807	2,844191	2,573637	1,230411	1,413874	2,378986	2,577584	2,542188	2,882698	2,075799
TAG(44:1)_	1	12,9 TAG	1,250387	0,930416	1,876929	1,658994	0,548457	0,653015	1,346834	1,701915	1,743615	0,803856	1,131803
TAG(45:1)_	1	13,13 TAG	1,13959	1,955076	2,756567	1,468183	0,761545	0,960249	1,635016	1,647734	2,020879	1,809283	1,176123
TAG(47:1)_	1	13,62 TAG	4,588577	4,978872	8,644316	6,450683	2,739361	2,996633	7,145634	7,30378	6,475186	5,012909	5,089868
TAG(49:1)_	1	14 TAG	4,650693	3,968298	6,878868	5,405496	2,380541	3,08017	5,138309	5,720035	4,840759	4,313685	3,884586
TAG(46:2)_	1	12,99 TAG	6,999001	5,954087	10,2079	8,0032	3,755302	3,386164	7,422412	7,511708	7,711833	7,92165	4,896542
TAG(52:2)_	1	14,26 TAG	2,407784	1,205389	1,819311	1,385163		1,178426	1,975273	1,392772	1,685113	2,487708	
TAG(48:2)_	1	13,47 TAG	2,535914	2,201267	3,769175	3,449153	1,505121	1,207077	2,777903	3,691622	2,722793	3,016345	3,198364
TAG(49:2)_	1	13,71 TAG	1,142395	1,421727	1,379557	1,482754	0,988128	0,442647	1,642528	1,068313	1,478116	1,449609	1,436429
TAG(50:3)_	1	13,43 TAG		0,443298	0,361938					0,37514		0,514979	0,461257
TAG(47:1)_	1	13,56 TAG	2,351771	2,116195	3,010069	1,782014	1,018995	1,262175	2,746187	2,140791	2,591235	2,33965	1,431948
TAG(52:1)_	1	14,63 TAG	1,051136	0,940364	1,747857	1,158962	0,588084	0,500352	1,193771	1,304335	1,423054	0,835276	0,741057
TAG(53:2)_	1	14,4 TAG	1,508852		1,413259	1,540394			1,391445		1,28776	1,50888	1,333347
TAG(49:1)_	1	14,01 TAG	3,015838	1,947058	4,281319	2,806932	0,935249	1,464956	3,248412	2,881062	1,870532	3,094139	2,371474
TAG(51:2)_	1	14,04 TAG	3,025714	3,009931	3,98631	2,907737	1,736794	1,922724	3,23083	3,383229	2,96072	2,912464	2,828142
TAG(54:1)_	1	14,94 TAG	0,733515	0,698985	1,075379	0,95186			0,900722	0,870046	0,819763	1,055773	0,751957
TAG(49:2)_	1	13,67 TAG	1,777019	1,289196	3,036272	1,64895	0,9324	0,983369	1,673667	1,583101	1,63862	1,571166	1,199812
TAG(46:3)_	1	12,55 TAG	1,205469	1,822231	2,873545	2,389909	0,941235	0,915493	1,934616	1,994019	1,978896	1,446845	1,157509
TAG(48:0)_	1	14,21 TAG	1,727013	1,884201	2,019234	3,145522	1,21968	0,899027	2,40837	1,534987	1,63689	2,305727	1,091913
TAG(42:1)_	1	12,31 TAG	0,990278	0,755755	1,508724	0,982602	0,365003	0,415501	0,770517	1,007019	0,635331	0,940845	0,80059
TAG(50:3)_	1	13,48 TAG	1,838816	1,864656	2,569178	1,388781	0,886814	1,242657	3,127522	3,156435	2,121558	1,941983	1,829815
TAG(44:1)_	1	12,89 TAG	3,844616	3,755775	5,790434	4,1732	2,210452	2,165398	3,526019	3,786559	3,999164	3,573835	3,384558
TAG(56:4)_	1	14,26 TAG	0,532648		0,794798	0,481734				0,360713	0,385658	0,494986	0,520592
TAG(51:3)_	1	13,73 TAG	0,706364	0,651489	1,757002	0,838622	0,525949	0,406156	0,866686	0,698679	1,044958	0,866174	0,853209
TAG(50:1)_	1	14,26 TAG	2,578366	2,57999	3,098119	2,139033	1,007629	1,056925	3,137629	2,882468	2,359027	2,273033	1,7379
TAG(50:3)_	1	13,51 TAG	1,407244	1,534769	2,609845	2,179533		1,033402	2,445049	1,959192	1,989939	2,377927	1,907023
TAG(42:0)_	1	12,81 TAG	2,192854	1,317516	2,412445	2,843826	1,216794	1,304208	2,10478	1,327905	2,09879	2,404918	1,250631
TAG(47:2)_	1	13,19 TAG	0,73484	1,08882	1,005903	0,447898	0,51222	0,638838	0,692424	0,594864	1,128843	0,982506	0,719466
TAG(54:4)_	1	13,93 TAG	1,222821	1,109196		1,116897	1,056418	1,039527		1,47289	1,47149	1,353618	1,344464
TAG(48:2)_	1	13,44 TAG	0,598778	0,418866	0,560629	0,542898				0,426509	0,728936	1,138312	1,613771
TAG(47:0)_	1	13,97 TAG	2,635172	2,213599	3,382254	3,71171	1,961958	1,218181	2,796195	3,573135	3,3293	2,976556	2,087569
TAG(50:0)_	1	14,59 TAG	1,006846	0,870635	0,96892	1,52734	0,669393	0,533898	1,1781	0,824131	0,866846	1,029065	0,600321

TAG(51:2)_	1	14,06	TAG	1,072522	0,740819	1,192321	0,728884	0,653226	0,892648	0,973684	0,782709	1,069822	1,303696	0,798196
TAG(48:2)_	1	13,42	TAG	1,440004	1,519278	1,836073	1,783566	1,027363		1,590646	1,76547	2,030029	1,443798	1,214153
TAG(46:0)_	1	13,82	TAG	0,986051	0,62896	1,154284	0,732276	0,482586		0,834538	1,299494	0,822694	1,261839	0,699981
TAG(52:2)_	1	14,26	TAG	1,785308	1,233045	1,962065	1,382296			3,426244	4,17191	2,750212	1,230941	1,483776
TAG(50:1)_	1	14,22	TAG	0,551181	0,70014	0,632486	0,638172	0,376658	0,406982	0,661802	0,950503	0,748437	0,823163	0,625078
TAG(51:1)_	1	14,4	TAG	0,808911	0,863439	1,235642	1,493862	0,259075	0,32175	0,989932	0,953473	0,724834	1,134003	0,774092
TAG(49:2)_	1	13,66	TAG	0,535453	0,767902	0,855366	1,291369	0,405863	0,235533	0,780673	0,77865	0,560737	0,652066	0,958734
TAG(47:2)_	1	13,2	TAG	0,568098	0,733531	0,781578	0,830751		0,499568	0,436185	0,742575	0,65359	0,956887	0,801846
TAG(50:1)_	1	14,23	TAG	1,795813	1,643081	2,427987	1,808015	1,027438	0,84465	2,607005	2,010212	1,598072	2,008056	1,775831
TAG(54:2)_	1	14,63	TAG	0,403822	0,593038	0,580862	0,514615	0,318287	0,340505	0,747875	0,601998	0,675034	0,686903	0,595138
TAG(48:1)_	1	13,84	TAG	0,636056	0,507772	1,219294	0,954404	0,359894		0,708131	0,755883	0,762808	0,974322	0,857294
TAG(42:0)_	1	12,83	TAG	1,147163	0,833086		2,050471	1,139044		1,751316	1,414038	1,277145	0,919426	

Y-2016-6-1	QC-01	QC-02	QC-03
0,391714	0,478674	0,481812	0,475226
0,436439	0,444069	0,445191	0,451663
0,129963	0,200434	0,186715	0,169825
0,521366	0,668303	0,642163	0,757112
0,207027	0,34402	0,31055	0,26727
0,385092	0,50374	0,440581	0,605926
0,421218	0,493531	0,488183	0,486769
50,21669	41,69183	40,7425	41,32277
0,23493	0,203569	0,195755	0,190609
82,76609	74,76001	78,71995	70,4578
0,135411	0,307835	0,496424	0,328208
1,526604	3,290007	3,359427	3,314112
3348,785	4452,32	4384,737	4560,562
3,963829	4,974444	5,068179	5,206078
49,28566	68,68519	68,32894	65,34884
90,72601	88,63002	92,91811	88,12319
142,7024	190,7757	188,8023	200,7983
2089,116	3131,788	3348	3302,979
46,80935	31,40118	30,9784	29,24217
32,11351	30,06125	28,29061	30,53583
	22,75357	21,4729	
3,169366	4,079914	3,989134	3,711776
1,300495	1,757523	1,589002	1,654935
37,78633	39,74984	35,5013	39,6761
0,754914	0,819377	0,882925	0,746417
9,320287	5,930034	4,811275	5,384103
11,03532	11,78378	13,8158	14,54676
0,390928	0,47979	0,465265	0,362805
	10,16785	6,678428	6,85105
7,324842	9,081233	7,82831	7,775232
20,68671	23,76276	24,2801	24,26631

0,925927	1,666664	1,710347	1,675484
0,938193	1,375701	1,393576	1,355231
1,738807	2,775517	2,807323	2,860924
39,46896	38,98102	40,90206	40,84167
11,41286	12,2806	12,73926	12,07254
0,580856		0,668278	0,698816
3,215131	3,245572	3,046827	3,17655
13,95174	17,44686	18,76509	18,3089
3,080765	3,382232	3,376174	3,156515
8,900182	8,566436	9,127248	8,511896
38,49055	43,86318	43,15249	47,28294
1,494851	1,98556	2,13936	2,186365
33,4628	37,29196	40,8247	40,68107
6,490318	7,400903	7,969708	8,278847
	1,442075		1,562304
6,07755	6,535309	7,145098	6,442195
0,632281	0,600865	0,586911	0,655593
2,183141	2,275057	2,076073	2,3252
1,801331	2,226422	2,410561	2,503529
29,03611	27,11286	30,15042	30,21028
11,73487	12,79722	14,41822	14,08776
6,972891	7,237557	7,645855	8,198803
1,896461	1,73626	1,828255	1,970263
2,96562	3,251919	3,187497	3,598464
3,090082	3,158524	2,792254	3,116829
1,825344	2,167067	2,341607	2,049367
11,27412	11,57928	13,23623	12,26849
3,341043	3,831037	4,139169	4,39722
0,911134	1,111845	1,231654	1,272612
1,662321	1,822934	1,941223	2,096361
6,127466	6,562868	7,562816	7,213244
7,936057	9,09294	9,983152	8,675714
7,31272	7,720777	7,90363	8,826293

2,728826	3,131465	2,911652	3,368834
0,786888	0,780359	0,781236	0,885533
0,511023	0,684883	0,790477	0,705067
0,875404	1,06297	1,150287	0,983903
7,478888	8,672872	10,15654	9,177352
3,93584	3,945183	3,76126	4,401366
14,261	15,25582	17,52223	17,80815
7,495602	7,194647		8,096565
3,193245	3,686457	4,351468	3,9395
0,907391	0,803861	0,886989	0,954966
19,28305	18,13784	21,54371	20,6055
5,365756	5,158401	5,597169	6,183437
3,192902	4,260924	5,087286	4,500591
2,03066	2,195891	2,565765	2,607413
	1,745034	1,893368	2,101191
0,424799	0,600453	0,729358	0,68937
4,258241	4,837529	5,741795	5,787628
1,658559	2,205969	2,350599	2,670905
5,965638	4,807737	5,29926	5,868901
6,97342	5,401976	6,396074	6,521641
7,178227	6,326273	7,263044	7,777798
4,540131	5,183571	6,288716	5,387769
0,802485	1,204856	1,278315	1,036314
2,525136	2,547178	2,876793	2,325382
6,573319	8,186191	7,055647	8,747959
7,611755	9,475803	11,61311	9,912017
2,00848	1,659204	2,03978	1,750806
4,227233	4,258709	5,310546	4,84854
5,184854	5,236233	5,862474	6,53082
10,53479	10,5536	12,09228	9,653163
6,544271	6,305446	7,936655	7,321349
5,194778	5,213239	6,542142	6,256675
	0,48719	0,613304	0,535158

10,6961	10,95034	13,50928	11,22672
1,985163	2,463871	2,819746	3,126051
1,356174	1,559672	1,260503	1,298919
2,286921	2,242503	2,626338	2,06937
5,972388	5,912064	7,343293	7,480818
4,875601	5,022297	6,397794	5,404086
6,884992	6,823895	8,707504	8,538193
1,648792	1,410882	1,446476	1,785234
3,261442	2,697311	3,302452	3,514508
1,581564	1,42235	1,740257	1,875547
0,409349	0,647198		0,531215
2,360732	2,095746	2,781055	2,550748
0,923635	1,271902	1,0941	1,454627
1,453948	1,596886	1,628054	1,241197
2,557359	2,421258	3,197139	2,635473
2,85995	2,807247	3,713854	3,747344
0,761347	0,811906	1,10484	1,059427
1,790986	2,013502	2,760032	2,26252
1,556601	1,734879	2,20776	2,405929
1,539858	2,736702	1,963478	2,510742
0,86644	1,025622	0,851232	1,206319
1,704311	1,950523	2,367226	2,80957
4,262836	3,741535	5,455324	5,17109
	0,398694	0,503089	0,590775
0,789004	1,244084	0,946483	1,42256
2,271706	2,101681	3,142528	2,515689
2,303537	2,04294	2,50112	3,070166
1,798696	1,998476	2,350761	3,003478
0,74815	0,778498	1,10787	0,781841
1,6194	0,967667	1,010201	1,409813
2,041682	0,624521	0,514403	0,794589
2,755337	2,585601	2,912751	3,967324
0,968495	0,92305	0,835283	1,278136

0,748062	1,265544	0,916985	0,823493
1,546706	1,386498	2,214029	2,059368
0,864422	0,934068	0,816698	1,276085
1,517854	2,559107	2,022771	1,558682
0,666159	0,748658	1,190517	0,847706
0,972689	1,106053	1,381325	0,82687
1,188262	0,85426	1,062031	0,619348
0,372179	0,73672	0,968404	0,565974
1,566085	1,740863	1,841882	2,766048
0,446216	0,427365	0,743587	0,657249
0,590546	1,101134	0,639946	0,826688
1,627258	1,10519	1,738537	1,044521



TABLE 7

id	MS2 name	MS2 score	rt	type	MEAN C-2016	MEAN Y-2016
1	Cer(18:1/26:1)	1	11,92	CER	0,346141651	0,394563674
2	Cer(18:1/26:0)	1	12,29	CER	0,340420585	0,394063463
3	Cer(18:1/22:0)	1	10,94	CER	0,133092643	0,136740974
4	Cer(18:1/24:0)	1	11,65	CER	0,459220136	0,444167025
5	Cer(18:1/16:1)	1	8,25	CER	0,181895499	0,254055835
6	Cer(18:1/24:1)	1	11,25	CER	0,326776511	0,306407655
7	DAG(16:0/16:1)	1	9,38	DAG	0,320518537	0,32242666
8	DAG(16:0/16:0)	1	9,96	DAG	49,08452603	23,93592699
9	DAG(14:0/20:0)	1	10,7	DAG	0,244171489	0,138816875
10	DAG(16:0/18:0)	1	10,7	DAG	81,33182528	40,03342159
11	DAG(16:1/16:1)	1	8,79	DAG	0,255007554	0,242367791
12	FFA(24:6)	1	4,73	FFA	1,211542921	2,661071393
13	FFA(18:0)	1	5,58	FFA	2551,461496	3610,222712
14	FFA(18:3)	1	3,54	FFA	3,053973954	5,75401691
15	FFA(20:0)	1	6,41	FFA	39,13039896	79,20569337
16	FFA(14:0)	1	3,57	FFA	61,24162889	80,98540374
17	FFA(18:1)	1	4,95	FFA	111,2615983	203,4439418
18	FFA(16:0)	1	4,76	FFA	1668,724772	1543,916582
19	FFA(22:1)	1	6,45	FFA	31,36786412	50,13854421
20	FFA(16:1)	1	4,01	FFA	27,58685442	28,23564985
21	FFA(24:0)	1	8,28	FFA	11,89988935	0,030687215
22	FFA(20:5)	1	3,84	FFA	3,999391051	3,259853958
23	FFA(28:0)	1	10,16	FFA	1,207771591	2,22477261
24	FFA(18:2)	1	4,25	FFA	31,3871491	54,52929753
25	FFA(20:4)	1	4,06	FFA	0,652907441	1,248477628
26	FFA(20:1)	1	5,69	FFA	7,428419453	8,025882974
27	FFA(22:0)	1	7,32	FFA	10,05513267	17,99230131
28	FFA(20:2)	1	5,23	FFA	0,294213147	0,429972655
29	FFA(26:0)	1	9,24	FFA	4,187434478	2,176260484
30	SM(14:0)	1	6,35	SM	8,153430767	7,596877041
31	TAG(50:0)_FA18:0	1	14,59	TAG	14,73561164	19,5161101
32	TAG(51:0)_FA17:0	1	14,75	TAG	1,262610631	1,391814986
33	TAG(47:1)_FA17:0	1	13,55	TAG	1,221450296	1,166708224
34	TAG(49:0)_FA18:0	1	14,39	TAG	2,218494207	2,319048231
35	TAG(52:0)_FA18:0	1	14,93	TAG	32,26786187	33,92830421
36	TAG(48:1)_FA16:1	1	13,85	TAG	7,1436717	10,58580401
37	TAG(44:0)_FA18:0	1	13,36	TAG	0,334176944	0,577137181
38	TAG(44:1)_FA14:0	1	12,89	TAG	2,182501552	2,88489461
39	TAG(46:0)_FA16:0	1	13,79	TAG	11,23108105	15,175318
40	TAG(47:1)_FA14:0	1	13,59	TAG	2,081327292	2,516958418
41	TAG(45:0)_FA16:0	1	13,56	TAG	7,267255646	8,226718134
42	TAG(50:0)_FA16:0	1	14,59	TAG	26,74676394	35,96218999
43	TAG(54:0)_FA16:0	1	15,26	TAG	1,764230795	1,687614298
44	TAG(48:0)_FA16:0	1	14,2	TAG	25,42070875	35,97325099
45	TAG(45:0)_FA14:0	1	13,55	TAG	5,273111167	6,443941168
46	TAG(50:2)_FA14:0	1	13,81	TAG	0,233769024	0,731077533
47	TAG(46:1)_FA16:0	1	13,41	TAG	4,212248888	5,69655891
48	TAG(54:7)_FA18:2	1	12,71	TAG	0,501398724	0,569764399

49	TAG(49:3)_FA16:1	1	13,28	TAG	2,086005609	2,188458281
50	TAG(51:1)_FA17:0	1	14,38	TAG	0,986084036	1,886723531
51	TAG(54:0)_FA18:0	1	15,25	TAG	24,36660383	20,84779895
52	TAG(48:2)_FA16:1	1	13,48	TAG	5,809608371	12,22590403
53	TAG(49:2)_FA16:1	1	13,67	TAG	4,987254845	7,12675252
54	TAG(51:2)_FA16:1	1	14,07	TAG	0,928142745	1,979508084
55	TAG(49:2)_FA18:1	1	13,65	TAG	1,966222037	2,919305516
56	TAG(48:2)_FA18:1	1	13,44	TAG	2,590140465	2,771853155
57	TAG(51:0)_FA16:0	1	14,75	TAG	1,514294837	2,015171768
58	TAG(48:1)_FA16:0	1	13,84	TAG	5,904251087	11,12885316
59	TAG(47:0)_FA17:0	1	13,95	TAG	2,518032973	3,536173145
60	TAG(56:1)_FA16:0	1	15,27	TAG	0,921422456	1,077146489
61	TAG(51:0)_FA18:0	1	14,75	TAG	1,508470397	1,633710323
62	TAG(49:1)_FA16:0	1	14,02	TAG	3,09358774	6,08476568
63	TAG(49:0)_FA16:0	1	14,39	TAG	6,797815971	8,565961629
64	TAG(47:2)_FA16:1	1	13,23	TAG	3,648127944	7,567768465
65	TAG(44:2)_FA16:1	1	12,43	TAG	1,355069183	2,570023469
66	TAG(42:1)_FA14:0	1	12,32	TAG	0,5253254	0,889543994
67	TAG(56:1)_FA18:1	1	15,26	TAG	0,575635599	0,677734517
68	TAG(53:0)_FA16:0	1	15,1	TAG	0,888433517	0,968501968
69	TAG(46:0)_FA14:0	1	13,79	TAG	4,860570827	7,531319566
70	TAG(52:4)_FA16:0	1	13,49	TAG	2,518886938	4,349872931
71	TAG(47:0)_FA16:0	1	14	TAG	12,74144304	15,14270475
72	TAG(54:5)_FA18:2	1	13,5	TAG	1,313512805	4,170491211
73	TAG(48:1)_FA14:0	1	13,81	TAG	1,881944519	3,46884518
74	TAG(52:0)_FA20:0	1	14,94	TAG	0,533309595	0,798381336
75	TAG(52:0)_FA16:0	1	14,93	TAG	14,73028364	16,88786443
76	TAG(49:1)_FA16:1	1	14,02	TAG	4,44821007	5,386453561
77	TAG(54:1)_FA18:0	1	14,93	TAG	1,05618255	4,349618353
78	TAG(51:1)_FA16:0	1	14,39	TAG	1,832280383	2,136707345
79	TAG(54:1)_FA18:1	1	14,93	TAG	0,030687215	1,398044932
80	TAG(44:2)_FA14:0	1	12,43	TAG	0,203705322	0,412118161
81	TAG(48:1)_FA18:1	1	13,8	TAG	4,528214424	5,148913684
82	TAG(46:1)_FA18:1	1	13,36	TAG	1,905617266	2,016941833
83	TAG(52:4)_FA18:2	1	13,49	TAG	3,619601965	5,670786368
84	TAG(54:6)_FA18:2	1	13,11	TAG	5,151170261	6,117820532
85	TAG(50:2)_FA18:1	1	13,84	TAG	4,928054356	5,697096801
86	TAG(49:0)_FA17:0	1	14,38	TAG	4,637652138	4,878601007
87	TAG(51:2)_FA17:0	1	14,05	TAG	0,72545967	0,837384157
88	TAG(48:0)_FA18:0	1	14,21	TAG	1,62774667	2,333781288
89	TAG(44:0)_FA14:0	1	13,33	TAG	5,26550108	6,971507133
90	TAG(50:2)_FA16:1	1	13,88	TAG	5,462752384	8,637393192
91	TAG(46:2)_FA14:0	1	13	TAG	1,429342354	1,657113131
92	TAG(48:3)_FA16:1	1	13,08	TAG	3,741228977	4,632809082
93	TAG(46:1)_FA14:0	1	13,39	TAG	4,198848831	4,88857946
94	TAG(47:1)_FA16:1	1	13,62	TAG	7,999427297	9,466132118
95	TAG(44:0)_FA16:0	1	13,34	TAG	5,73497779	6,152061492
96	TAG(50:3)_FA16:1	1	13,49	TAG	4,094558833	6,203624664
97	TAG(44:1)_FA18:1	1	12,86	TAG	0,233277286	0,314123062
98	TAG(46:1)_FA16:1	1	13,4	TAG	5,23719676	10,81811448

99	TAG(51:1)_FA18:1	1	14,38	TAG	2,069665865	2,407069482
100	TAG(44:1)_FA16:0	1	12,9	TAG	1,153033073	1,34736598
101	TAG(45:1)_FA16:0	1	13,13	TAG	1,506868329	1,7626595
102	TAG(47:1)_FA16:0	1	13,62	TAG	5,066406885	6,16662753
103	TAG(49:1)_FA18:1	1	14	TAG	4,39401088	4,795495859
104	TAG(46:2)_FA16:1	1	12,99	TAG	6,384275335	7,058189374
105	TAG(52:2)_FA18:2	1	14,26	TAG	1,337793375	1,536724003
106	TAG(48:2)_FA16:0	1	13,47	TAG	2,444617883	3,111411446
107	TAG(49:2)_FA18:2	1	13,71	TAG	1,074208125	1,442759865
108	TAG(50:3)_FA14:0	1	13,43	TAG	0,154664206	0,303683318
109	TAG(47:1)_FA18:1	1	13,56	TAG	1,923536436	2,268423887
110	TAG(52:1)_FA16:1	1	14,63	TAG	0,997792466	1,070188043
111	TAG(53:2)_FA18:1	1	14,4	TAG	0,759094425	1,167677975
112	TAG(49:1)_FA17:0	1	14,01	TAG	2,408558703	2,670496426
113	TAG(51:2)_FA18:1	1	14,04	TAG	1,505907188	3,029222326
114	TAG(54:1)_FA16:0	1	14,94	TAG	0,586852094	0,859934649
115	TAG(49:2)_FA16:0	1	13,67	TAG	1,11027017	1,576225058
116	TAG(46:3)_FA16:1	1	12,55	TAG	1,691313464	1,678081034
117	TAG(48:0)_FA14:0	1	14,21	TAG	1,296640342	1,752957635
118	TAG(42:1)_FA16:1	1	12,31	TAG	0,58997104	0,836790274
119	TAG(50:3)_FA18:1	1	13,48	TAG	1,631817087	1,792646228
120	TAG(44:1)_FA16:1	1	12,89	TAG	1,977608783	3,755494942
121	TAG(56:4)_FA18:2	1	14,26	TAG	0,189521914	0,303887205
122	TAG(51:3)_FA18:2	1	13,73	TAG	0,463966368	0,853118396
123	TAG(50:1)_FA16:1	1	14,26	TAG	1,742813678	2,443627372
124	TAG(50:3)_FA18:2	1	13,51	TAG	1,46591333	2,16377785
125	TAG(42:0)_FA14:0	1	12,81	TAG	1,881274014	1,830953451
126	TAG(47:2)_FA18:1	1	13,19	TAG	0,738086429	0,811042172
127	TAG(54:4)_FA18:0	1	13,93	TAG	0,929257587	1,215425057
128	TAG(48:2)_FA18:2	1	13,44	TAG	0,363757634	0,661483832
129	TAG(47:0)_FA14:0	1	13,97	TAG	2,520478929	2,919681943
130	TAG(50:0)_FA14:0	1	14,59	TAG	0,680063199	0,911159801
131	TAG(51:2)_FA16:0	1	14,06	TAG	0,880070134	0,946028164
132	TAG(48:2)_FA14:0	1	13,42	TAG	1,27282869	1,598467058
133	TAG(46:0)_FA18:0	1	13,82	TAG	0,669140679	0,963827837
134	TAG(52:2)_FA16:1	1	14,26	TAG	1,07068152	2,430156221
135	TAG(50:1)_FA14:0	1	14,22	TAG	0,430558768	0,592554241
136	TAG(51:1)_FA18:0	1	14,4	TAG	0,500008844	0,924837214
137	TAG(49:2)_FA17:0	1	13,66	TAG	0,681914212	0,81985362
138	TAG(47:2)_FA14:0	1	13,2	TAG	0,574035453	0,660543818
139	TAG(50:1)_FA18:0	1	14,23	TAG	1,45550332	1,927543676
140	TAG(54:2)_FA18:2	1	14,63	TAG	0,45852134	0,625527543
141	TAG(48:1)_FA18:0	1	13,84	TAG	0,618017772	0,77483055
142	TAG(42:0)_FA16:0	1	12,83	TAG	0,871856446	1,169978223

VIP	P-VALUE	Q-VALUE	FOLD CHANGE	LOG_FOLDCHANGE
0,750909062	0,517275692	0,355720235	0,877277038	-0,188895587
0,721519144	0,514515615	0,354893926	0,863872492	-0,211109709
0,005822131	0,911780234	0,492276529	0,973319402	-0,039014781
0,535770343	0,894389304	0,487464081	1,033890654	0,048083612
0,80218646	0,304462824	0,282675502	0,715966626	-0,482035756
0,641155987	0,787299618	0,455694896	1,066476328	0,092851944
0,166391325	0,9855332	0,511719724	0,994081993	-0,008563242
1,495782032	0,065607899	0,1878398	2,050663258	1,036090605
1,264282013	0,025398555	0,153949895	1,758946734	0,814711795
1,485396476	0,069899821	0,189457359	2,031598151	1,022615066
0,632634477	0,843944783	0,4729743	1,052151167	0,073341998
1,157933841	0,007291779	0,088936782	0,455283885	-1,135161701
0,741512599	0,282744787	0,275949378	0,706732437	-0,500763969
1,855660733	0,001759833	0,042928869	0,530755123	-0,913881703
1,745093013	0,02059842	0,144066749	0,49403518	-1,017314316
0,712960915	0,326256221	0,288797153	0,756205761	-0,403149254
1,810726151	0,00418488	0,070972469	0,546890693	-0,870675584
1,265845799	0,813077729	0,463696841	1,080838688	0,112151221
0,511231631	0,166281119	0,246105792	0,625623751	-0,67663281
0,492917943	0,927049381	0,496427937	0,977022118	-0,033536872
1,563823362	0,032609547	0,164669407	387,7800366	8,599094723
0,590887999	0,395446297	0,315837006	1,226862032	0,294973018
1,17100991	0,066080336	0,188026723	0,542874173	-0,881310245
1,778771036	0,00158313	0,042928869	0,575601567	-0,796857576
1,485144521	0,006690701	0,086293677	0,522962868	-0,935219579
0,615727872	0,820146885	0,46585028	0,925557908	-0,111604839
1,486940454	0,039511188	0,17203945	0,558857507	-0,839447611
0,045216182	0,243296792	0,264244592	0,684260137	-0,547383193
0,727371876	0,45401809	0,336055146	1,924142128	0,944215369
0,451343846	0,497844395	0,349794496	1,073260858	0,102000768
0,866015574	0,18662233	0,252063551	0,755048602	-0,405358583
0,614280263	0,609042715	0,393074491	0,907168441	-0,140557643
0,11123593	0,820523486	0,465964517	1,046920104	0,066151347
0,529467625	0,806502797	0,461678311	0,95663996	-0,063952039
0,727717827	0,81812297	0,465235515	0,951060262	-0,072391338
1,105631594	0,203533918	0,256277461	0,674835062	-0,567393163
1,029921133	0,245313307	0,264590695	0,579025152	-0,788302076
1,039051907	0,13220125	0,233076507	0,756527307	-0,402535936
0,939890033	0,217757218	0,259403235	0,740088679	-0,434229947
0,594309158	0,218760146	0,25961097	0,826921604	-0,274177533
0,608757914	0,397833765	0,31672341	0,883372388	-0,178906356
0,881177608	0,156790918	0,242917392	0,743746806	-0,427116527
0,024105659	0,740349579	0,440490198	1,045399294	0,06405409
0,917125444	0,121439397	0,227860476	0,706655864	-0,500920291
0,861075657	0,231172093	0,262057421	0,818305293	-0,289288911
1,06145141	0,21405187	0,258621862	0,319759551	-1,644940642
1,077458708	0,329009014	0,289530061	0,739437431	-0,435500018
0,644307582	0,72514185	0,435381398	0,880010623	-0,184407155

0,568019681	0,774789674	0,451724919	0,953185001	-0,069171845
1,50332246	0,038009743	0,170614239	0,522643631	-0,936100528
0,587863336	0,553269558	0,370411938	1,168785438	0,225010109
1,592919556	0,055810228	0,183363744	0,475188449	-1,073428328
1,103535067	0,251583927	0,265636981	0,699793466	-0,514998902
1,615010663	0,048414341	0,179000479	0,468875451	-1,09272335
1,165184208	0,144159061	0,238179895	0,6735239	-0,570198954
0,199825086	0,608986263	0,393052377	0,934443609	-0,097820491
1,060402362	0,361406507	0,302547767	0,751447029	-0,412256686
1,56524526	0,105266254	0,218626305	0,530535447	-0,914478949
1,149897782	0,245653402	0,264648595	0,71207853	-0,489891741
0,962481453	0,193990793	0,253972568	0,855429105	-0,225279801
0,534869997	0,719626805	0,433505576	0,923340188	-0,115065814
1,585995324	0,08207137	0,201313499	0,508415262	-0,975920755
0,674430114	0,315436646	0,285830976	0,793584686	-0,333543909
1,595414461	0,061560096	0,186137924	0,482061252	-1,052711623
1,561834894	0,097177331	0,213225495	0,527259459	-0,923415023
1,325167396	0,031127561	0,162768854	0,590555839	-0,759854617
0,833643115	0,490411645	0,347459174	0,849352637	-0,235564433
0,641759052	0,474600622	0,342474268	0,917327529	-0,12449116
1,30751879	0,172039042	0,24790501	0,645381036	-0,631776908
1,028042783	0,165902946	0,2459842	0,579071384	-0,78818689
0,743638173	0,333763155	0,290775818	0,841424517	-0,249094239
0,948950142	0,235118398	0,262790001	0,31495398	-1,666787053
1,477575793	0,056199352	0,183566555	0,542527678	-0,882231355
1,081821717	0,060194888	0,18552004	0,667988554	-0,582104712
0,783813251	0,522510034	0,357273659	0,872240756	-0,197201692
0,807275431	0,300544305	0,281510792	0,825814243	-0,276110794
1,667770761	0,001341041	0,042928869	0,24282189	-2,042029609
0,962160582	0,254548513	0,26611644	0,857525195	-0,221749035
1,643931389	0,026910236	0,156538559	0,021950092	-5,509629199
1,767454991	0,054472166	0,182647836	0,494288632	-1,016574367
0,777021605	0,424092515	0,326109733	0,879450444	-0,18532581
0,776685399	0,693270843	0,424366286	0,944805266	-0,081911088
1,159497907	0,138832803	0,235988279	0,638289248	-0,64771775
0,849058131	0,171443798	0,247723425	0,84199434	-0,24811756
0,386488847	0,703993992	0,428120034	0,865011519	-0,209208751
0,238412481	0,774533037	0,45164287	0,950611073	-0,073072888
0,447842811	0,523200632	0,357477291	0,866340334	-0,20699421
0,996935285	0,116486884	0,225228019	0,697471815	-0,519793177
0,722327293	0,231740231	0,262164171	0,755288775	-0,40489975
1,155621754	0,133366339	0,23360366	0,632453828	-0,660967936
0,565167624	0,446746628	0,333707655	0,862549652	-0,213320588
0,86946762	0,315147678	0,285749829	0,807550864	-0,308374963
0,705757437	0,247653005	0,264986311	0,858909805	-0,219421455
0,634707245	0,479336783	0,34390601	0,845057643	-0,242878341
0,375006307	0,625525495	0,399462968	0,932204237	-0,101282024
0,805893483	0,1124473	0,222958997	0,660026848	-0,599403385
0,85252386	0,668421336	0,41547512	0,742630243	-0,429284026
1,592339189	0,065703762	0,187877916	0,484113638	-1,046582356

0,898236613	0,280598465	0,275247078	0,859828053	-0,217879915
0,42257052	0,477380178	0,343316525	0,855768284	-0,224707884
0,52414393	0,469352183	0,340868224	0,854883391	-0,226200451
0,707512606	0,293394496	0,279331554	0,821584709	-0,283518764
0,442489927	0,585974968	0,383902112	0,916278735	-0,126141557
0,579302579	0,572011438	0,378213875	0,904520267	-0,144775267
0,161162366	0,679330051	0,419411858	0,87054889	-0,200002773
0,973944316	0,18129076	0,250605084	0,785694186	-0,347960211
0,950125089	0,168101662	0,246685129	0,744550878	-0,425557657
0,891014329	0,237795573	0,263275386	0,509294378	-0,973428304
0,751119909	0,351630799	0,298491458	0,847961639	-0,237929096
0,356781744	0,74353992	0,441550234	0,932352471	-0,101052633
0,497283221	0,329923721	0,289771699	0,650088844	-0,621291199
0,58994118	0,635403214	0,40322738	0,901914221	-0,148937867
1,602344085	0,069025861	0,189142117	0,497126663	-1,008314611
1,10919847	0,204800684	0,25657023	0,682438014	-0,551230084
1,128663774	0,134670714	0,234185768	0,70438556	-0,505562761
0,059071088	0,971441786	0,508120789	1,007885453	0,011331685
0,979073523	0,24517369	0,264566886	0,73968721	-0,435012765
1,257157105	0,185389705	0,251732335	0,705040509	-0,504221943
0,601286616	0,741895791	0,441004451	0,910283949	-0,135611453
1,565950979	0,09757849	0,213507678	0,526590719	-0,925245999
0,984563059	0,416708343	0,323535578	0,623658749	-0,681171257
1,4801608	0,041058439	0,173421457	0,543847572	-0,878725741
1,110158013	0,278713113	0,274624251	0,713207626	-0,487605965
0,780834454	0,119410729	0,226801214	0,677478666	-0,561752579
0,135798769	0,885235886	0,484894303	1,027483256	0,039114884
0,597912025	0,599625591	0,389363171	0,910046919	-0,135987168
0,459777218	0,364655588	0,303871209	0,764553587	-0,387310473
0,595066344	0,311547383	0,284730123	0,549911603	-0,862728367
0,727114411	0,377649632	0,309045176	0,863271746	-0,212113323
0,978794519	0,203240527	0,256209229	0,746370942	-0,422035276
0,446074582	0,605955494	0,391862787	0,930279	-0,104264635
0,907714466	0,29964312	0,281240004	0,796280839	-0,328650753
1,10887924	0,155078595	0,242310063	0,694253324	-0,526465916
1,270810592	0,047627058	0,178470735	0,440581355	-1,182519652
0,479275893	0,370487433	0,306216559	0,726614947	-0,460737051
1,470510913	0,111969048	0,222682683	0,540645246	-0,88724584
0,610475085	0,458332974	0,337428069	0,831751176	-0,265776094
0,626235721	0,579157953	0,381138167	0,869034631	-0,202514425
0,982209893	0,234252279	0,262630984	0,755107829	-0,40524542
1,388932936	0,028341716	0,158804599	0,733015429	-0,448084529
0,90856304	0,420205034	0,324760728	0,797616682	-0,326232512
0,766314438	0,479060441	0,343822923	0,745190319	-0,424319163

Kind of lipids	Number of lipids
TAG	102
FFA	18
CER	6
DAG	5
SM	1

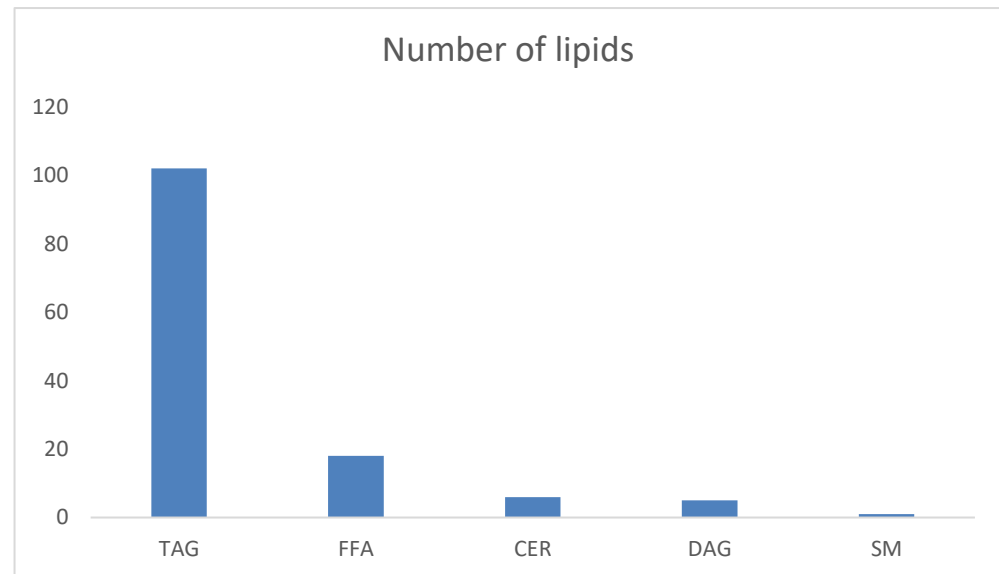


TABLE 9

name	DAG(14:0/20:0)	FFA(24:6)	FFA(18:3)	FFA(20:0)	FFA(18:1)	FFA(24:0)	FFA(18:2)	FFA(20:4)	FFA(22:0)	DAG(51:1)_FA17	DAG(51:2)_FA16	DAG(42:1)_FA14
DAG(14:0/20:0)	0	0,03572	0,06278	0,05087	0,06224	0,1954	0,09162	0,05972	0,22136	0,15081	0,18311	0,06112
FFA(24:6)	0,03572	0	0,00414	0,00137	0,0001	0,04392	0,00444	0,00535	0,05065	0,05517	0,02193	0,09987
FFA(18:3)	0,06278	0,00414	0	0,00369	0,00001	0,1856	0	0,01023	0,00615	0,03588	0,10577	0,04936
FFA(20:0)	0,05087	0,00137	0,00369	0	0,00016	0,23679	0,00286	0,00016	0,00007	0,04368	0,11836	0,18584
FFA(18:1)	0,06224	0,0001	0,00001	0,00016	0	0,2387	0,00003	0,00291	0,00291	0,02329	0,0516	0,08621
FFA(24:0)	0,1954	0,04392	0,1856	0,23679	0,2387	0	0,21097	0,2906	0,58573	0,14487	0,03958	0,03866
FFA(18:2)	0,09162	0,00444	0	0,00286	0,00003	0,21097	0	0,00139	0,00196	0,03812	0,08502	0,10035
FFA(20:4)	0,05972	0,00535	0,01023	0,00016	0,00291	0,2906	0,00139	0	0,00049	0,15835	0,20617	0,51142
FFA(22:0)	0,22136	0,05065	0,00615	0,00007	0,00291	0,58573	0,00196	0,00049	0	0,10594	0,33733	0,45531
TAG(51:1)_FA17:0	0,15081	0,05517	0,03588	0,04368	0,02329	0,14487	0,03812	0,15835	0,10594	0	0,00002	0,00022
TAG(51:2)_FA16:1	0,18311	0,02193	0,10577	0,11836	0,0516	0,03958	0,08502	0,20617	0,33733	0,00002	0	0,00117
TAG(42:1)_FA14:0	0,06112	0,09987	0,04936	0,18584	0,08621	0,03866	0,10035	0,51142	0,45531	0,00022	0,00117	0
TAG(54:1)_FA18:0	0,033	0,00416	0,01673	0,00572	0,0091	0,02201	0,00821	0,0115	0,04876	0,00088	0,00051	0,00469
TAG(54:1)_FA18:1	0,00003	0,01175	0,05418	0,00346	0,03221	0,11803	0,06243	0,00865	0,0552	0,06906	0,10113	0,06013
TAG(51:3)_FA18:2	0,14112	0,1603	0,06553	0,16181	0,07916	0,15755	0,05231	0,25481	0,18564	0	0,00013	0,00033
TAG(52:2)_FA16:1	0,0289	0,04462	0,06098	0,18758	0,09187	0,2503	0,08566	0,15452	0,53413	0,0985	0,0697	0,07229
TAG(54:2)_FA18:2	0,00458	0,00794	0,07423	0,0638	0,02884	0,39714	0,04017	0,01034	0,21422	0,09244	0,04421	0,21529



AG(54:1)_FA18	(54:1)_F	(51:3)_F	(52:2)_F	(54:2)_FA
0,033	0,00003	0,14112	0,0289	0,00458
0,00416	0,01175	0,1603	0,04462	0,00794
0,01673	0,05418	0,06553	0,06098	0,07423
0,00572	0,00346	0,16181	0,18758	0,0638
0,0091	0,03221	0,07916	0,09187	0,02884
0,02201	0,11803	0,15755	0,2503	0,39714
0,00821	0,06243	0,05231	0,08566	0,04017
0,0115	0,00865	0,25481	0,15452	0,01034
0,04876	0,0552	0,18564	0,53413	0,21422
0,00088	0,06906	0	0,0985	0,09244
0,00051	0,10113	0,00013	0,0697	0,04421
0,00469	0,06013	0,00033	0,07229	0,21529
0	0,00496	0,00387	0,02171	0,02706
0,00496	0	0,12135	0,0256	0,00678
0,00387	0,12135	0	0,18914	0,09811
0,02171	0,0256	0,18914	0	0,01416
0,02706	0,00678	0,09811	0,01416	0

TABLE 10

Model	Type	A	N	R2X(cum)	R2Y(cum)	Q2(cum)	Title
Model 1	PCA	3	15	0,659			TOTAL with QC
Model 2	PCA	3	12	0,669			TOTAL
Model 3	PCA	3	12	0,669			C-2016 VS Y-2016
Model 4	OPLS-DA	1+1+0	12	0,547	0.835	0.376	C-2016 VS Y-2016