

Supplemental Material

Table S1. The 211 named metabolites and their category.

Category	Metabolites
Carnitine	C2 carnitine, C16 carnitine, C10 carnitine, C5 carnitine, C6 carnitine, C8 carnitine, C3 carnitine, C18 carnitine, C4 carnitine, C14:1 carnitine, C12 carnitine, C5:1 carnitine, C18:1 carnitine, C14 carnitine, C26 carnitine, C18:2 carnitine, C4-OH carnitine, C9 carnitine, C10:2 carnitine, C12:1 carnitine, C14:2 carnitine, carnitine
Cholesteryl ester (CE)	C18:2 CE, C16:1 CE, C16:0 CE, C18:1 CE, C14:0 CE, C20:4 CE, C20:5 CE, C22:6 CE, C20:3 CE, C18:0 CE, C18:3 CE, C22:5 CE
Diacylglycerol (DAG)	C30:0 DAG, C32:0 DAG, C32:1 DAG, C34:1 DAG, C34:2 DAG, C32:2 DAG, C34:3 DAG, C38:5 DAG, C36:1 DAG, C36:2 DAG, C36:3 DAG, C36:4 DAG
Lysophosphatidylcholine (LPC)	C18:1 LPC, C14:0 LPC, C16:0 LPC, C16:1 LPC, C18:0 LPC, C18:2 LPC, C20:4 LPC, C20:5 LPC, C22:6 LPC
Lysophosphatidylethanolamine (LPE)	C18:0 LPE, C16:0 LPE, C18:1 LPE, C18:2 LPE, C20:4 LPE, C22:6 LPE
Phosphatidylcholine (PC)	C30:0 PC, C30:1 PC, C32:0 PC, C32:1 PC, C32:2 PC, C34:4 PC, C34:0 PC, C34:1 PC, C34:2 PC, C36:4 PC-A, C38:6 PC, C34:3 PC, C36:0 PC, C36:1 PC, C36:2 PC, C38:3 PC, C38:4 PC, C40:6 PC, C36:3 PC, C36:4 PC-B, C38:2 PC, C40:10 PC, C40:9 PC, C34:1 PC plasmalogen-A, C34:2 PC plasmalogen, C34:3 PC plasmalogen, C34:5 PC plasmalogen, C36:5 PC plasmalogen-B, C36:5 PC plasmalogen-A, C38:7 PC plasmalogen, C36:1 PC plasmalogen, C36:2 PC plasmalogen, C36:3 PC plasmalogen, C38:4 PC plasmalogen, C40:7 PC plasmalogen, C36:4 PC plasmalogen, C34:0 PE, C34:2 PE, C36:4 PE, C38:2 PE, C34:2 PE plasmalogen, C36:0 PE, C36:1 PE, C36:2 PE, C38:4 PE, C40:6 PE, C36:3 PE, C38:5 PE, C36:2 PE plasmalogen, C38:6 PE, C34:3 PE plasmalogen, C38:3 PE plasmalogen, C38:5 PE plasmalogen, C38:6 PE plasmalogen, C40:7 PE plasmalogen, C36:5 PE plasmalogen, C38:7 PE plasmalogen, C36:3 PE plasmalogen, C36:4 PE plasmalogen
Lysophosphatidylethanolamine (PE)	C18:0 SM, C16:0 SM, C24:0 SM, C14:0 SM, C20:0 SM, C22:0 SM, C22:1 SM
Sphingomyeline (SM)	C48:0 TAG, C50:0 TAG, C48:1 TAG, C50:1 TAG, C52:4 TAG, C52:0 TAG, C52:1 TAG, C52:2 TAG, C54:4 TAG, C48:2 TAG, C50:2 TAG, C52:3 TAG, C54:5 TAG, C56:8 TAG, C54:1 TAG, C54:2 TAG, C56:2 TAG, C54:3 TAG, C56:5 TAG, C56:3 TAG, C58:8 TAG, C48:3 TAG, C50:3 TAG, C50:4 TAG, C52:6 TAG, C56:9 TAG, C56:6 TAG, C56:7 TAG, C58:9 TAG, C58:7 TAG, C60:12 TAG, C46:0 TAG, C46:1 TAG, C46:2 TAG, C50:5 TAG, C50:6 TAG, C54:9 TAG, C56:10 TAG, C52:7 TAG, C54:8 TAG, C58:11 TAG, C44:0 TAG
Triacylglycerol (TAG)	N-carbamoyl-beta-alanine
β -alanine derivative	creatine
Nitrogenous organic acid	dimethylglycine
Amino acid glycine derivative	glycine, glutamate, tyrosine, phenylalanine, alanine, threonine, asparagine, isoleucine, histidine, lysine, serine, ornithine, arginine, glutamine, leucine, methionine, kynurenic acid, pipecolic acid, hydroxyproline, valine, citrulline, tryptophan
Amino acid	taurine
organic compound, constituent of bile	allantoin
Diureide of glyoxylic acid	1-methylnicotinamide
Others	Metabolite of nicotinamide
Carboxylic acid of piperidine	pipecolic acid
TMAO	trimethylamine-N-oxide
Alkaloid found in tobacco	cotinine
Vitamin	niacinamide
Modified nucleosides	1-methyladenosine
Ceramide	C16:0 Ceramide (d18:1), C22:0 Ceramide (d18:1), C24:0 Ceramide (d18:1)
Phosphatidylserine	C40:6 PS, C34:0 PS, C34:0 PI
N-monomethyl-L-arginine	NMMA

Table S2. HMDB IDs and metabolite names.

HMDB	METABOLITE
HMDB00026	N-carbamoyl-beta-alanine
HMDB00062	carnitine
HMDB00064	creatine
HMDB00092	dimethylglycine
HMDB00123	glycine
HMDB00148	glutamate
HMDB00158	tyrosine
HMDB00159	phenylalanine
HMDB00161	alanine
HMDB00167	threonine
HMDB00168	asparagine
HMDB00172	isoleucine
HMDB00177	histidine
HMDB00182	lysine
HMDB00187	serine
HMDB00201	C2 carnitine
HMDB00214	ornithine
HMDB00222	C16 carnitine
HMDB00251	taurine
HMDB00252	sphingosine
HMDB00462	allantoin
HMDB00517	arginine
HMDB00610	C18:2 CE
HMDB00641	glutamine
HMDB00651	C10 carnitine
HMDB00658	C16:1 CE
HMDB00687	leucine
HMDB00688	C5 carnitine
HMDB00696	methionine
HMDB00699	1-methylnicotinamide
HMDB00705	C6 carnitine
HMDB00715	kynurenic acid
HMDB00716	pipecolic acid
HMDB00725	hydroxyproline
HMDB00791	C8 carnitine
HMDB00824	C3 carnitine
HMDB00848	C18 carnitine
HMDB00883	valine
HMDB00885	C16:0 CE
HMDB00904	citrulline
HMDB00918	C18:1 CE
HMDB00925	trimethylamine-N-oxide
HMDB00929	tryptophan
HMDB01046	cotinine
HMDB01348	C18:0 SM
HMDB01406	niacinamide
HMDB02013	C4 carnitine
HMDB02014	C14:1 carnitine
HMDB02250	C12 carnitine
HMDB02366	C5:1 carnitine
HMDB02815	C18:1 LPC
HMDB03331	1-methyladenosine
HMDB04949	C16:0 Ceramide (d18:1)
HMDB04952	C22:0 Ceramide (d18:1)
HMDB04956	C24:0 Ceramide (d18:1)
HMDB05065	C18:1 carnitine

HMDB05066	C14 carnitine
HMDB05356	C48:0 TAG
HMDB05357	C50:0 TAG
HMDB05359	C48:1 TAG
HMDB05360	C50:1 TAG
HMDB05363	C52:4 TAG
HMDB05365	C52:0 TAG
HMDB05367	C52:1 TAG
HMDB05369	C52:2 TAG
HMDB05370	C54:4 TAG
HMDB05376	C48:2 TAG
HMDB05377	C50:2 TAG
HMDB05384	C52:3 TAG
HMDB05385	C54:5 TAG
HMDB05392	C56:8 TAG
HMDB05395	C54:1 TAG
HMDB05403	C54:2 TAG
HMDB05404	C56:2 TAG
HMDB05405	C54:3 TAG
HMDB05406	C56:5 TAG
HMDB05410	C56:3 TAG
HMDB05413	C58:8 TAG
HMDB05432	C48:3 TAG
HMDB05433	C50:3 TAG
HMDB05435	C50:4 TAG
HMDB05436	C52:6 TAG
HMDB05448	C56:9 TAG
HMDB05456	C56:6 TAG
HMDB05462	C56:7 TAG
HMDB05463	C58:9 TAG
HMDB05471	C58:7 TAG
HMDB05478	C60:12 TAG
HMDB06347	C26 carnitine
HMDB06469	C18:2 carnitine
HMDB06725	C14:0 CE
HMDB06726	C20:4 CE
HMDB06731	C20:5 CE
HMDB06733	C22:6 CE
HMDB06736	C20:3 CE
HMDB07011	C30:0 DAG
HMDB07098	C32:0 DAG
HMDB07099	C32:1 DAG
HMDB07102	C34:1 DAG
HMDB07103	C34:2 DAG
HMDB07128	C32:2 DAG
HMDB07132	C34:3 DAG
HMDB07199	C38:5 DAG
HMDB07216	C36:1 DAG
HMDB07218	C36:2 DAG
HMDB07219	C36:3 DAG
HMDB07248	C36:4 DAG
HMDB07869	C30:0 PC
HMDB07870	C30:1 PC
HMDB07871	C32:0 PC
HMDB07873	C32:1 PC
HMDB07874	C32:2 PC
HMDB07883	C34:4 PC
HMDB07970	C34:0 PC

HMDB07972	C34:1 PC
HMDB07973	C34:2 PC
HMDB07983	C36:4 PC-A
HMDB07991	C38:6 PC
HMDB08006	C34:3 PC
HMDB08036	C36:0 PC
HMDB08038	C36:1 PC
HMDB08039	C36:2 PC
HMDB08047	C38:3 PC
HMDB08048	C38:4 PC
HMDB08057	C40:6 PC
HMDB08105	C36:3 PC
HMDB08138	C36:4 PC-B
HMDB08270	C38:2 PC
HMDB08511	C40:10 PC
HMDB08731	C40:9 PC
HMDB08925	C34:0 PE
HMDB08928	C34:2 PE
HMDB08937	C36:4 PE
HMDB08942	C38:2 PE
HMDB08952	C34:2 PE plasmalogen
HMDB08991	C36:0 PE
HMDB08993	C36:1 PE
HMDB08994	C36:2 PE
HMDB09003	C38:4 PE
HMDB09012	C40:6 PE
HMDB09060	C36:3 PE
HMDB09069	C38:5 PE
HMDB09082	C36:2 PE plasmalogen
HMDB09102	C38:6 PE
HMDB09805	C34:0 PI
HMDB10167	C40:6 PS
HMDB10169	C16:0 SM
HMDB10368	C18:0 CE
HMDB10370	C18:3 CE
HMDB10375	C22:5 CE
HMDB10379	C14:0 LPC
HMDB10382	C16:0 LPC
HMDB10383	C16:1 LPC
HMDB10384	C18:0 LPC
HMDB10386	C18:2 LPC
HMDB10395	C20:4 LPC
HMDB10397	C20:5 LPC
HMDB10404	C22:6 LPC
HMDB10411	C46:0 TAG
HMDB10412	C46:1 TAG
HMDB10419	C46:2 TAG
HMDB10471	C50:5 TAG
HMDB10497	C50:6 TAG
HMDB10498	C54:9 TAG
HMDB10513	C56:10 TAG
HMDB10517	C52:7 TAG
HMDB10518	C54:8 TAG
HMDB10531	C58:11 TAG
HMDB11130	C18:0 LPE
HMDB11208	C34:1 PC plasmalogen-A
HMDB11210	C34:2 PC plasmalogen
HMDB11211	C34:3 PC plasmalogen

HMDB11214	C34:5 PC plasmalogen
HMDB11220	C36:5 PC plasmalogen-B
HMDB11221	C36:5 PC plasmalogen-A
HMDB11229	C38:7 PC plasmalogen
HMDB11241	C36:1 PC plasmalogen
HMDB11243	C36:2 PC plasmalogen
HMDB11244	C36:3 PC plasmalogen
HMDB11252	C38:4 PC plasmalogen
HMDB11294	C40:7 PC plasmalogen
HMDB11310	C36:4 PC plasmalogen
HMDB11343	C34:3 PE plasmalogen
HMDB11384	C38:3 PE plasmalogen
HMDB11386	C38:5 PE plasmalogen
HMDB11387	C38:6 PE plasmalogen
HMDB11394	C40:7 PE plasmalogen
HMDB11410	C36:5 PE plasmalogen
HMDB11420	C38:7 PE plasmalogen
HMDB11441	C36:3 PE plasmalogen
HMDB11442	C36:4 PE plasmalogen
HMDB11503	C16:0 LPE
HMDB11506	C18:1 LPE
HMDB11507	C18:2 LPE
HMDB11517	C20:4 LPE
HMDB11526	C22:6 LPE
HMDB11697	C24:0 SM
HMDB12097	C14:0 SM
HMDB12102	C20:0 SM
HMDB12103	C22:0 SM
HMDB12104	C22:1 SM
HMDB12356	C34:0 PS
HMDB13127	C4-OH carnitine
HMDB13130	C5-DC carnitine
HMDB13238	C7 carnitine
HMDB13288	C9 carnitine
HMDB13325	C10:2 carnitine
HMDB13326	C12:1 carnitine
HMDB13331	C14:2 carnitine
HMDB29416	NMMA
HMDB42063	C44:0 TAG

Figure S1. Flow chart of current study.

