

Supplemental Table 2. Relative levels of 51 metabolites analyzed by GC-MS during ripening and after cold storage of fruits from six different varieties. Values represent the mean of 5 independent determinations with three technical repetitions each one, relative to the amount found in harvested Elegant Lady (EL) fruits. Standard errors (SE) are shown. nd: not detected

	<i>Elegant Lady (EL)</i>									
	H	SE	RS	SE	CS	SE	CS21	SE	CS21+RS	SE
Sugars										
Fucose	1.00	0.06	2.58	0.11	1.03	0.10	1.11	0.09	2.46	0.09
Fructose	1.00	0.04	1.11	0.05	1.18	0.12	2.22	0.46	2.78	0.65
Fructose-6-P	1.00	0.13	1.15	0.29	1.06	0.06	0.99	0.10	1.54	0.23
Glucose	1.00	0.10	0.97	0.12	1.15	0.28	2.53	0.69	3.55	1.06
Glucoheptose	1.00	0.10	0.83	0.06	0.97	0.16	0.91	0.09	1.04	0.11
Isomaltose	1.00	0.16	0.48	0.06	0.97	0.20	0.97	0.17	0.93	0.04
1-O-Methyl-mannoside	1.00	0.05	1.22	0.21	0.87	0.08	0.85	0.03	0.74	0.04
Maltose	1.00	0.05	0.90	0.03	1.09	0.13	0.95	0.12	1.19	0.17
Raffinose	1.00	0.09	0.77	0.15	1.04	0.05	17.80	2.99	1.25	0.18
Rhamnose	1.00	0.06	1.03	0.05	0.99	0.24	0.89	0.09	0.97	0.12
Sucrose	1.00	0.09	1.11	0.10	1.20	0.25	3.00	0.61	3.68	0.71
Trehalose	1.00	0.07	0.42	0.06	0.57	0.06	0.45	0.04	0.56	0.07
Xylose	1.00	0.10	1.32	0.07	1.02	0.07	1.05	0.07	2.15	0.15
Sugars alcohol										
Galactinol	1.00	0.13	1.01	0.16	36.38	7.02	30.34	4.85	0.73	0.08
Glycerol	1.00	0.04	1.03	0.04	0.93	0.05	1.00	0.06	0.81	0.03
Myo-inositol	1.00	0.08	1.28	0.09	1.39	0.38	1.93	0.42	1.56	0.18
Maltitol	1.00	0.10	0.68	0.07	0.94	0.14	0.81	0.12	1.01	0.15
Sorbitol	1.00	0.06	1.06	0.04	1.27	0.30	2.49	0.54	2.87	0.70
Organic acids										
Benzoate	1.00	0.08	1.98	0.38	1.53	0.40	1.27	0.06	1.06	0.08
Citrate	1.00	0.04	1.04	0.03	1.12	0.07	2.33	0.31	2.88	0.48
Dehydroascorbate	1.00	0.19	0.74	0.19	0.74	0.14	0.41	0.11	0.60	0.09
2-oxo-Glutarate	1.00	0.12	nd		0.30	0.04	nd		nd	
Fumarate	1.00	0.18	2.44	0.48	1.63	0.28	0.97	0.05	0.68	0.08
Glycerate	1.00	0.03	2.05	0.38	1.14	0.22	0.94	0.09	1.64	0.17
Gulonate-1,4-lactone	1.00	0.05	0.67	0.17	0.85	0.12	0.74	0.16	0.70	0.09
Quinate	1.00	0.05	1.06	0.07	1.09	0.08	1.88	0.42	2.36	0.51
Malate	1.00	0.04	0.92	0.04	1.02	0.07	1.70	0.29	1.83	0.38
Succinate	1.00	0.07	0.97	0.17	0.53	0.07	nd		0.83	0.16
Amino acids										
Alanine	1.00	0.09	1.79	0.21	0.91	0.11	2.04	0.21	2.29	0.21
β-Alanine	1.00	0.00	nd		0.32	0.00	0.44	0.12	0.30	0.00
Asparagine	1.00	0.22	0.63	0.04	0.66	0.19	0.88	0.28	0.81	0.07
Aspartate	1.00	0.07	1.14	0.14	1.67	0.13	2.60	0.02	1.27	0.07
GABA	1.00	0.20	0.81	0.06	1.09	0.08	1.94	0.22	0.76	0.03
Glutamate	1.00	0.08	0.65	0.11	1.20	0.10	1.05	0.15	0.77	0.04
Glycine	1.00	0.25	1.02	0.21	1.18	0.20	1.27	0.20	0.86	0.11
Isoleucine	1.00	0.17	2.04	0.08	2.00	0.30	4.53	0.31	2.11	0.60
Phenylalanine	1.00	0.12	0.86	0.26	1.70	0.31	3.75	0.46	3.07	1.14
Proline	1.00	0.22	0.33	0.09	0.75	0.16	0.76	0.15	0.72	0.16
4-OH-Proline	1.00	0.14	0.42	0.18	0.60	0.09	0.65	0.15	0.38	0.06
Serine	1.00	0.08	2.10	0.11	1.45	0.12	1.87	0.17	2.98	0.19
Threonine	1.00	0.16	1.14	0.18	1.29	0.23	1.04	0.12	1.34	0.15
Valine	1.00	0.14	1.93	0.30	1.56	0.20	3.35	0.20	1.38	0.29
Fatty acids										
Hexadecenoic acid	1.00	0.03	0.86	0.05	0.90	0.05	0.88	0.01	0.97	0.10
Octadecanoic acid	1.00	0.03	0.68	0.10	0.87	0.08	0.91	0.04	1.06	0.16
Miscellaneous										
Ornithine	1.00	0.29	1.51	0.17	0.84	0.20	1.49	0.74	1.26	0.37
Phosphate	1.00	0.18	0.92	0.07	1.19	0.09	1.19	0.21	1.00	0.03
Putrescine	1.00	0.21	0.31	0.07	0.70	0.11	0.71	0.13	0.90	0.13
cis-3-caffeoylquinic acid	1.00	0.25	0.63	0.00	0.76	0.18	0.69	0.26	1.05	0.16
trans-3-caffeoylquinic acid	1.00	0.16	1.11	0.00	0.44	0.11	0.64	0.03	1.61	0.00
Spermidine	1.00	0.22	0.68	0.08	0.79	0.13	0.91	0.17	1.66	0.23
Urea	1.00	0.35	0.47	0.00	0.64	0.22	0.68	0.31	1.14	0.25

Red Globe (RG)										
	H	SE	RS	SE	CS	SE	CS21	SE	CS21+RS	SE
Sugars										
Fucose	1.19	0.06	3.03	0.13	1.33	0.04	1.50	0.09	2.80	0.06
Fructose	0.95	0.04	0.95	0.04	0.88	0.02	0.88	0.03	0.93	0.04
Fructose-6-P	0.70	0.13	0.76	0.03	0.75	0.18	1.20	0.10	1.31	0.06
Glucose	0.85	0.06	0.77	0.07	0.72	0.09	0.66	0.06	0.72	0.02
Glucoheptose	0.66	0.09	0.60	0.10	0.66	0.07	0.72	0.11	0.60	0.23
Isomaltose	0.48	0.07	0.46	0.06	0.48	0.06	0.75	0.10	1.24	0.23
1-O-Methyl-mannoside	1.41	0.17	1.39	0.13	1.34	0.13	1.45	0.14	1.41	0.13
Maltose	0.72	0.06	0.78	0.04	0.79	0.05	0.82	0.05	0.87	0.07
Raffinose	1.04	0.16	1.15	0.10	2.00	0.22	21.65	0.88	2.34	0.33
Rhamnose	0.93	0.13	1.18	0.08	0.75	0.05	0.98	0.10	1.24	0.04
Sucrose	1.01	0.11	1.03	0.09	0.98	0.09	1.01	0.08	0.94	0.08
Trehalose	0.70	0.12	0.83	0.08	0.99	0.06	0.98	0.08	1.08	0.08
Xylose	0.92	0.08	1.17	0.05	0.92	0.04	1.00	0.07	1.94	0.19
Sugars alcohol										
Galactinol	0.88	0.09	1.24	0.10	44.74	6.97	76.93	15.08	1.39	0.20
Glycerol	1.10	0.06	1.09	0.06	1.04	0.05	0.96	0.03	1.00	0.04
Myo-inositol	0.95	0.09	1.12	0.07	1.10	0.09	1.05	0.04	1.08	0.10
Maltitol	0.66	0.08	0.60	0.06	0.61	0.07	0.60	0.04	0.71	0.07
Sorbitol	0.93	0.03	0.82	0.04	0.86	0.01	0.87	0.04	0.83	0.05
Organic acids										
Benzoate	1.73	0.14	1.60	0.17	1.44	0.15	1.55	0.15	1.54	0.12
Citrate	1.04	0.04	0.98	0.03	0.92	0.02	0.89	0.04	0.90	0.04
Dehydroascorbate	0.91	0.19	1.08	0.09	0.46	0.04	0.80	0.12	0.90	0.06
2-oxo-Glutarate	1.49	0.18	0.21	0.03	0.58	0.13	0.22	0.02	0.18	0.01
Fumarate	2.05	0.18	1.60	0.06	1.77	0.15	1.57	0.14	0.96	0.10
Glycerate	1.01	0.13	1.09	0.09	1.07	0.17	1.07	0.13	1.63	0.19
Gulonate-1,4-lactone	0.93	0.10	0.64	0.05	0.62	0.06	0.61	0.07	0.64	0.03
Quinate	0.99	0.04	1.00	0.07	0.91	0.02	0.93	0.03	0.98	0.07
Malate	0.93	0.02	0.83	0.02	0.86	0.03	0.79	0.02	0.81	0.03
Succinate	1.41	0.13	1.08	0.16	0.66	0.04	0.48	0.06	0.74	0.06
Amino acids										
Alanine	0.96	0.16	1.63	0.37	0.88	0.16	2.47	0.16	1.94	0.33
β-Alanine	0.52	0.10	0.56	0.03	0.56	0.02	0.48	0.02	0.56	0.04
Asparagine	1.29	0.08	1.21	0.09	1.19	0.17	1.05	0.07	1.08	0.13
Aspartate	1.32	0.06	0.78	0.05	1.68	0.24	2.15	0.19	0.81	0.10
GABA	1.05	0.06	0.86	0.05	1.01	0.13	1.83	0.10	1.19	0.09
Glutamate	0.92	0.05	0.75	0.12	1.06	0.13	1.11	0.11	0.80	0.05
Glycine	2.03	0.18	0.92	0.14	1.64	0.31	1.98	0.07	1.14	0.18
Isoleucine	4.18	0.93	3.38	1.15	4.01	0.86	6.98	0.43	5.26	1.75
Phenylalanine	2.09	0.31	2.43	0.71	2.66	0.36	5.02	1.40	8.99	3.02
Proline	2.69	0.37	0.52	0.07	1.72	0.41	1.32	0.10	1.00	0.15
4-OH-Proline	0.78	0.15	0.93	0.13	1.02	0.23	1.07	0.15	0.89	0.11
Serine	1.52	0.20	1.72	0.18	1.51	0.22	2.28	0.08	3.09	0.14
Threonine	1.65	0.23	1.20	0.23	1.59	0.33	1.63	0.11	2.26	0.43
Valine	2.80	0.58	2.14	0.55	2.52	0.55	4.62	0.32	2.70	0.68
Fatty acids										
Hexadecenoic acid	1.06	0.10	0.97	0.04	0.90	0.02	0.88	0.03	0.96	0.10
Octadecanoic acid	1.21	0.16	1.04	0.04	0.93	0.04	0.90	0.03	1.03	0.11
Miscellaneous										
Ornithine	0.60	0.08	0.58	0.12	0.71	0.25	0.83	0.13	1.12	0.33
Phosphate	1.35	0.12	1.26	0.17	1.40	0.18	1.27	0.02	1.31	0.19
Putrescine	0.75	0.08	0.69	0.12	0.75	0.22	0.79	0.07	0.90	0.19
cis-3-caffeoylquinic acid	0.63	0.18	0.58	0.10	0.38	0.07	0.61	0.13	1.18	0.22
trans-3-caffeoylquinic acid	1.71	0.30	2.13	0.47	0.98	0.27	1.05	0.12	1.69	0.23
Spermidine	1.78	0.29	1.58	0.10	1.42	0.19	1.53	0.20	2.46	0.23
Urea	0.68	0.27	0.47	0.07	0.42	0.08	0.47	0.15	0.25	0.01

Limón Marelli (LM)										
	H	SE	RS	SE	CS	SE	CS21	SE	CS21+RS	SE
Sugars										
Fucose	0.86	0.06	1.90	0.10	0.85	0.03	0.94	0.05	1.97	0.09
Fructose	0.96	0.03	0.95	0.02	0.94	0.01	0.91	0.02	0.90	0.02
Fructose-6-P	0.80	0.12	1.08	0.07	0.79	0.06	1.03	0.11	1.46	0.13
Glucose	0.76	0.08	0.75	0.05	0.77	0.08	0.95	0.13	0.74	0.15
Glucoheptose	0.95	0.08	0.97	0.10	1.05	0.07	1.22	0.14	1.19	0.10
Isomaltose	0.93	0.11	0.91	0.11	1.01	0.23	1.52	0.17	1.42	0.19
1-O-Methyl-mannoside	1.48	0.07	1.54	0.02	1.55	0.04	1.58	0.04	1.44	0.03
Maltose	0.96	0.08	1.10	0.10	1.04	0.08	1.24	0.12	1.11	0.07
Raffinose	0.76	0.08	1.04	0.11	1.41	0.15	18.00	0.64	2.04	0.14
Rhamnose	1.00	0.06	1.07	0.10	0.91	0.07	0.96	0.07	1.30	0.11
Sucrose	1.01	0.05	1.05	0.01	0.97	0.03	1.04	0.03	0.96	0.03
Trehalose	0.86	0.09	1.05	0.09	0.98	0.13	1.28	0.07	1.14	0.09
Xylose	0.73	0.04	0.99	0.04	0.84	0.01	0.98	0.08	1.28	0.04
Sugars alcohol										
Galactinol	1.08	0.20	13.63	3.43	50.86	4.93	149.24	21.84	1.95	0.29
Glycerol	1.19	0.07	1.08	0.03	1.17	0.17	1.20	0.24	1.05	0.04
Myo-inositol	0.89	0.07	0.80	0.05	0.73	0.06	0.83	0.09	0.83	0.06
Maltitol	0.97	0.08	1.14	0.13	1.10	0.09	1.33	0.14	1.14	0.08
Sorbitol	0.87	0.02	0.81	0.01	0.84	0.01	0.83	0.01	0.78	0.01
Organic acids										
Benzoate	1.65	0.06	1.70	0.05	1.69	0.03	1.55	0.08	1.64	0.03
Citrate	0.87	0.02	0.90	0.03	0.88	0.04	0.78	0.03	0.72	0.03
Dehydroascorbate	0.66	0.06	0.79	0.18	0.39	0.06	0.57	0.09	0.35	0.02
2-oxo-Glutarate	0.50	0.02	0.20	0.00	0.32	0.04	0.20	0.02	0.14	0.00
Fumarate	2.04	0.06	2.18	0.10	2.22	0.13	2.30	0.16	1.58	0.04
Glycerate	0.73	0.03	0.91	0.06	1.27	0.07	1.05	0.05	1.33	0.14
Gulonate-1,4-lactone	0.64	0.06	0.63	0.08	0.68	0.06	0.79	0.10	0.62	0.04
Quinate	0.87	0.03	0.81	0.04	0.84	0.02	0.85	0.03	0.78	0.04
Malate	0.93	0.02	0.93	0.01	0.94	0.03	0.95	0.01	0.84	0.01
Succinate	1.11	0.11	0.50	0.03	0.58	0.02	0.57	0.05	0.61	0.07
Amino acids										
Alanine	1.00	0.14	5.38	0.47	1.22	0.09	2.44	0.46	7.08	0.29
β-Alanine	nd		0.45	0.02	nd		nd		0.61	0.05
Asparagine	0.34	0.07	0.21	0.04	0.48	0.05	0.54	0.10	0.22	0.04
Aspartate	0.81	0.08	1.06	0.05	1.32	0.10	1.80	0.13	0.84	0.08
GABA	0.75	0.02	1.41	0.15	1.27	0.06	2.25	0.29	1.91	0.21
Glutamate	0.97	0.09	1.46	0.03	1.27	0.09	1.37	0.07	1.34	0.05
Glycine	0.73	0.07	0.40	0.04	0.82	0.09	0.96	0.08	0.73	0.09
Isoleucine	1.45	0.16	0.52	0.05	2.37	0.27	5.18	0.41	0.61	0.06
Phenylalanine	0.85	0.06	0.44	0.05	1.62	0.23	3.78	0.37	0.89	0.31
Proline	0.44	0.07	0.48	0.07	0.72	0.12	0.87	0.04	0.77	0.06
4-OH-Proline	0.41	0.05	0.44	0.05	0.26	0.05	0.44	0.05	0.54	0.15
Serine	1.00	0.11	2.27	0.15	1.31	0.10	1.78	0.16	2.86	0.15
Threonine	0.61	0.09	0.52	0.05	0.82	0.10	0.95	0.08	0.85	0.06
Valine	1.25	0.08	0.91	0.08	1.71	0.18	3.42	0.26	1.18	0.13
Fatty acids										
Hexadecenoic acid	0.93	0.02	0.92	0.03	0.87	0.03	0.79	0.03	0.81	0.02
Octadecanoic acid	0.94	0.02	0.95	0.06	0.85	0.04	0.74	0.05	0.78	0.04
Miscellaneous										
Ornithine	0.42	0.09	0.35	0.07	1.20	0.20	1.11	0.18	0.92	0.40
Phosphate	0.85	0.05	0.79	0.03	0.96	0.08	1.13	0.05	1.11	0.10
Putrescine	0.32	0.07	0.23	0.05	0.74	0.13	0.65	0.08	0.50	0.19
cis-3-caffeoylquinic acid	1.67	0.35	1.48	0.34	0.38	0.09	1.60	0.49	0.30	0.06
trans-3-caffeoylquinic acid	1.86	0.45	1.23	0.28	0.33	0.06	1.62	0.40	0.90	0.43
Spermidine	nd		nd		nd		0.41	0.00	0.34	0.00
Urea	0.47	0.07	0.37	0.12	0.47	0.14	1.61	1.30	0.29	0.02

<i>Springlady (SL)</i>										
	H	SE	RS	SE	CS	SE	CS21	SE	CS21+RS	SE
Sugars										
Fucose	0.83	0.11	2.36	0.10	1.12	0.07	0.99	0.07	2.64	0.14
Fructose	0.96	0.03	0.96	0.03	0.98	0.03	0.95	0.03	0.93	0.01
Fructose-6-P	0.34	0.05	0.39	0.01	0.40	0.04	0.32	0.02	0.43	0.04
Glucose	0.61	0.10	0.63	0.05	0.52	0.04	0.52	0.02	0.57	0.02
Glucoheptose	0.25	0.06	0.32	0.06	0.37	0.07	0.20	0.03	0.48	0.05
Isomaltose	0.25	0.06	0.24	0.02	0.34	0.12	0.24	0.05	0.34	0.04
1-O-Methyl-mannoside	1.11	0.07	1.28	0.06	1.16	0.11	1.14	0.06	1.23	0.05
Maltose	0.41	0.03	0.46	0.03	0.47	0.06	0.40	0.03	0.44	0.02
Raffinose	1.21	0.09	1.64	0.08	2.05	0.14	13.71	0.94	2.29	0.08
Rhamnose	0.71	0.06	0.82	0.03	0.74	0.06	0.65	0.05	0.94	0.04
Sucrose	1.09	0.08	1.19	0.05	1.10	0.07	1.11	0.04	1.07	0.04
Trehalose	0.46	0.05	0.67	0.04	0.59	0.07	0.54	0.04	0.66	0.04
Xylose	0.61	0.03	0.99	0.05	0.74	0.05	0.82	0.03	1.54	0.05
Sugars alcohol										
Galactinol	nd		1.44	0.06	12.16	3.24	11.75	1.59	0.60	0.07
Glycerol	2.92	0.14	2.44	0.13	2.54	0.10	2.68	0.12	2.72	0.07
Myo-inositol	0.82	0.06	0.80	0.05	0.80	0.09	0.66	0.04	0.68	0.08
Maltitol	0.29	0.02	0.30	0.02	0.30	0.03	0.26	0.02	0.31	0.01
Sorbitol	1.06	0.06	0.74	0.03	0.94	0.11	0.97	0.05	0.76	0.04
Organic acids										
Benzoate	9.44	2.86	11.07	1.02	8.45	2.96	7.91	2.58	9.22	0.48
Citrate	1.05	0.05	0.80	0.09	1.01	0.08	0.93	0.08	0.82	0.04
Dehydroascorbate	0.70	0.09	0.50	0.05	0.75	0.18	0.38	0.06	0.56	0.07
2-oxo-Glutarate	1.21	0.14	0.38	0.03	0.49	0.05	0.17	0.00	0.42	0.06
Fumarate	0.87	0.04	0.77	0.10	0.80	0.05	0.64	0.07	0.37	0.02
Glycerate	0.68	0.08	0.64	0.05	0.70	0.03	0.90	0.07	1.00	0.08
Gulonate-1,4-lactone	0.53	0.04	0.31	0.01	0.32	0.04	0.35	0.05	0.28	0.04
Quinate	1.07	0.08	1.09	0.03	1.13	0.05	1.06	0.03	1.08	0.04
Malate	1.16	0.03	1.03	0.04	1.07	0.03	1.04	0.02	0.95	0.02
Succinate	3.31	0.38	1.48	0.08	1.25	0.15	0.70	0.04	1.57	0.10
Amino acids										
Alanine	2.88	0.68	1.12	0.26	3.44	0.81	3.49	0.47	1.47	0.31
β-Alanine	1.59	0.15	0.49	0.04	1.32	0.38	1.13	0.26	0.88	0.14
Asparagine	1.81	0.14	1.39	0.12	1.36	0.21	1.33	0.14	1.32	0.06
Aspartate	1.00	0.12	0.70	0.06	1.32	0.18	1.83	0.29	0.81	0.03
GABA	1.38	0.20	0.26	0.07	1.26	0.52	2.02	0.69	0.54	0.17
Glutamate	1.23	0.16	0.30	0.07	0.83	0.33	0.67	0.21	0.58	0.20
Glycine	5.88	2.30	0.90	0.22	2.99	0.56	3.35	0.75	1.77	0.14
Isoleucine	7.16	1.71	6.83	1.52	10.25	1.85	11.46	2.10	14.98	1.91
Phenylalanine	4.78	0.79	5.40	1.37	7.41	0.79	11.28	2.60	11.53	1.35
Proline	3.24	0.49	0.84	0.20	2.71	0.65	2.32	0.61	1.49	0.15
4-OH-Proline	0.46	0.08	0.24	0.04	0.34	0.07	0.42	0.10	0.29	0.04
Serine	2.65	0.41	2.96	0.35	3.73	0.55	3.38	0.71	6.39	0.70
Threonine	2.84	0.42	3.01	0.48	3.89	0.59	2.82	0.53	5.33	0.38
Valine	5.53	1.25	3.70	0.46	7.64	1.52	8.42	1.73	7.06	1.30
Fatty acids										
Hexadecenoic acid	0.88	0.03	0.81	0.05	0.80	0.03	0.95	0.05	0.80	0.02
Octadecanoic acid	0.69	0.03	0.67	0.05	0.76	0.04	0.81	0.07	0.67	0.04
Miscellaneous										
Ornithine	0.19	0.00	1.41	0.26	1.74	0.65	1.41	0.02	1.94	0.55
Phosphate	1.03	0.06	1.36	0.17	1.41	0.07	1.08	0.07	1.30	0.08
Putrescine	0.25	0.04	0.20	0.07	0.71	0.16	0.25	0.06	0.64	0.06
cis-3-caffeoylquinic acid	0.89	0.25	0.91	0.21	0.88	0.21	0.97	0.13	0.89	0.12
trans-3-caffeoylquinic acid	1.35	0.44	1.43	0.38	1.63	0.43	1.41	0.22	1.67	0.14
Spermidine	0.91	0.00	0.44	0.13	0.44	0.00	nd		0.61	0.03
Urea	1.01	0.31	0.73	0.14	1.06	0.17	0.70	0.10	0.89	0.35

Rojo 2 (R2)										
	H	SE	RS	SE	CS	SE	CS21	SE	CS21+RS	SE
Sugars										
Fucose	0.51	0.03	1.61	0.12	0.62	0.02	0.62	0.01	1.17	0.09
Fructose	0.91	0.01	0.92	0.02	0.91	0.03	0.91	0.03	0.83	0.01
Fructose-6-P	0.37	0.00	0.34	0.03	0.32	0.03	0.32	0.02	0.31	0.01
Glucose	0.63	0.02	0.61	0.05	0.62	0.08	0.53	0.04	0.50	0.03
Glucoheptose	0.52	0.03	0.55	0.02	0.55	0.05	0.61	0.03	0.59	0.03
Isomaltose	0.11	0.01	0.12	0.01	0.16	0.03	0.13	0.01	0.15	0.02
1-O-Methyl-mannoside	0.82	0.07	0.90	0.06	0.90	0.05	0.86	0.07	0.77	0.08
Maltose	0.33	0.01	0.36	0.02	0.39	0.04	0.36	0.02	0.33	0.02
Raffinose	1.17	0.08	1.45	0.10	1.56	0.12	6.69	1.01	2.09	0.23
Rhamnose	0.62	0.06	0.89	0.05	0.78	0.05	0.67	0.04	1.02	0.11
Sucrose	0.98	0.08	0.95	0.04	0.97	0.07	0.85	0.07	0.75	0.06
Trehalose	0.41	0.04	0.53	0.03	0.52	0.06	0.46	0.03	0.49	0.03
Xylose	0.63	0.04	0.99	0.11	0.75	0.03	0.99	0.03	1.79	0.20
Sugars alcohol										
Galactinol	nd		nd		6.89	1.43	2.40	0.36	nd	
Glycerol	1.00	0.05	1.02	0.03	1.01	0.05	0.97	0.05	0.94	0.05
Myo-inositol	0.84	0.08	0.83	0.08	0.97	0.09	0.69	0.04	0.60	0.07
Maltitol	0.22	0.01	0.24	0.01	0.27	0.03	0.25	0.02	0.21	0.01
Sorbitol	0.68	0.12	0.33	0.04	0.70	0.12	0.68	0.13	0.30	0.04
Organic acids										
Benzoate	1.13	0.03	1.01	0.05	1.11	0.05	1.15	0.04	0.98	0.05
Citrate	1.06	0.02	0.99	0.04	1.02	0.02	1.02	0.04	0.81	0.04
Dehydroascorbate	0.31	0.02	0.35	0.02	0.30	0.04	0.34	0.04	0.31	0.04
2-oxo-Glutarate	0.57	0.07	0.34	0.02	0.45	0.04	nd		0.35	0.07
Fumarate	0.83	0.05	0.96	0.07	0.93	0.05	0.72	0.06	0.52	0.05
Glycerate	1.20	0.08	1.54	0.19	1.29	0.06	1.12	0.06	1.39	0.07
Gulonate-1,4-lactone	0.57	0.04	0.43	0.03	0.48	0.06	0.45	0.02	0.40	0.02
Quinate	0.94	0.03	0.94	0.01	0.99	0.04	0.96	0.05	0.83	0.02
Malate	0.86	0.04	0.88	0.05	0.91	0.03	0.86	0.04	0.79	0.03
Succinate	5.51	1.15	3.85	0.58	2.83	0.39	0.78	0.16	2.18	0.37
Amino acids										
Alanine	4.48	0.98	4.31	0.84	3.38	0.64	5.75	0.75	9.70	1.12
β-Alanine	1.41	0.10	1.12	0.14	1.15	0.15	1.40	0.16	1.10	0.22
Asparagine	1.30	0.13	1.24	0.07	1.23	0.17	1.26	0.09	1.17	0.06
Aspartate	1.50	0.19	1.20	0.07	2.03	0.12	3.36	0.30	1.41	0.09
GABA	1.95	0.22	1.53	0.20	1.71	0.18	3.47	0.37	1.87	0.31
Glutamate	1.04	0.11	0.77	0.04	1.36	0.18	0.48	0.06	0.74	0.06
Glycine	2.99	0.62	2.07	0.21	2.15	0.20	2.77	0.31	2.69	0.36
Isoleucine	12.99	3.51	16.95	2.14	11.62	2.07	17.34	1.61	21.12	2.79
Phenylalanine	5.13	1.58	6.68	1.23	4.59	0.77	9.99	1.40	10.28	2.25
Proline	6.59	1.35	3.09	0.77	4.18	0.71	5.07	0.81	3.74	1.06
4-OH-Proline	0.79	0.10	0.84	0.11	0.84	0.19	0.76	0.14	0.55	0.13
Serine	5.18	1.17	5.66	0.80	4.18	0.56	5.47	0.53	7.96	0.71
Threonine	4.06	0.86	3.97	0.52	3.14	0.47	4.21	0.48	4.84	0.49
Valine	9.66	2.48	10.74	1.24	8.42	1.52	11.55	0.98	13.40	1.60
Fatty acids										
Hexadecenoic acid	1.00	0.02	1.00	0.03	0.98	0.02	1.07	0.06	0.92	0.02
Octadecanoic acid	1.12	0.05	1.08	0.04	1.06	0.04	1.26	0.11	1.04	0.01
Miscellaneous										
Ornithine	0.67	0.20	0.81	0.09	0.87	0.26	1.24	0.17	1.26	0.15
Phosphate	1.09	0.04	1.14	0.08	1.27	0.08	1.22	0.08	1.18	0.06
Putrescine	1.01	0.22	0.95	0.10	1.10	0.22	1.32	0.13	1.25	0.07
cis-3-caffeoylquinic acid	0.32	0.03	0.30	0.02	0.36	0.09	0.30	0.02	0.26	0.03
trans-3-caffeoylquinic acid	0.45	0.05	0.40	0.03	0.50	0.14	0.44	0.07	0.36	0.09
Spermidine	0.43	0.04	0.55	0.03	0.40	0.07	0.44	0.04	0.65	0.04
Urea	0.66	0.07	0.56	0.08	1.12	0.39	0.44	0.06	0.47	0.07

<i>Flordaking (FD)</i>										
	H	SE	RS	SE	CS	SE	CS21	SE	CS21+RS	SE
Sugars										
Fucose	0.86	0.11	2.00	0.07	0.94	0.03	1.18	0.25	2.79	0.12
Fructose	1.04	0.02	1.06	0.03	1.05	0.01	1.10	0.04	1.03	0.02
Fructose-6-P	0.41	0.00	0.34	0.02	0.31	0.02	0.44	0.07	0.46	0.04
Glucose	0.84	0.02	0.93	0.03	0.92	0.08	0.73	0.06	0.93	0.07
Glucoheptose	0.80	0.08	0.91	0.05	0.97	0.06	0.61	0.03	1.27	0.04
Isomaltose	0.14	0.02	0.16	0.01	0.26	0.02	0.21	0.04	0.28	0.02
1-O-Methyl-mannoside	0.72	0.07	0.75	0.02	0.82	0.09	0.65	0.07	0.72	0.02
Maltose	0.40	0.05	0.42	0.01	0.49	0.03	0.40	0.03	0.44	0.02
Raffinose	1.79	0.24	2.13	0.14	2.70	0.20	5.65	1.66	3.03	0.17
Rhamnose	0.57	0.01	0.87	0.06	0.79	0.08	0.64	0.03	0.78	0.02
Sucrose	0.75	0.10	0.82	0.02	0.90	0.07	0.63	0.10	0.71	0.02
Trehalose	0.49	0.05	0.55	0.03	0.69	0.08	0.47	0.05	0.61	0.04
Xylose	0.82	0.03	1.14	0.06	0.82	0.03	1.48	0.32	2.39	0.10
Sugars alcohol										
Galactinol	nd		nd		13.56	2.26	57.31	24.34	nd	
Glycerol	2.66	0.29	2.42	0.12	2.50	0.09	2.70	0.27	2.54	0.11
Myo-inositol	0.68	0.04	0.66	0.03	0.79	0.02	0.66	0.06	0.67	0.02
Maltitol	0.30	0.03	0.32	0.02	0.40	0.02	0.34	0.02	0.36	0.01
Sorbitol	0.81	0.07	0.48	0.06	1.02	0.02	0.67	0.23	0.48	0.02
Organic acids										
Benzoate	7.45	1.01	10.40	0.60	7.89	0.55	6.52	2.56	8.92	0.41
Citrate	1.05	0.02	1.06	0.04	1.07	0.02	1.11	0.05	0.96	0.03
Dehydroascorbate	0.35	0.05	0.40	0.04	0.50	0.06	0.27	0.01	0.38	0.01
2-oxo-Glutarate	0.57	0.07	0.31	0.05	0.40	0.04	0.42	0.22	0.19	0.01
Fumarate	0.74	0.04	0.57	0.04	0.63	0.08	0.54	0.06	0.25	0.01
Glycerate	1.21	0.13	1.57	0.15	1.59	0.14	1.80	0.30	1.88	0.18
Gulonate-1,4-lactone	0.45	0.04	0.35	0.02	0.41	0.03	0.54	0.09	0.53	0.06
Quinate	1.22	0.05	1.18	0.05	1.25	0.03	1.32	0.07	1.15	0.04
Malate	0.89	0.02	0.78	0.06	0.90	0.03	0.74	0.06	0.65	0.04
Succinate	5.46	0.71	1.87	0.35	1.27	0.06	1.64	0.55	1.72	0.27
Amino acids										
Alanine	1.50	0.56	0.58	0.18	0.29	0.06	4.74	1.08	2.00	0.40
β-Alanine	0.58	0.08	0.41	0.03	0.50	0.04	1.11	0.18	0.52	0.08
Asparagine	1.18	0.22	0.80	0.04	0.64	0.13	1.28	0.19	0.63	0.08
Aspartate	1.09	0.08	0.90	0.07	1.29	0.13	1.76	0.64	0.76	0.05
GABA	0.65	0.19	0.13	0.03	0.25	0.04	2.18	0.85	0.48	0.09
Glutamate	0.67	0.19	0.11	0.04	0.13	0.03	0.83	0.27	0.34	0.08
Glycine	5.29	1.74	2.73	0.44	1.90	0.28	6.15	0.76	1.23	0.13
Isoleucine	8.72	1.43	10.00	0.97	5.03	0.29	17.10	4.19	16.77	2.19
Phenylalanine	5.62	0.83	6.25	0.85	3.84	0.85	10.91	2.25	11.84	1.73
Proline	1.28	0.11	1.12	0.47	2.08	0.38	4.07	1.05	1.06	0.26
4-OH-Proline	0.48	0.04	0.29	0.05	0.46	0.07	0.58	0.13	0.35	0.05
Serine	2.61	0.29	3.31	0.63	1.92	0.37	4.84	1.08	6.57	0.63
Threonine	3.05	0.37	2.99	0.47	2.66	0.38	3.59	0.62	4.59	0.76
Valine	4.60	1.18	3.84	0.41	2.18	0.19	9.87	2.81	7.15	0.71
Fatty acids										
Hexadecenoic acid	0.80	0.04	0.75	0.03	0.64	0.02	0.90	0.05	0.72	0.03
Octadecanoic acid	0.65	0.04	0.65	0.04	0.58	0.03	0.70	0.04	0.58	0.03
Miscellaneous										
Ornithine	1.85	0.94	4.39	0.38	7.53	0.84	1.32	1.03	3.29	0.99
Phosphate	1.04	0.10	1.50	0.22	1.43	0.18	1.20	0.08	1.23	0.18
Putrescine	0.80	0.18	0.53	0.06	0.88	0.16	0.76	0.10	0.79	0.12
cis-3-caffeoylquinic acid	1.83	0.53	4.17	1.30	0.51	0.23	0.92	0.20	4.06	0.56
trans-3-caffeoylquinic acid	3.87	1.61	6.09	1.82	0.65	0.36	0.95	0.21	4.40	0.64
Spermidine	0.47	0.06	0.70	0.14	nd		0.81	0.16	1.39	0.11
Urea	1.10	0.34	1.23	0.11	0.92	0.06	1.48	0.39	0.86	0.16