### Table S1. Factor loadings after Varimax rotation.

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | *Factor* | *Factor* | *Factor* | *Factor* | *Factor* | *Factor* | *Factor* |
|  | *1* | *2* | *3* | *4* | *5* | *6* | *7* |
| succinic | **0,799838** | 0,207739 | 0,242964 | 0,457792 | 0,0101875 | 0,0892937 | -0,00691179 |
| 2m-glyceric | -0,0185298 | **0,826797** | -0,10005 | -0,0918008 | 0,0201811 | 0,429427 | 0,104401 |
| glyceric | **0,772298** | 0,167938 | 0,412009 | 0,300083 | 0,0970007 | 0,0264135 | -0,0405083 |
| c5alkene\_1 | 0,000281987 | **0,852508** | 0,0227244 | -0,128974 | -0,223653 | -0,187081 | 0,0262415 |
| c5alkene\_2 | 0,427303 | **0,438734** | 0,286257 | -0,143091 | -0,307644 | -0,272211 | -0,274286 |
| c5alkene | -0,17219 | **0,855492** | -0,192938 | -0,0520034 | -0,138239 | -0,201763 | -0,0573132 |
| glutaric | **0,79622** | 0,15959 | 0,241668 | 0,468828 | 0,046446 | -0,00813394 | -0,0226366 |
| malic | 0,523158 | **0,620023** | 0,204298 | 0,174709 | 0,205398 | 0,0280471 | 0,0557705 |
| adipic | **0,629154** | 0,119043 | 0,438674 | 0,341033 | -0,0626661 | -0,144916 | -0,133253 |
| cis-pinonic | **0,617755** | 0,364395 | 0,133801 | 0,265448 | -0,360056 | 0,035842 | -0,203899 |
| 2meritrol | -0,148487 | **0,822248** | -0,193912 | -0,00589145 | -0,209943 | 0,191318 | 0,0532837 |
| 2mttritol | -0,0655117 | **0,858591** | -0,162236 | 0,0681803 | -0,17362 | 0,146764 | 0,042471 |
| 3hydroxyglutar | 0,417206 | **0,786332** | 0,247905 | 0,18627 | 0,0621786 | -0,0743336 | 0,000588784 |
| pimelic | **0,734683** | 0,236199 | 0,504724 | 0,288673 | 0,00735609 | 0,0274966 | 0,11667 |
| pinic | 0,393528 | **0,722944** | 0,0107596 | 0,492258 | -0,0438995 | 0,106552 | -0,0105067 |
| galactosan | **0,671697** | 0,0150235 | 0,103731 | 0,674121 | 0,124256 | -0,123811 | -0,0288889 |
| mannosan | **0,770983** | -0,0141281 | 0,114455 | 0,581331 | 0,125767 | -0,111622 | -0,0225672 |
| pthalic | **0,773542** | -0,0130623 | 0,160059 | 0,488594 | 0,195001 | -0,100381 | 0,0065217 |
| suberic | **0,620179** | 0,453774 | 0,101134 | 0,437616 | 0,026619 | 0,139595 | 0,246163 |
| levoglucosa | **0,968141** | 0,00671232 | 0,048847 | 0,167391 | 0,0387677 | -0,016169 | -0,0203004 |
| MBTCA | -0,200418 | **0,864682** | -0,18118 | -0,0257171 | -0,0816422 | -0,138514 | -0,111252 |
| azelaic | 0,446016 | 0,00869863 | 0,101425 | **0,817961** | 0,180703 | -0,0376549 | 0,0668892 |
| 0:C14 | 0,0328163 | 0,0856453 | -0,228007 | **0,833268** | -0,134636 | 0,14111 | -0,01823 |
| a-glucose | 0,0202021 | -0,224094 | -0,0724747 | **0,654554** | 0,583897 | 0,233353 | -0,120337 |
| 0:C15 | 0,252922 | 0,290094 | 0,0548239 | -0,120228 | 0,2509 | **0,616229** | 0,548063 |
| manitol | **0,908485** | 0,0574848 | 0,245448 | 0,202617 | 0,00708591 | 0,0290739 | 0,109376 |
| b-glucose | -0,144495 | -0,226374 | -0,131715 | 0,276431 | **0,679101** | **0,509849** | -0,0313672 |
| 0:C16 | **0,851467** | 0,140623 | 0,130918 | -0,054362 | -0,186841 | 0,162101 | 0,22775 |
| 0:C17 | **0,821927** | 0,118831 | 0,215802 | -0,0800407 | 0,221409 | 0,214113 | 0,318193 |
| linoleic | 0,515827 | -0,0328141 | 0,0201246 | 0,273043 | 0,192159 | 0,556772 | -0,0678385 |
| oleic | **0,926262** | 0,0355238 | -0,0169259 | 0,159944 | 0,0906247 | 0,015943 | -0,184756 |
| 0:C19 | **0,749269** | -0,102376 | 0,343643 | 0,0485045 | 0,33321 | 0,0322338 | 0,209135 |
| dehydrabie | **0,761791** | 0,012711 | 0,332964 | 0,0092395 | -0,0930577 | 0,0139468 | 0,018013 |
| 0:C20 | **0,901978** | -0,0326717 | 0,28893 | 0,182181 | 0,127463 | -0,00900661 | 0,148834 |
| 0:C21 | 0,423526 | -0,1601 | 0,179616 | -0,0531485 | **0,771039** | 0,144306 | 0,16921 |
| sucrose | -0,21187 | 0,0152349 | -0,156452 | 0,0429248 | 0,197138 | **0,858014** | -0,0160143 |
| trehalose | -0,237543 | -0,419741 | -0,167394 | 0,034978 | 0,707899 | 0,0190304 | -0,130896 |
| C20 | **0,695488** | -0,179365 | 0,205001 | 0,104083 | -0,16862 | -0,276898 | -0,127437 |
| C21 | **0,882501** | -0,0493276 | 0,243788 | 0,144143 | -0,0143586 | -0,0615707 | -0,0234663 |
| C22 | **0,872765** | -0,0123776 | 0,340577 | 0,155042 | 0,0250363 | 0,0407417 | 0,00707392 |
| C23 | **0,864858** | 0,0309565 | 0,296149 | 0,300755 | 0,0327811 | 0,0443995 | -0,0566975 |
| C24 | **0,847426** | -0,00876299 | 0,425328 | 0,242559 | 0,0384906 | -0,0435962 | 0,000722038 |
| C25 | **0,842** | 0,00975662 | 0,421669 | 0,276603 | 0,0492011 | -0,0182693 | 0,0185305 |
| C26 | **0,823184** | -0,0582849 | 0,462886 | 0,188239 | 0,0549767 | -0,0955363 | 0,00289379 |
| C27 | **0,781213** | -0,0202157 | 0,501499 | 0,287303 | 0,0606831 | -0,0204046 | 0,0585993 |
| C28 | **0,895964** | -0,0452417 | 0,368636 | 0,131096 | 0,0449871 | -0,0583672 | 0,0256943 |
| C29 | 0,597627 | -0,0289806 | **0,718588** | 0,200421 | 0,0342723 | 0,00521037 | 0,0304702 |
| C30 | 0,657518 | -0,095798 | **0,680429** | 0,12035 | 0,0863651 | -0,0659791 | 0,0535346 |
| C31 | 0,288288 | -0,0855657 | **0,897197** | -0,058659 | 0,00578148 | 0,00062313 | -0,0221306 |
| C32 | 0,343989 | -0,188057 | **0,848138** | -0,176631 | -0,00593766 | -0,132794 | 0,00649474 |
| C33 | 0,178262 | -0,181465 | **0,889847** | -0,094352 | 0,118862 | -0,0521934 | 0,0614802 |
| 9fluorenone | **0,960371** | 0,0380999 | -0,0784289 | -0,0202433 | -0,00468464 | 0,000835757 | 0,0234794 |
| phenanthrene | **0,959856** | 0,0152277 | -0,0505812 | 0,0527847 | -0,00914308 | -0,0378297 | -0,0588782 |
| antracene | **0,966784** | 0,0401296 | -0,00244527 | 0,0228251 | 0,0345612 | 0,0129262 | -0,00173996 |
| antraquinone | **0,983912** | 0,0444261 | 0,00396377 | -0,0703902 | -0,0230248 | 0,0276729 | 0,0114624 |
| fluorantene | **0,980712** | 0,0623461 | 0,0293768 | 0,0114918 | -0,0102796 | 0,0353135 | -0,0327952 |
| pyrene | **0,982052** | 0,0624249 | 0,0410931 | -0,0160583 | -0,0192718 | 0,0388412 | -0,0192144 |
| retene | **0,767767** | 0,0630032 | 0,136662 | -0,195498 | -0,0243975 | 0,111806 | -0,257528 |
| B(a)fone | **0,959856** | 0,037954 | 0,192394 | -0,0677542 | -0,019665 | 0,0190381 | 0,0357445 |
| B(b)fone | **0,903036** | -0,0285841 | 0,141507 | 0,0077967 | -0,0118573 | -0,0441806 | 0,270059 |
| b(a)a | **0,952548** | 0,0448465 | 0,170401 | 0,207004 | 0,0389115 | -0,0203871 | -0,000821029 |
| chrysene | **0,941291** | 0,0379085 | 0,200775 | 0,225949 | 0,0505155 | -0,0284477 | 0,0179627 |
| bzantrone | **0,743333** | -0,0722077 | 0,225413 | 0,0677184 | -0,0580187 | -0,0810042 | 0,442229 |
| B(b+k)FA | **0,871322** | -0,000423406 | 0,29073 | 0,269768 | 0,00984886 | -0,0740714 | 0,0969914 |
| B(e)P | **0,896924** | 0,011192 | 0,296946 | 0,235395 | 0,122985 | -0,0388865 | -0,0470695 |
| B(a)P | **0,952413** | 0,0303015 | 0,202078 | 0,175039 | 0,0644558 | -0,0132051 | -0,0369408 |
| C290norhop | 0,0104891 | -0,0423186 | 0,197447 | -0,130723 | **0,741445** | -0,025391 | 0,251973 |
| C30hop | 0,0930662 | -0,106624 | 0,049806 | 0,17562 | **0,77458** | 0,140548 | -0,157201 |
| inde(cd)pyr | **0,941239** | 0,0106441 | 0,216476 | 0,165635 | -0,0333663 | -0,0203068 | 0,0458364 |
| dib(a,h)A | **0,819305** | -0,00171439 | 0,177754 | 0,0024894 | 0,402318 | -0,000331367 | 0,147638 |
| B(ghi)per | **0,949943** | 0,0144577 | 0,200131 | 0,156652 | -0,020667 | -0,0277549 | -0,00287315 |
| coronene | **0,958308** | 0,0124211 | 0,147245 | -0,0610264 | -0,0193854 | 0,0156546 | 0,140761 |