

Table S1. **Variable ranking criterion.** The variables are ranked according to the frequency of selection among all 100 iterations. This was performed as follows: stepwise forward variable selection for LDA; variable importance for projection for PLS-DA; recursive feature elimination for SVM; and mean decrease in accuracy (MDA) and in Gini as provided by RF.

LDA ^a		PLS-DA ^b					SVM ^b					MDA ^b					MDG ^b				
	30		30	15	10	5		30	15	10	5		30	15	10	5		30	15	10	5
<i>m/z</i> 76	99	<i>m/z</i> 105	100	99	98	54	<i>m/z</i> 64	100	95	88	66	<i>m/z</i> 105	100	100	100	100	<i>m/z</i> 104	100	100	100	100
<i>m/z</i> 114	89	<i>m/z</i> 114	100	79	52		<i>m/z</i> 76	100	94	84	59	<i>m/z</i> 114	100	63			<i>m/z</i> 105	100			
<i>m/z</i> 89	72	<i>m/z</i> 120	100				<i>m/z</i> 77	100	76	49		<i>m/z</i> 120	100	76			<i>m/z</i> 114	100			
<i>m/z</i> 64	53	<i>m/z</i> 51	100				<i>m/z</i> 84	100	87	57	31	<i>m/z</i> 154	100				<i>m/z</i> 119	100			
<i>m/z</i> 157	45	<i>m/z</i> 58	100	96	87		<i>m/z</i> 90	100	59			<i>m/z</i> 58	100	88	34		<i>m/z</i> 120	100	96		
<i>m/z</i> 116	38	<i>m/z</i> 63	100	91			<i>m/z</i> 105	100	100	100	94	<i>m/z</i> 63	100	100	100	61	<i>m/z</i> 58	100	64	100	
<i>m/z</i> 126	38	<i>m/z</i> 64	100	100	100	93	<i>m/z</i> 58	99	55			<i>m/z</i> 64	100	100	100	78	<i>m/z</i> 63	100	100	100	71
<i>m/z</i> 117	38	<i>m/z</i> 65	100	99	63		<i>m/z</i> 89	98	79	60		<i>m/z</i> 65	100	100	95		<i>m/z</i> 64	100	100		76
<i>m/z</i> 105	37	<i>m/z</i> 76	100	100	100	100	<i>m/z</i> 63	96	56			<i>m/z</i> 76	100	100	100	98	<i>m/z</i> 65	100	100	99	
<i>m/z</i> 122	36	<i>m/z</i> 77	100	100	99	60	<i>m/z</i> 114	96	82	56		<i>m/z</i> 77	100	100	100	89	<i>m/z</i> 76	100	100	100	98
<i>m/z</i> 61	35	<i>m/z</i> 79	100	88	63		<i>m/z</i> 65	95				<i>m/z</i> 79	100				<i>m/z</i> 77	100	54	100	88
<i>m/z</i> 84	33	<i>m/z</i> 84	100	100	100	96	<i>m/z</i> 91	95	51			<i>m/z</i> 84	100	100	100		<i>m/z</i> 79	100	100		
<i>m/z</i> 104	32	<i>m/z</i> 89	100	85	55		<i>m/z</i> 79	92	62	48		<i>m/z</i> 89	100	85			<i>m/z</i> 84	100	100	80	
<i>m/z</i> 79	31	<i>m/z</i> 90	100	77			<i>m/z</i> 154	92	78	67	37	<i>m/z</i> 90	100	100	94		<i>m/z</i> 89	100	93	41	
<i>m/z</i> 127	31	<i>m/z</i> 91	100	79			<i>m/z</i> 167	90	61	49		<i>m/z</i> 91	100	100	96		<i>m/z</i> 90	100	100	99	
<i>m/z</i> 163	28	<i>m/z</i> 92	100				<i>m/z</i> 143	87				<i>m/z</i> 92	100	82			<i>m/z</i> 91	100	100	98	
<i>m/z</i> 156	28	<i>m/z</i> 154	98	53			<i>m/z</i> 99	86				<i>m/z</i> 99	100	55			<i>m/z</i> 92	100	98		
<i>m/z</i> 128	28	<i>m/z</i> 143	97				<i>m/z</i> 104	86				<i>m/z</i> 119	97				<i>m/z</i> 99	100			
<i>m/z</i> 167	27	<i>m/z</i> 99	96	69			<i>m/z</i> 116	81				<i>m/z</i> 104	96				<i>m/z</i> 154	95	52		
<i>m/z</i> 107	27	<i>m/z</i> 136	87				<i>m/z</i> 70	77				<i>m/z</i> 71	83				<i>m/z</i> 66	90			
<i>m/z</i> 118	26	<i>m/z</i> 70	85				<i>m/z</i> 107	77				<i>m/z</i> 51	79				<i>m/z</i> 51	85			
<i>m/z</i> 82	25	<i>m/z</i> 104	75				<i>m/z</i> 127	76				<i>m/z</i> 61	75				<i>m/z</i> 136	82			
<i>m/z</i> 146	23	<i>m/z</i> 66	75				<i>m/z</i> 53	69	41			<i>m/z</i> 70	64				<i>m/z</i> 71	80			
<i>m/z</i> 58	22	<i>m/z</i> 127	72				<i>m/z</i> 146	56				<i>m/z</i> 127	63				<i>m/z</i> 86	75			
<i>m/z</i> 106	20	<i>m/z</i> 57	71				<i>m/z</i> 163	55				<i>m/z</i> 136	58				<i>m/z</i> 78	68			
<i>m/z</i> 143	20	<i>m/z</i> 60	71				<i>m/z</i> 61	49				<i>m/z</i> 66	54				<i>m/z</i> 127	63			