

Table S4. Relative peak intensities of 18 weeks samples

Compound name	Control1	Control2	Control3	LAB + EtOH1	LAB + EtOH2	LAB + EtOH3	Acid + Yeast1	Acid + Yeast2	Acid + Yeast3	Acid + EtOH1	Acid + EtOH2	Acid + EtOH3
Alanine	1.7471	1.4856	2.0465	1.4134	1.3055	1.6286	1.3972	1.3177	1.5342	1.1930	1.0393	1.0435
Arabinose	0.1854	0.1509	0.2121	0.1360	0.1440	0.1724	0.4727	0.5269	0.5093	0.5334	0.4381	0.4428
Arabitol	1.2946	1.1502	1.1965	0.9496	0.9845	1.0068	1.2095	1.2171	1.3394	0.9480	0.9893	0.9970
Aspartic acid	0.6917	0.5981	0.7292	0.4936	0.5397	0.6572	1.1058	1.0817	1.1325	0.9792	0.9883	0.9838
Citric acid + Isocitric acid	0.0028	0.0050	0.0026	0.0055	0.0033	0.0046	0.0414	0.0436	0.0429	0.0432	0.0391	0.0372
Fructose	0.0050	0.0044	0.0054	0.0060	0.0069	0.0082	0.0137	0.0188	0.0163	0.0378	0.0364	0.0337
Galactose	0.2949	0.2738	0.2735	0.2524	0.2625	0.2756	0.2886	0.2939	0.3209	0.2790	0.2794	0.2747
Glucose	1.0021	1.1070	1.0216	1.7703	1.8009	1.5850	1.5157	1.3379	1.5828	1.3514	1.5645	1.5853
Glutamic acid	1.6202	1.4999	1.7374	1.3258	1.3542	1.4845	1.7597	1.7601	1.9582	1.5367	1.4756	1.4235
Glutamine	0.0050	0.0047	0.0066	0.0033	0.0055	0.0059	0.0045	0.0042	0.0046	0.0040	0.0048	0.0028
Glycerol	2.4905	2.5436	2.3488	0.7416	0.7101	0.7442	2.4818	2.2385	2.6222	0.8085	0.7743	0.7694
Glycine	1.0306	0.9576	1.0792	0.9449	0.9490	1.0335	1.1356	1.1810	1.2419	1.0691	1.0552	1.0551
Histidine	0.1289	0.1013	0.1566	0.0903	0.0975	0.1192	0.1665	0.1378	0.1656	0.1345	0.1093	0.1031
Inositol	0.1662	0.1614	0.1757	0.1606	0.1559	0.1573	0.1729	0.1712	0.1747	0.1621	0.1577	0.1659
Isoleucine	0.9766	0.8535	0.9480	0.7572	0.7506	0.8528	0.9567	0.9745	1.0879	0.9056	0.8532	0.8504
Lactic acid	0.0786	0.0793	0.0656	0.0782	0.0790	0.0776	0.0632	0.0626	0.0700	0.0584	0.0552	0.0695
Leucine	1.7078	1.5218	1.7055	1.3719	1.3919	1.6159	1.8194	1.7207	1.9359	1.5896	1.6083	1.5904
Lysine	0.5293	0.4457	0.5479	0.4466	0.4679	0.4793	0.5254	0.5142	0.5535	0.4813	0.4685	0.4719
Malic acid	0.1750	0.1322	0.1782	0.1334	0.1408	0.1685	0.1833	0.1809	0.1837	0.1782	0.1631	0.1560
Mannitol	0.1706	0.1717	0.1820	0.1694	0.1774	0.1752	0.2152	0.2155	0.2254	0.1816	0.2080	0.2035
<i>meso</i> -Erythritol	0.4679	0.4260	0.4684	0.3667	0.4136	0.4393	0.4694	0.4799	0.5104	0.4167	0.4256	0.4284
Methionine	0.1389	0.1129	0.1323	0.1054	0.1047	0.1254	0.1257	0.1347	0.1424	0.1237	0.1206	0.1148
Ornithine	1.0461	0.8744	1.1009	0.7305	0.7872	0.9120	0.2746	0.3010	0.3324	0.2619	0.2314	0.2341
Phenylalanine	0.4233	0.3884	0.4145	0.3647	0.3529	0.3842	0.4229	0.4289	0.4380	0.3717	0.3847	0.3671
Phosphate	1.0278	0.9647	1.0035	0.9365	0.9513	1.0229	1.0399	1.0356	1.0497	1.0033	1.0021	0.9842
Proline	1.2980	1.0789	1.5431	0.9695	0.9408	1.2058	1.5860	1.4603	1.6990	1.3500	1.2768	1.2611
Pyroglutamic acid	0.4660	0.4658	0.2813	0.5853	0.5788	0.5729	0.2120	0.3805	0.2713	0.2694	0.4645	0.6010
Ribose	0.0080	0.0077	0.0083	0.0074	0.0077	0.0088	0.0116	0.0127	0.0129	0.0122	0.0118	0.0124
Serine	0.5680	0.5216	0.6004	0.4615	0.4708	0.5258	0.7631	0.7525	0.8398	0.6857	0.6380	0.6482
Succinic acid (or aldehyde)	0.1682	0.1466	0.1758	0.0577	0.0585	0.0701	0.1540	0.1616	0.1634	0.0637	0.0673	0.0678
Threonine	0.2084	0.1845	0.2075	0.1686	0.1680	0.1874	0.2246	0.2154	0.2311	0.1842	0.1782	0.1885
Tryptophan	0.0054	0.0071	0.0026	0.0468	0.0418	0.0484	0.0025	0.0039	0.0026	0.0287	0.0367	0.0328
Tyrosine	0.1702	0.1658	0.1702	0.1810	0.1896	0.1866	0.1814	0.1896	0.1968	0.2070	0.1997	0.1954
Valine	1.1496	0.9597	1.2051	0.9207	0.8647	1.0437	1.1866	1.1515	1.3336	1.0625	1.0069	1.0182
Xylitol	0.0409	0.0378	0.0429	0.0303	0.0301	0.0312	0.0288	0.0296	0.0302	0.0161	0.0185	0.0190
Xylose	0.2891	0.2525	0.3151	0.2277	0.2610	0.2917	0.3353	0.3865	0.3520	0.3584	0.3265	0.3541
(<i>R</i>)-Dihydro-3-hydroxy-4,4-dimethyl-2(3H)-furanone	0.0917	0.0879	0.0938	0.0874	0.0804	0.0843	0.1031	0.0970	0.1008	0.1050	0.0940	0.1009
(<i>Z,Z</i>)-9,12-Octadecadienoic acid (Linoleic acid)	0.0024	0.0024	0.0024	0.0024	0.0024	0.0024	0.0024	0.0024	0.0054	0.0024	0.0027	0.0024
1,2,3-Benzenetriol (Pyrogallol)	0.0957	0.1109	0.0941	0.1000	0.0699	0.0650	0.0956	0.0585	0.0371	0.1000	0.0599	0.1004
1,4-Benzenediol	0.1022	0.1139	0.1108	0.1087	0.1076	0.1068	0.0979	0.0865	0.0835	0.0924	0.0952	0.0971
1-Butanol	1.5888	1.5816	1.6190	0.0057	0.0062	0.0064	1.5989	1.5608	1.8567	0.0056	0.0062	0.0046
1-Hydroxy-2-butanone	0.1005	0.1054	0.1105	0.0210	0.0198	0.0204	0.1249	0.1124	0.1239	0.0153	0.0158	0.0145
1-Hydroxy-2-propanone (Acetol)	0.0116	0.0124	0.0133	0.0126	0.0113	0.0121	0.0162	0.0148	0.0159	0.0168	0.0168	0.0150
1-Propanol	0.2083	0.2026	0.2125	0.1161	0.1081	0.1087	0.1945	0.1737	0.1975	0.1089	0.1175	0.1100
2-(4-Hydroxyphenyl)ethanol	0.7157	0.7158	0.7771	0.0684	0.0689	0.0705	0.7224	0.5931	0.6542	0.0296	0.0321	0.0313
2(5 <i>H</i>)-furanone	0.0114	0.0125	0.0134	0.0124	0.0113	0.0120	0.0134	0.0132	0.0146	0.0142	0.0151	0.0142
2,3-Butanediol	0.3950	0.4588	0.5247	0.0323	0.0314	0.0313	0.4404	0.4006	0.5006	0.0232	0.0288	0.0284

Compound name	Control1	Control2	Control3	LAB + EtOH1	LAB + EtOH2	LAB + EtOH3	Acid + Yeast1	Acid + Yeast2	Acid + Yeast3	Acid + EtOH1	Acid + EtOH2	Acid + EtOH3
2,5-Dimethyl-4-hydroxy-3(2 <i>H</i>)-furanone (HDM)	0.0126	0.0117	0.0139	0.0191	0.0169	0.0188	0.0074	0.0049	0.0053	0.0089	0.0095	0.0082
2-Acetylpyrrole	0.0126	0.0117	0.0119	0.0164	0.0140	0.0150	0.0130	0.0107	0.0111	0.0174	0.0154	0.0149
2-Butenoic acid	0.0162	0.0170	0.0145	0.0067	0.0054	0.0055	0.0233	0.0211	0.0142	0.0061	0.0053	0.0063
2-Furancarboxaldehyde (Furfural)	0.0666	0.0701	0.0641	0.0295	0.0278	0.0260	0.0775	0.0836	0.0691	0.0341	0.0233	0.0405
2-Furanmethanol (Furfuryl alcohol)	0.1132	0.1265	0.1407	0.0629	0.0534	0.0638	0.1138	0.0912	0.1025	0.0905	0.0399	0.0652
2-Hydroxy-3-methyl-2-cyclopenten-1-one (Cyclotene)	0.0152	0.0147	0.0148	0.0110	0.0099	0.0099	0.0084	0.0072	0.0075	0.0041	0.0039	0.0040
2-Methoxy-4-vinylphenol (4-Vinylguaiacol)	0.8549	0.9759	1.0531	0.8487	0.8397	0.8771	0.7576	0.6294	0.5913	0.8551	0.7341	0.7228
2-Methoxy-6-methyl-4-pyran-4-one	0.0807	0.0807	0.0883	0.0425	0.0427	0.0440	0.0906	0.0778	0.0780	0.0311	0.0431	0.0322
2-Methyl-1-propanol (Isobutyl alcohol)	0.1642	0.1623	0.1769	0.0222	0.0225	0.0235	0.1430	0.1206	0.1301	0.0204	0.0209	0.0205
2-Methyl-2-butenic acid	0.0125	0.0141	0.0140	0.0161	0.0161	0.0170	0.0131	0.0136	0.0122	0.0129	0.0174	0.0153
2-Methylbutanoic acid	0.1428	0.1536	0.1451	0.1644	0.1604	0.1618	0.1466	0.1439	0.1273	0.1308	0.1676	0.1599
2-Methylpropanoic acid (Isobutyric acid)	0.1307	0.1426	0.1316	0.1582	0.1455	0.1386	0.1266	0.1231	0.1179	0.0996	0.1477	0.1371
2-Phenylethyl alcohol	1.0918	1.0417	1.1039	0.0740	0.0702	0.0799	1.0936	0.8127	0.8827	0.0540	0.0543	0.0508
3-(Methylthio)-1-propanal (Methional)	0.0201	0.0205	0.0210	0.0219	0.0222	0.0224	0.0207	0.0210	0.0213	0.0232	0.0205	0.0202
3-(Methylthio)-1-propanol (Methionol)	0.1793	0.1646	0.1739	0.0431	0.0462	0.0459	0.1656	0.1516	0.1411	0.0422	0.0391	0.0378
3,5-Dihydroxy-6-methyl-2,3-dihydro-4 <i>H</i> -pyran-4-one	0.0280	0.0281	0.0322	0.0511	0.0539	0.0567	0.0307	0.0014	0.1003	0.0433	0.0615	0.0406
3,5-Dimethyl-4-heptanone	0.4150	0.4013	0.4091	0.0157	0.0138	0.0137	0.4847	0.3737	0.3513	0.0074	0.0074	0.0084
3-Hydroxy-2-butanone (Acetoin)	0.6469	0.6826	0.6958	0.0077	0.0068	0.0063	1.0344	0.9888	1.0880	0.0032	0.0031	0.0036
3-Hydroxy-2-methyl-4 <i>H</i> -pyran-4-one (Maltol)	0.2712	0.2792	0.2646	0.3015	0.2696	0.2725	0.2797	0.2419	0.2442	0.3094	0.2714	0.3018
3-Methyl-1-butanol	0.9209	0.9536	1.1072	0.0815	0.0939	0.1045	0.8419	0.6912	0.8321	0.0750	0.0847	0.0748
3-Methyl-2(5 <i>H</i>)-Furanone	0.0563	0.0538	0.0563	0.0024	0.0015	0.0024	0.0719	0.0535	0.0625	0.0014	0.0027	0.0015
3-Methylbutanoic acid (Isovaleric acid)	0.4739	0.5367	0.4875	0.6046	0.5507	0.5271	0.4732	0.4887	0.4123	0.4783	0.5394	0.5731
4-Ethyl-2,6-dimethoxyphenol	0.1254	0.1465	0.1576	0.1631	0.1821	0.1746	0.1270	0.1248	0.1272	0.1503	0.1834	0.1565
4-Hydroxy-5-methyl-furanone	0.1083	0.1222	0.1350	0.3101	0.3175	0.3331	0.1057	0.0765	0.0914	0.2862	0.3550	0.2668
4-Oxopentanoic acid (Levulinic acid)	0.0156	0.0209	0.0185	0.0257	0.0255	0.0243	0.0232	0.0270	0.0260	0.0303	0.0267	0.0326
5(or 2)-Ethyl-4-hydroxy-2(or 5)-methyl-3(2 <i>H</i>)-furanone (HEMF)	0.2926	0.3185	0.3089	0.0110	0.0108	0.0110	0.3453	0.2830	0.2875	0.0046	0.0060	0.0057
5-Ethyl-2(3 <i>H</i>)-furanone	0.0177	0.0156	0.0171	0.0015	0.0024	0.0015	0.0195	0.0164	0.0165	0.0024	0.0016	0.0024
5-Ethylidihydro-2(3 <i>H</i>)-furanone (<i>gamma</i> -hexalactone)	0.0065	0.0064	0.0062	0.0034	0.0030	0.0031	0.0054	0.0049	0.0048	0.0030	0.0033	0.0035
Acetic acid	0.0629	0.0591	0.0623	0.0617	0.0535	0.0544	0.0601	0.0535	0.0419	0.0612	0.0437	0.0598
Benzoic acid	0.0014	0.0024	0.0015	0.0024	0.0015	0.0024	0.0014	0.0024	0.0017	0.0014	0.0027	0.0015
Butanoic acid (Butyric acid)	0.0665	0.0714	0.0644	0.0457	0.0433	0.0391	0.0540	0.0553	0.0539	0.0458	0.0407	0.0415
Caprolactam	0.0537	0.0890	0.0832	0.0770	0.0835	0.0695	0.0805	0.0645	0.1301	0.0860	0.0750	0.0819
Dihydro-2(3 <i>H</i>)-Furanone (<i>gamma</i> -Butyrolactone)	0.0290	0.0272	0.0286	0.0208	0.0180	0.0186	0.0216	0.0185	0.0184	0.0144	0.0124	0.0145
Dihydro-5-methyl-2(3 <i>H</i>)-furanone (<i>gamma</i> -Valerolactone)	0.0161	0.0153	0.0176	0.0024	0.0019	0.0024	0.0222	0.0181	0.0203	0.0014	0.0027	0.0015
Ethyl hexadecanoate (Ethyl Palmitate)	0.1346	0.1570	0.1609	0.1276	0.1176	0.1054	0.1878	0.1896	0.1755	0.1263	0.1006	0.1188
Ethyl lactate	1.0573	1.0930	1.0848	1.1397	1.1061	1.0810	1.1911	1.1492	1.3081	1.1466	0.9357	1.1631
Hexanoic acid (Caproic acid)	0.0126	0.0126	0.0121	0.0139	0.0128	0.0127	0.0119	0.0096	0.0075	0.0130	0.0115	0.0119
mono-Ethyl succinate	1.5644	1.5856	1.6260	0.8502	0.8892	0.9077	1.5992	1.5619	1.8341	0.8991	0.8590	0.9812
<i>n</i> -Hexadecanoic acid (Palmitic acid)	0.0334	0.0398	0.0365	0.0273	0.0291	0.0286	0.0357	0.0388	0.0381	0.0250	0.0272	0.0211
Phenylacetaldehyde	0.0674	0.0658	0.0705	0.0648	0.0538	0.0567	0.0722	0.0655	0.0695	0.0582	0.0527	0.0609
Phenylacetic acid	0.2758	0.3009	0.2876	0.2893	0.3011	0.3148	0.2870	0.2638	0.2562	0.2361	0.3142	0.2883
(<i>Z</i>)-1,5-Octadien-3-ol	0.0021	0.0022	0.0005	0.0013	0.0020	0.0041	0.0025	0.0018	0.0006	0.0005	0.0017	0.0015
(<i>Z</i>)-3,7-Dimethyl-2-octene	0.0026	0.0023	0.0021	0.0009	0.0009	0.0011	0.0033	0.0039	0.0016	0.0009	0.0010	0.0006
1-Octen-3-ol	0.0553	0.0445	0.0486	0.0436	0.0493	0.0823	0.0485	0.0506	0.0531	0.0527	0.0477	0.0461
2,3-Butanedione (Diacyetyl)	0.7306	0.8174	0.6708	0.0238	0.0136	0.0263	0.8573	0.9497	0.8859	0.0123	0.0119	0.0151
2,3-Pentanedione	0.0301	0.0275	0.0199	0.0139	0.0105	0.0082	0.0144	0.0249	0.0124	0.0035	0.0062	0.0078
2,6-Dimethyl-pyrazine	0.0064	0.0062	0.0066	0.0053	0.0052	0.0086	0.0059	0.0046	0.0065	0.0055	0.0043	0.0045

Compound name	Control1	Control2	Control3	LAB + EtOH1	LAB + EtOH2	LAB + EtOH3	Acid + Yeast1	Acid + Yeast2	Acid + Yeast3	EtOH' Acid + EtOH'	Acid + EtOH3	Acid + EtOH3
2-Butanone	0.5502	0.5065	0.4908	0.3931	0.3804	0.5311	0.4697	0.5120	0.4885	0.3392	0.3488	0.3732
2-Butenal	0.0109	0.0076	0.0099	0.0036	0.0018	0.0038	0.0185	0.0173	0.0135	0.0096	0.0062	0.0042
2-Ethoxy-2-methyl-propane	0.0103	0.0071	0.0161	0.0042	0.0073	0.0141	0.0014	0.0018	0.0083	0.0106	0.0063	0.0074
2-Methyl-1-butanol (Active amyl alcohol)	0.5887	0.5728	0.5780	0.0888	0.0967	0.1467	0.5398	0.4765	0.5244	0.0586	0.0712	0.0614
2-Methyl-2-propanol	0.0199	0.0508	0.0973	0.0094	0.0069	0.0177	0.0056	0.0030	0.0101	0.0109	0.0048	0.0117
2-Methyl-butanal (Valeraldehyde)	1.5585	1.4951	1.4268	1.5033	1.4814	1.7857	2.0055	2.0964	2.1843	1.8376	1.5821	1.6118
2-Methylbutyl acetate	0.0233	0.0170	0.0149	0.0022	0.0076	0.0087	0.0155	0.0147	0.0179	0.0036	0.0030	0.0035
2-Methyl-furan	0.0061	0.0080	0.0059	0.0130	0.0121	0.0097	0.0103	0.0144	0.0108	0.0122	0.0139	0.0224
2-Methyl-propanal (Isobutyraldehyde)	1.7364	1.5505	1.5279	1.4842	1.5166	2.1166	2.2267	2.0801	2.1764	1.7665	1.6293	1.5812
2-Methylpropyl acetate (Isobutyl acetate)	0.0751	0.0537	0.0680	0.0067	0.0045	0.0071	0.0576	0.0573	0.0593	0.0031	0.0062	0.0030
2-Pentanone	0.0222	0.0157	0.0165	0.0064	0.0041	0.0156	0.0205	0.0168	0.0219	0.0080	0.0070	0.0064
2-Propanol	0.1178	0.0961	0.0900	0.1002	0.1044	0.1485	0.1053	0.1009	0.0919	0.0647	0.0747	0.0948
2-Propanone (Acetone)	1.2529	1.1921	1.1003	1.2178	1.0250	1.4239	1.6101	1.5882	1.5411	1.4562	1.3935	1.6207
3,4-Hexanedione	0.0158	0.0159	0.0139	0.0025	0.0021	0.0021	0.0116	0.0133	0.0137	0.0003	0.0002	0.0004
3-Methyl-2-butanone	0.0425	0.0470	0.0304	0.0487	0.0388	0.0682	0.0356	0.0378	0.0490	0.0462	0.0419	0.0439
3-Methyl-butanal (Isovaleraldehyde)	1.5855	1.6823	1.3788	1.0984	1.1104	1.2850	1.6922	1.8588	1.7748	0.9452	0.9118	1.0272
3-Methylbutyl acetate (Isoamyl acetate)	0.0493	0.0312	0.0451	0.0054	0.0062	0.0094	0.0351	0.0318	0.0319	0.0074	0.0057	0.0035
3-Octanol	0.0045	0.0039	0.0038	0.0025	0.0042	0.0048	0.0036	0.0035	0.0030	0.0028	0.0034	0.0028
3-Octanone	0.0085	0.0069	0.0118	0.0055	0.0019	0.0035	0.0064	0.0068	0.0111	0.0021	0.0003	0.0009
Acetaldehyde	2.5370	2.8407	2.1685	1.0386	1.0897	1.6812	2.5488	2.1272	2.0404	0.7063	0.7388	0.6921
Benzaldehyde	0.0132	0.0154	0.0101	0.0112	0.0093	0.0131	0.0090	0.0124	0.0110	0.0041	0.0060	0.0064
Butyl acetate	0.1462	0.1298	0.1239	0.0115	0.0223	0.0246	0.1775	0.1733	0.1664	0.0112	0.0112	0.0237
Dimethyl disulfide	0.0173	0.0237	0.0166	0.0100	0.0133	0.0195	0.0215	0.0229	0.0278	0.0134	0.0088	0.0179
Ethyl 2-methylbutanoate	0.0651	0.0374	0.0510	0.0974	0.1135	0.1455	0.0477	0.0532	0.0575	0.0835	0.0881	0.0606
Ethyl 2-methylpropanoate (Ethyl isobutyrate)	0.1898	0.1039	0.1374	0.1803	0.2131	0.2893	0.1505	0.1485	0.1758	0.1262	0.1475	0.0901
Ethyl 3-methylbutanoate (Ethyl isovalerate)	0.0688	0.0383	0.0562	0.0678	0.0744	0.1096	0.0488	0.0479	0.0602	0.0648	0.0603	0.0363
Ethyl benzoate	0.0141	0.0129	0.0128	0.0129	0.0153	0.0202	0.0139	0.0141	0.0126	0.0092	0.0135	0.0097
Ethyl butanoate	0.0285	0.0162	0.0210	0.0173	0.0195	0.0293	0.0170	0.0167	0.0210	0.0187	0.0157	0.0113
Ethyl dodecanoate (Ethyl laurate)	0.0087	0.0062	0.0045	0.0033	0.0039	0.0044	0.0044	0.0063	0.0030	0.0025	0.0049	0.0035
Ethyl formate	0.0946	0.0987	0.0852	0.2504	0.2106	0.2677	0.1071	0.1043	0.1039	0.1042	0.0861	0.1168
Ethyl heptanoate	0.0025	0.0014	0.0018	0.0011	0.0016	0.0014	0.0010	0.0011	0.0009	0.0007	0.0011	0.0003
Ethyl hexanoate (Ethyl caproate)	0.0117	0.0078	0.0092	0.0103	0.0099	0.0169	0.0075	0.0071	0.0080	0.0101	0.0081	0.0075
Ethyl propionate	0.2209	0.1478	0.1869	0.1212	0.1235	0.1812	0.1822	0.1876	0.2023	0.0875	0.0836	0.0743
Furan	0.0364	0.0510	0.0332	0.0452	0.0467	0.0397	0.0425	0.0506	0.0486	0.0317	0.0297	0.0323
Methanethiol	0.0348	0.0378	0.0322	0.0394	0.0432	0.0457	0.0356	0.0385	0.0324	0.0299	0.0348	0.0317
Methyl acetate	0.0729	0.0589	0.0430	0.0751	0.0614	0.1028	0.0697	0.0738	0.0732	0.0784	0.0644	0.0711
n-Propyl acetate	0.0269	0.0145	0.0228	0.0081	0.0073	0.0072	0.0120	0.0112	0.0223	0.0036	0.0057	0.0052