Homework 2

https://github.com/mnickols/CSC-302-W1/blob/main/HW2.Rmd

1. Run the following lines and study how they work. Then state what they do and output for us.

```r
df1=data.frame(Name=c('James','Paul','Richards','Marico','Samantha','Ravi','Raghu',
'Richards','George','Ema','Samantha','Catherine'),
State=c('Alaska','California','Texas','North Carolina','California','Texas',
'Alaska','Texas','North Carolina','Alaska','California','Texas'),
Sales=c(14,24,31,12,13,7,9,31,18,16,18,14))

aggregate(df1$Sales, by=list(df1$State), FUN=sum)
```

```
##          Group.1  x
## 1         Alaska 39
## 2     California 55
## 3 North Carolina 30
## 4          Texas 83
```

```r
library(dplyr)
```

```
##
## Attaching package: 'dplyr'
```

```
## The following objects are masked from 'package:stats':
##
##     filter, lag
```

```
## The following objects are masked from 'package:base':
##
##     intersect, setdiff, setequal, union
```

```r
df1 %>% group_by(State) %>% summarise(sum_sales = sum(Sales))
```

```
## # A tibble: 4 x 2
##   State          sum_sales
##   <chr>              <dbl>
## 1 Alaska                39
## 2 California            55
## 3 North Carolina        30
## 4 Texas                 83
```

The first section of this code is setting up the data frame with the States, Names, and Sales. The next 2 sections are doing the same thing, but the first is using the in-built aggregate function to sort the data frame by state and the sum of the sales in the 2nd column. The final section does this using the dplyr library instead of the in-built tools. This library allows us to rename the column with the sum of sales as well.

Read in WorldCupMatches.csv

```
wc = read.csv("C:/Users/Matthew/OneDrive - Umich/Documents/WorldCupMatches.csv", header=T)
head(wc)
```

```
##   Year            Datetime   Stage        Stadium         City Home.Team.Name
## 1 1930 13 Jul 1930 - 15:00  Group 1        Pocitos Montevideo          France
## 2 1930 13 Jul 1930 - 15:00  Group 4 Parque Central Montevideo             USA
## 3 1930 14 Jul 1930 - 12:45  Group 2 Parque Central Montevideo      Yugoslavia
## 4 1930 14 Jul 1930 - 14:50  Group 3        Pocitos Montevideo         Romania
## 5 1930 15 Jul 1930 - 16:00  Group 1 Parque Central Montevideo       Argentina
## 6 1930 16 Jul 1930 - 14:45  Group 1 Parque Central Montevideo           Chile
##   Home.Team.Goals Away.Team.Goals Away.Team.Name Win.conditions Attendance
## 1               4               1         Mexico                      4444
## 2               3               0        Belgium                     18346
## 3               2               1         Brazil                     24059
## 4               3               1           Peru                      2549
## 5               1               0         France                     23409
## 6               3               0         Mexico                      9249
##   Half.time.Home.Goals Half.time.Away.Goals                Referee
## 1                    3                    0 LOMBARDI Domingo (URU)
## 2                    2                    0      MACIAS Jose (ARG)
## 3                    2                    0    TEJADA Anibal (URU)
## 4                    1                    0  WARNKEN Alberto (CHI)
## 5                    0                    0     REGO Gilberto (BRA)
## 6                    1                    0  CRISTOPHE Henry (BEL)
##                 Assistant.1                 Assistant.2 RoundID MatchID
## 1    CRISTOPHE Henry (BEL)        REGO Gilberto (BRA)     201    1096
## 2 MATEUCCI Francisco (URU)      WARNKEN Alberto (CHI)     201    1090
## 3  VALLARINO Ricardo (URU)        BALWAY Thomas (FRA)     201    1093
## 4      LANGENUS Jean (BEL)    MATEUCCI Francisco (URU)     201    1098
## 5      SAUCEDO Ulises (BOL) RADULESCU Constantin (ROU)     201    1085
## 6   APHESTEGUY Martin (URU)        LANGENUS Jean (BEL)     201    1095
##   Home.Team.Initials Away.Team.Initials
## 1                FRA                MEX
## 2                USA                BEL
## 3                YUG                BRA
## 4                ROU                PER
## 5                ARG                FRA
## 6                CHI                MEX
```

2a) Find the size of the data frame. How many rows, columns?

```
nrow(wc)
```

```
## [1] 852
```

```r
ncol(wc)
```

```
## [1] 20
```

2b) Use the summary function to report the statistical summary of your data

```r
summary(wc)
```

```
##       Year          Datetime            Stage              Stadium
##  Min.   :1930    Length:852          Length:852          Length:852
##  1st Qu.:1970    Class :character    Class :character    Class :character
##  Median :1990    Mode  :character    Mode  :character    Mode  :character
##  Mean   :1985
##  3rd Qu.:2002
##  Max.   :2014
##
##       City          Home.Team.Name      Home.Team.Goals   Away.Team.Goals
##  Length:852         Length:852          Min.   : 0.000    Min.   :0.000
##  Class :character   Class :character    1st Qu.: 1.000    1st Qu.:0.000
##  Mode  :character   Mode  :character    Median : 2.000    Median :1.000
##                                         Mean   : 1.811    Mean   :1.022
##                                         3rd Qu.: 3.000    3rd Qu.:2.000
##                                         Max.   :10.000    Max.   :7.000
##
##  Away.Team.Name     Win.conditions       Attendance      Half.time.Home.Goals
##  Length:852         Length:852          Min.   :  2000    Min.   :0.0000
##  Class :character   Class :character    1st Qu.: 30000    1st Qu.:0.0000
##  Mode  :character   Mode  :character    Median : 41580    Median :0.0000
##                                         Mean   : 45165    Mean   :0.7089
##                                         3rd Qu.: 61375    3rd Qu.:1.0000
##                                         Max.   :173850    Max.   :6.0000
##                                         NA's   :2
##  Half.time.Away.Goals   Referee          Assistant.1         Assistant.2
##  Min.   :0.0000       Length:852         Length:852          Length:852
##  1st Qu.:0.0000       Class :character   Class :character    Class :character
##  Median :0.0000       Mode  :character   Mode  :character     Mode  :character
##  Mean   :0.4284
##  3rd Qu.:1.0000
##  Max.   :5.0000
##
##     RoundID            MatchID          Home.Team.Initials Away.Team.Initials
##  Min.   :     201   Min.   :       25   Length:852         Length:852
##  1st Qu.:     262   1st Qu.:     1189   Class :character   Class :character
##  Median :     337   Median :     2191   Mode  :character   Mode  :character
##  Mean   :10661773   Mean   : 61346868
##  3rd Qu.:  249722   3rd Qu.: 43950059
##  Max.   :97410600   Max.   :300186515
##
```

2c) Find how many unique locations

```
library(dplyr)
n_distinct(wc$City)
```

```
## [1] 151
```

2d) Find the average attendance

```
df = wc[is.na(wc['Attendance'])==F, ]
mean(df$Attendance)
```

```
## [1] 45164.8
```

2e) For each Home Team, what is the total number of goals scored?

```
library(dplyr)
wc %>% group_by(Home.Team.Name) %>% summarise(goals=sum(Home.Team.Goals))
```

```
## # A tibble: 78 x 2
##     Home.Team.Name goals
##     <chr>          <int>
##  1 Algeria             5
##  2 Angola              0
##  3 Argentina         111
##  4 Australia           7
##  5 Austria            31
##  6 Belgium            27
##  7 Bolivia             1
##  8 Brazil            180
##  9 Bulgaria           11
## 10 Cameroon           11
## # i 68 more rows
```

2f) What is the average number of attendees for each year? Is there a pattern in the data in that sense?

```
library(dplyr)
wc %>% group_by(Year) %>% summarise(average_attendance = mean(Attendance))
```

```
## # A tibble: 20 x 2
##      Year average_attendance
##     <int>              <dbl>
##  1  1930              32808.
##  2  1934              21353.
##  3  1938              20872.
##  4  1950              47511.
##  5  1954              29562.
##  6  1958              23423.
##  7  1962              27912.
##  8  1966              48848.
##  9  1970              50124.
## 10  1974              49099.
```

```
## 11   1978              40679.
## 12   1982              40572.
## 13   1986              46039.
## 14   1990              48389.
## 15   1994              68991.
## 16   1998              43517.
## 17   2002              42269.
## 18   2006              52491.
## 19   2010              49670.
## 20   2014                  NA
```

Read in metabolite.csv

```
meta = read.csv("C:/Users/Matthew/OneDrive - Umich/Documents/metabolite.csv", header=T)
head(meta)
```

```
##         Label  Phe Pro Ser Thr ADMA alpha.AAA c4.OH.Pro Carnosine Creatinine
## 1 Alzheimer 72.8 166 170 282 1.15     0.760     0.236     1.270       49.9
## 2 Alzheimer 93.4 138 142 217 1.05     0.929     0.189     1.350       48.8
## 3 Alzheimer 68.6 161 158 208 1.00     0.620     0.198     0.998       30.4
## 4 Alzheimer 94.1 129 162 201 1.10     0.795        NA     0.675       80.1
## 5 Alzheimer 79.8 126 115 199 1.24     1.360        NA     1.280       60.5
## 6 Alzheimer 82.5 167 173 333 1.35     1.150        NA     1.010       24.0
##    DOPA Dopamine Histamine Kynurenine Met.SO Nitro.Tyr PEA Putrescine Sarcosine
## 1 0.265    0.233     0.225       5.21  0.526     0.027  NA      0.068      17.8
## 2 0.252       NA     0.211       5.44  0.387        NA  NA      0.087      20.2
## 3 0.268       NA     0.217       5.20  0.651        NA  NA      0.260      14.4
## 4 0.264    0.234     0.209       5.80  0.389        NA  NA      0.110      18.7
## 5 0.271    0.231     0.210       4.46  0.466        NA  NA      0.118      22.5
## 6 0.275       NA     0.212       7.01  0.417        NA  NA      0.262      30.8
##    Serotonin Spermidine Spermine t4.OH.Pro Taurine SDMA   C0   C10 C10.1 C10.2
## 1     0.147      0.188       NA      24.0     125 1.13 18.2 0.059 0.312 0.038
## 2     0.231      0.233       NA      29.3     120 1.65 17.0 0.051 0.288 0.039
## 3     0.196      0.384       NA      20.9     139 1.57 12.6 0.083 0.357 0.054
## 4     0.255      0.353       NA      23.1     159 1.34 23.5 0.071 0.317 0.040
## 5     0.390      0.473       NA      26.9     149 1.24 13.6 0.139 0.472 0.074
## 6     0.140      0.856     1.28      26.0     379 1.44 26.7 0.058 0.238 0.042
##     C12 C12.DC C12.1   C14 C14.1 C14.1.OH C14.2 C14.2.OH   C16 C16.OH C16.1
## 1 0.030  0.042 0.290 0.023 0.019    0.008 0.008    0.006 0.046  0.008 0.009
## 2 0.038  0.038 0.265 0.026 0.017    0.008 0.009    0.009 0.070  0.009 0.013
## 3 0.032  0.048 0.302 0.021 0.031    0.010 0.010    0.009 0.076  0.011 0.019
## 4 0.045  0.048 0.275 0.026 0.028    0.010 0.013    0.011 0.074  0.011 0.015
## 5 0.056  0.079 0.394 0.034 0.043    0.016 0.025    0.017 0.062     NA 0.024
## 6 0.039  0.035 0.196 0.029 0.023    0.009 0.010    0.007 0.081  0.006 0.012
##   C16.1.OH C16.2 C16.2.OH   C18 C18.1 C18.1.OH C18.2   C2    C3 C3.OH C3.1
## 1    0.007 0.005    0.013 0.013 0.024    0.003 0.016 1.97 0.354 0.008 0.015
## 2    0.006 0.006    0.012 0.014 0.025    0.003 0.028 1.95 0.184 0.009 0.013
## 3    0.010 0.005    0.013 0.016 0.025       NA 0.018 1.70 0.371    NA 0.012
## 4    0.008 0.006    0.009 0.020 0.035    0.004 0.033 2.10 0.278 0.010 0.017
## 5    0.014 0.012    0.025 0.031 0.034    0.012 0.017 5.62 0.436 0.029 0.035
## 6    0.005 0.007    0.015 0.017 0.035    0.004 0.029 3.49 0.461 0.008 0.014
##     C4 C3.DC..C4.OH.  C4.1    C5 C5.M.DC C5.OH..C3.DC.M.  C5.1 C5.1.DC
## 1 0.082         0.045 0.025 0.094   0.023           0.026 0.030   0.020
```

```
## 2 0.108          0.080 0.025 0.077   0.032          0.026 0.024   0.021
## 3 0.057          0.035 0.039 0.096   0.045          0.024 0.037   0.018
## 4 0.110          0.077 0.031 0.145   0.034          0.041 0.035   0.016
## 5 0.106          0.099 0.069 0.141   0.094          0.058 0.073   0.049
## 6 0.123          0.068 0.026 0.090   0.019          0.037 0.022   0.016
##   C6..C4.1.DC. C5.DC..C6.OH.  C6.1 C7.DC    C8    C9 lysoPC.a.C14.0
## 1        0.022         0.014 0.018 0.011 0.062 0.016           2.23
## 2        0.030         0.018 0.015 0.010 0.058 0.014           1.97
## 3        0.022         0.029 0.031 0.021 0.090 0.017           2.12
## 4        0.029         0.016 0.027 0.017 0.091 0.018           2.19
## 5        0.052         0.040 0.040 0.036 0.192 0.041           1.88
## 6        0.063         0.016 0.019 0.014 0.073 0.014           2.11
##   lysoPC.a.C16.0 lysoPC.a.C16.1 lysoPC.a.C17.0 lysoPC.a.C18.0 lysoPC.a.C18.1
## 1           37.9           2.66          0.446           9.00           8.58
## 2           22.1           1.31          0.270           5.35           3.94
## 3           33.7           2.53          0.399           7.51           7.73
## 4           32.8           2.39          0.323           7.21           7.22
## 5           24.5           1.27          0.382           6.66           5.39
## 6           29.1           2.09          0.348           5.84           6.30
##   lysoPC.a.C18.2 lysoPC.a.C20.3 lysoPC.a.C20.4 lysoPC.a.C24.0 lysoPC.a.C26.0
## 1           7.27          1.830           8.25          0.079          0.113
## 2           4.42          0.958           4.60          0.059          0.066
## 3           8.02          2.050           9.84          0.075          0.126
## 4           7.62          1.640           6.75          0.066          0.086
## 5           3.60          0.970           6.26          0.084          0.118
## 6           8.10          1.970           7.04          0.083          0.112
##   lysoPC.a.C26.1 lysoPC.a.C28.0 lysoPC.a.C28.1 PC.aa.C24.0 PC.aa.C26.0
## 1          0.053          0.108          0.072       0.082       0.438
## 2          0.042          0.076          0.058       0.065       0.409
## 3          0.049          0.078          0.092       0.099       0.458
## 4          0.045          0.076          0.076       0.076       0.486
## 5          0.053          0.092          0.072       0.069       0.401
## 6          0.050          0.099          0.083       0.073       0.450
##   PC.aa.C28.1 PC.aa.C30.0 PC.aa.C32.0 PC.aa.C32.1 PC.aa.C32.2 PC.aa.C32.3
## 1       0.571        2.35        11.4        9.22          NA       0.092
## 2       0.521        1.99        12.7        5.40          NA       0.067
## 3       0.605        2.69        16.6       11.60          NA       0.105
## 4       0.685        3.33        18.6       13.30       0.053       0.079
## 5       0.513        1.78        13.8        5.03          NA       0.102
## 6       0.620        2.61        14.7        8.98          NA       0.107
##   PC.aa.C34.1 PC.aa.C34.2 PC.aa.C34.3 PC.aa.C34.4 PC.aa.C36.0 PC.aa.C36.1
## 1       109.0        71.0       1.430       0.200        2.38        21.7
## 2        64.2        60.5       0.879       0.127        2.05        14.3
## 3       108.0        83.1       1.930       0.210        2.30        19.9
## 4       106.0        93.6       1.590       0.190        2.57        20.9
## 5        83.4        35.9       0.709       0.135        1.83        20.5
## 6        90.2        85.6       1.790       0.213        2.48        15.5
##   PC.aa.C36.2 PC.aa.C36.3 PC.aa.C36.4 PC.aa.C36.5 PC.aa.C36.6 PC.aa.C38.0
## 1        42.4        42.7       120.0        1.86       0.084       1.230
## 2        35.6        24.3        83.7        1.05       0.046       0.946
## 3        44.9        43.9       146.0        2.09       0.057       1.210
## 4        48.8        41.2       122.0        1.76       0.070       1.160
## 5        28.5        21.9        98.1        1.70       0.048       1.100
## 6        43.2        46.0       114.0        3.47       0.103       1.390
```

```
##    PC.aa.C38.3 PC.aa.C38.4 PC.aa.C38.5 PC.aa.C38.6 PC.aa.C40.1 PC.aa.C40.2
## 1         32.1        95.1       16.80        41.6       0.195       0.074
## 2         21.9        78.9        9.91        25.1       0.211       0.057
## 3         34.5       107.0       17.50        36.6       0.212       0.118
## 4         28.7        92.7       14.30        29.9       0.220       0.097
## 5         23.3       101.0       13.80        36.2       0.165       0.044
## 6         28.9        78.0       13.10        48.4       0.205       0.120
##    PC.aa.C40.3 PC.aa.C40.4 PC.aa.C40.5 PC.aa.C40.6 PC.aa.C42.0 PC.aa.C42.1
## 1        0.491        3.48        5.66        21.8       0.364       0.226
## 2        0.358        3.39        4.08        14.2       0.419       0.216
## 3        0.395        3.56        5.34        16.7       0.476       0.281
## 4        0.433        3.59        5.06        14.0       0.427       0.223
## 5        0.525        3.37        5.29        22.5       0.125       0.095
## 6        0.346        2.63        3.25        18.9       0.451       0.233
##    PC.aa.C42.2 PC.aa.C42.4 PC.aa.C42.5 PC.aa.C42.6 PC.ae.C30.0 PC.ae.C30.1
## 1        0.108       0.272       0.272       0.291       0.173       0.027
## 2        0.109       0.336       0.317       0.248       0.147       0.024
## 3        0.118       0.300       0.206       0.267       0.209       0.046
## 4        0.119       0.268       0.267       0.254       0.223       0.049
## 5        0.083       0.206       0.205       0.280       0.095       0.082
## 6        0.135       0.228       0.254       0.271       0.221       0.039
##    PC.ae.C30.2 PC.ae.C32.1 PC.ae.C32.2 PC.ae.C34.0 PC.ae.C34.1 PC.ae.C34.2
## 1        0.022        1.65       0.371       0.880        3.66        2.48
## 2        0.020        2.01       0.360       0.763        2.68        2.32
## 3        0.030        2.40       0.477       0.938        4.04        2.95
## 4        0.023        2.47       0.459       0.964        4.06        3.09
## 5        0.023        1.72       0.316       1.060        3.28        1.70
## 6        0.029        2.01       0.397       0.920        3.26        2.58
##    PC.ae.C34.3 PC.ae.C36.0 PC.ae.C36.1 PC.ae.C36.2 PC.ae.C36.3 PC.ae.C36.4
## 1        0.813       0.498        5.64        1.90       1.170        6.96
## 2        0.905       0.398        3.89        1.54       0.873        6.40
## 3        1.030       0.554        5.95        2.29       1.240        9.05
## 4        1.020       0.552        4.75        2.01       1.350        8.36
## 5        0.722       0.553        5.95        1.47       0.760        4.78
## 6        1.000       0.443        4.95        2.05       1.170        7.04
##    PC.ae.C36.5 PC.ae.C38.0 PC.ae.C38.1 PC.ae.C38.2 PC.ae.C38.3 PC.ae.C38.4
## 1         4.79       0.474       0.287       0.538        2.66        6.33
## 2         5.36       0.325          NA       0.127        1.80        5.37
## 3         6.63       0.478       0.285       0.154        2.87        7.06
## 4         5.97       0.397       0.022       0.144        1.97        5.99
## 5         4.00       0.430       0.271       0.246        1.80        5.45
## 6         4.47       0.590          NA       0.312        2.46        5.55
##    PC.ae.C38.5 PC.ae.C38.6 PC.ae.C40.1 PC.ae.C40.2 PC.ae.C40.3 PC.ae.C40.4
## 1         5.51        1.95       0.574       0.575       0.940        1.76
## 2         4.49        1.63       0.281       0.491       0.702        1.43
## 3         5.64        1.98       0.759       0.654       0.817        1.51
## 4         5.63        1.97       0.425       0.540       0.742        1.45
## 5         4.34        1.51       0.430       0.432       0.632        1.10
## 6         4.60        1.80       0.481       0.598       0.826        1.25
##    PC.ae.C40.5 PC.ae.C40.6 PC.ae.C42.0 PC.ae.C42.1 PC.ae.C42.2 PC.ae.C42.3
## 1         1.77        1.59       0.629       0.316       0.192       0.277
## 2         1.55        1.20       0.616       0.260       0.157       0.200
## 3         1.64        1.49       0.686       0.356       0.241       0.288
## 4         1.62        1.25       0.637       0.299       0.159       0.208
```

```
## 5          1.25          1.47         0.660         0.355         0.138         0.174
## 6          1.38          1.61         0.669         0.265         0.195         0.253
##   PC.ae.C42.4 PC.ae.C42.5 PC.ae.C44.3 PC.ae.C44.4 PC.ae.C44.5 PC.ae.C44.6
## 1       0.264       0.888       0.065       0.168       0.536       0.494
## 2       0.311       0.840       0.071       0.220       0.470       0.515
## 3       0.319       0.957       0.065       0.228       0.565       0.603
## 4       0.392       0.863       0.069       0.237       0.517       0.611
## 5       0.162       0.513       0.081       0.154       0.178       0.134
## 6       0.316       0.814       0.085       0.232       0.554       0.539
##   SM..OH..C14.1 SM..OH..C16.1 SM..OH..C22.1 SM..OH..C22.2 SM..OH..C24.1
## 1         1.420          1.33          2.07          1.86         0.597
## 2         1.390          1.25          2.47          2.20         0.640
## 3         1.840          1.58          2.69          2.63         0.665
## 4         1.720          1.48          2.97          2.84         0.682
## 5         0.987          1.48          1.96          1.74         0.478
## 6         1.320          1.12          2.51          2.16         0.640
##   SM.C16.0 SM.C16.1 SM.C18.0 SM.C18.1 SM.C20.2 SM.C24.0 SM.C24.1 SM.C26.0
## 1     44.9     7.99     14.5    10.40    0.290    12.20     27.3    0.147
## 2     42.1     6.88     12.7     8.52    0.211    10.40     25.6    0.130
## 3     44.8     8.91     14.6    11.60    0.304    11.50     28.8    0.163
## 4     52.4     8.61     17.2    11.50    0.261    11.80     27.9    0.138
## 5     40.6     5.86     13.0     8.34    0.196     9.29     20.5    0.111
## 6     42.6     8.49     13.0    10.60    0.270     9.58     23.7    0.135
##   SM.C26.1 H1_1   H1 Urea_N L.Arginine_N L.Leucine_N EDTAca_N
## 1    0.337 3356 3356     NA           NA          NA       NA
## 2    0.317 2509 2509  201.9         22.5        35.3      2.0
## 3    0.364 2661 2661  193.3         21.0        25.4      1.8
## 4    0.353 2652 2652  500.8         16.0        27.1      2.5
## 5    0.283 2258 2258  132.5         13.2        57.9      2.5
## 6    0.316 3031 3031  193.3         32.2        26.5      0.0
##   X2.Hydroxybutyrate X3.Hydroxybutyrate Acetate Acetoacetate Acetone Betaine
## 1                 NA                 NA      NA           NA      NA      NA
## 2              12.40                8.5    13.2          5.7     5.1    22.0
## 3              11.33               11.7     5.8          9.3     5.6    19.1
## 4              12.70                7.2     9.8          4.8     4.0    13.9
## 5              35.20               44.7    20.2         18.9    18.9    33.9
## 6              17.20               16.0    23.6          7.8     5.5    16.9
##   Carnitine Choline Creatine Dimethyl.sulfone Ethanol Formate Glucose Glycerol
## 1        NA      NA       NA               NA      NA      NA      NA       NA
## 2       8.7    14.2     14.5              4.7    16.6    24.6  1489.7    324.6
## 3      15.3    14.5     17.8              2.1     8.1    27.4  1343.9    201.3
## 4       7.7    11.8     14.7              1.3     6.4    14.4   629.5    322.0
## 5      18.5    27.7     35.4              5.5    13.0    40.0  1618.0    271.6
## 6      16.7    25.9     18.6              3.4     5.0    35.5  1791.8    274.2
##   Hypoxanthine Isobutyrate Isopropanol Lactate Malonate
## 1           NA          NA          NA      NA       NA
## 2          6.3         3.6         1.9  1171.6     10.4
## 3          6.0         2.5         2.5  1938.1     13.1
## 4          8.6         2.5         4.4  1037.7      7.6
## 5          0.0         6.1        11.2  2199.9     11.7
## 6          8.8         2.3         2.4  1486.7     11.8
```

3a) Find how many Alzheimer patients there are in the data set

```r
meta %>% group_by(Label) %>% summarise(num_alz = sum(Label == 'Alzheimer'))
```

```
## # A tibble: 2 x 2
##   Label     num_alz
##   <chr>       <int>
## 1 Alzheimer      35
## 2 Healthy         0
```

3b) Determine the number of missing values for each column

```r
colSums(is.na(meta))
```

```
##             Label              Phe              Pro              Ser
##                 0                0                0                0
##               Thr             ADMA        alpha.AAA        c4.OH.Pro
##                 0                0                0               20
##         Carnosine        Creatinine             DOPA         Dopamine
##                 1                0                0               20
##         Histamine        Kynurenine           Met.SO         Nitro.Tyr
##                 0                0                1               62
##               PEA        Putrescine        Sarcosine        Serotonin
##                69                0                0                0
##         Spermidine          Spermine         t4.OH.Pro          Taurine
##                 0               60                0                2
##              SDMA                C0              C10            C10.1
##                 0                0                0                0
##             C10.2               C12           C12.DC            C12.1
##                 0                0                1                0
##               C14             C14.1         C14.1.OH            C14.2
##                 0                0                1                0
##          C14.2.OH               C16           C16.OH            C16.1
##                 2                0                1                0
##          C16.1.OH             C16.2         C16.2.OH              C18
##                 2                2                1                0
##             C18.1         C18.1.OH            C18.2               C2
##                 0                7                0                0
##                C3             C3.OH             C3.1               C4
##                 0                8                2                0
##     C3.DC..C4.OH.             C4.1               C5          C5.M.DC
##                 0                0                0                1
##    C5.OH..C3.DC.M.             C5.1           C5.1.DC     C6..C4.1.DC.
##                 0                5                2                0
##      C5.DC..C6.OH.             C6.1            C7.DC               C8
##                 4                2                1                0
##                C9     lysoPC.a.C14.0   lysoPC.a.C16.0   lysoPC.a.C16.1
##                 1                0                0                0
##    lysoPC.a.C17.0    lysoPC.a.C18.0   lysoPC.a.C18.1   lysoPC.a.C18.2
##                 0                0                0                0
##    lysoPC.a.C20.3    lysoPC.a.C20.4   lysoPC.a.C24.0   lysoPC.a.C26.0
##                 0                0                0                0
##    lysoPC.a.C26.1    lysoPC.a.C28.0   lysoPC.a.C28.1      PC.aa.C24.0
##                 0                0                0                0
```

```
##        PC.aa.C26.0        PC.aa.C28.1        PC.aa.C30.0        PC.aa.C32.0
##                 0                  0                  0                  0
##        PC.aa.C32.1        PC.aa.C32.2        PC.aa.C32.3        PC.aa.C34.1
##                 0                 47                  0                  0
##        PC.aa.C34.2        PC.aa.C34.3        PC.aa.C34.4        PC.aa.C36.0
##                 0                  0                  0                  0
##        PC.aa.C36.1        PC.aa.C36.2        PC.aa.C36.3        PC.aa.C36.4
##                 0                  0                  0                  0
##        PC.aa.C36.5        PC.aa.C36.6        PC.aa.C38.0        PC.aa.C38.3
##                 0                  0                  0                  0
##        PC.aa.C38.4        PC.aa.C38.5        PC.aa.C38.6        PC.aa.C40.1
##                 0                  0                  0                  0
##        PC.aa.C40.2        PC.aa.C40.3        PC.aa.C40.4        PC.aa.C40.5
##                 0                  0                  0                  0
##        PC.aa.C40.6        PC.aa.C42.0        PC.aa.C42.1        PC.aa.C42.2
##                 0                  0                  0                  0
##        PC.aa.C42.4        PC.aa.C42.5        PC.aa.C42.6        PC.ae.C30.0
##                 0                  0                  0                  0
##        PC.ae.C30.1        PC.ae.C30.2        PC.ae.C32.1        PC.ae.C32.2
##                10                  0                  0                  0
##        PC.ae.C34.0        PC.ae.C34.1        PC.ae.C34.2        PC.ae.C34.3
##                 0                  0                  0                  0
##        PC.ae.C36.0        PC.ae.C36.1        PC.ae.C36.2        PC.ae.C36.3
##                 0                  0                  0                  0
##        PC.ae.C36.4        PC.ae.C36.5        PC.ae.C38.0        PC.ae.C38.1
##                 0                  0                  0                 52
##        PC.ae.C38.2        PC.ae.C38.3        PC.ae.C38.4        PC.ae.C38.5
##                19                  0                  0                  0
##        PC.ae.C38.6        PC.ae.C40.1        PC.ae.C40.2        PC.ae.C40.3
##                 0                  0                  0                  0
##        PC.ae.C40.4        PC.ae.C40.5        PC.ae.C40.6        PC.ae.C42.0
##                 0                  0                  0                  0
##        PC.ae.C42.1        PC.ae.C42.2        PC.ae.C42.3        PC.ae.C42.4
##                 0                  1                  0                  0
##        PC.ae.C42.5        PC.ae.C44.3        PC.ae.C44.4        PC.ae.C44.5
##                 0                  0                  0                  0
##        PC.ae.C44.6        SM..OH..C14.1      SM..OH..C16.1      SM..OH..C22.1
##                 0                  0                  0                  0
##      SM..OH..C22.2        SM..OH..C24.1          SM.C16.0           SM.C16.1
##                 0                  0                  0                  0
##          SM.C18.0           SM.C18.1           SM.C20.2           SM.C24.0
##                 0                  0                  0                  0
##          SM.C24.1           SM.C26.0           SM.C26.1               H1_1
##                 0                  0                  0                  0
##                H1             Urea_N        L.Arginine_N       L.Leucine_N
##                 0                  1                  1                  1
##         EDTAca_N X2.Hydroxybutyrate X3.Hydroxybutyrate            Acetate
##                 1                  1                  1                  1
##       Acetoacetate            Acetone            Betaine          Carnitine
##                 1                  1                  1                  1
##           Choline           Creatine    Dimethyl.sulfone            Ethanol
##                 1                  1                  1                  2
##           Formate            Glucose           Glycerol       Hypoxanthine
##                 2                  1                  1                  1
```

```
##         Isobutyrate        Isopropanol          Lactate          Malonate
##                 1                   1                1                 1
```

3c) Remove the rows which has missing value for the Dopamine column and assign the result to a new data frame

```
meta2 = meta[is.na(meta['Dopamine'])==F, ]
```

3d) In the new data frame, replace the missing values in the c4-OH-Pro column with the median value of the same column

```
meta2$c4.OH.Pro[is.na(meta2$c4.OH.Pro)] <- median(meta2$c4.OH.Pro, na.rm=TRUE)
```

3e) Drop Columns which have more than 25% missing values

```
meta2[, which(colMeans(!is.na(meta2)) > 0.25)]
```

```
##          Label   Phe   Pro   Ser Thr  ADMA alpha.AAA c4.OH.Pro Carnosine
## 1    Alzheimer  72.8 166.0 170.0 282 1.150     0.760     0.236     1.270
## 4    Alzheimer  94.1 129.0 162.0 201 1.100     0.795     0.199     0.675
## 5    Alzheimer  79.8 126.0 115.0 199 1.240     1.360     0.199     1.280
## 8      Healthy  83.6 119.0 135.0 268 1.180     0.779     0.215     0.647
## 9      Healthy  73.7 124.0 145.0 307 1.170     0.785     0.186     0.590
## 10     Healthy  81.5 151.0 174.0 269 1.300     0.767     0.185     1.130
## 12     Healthy  89.0 159.0 193.0 346 1.680     1.040     0.215     1.060
## 13     Healthy  81.5 145.0 168.0 271 1.160     0.890     0.237     0.480
## 15     Healthy  65.0 161.0 139.0 314 1.570     1.060     0.215     0.841
## 16     Healthy  74.2  99.3 193.0 322 1.760     1.040     0.192     1.100
## 17     Healthy  92.5 150.0 143.0 220 1.360     1.050     0.199     2.280
## 18     Healthy  75.8 120.0 198.0 283 1.120     0.711     0.199     0.627
## 19   Alzheimer  76.0 118.0 141.0 274 1.080     0.838     0.215     0.953
## 20     Healthy  63.2 115.0 150.0 256 1.680     0.682     0.185     1.060
## 21     Healthy  74.2 134.0 163.0 258 1.020     0.835     0.193     1.700
## 22     Healthy  80.4 101.0 142.0 229 1.550     1.000     0.224     2.200
## 24     Healthy  66.7 118.0 160.0 265 1.390     0.800     0.221     1.220
## 25     Healthy  68.3 137.0 199.0 228 1.510     0.872     0.184     2.420
## 26     Healthy  74.1 114.0 162.0 314 1.300     0.945     0.199     0.943
## 27     Healthy  71.5 104.0 150.0 281 1.170     0.916     0.199     1.940
## 29     Healthy  83.8 121.0 183.0 210 1.220     0.776     0.199     0.939
## 30     Healthy  80.7 103.0 155.0 189 1.040     0.658     0.199     1.290
## 32     Healthy  84.1 145.0 161.0 294 1.560     0.853     0.235     1.300
## 33     Healthy  76.0 111.0 156.0 331 1.160     0.806     0.209     0.315
## 34     Healthy  62.3 131.0 142.0 225 1.140     0.787     0.183     1.280
## 36     Healthy  82.1 118.0 186.0 330 1.240     0.751     0.195     0.711
## 37     Healthy  64.9 115.0 183.0 251 1.070     0.701     0.192     0.605
## 40   Alzheimer  90.1 133.0 160.0 241 1.630     1.140     0.232     1.330
## 41   Alzheimer  79.8 119.0 120.0 243 1.310     0.800     0.216     2.440
## 42     Healthy  79.5 127.0 172.0 223 1.210     0.747     0.267     0.667
## 43   Alzheimer  83.5 118.0 172.0 212 1.070     0.853     0.188     1.110
## 44   Alzheimer  85.3 135.0 182.0 214 1.100     0.918     0.199     1.000
## 49     Healthy  66.9 166.0 208.0 258 1.110     0.830     0.199     0.837
## 51   Alzheimer  72.9 147.0 135.0 169 1.060     0.900     0.248     0.396
```

```
## 53 Alzheimer  62.0 108.0 132.0 207 1.290      0.801      0.199      1.260
## 54 Alzheimer  93.3 102.0 158.0 215 1.270      0.972      0.199      0.006
## 56 Alzheimer  86.8 135.0 164.0 195 1.330      0.901      0.199      0.895
## 57 Alzheimer  78.2 193.0 275.0 553 0.714      0.955      0.182      1.130
## 58 Alzheimer  73.0 103.0 191.0 309 1.410      0.712      0.199      0.570
## 59 Alzheimer  70.5 124.0 171.0 336 1.390      1.160      0.203      0.324
## 60 Alzheimer  91.6 159.0 190.0 271 1.430      0.902      0.186      0.941
## 61 Alzheimer  55.1 148.0 171.0 251 1.120      0.695      0.235      1.030
## 62 Alzheimer  47.7  54.0 109.0 156 0.315      0.339      0.177      0.003
## 63 Alzheimer  76.5 107.0  93.2 220 0.388      1.210      0.199         NA
## 64 Alzheimer  79.7 143.0 190.0 199 1.150      1.530      0.199      0.521
## 65 Alzheimer 170.0 164.0 206.0 231 1.560      1.160      0.193      0.316
## 67 Alzheimer  98.9 146.0 219.0 325 1.030      1.310      0.185      1.260
## 68 Alzheimer 104.0 166.0 169.0 227 1.280      2.160      0.189      0.274
## 69 Alzheimer  89.1 145.0 211.0 235 1.330      1.980      0.199      0.076
##    Creatinine  DOPA Dopamine Histamine Kynurenine Met.SO Putrescine Sarcosine
## 1        49.9 0.265    0.233     0.225      5.210  0.526      0.068     17.80
## 4        80.1 0.264    0.234     0.209      5.800  0.389      0.110     18.70
## 5        60.5 0.271    0.231     0.210      4.460  0.466      0.118     22.50
## 8        30.6 0.275    0.244     0.214      5.660  0.245      0.161     23.30
## 9        39.8 0.259    0.233     0.210      6.360  0.413      0.121     22.10
## 10       44.0 0.257    0.225     0.210      5.690  0.178      0.183     18.50
## 12       53.8 0.266    0.240     0.214      6.040  0.383      0.244     24.20
## 13       29.7 0.246    0.239     0.211      5.660  0.273      0.230     20.90
## 15       82.4 0.259    0.231     0.209      5.540  0.404      0.132     26.30
## 16       32.9 0.260    0.236     0.214      6.710  0.284      0.137     21.40
## 17       72.2 0.267    0.235     0.210      6.040  0.451      0.154     22.60
## 18       35.1 0.263    0.233     0.210      5.840  0.399      0.092     21.00
## 19       95.3 0.246    0.234     0.211      6.580  0.434      0.173     19.40
## 20       38.4 0.243    0.228     0.212      5.890  0.417      0.102     24.80
## 21       39.9 0.240    0.229     0.230      4.220  0.335      0.132     24.00
## 22       33.6 0.261    0.227     0.216      3.910  0.380      0.278     22.70
## 24       37.8 0.248    0.231     0.212      5.640  0.406      0.229     21.40
## 25       30.8 0.251    0.227     0.216      5.140  0.326      0.205     19.10
## 26       34.0 0.263    0.226     0.213      7.310  0.398      0.250     20.90
## 27       33.5 0.240    0.235     0.211      6.600  0.224      0.173     14.60
## 29       34.6 0.253    0.236     0.217      6.490  0.357      0.167     24.50
## 30       33.6 0.253    0.225     0.210      4.850  0.276      0.131     15.30
## 32       34.3 0.249    0.231     0.211      6.200  0.347      0.163     22.50
## 33       34.1 0.263    0.229     0.209      6.710  0.261      0.347     19.70
## 34       29.1 0.252    0.232     0.210      4.490  0.180      0.107     16.90
## 36       40.9 0.249    0.240     0.216      7.210  0.231      0.356     21.00
## 37       31.6 0.237    0.235     0.210      5.000  0.263      0.209     12.90
## 40       38.5 0.244    0.229     0.211      4.150  0.258      0.095     38.50
## 41       39.7 0.244    0.235     0.212      5.280  0.181      0.074     17.10
## 42       35.8 0.241    0.229     0.211      6.580  0.338      0.105     21.60
## 43       34.5 0.248    0.224     0.221      5.390  0.238      0.143     17.20
## 44       49.9 0.251    0.256     0.223      4.800  0.370      0.218     21.90
## 49       34.3 0.242    0.228     0.213      5.580  0.362      0.067     18.40
## 51       99.7 0.227    0.231     0.209      3.970  0.346      0.014     23.50
## 53       58.1 0.232    0.237     0.210      4.010  0.095      0.110     17.10
## 54       60.7 0.247    0.236     0.211      5.130  0.227      0.034     28.00
## 56       90.5 0.233    0.225     0.211      3.840  0.394      0.108     20.60
## 57      102.0 0.250    0.236     0.209      5.500  0.639      0.018     26.70
```

```
## 58         57.8 0.247    0.235    0.212     6.040 0.213     0.106     17.80
## 59         99.0 0.227    0.231    0.211     3.890 0.247     0.247     29.90
## 60        108.0 0.239    0.230    0.210     3.530 0.410     0.107     30.90
## 61         71.4 0.231    0.230    0.209     4.960 0.230     0.053     15.80
## 62         44.3 0.212    0.234    0.208     0.505 0.063     3.020      8.81
## 63         85.9 0.216    0.231    0.208     1.430 0.488     3.530     19.50
## 64         74.5 0.235    0.228    0.211     6.130 0.290     0.048     22.10
## 65         91.9 0.235    0.230    0.212     4.580 0.398     0.185     40.00
## 67         80.9 0.220    0.230    0.212     3.980 0.389     0.175     27.10
## 68         82.7 0.221    0.248    0.211     3.900 0.234    52.900     17.70
## 69         73.0 0.228    0.234    0.216     3.540    NA     0.341     33.30
##    Serotonin Spermidine t4.OH.Pro Taurine  SDMA    C0  C10 C10.1 C10.2   C12
## 1      0.147      0.188     24.00   125.0 1.130 18.20 0.059 0.312 0.038 0.030
## 4      0.255      0.353     23.10   159.0 1.340 23.50 0.071 0.317 0.040 0.045
## 5      0.390      0.473     26.90   149.0 1.240 13.60 0.139 0.472 0.074 0.056
## 8      0.215      0.276     10.70   133.0 1.040 13.30 0.051 0.217 0.030 0.041
## 9      0.166      0.327     16.00   215.0 1.240 15.80 0.061 0.258 0.036 0.037
## 10     0.320      0.236     27.90   140.0 1.840 15.60 0.068 0.319 0.041 0.039
## 12     0.383      0.056     19.20   186.0 1.660 20.70 0.063 0.249 0.037 0.035
## 13     0.223      0.508     16.40   318.0 1.220 19.60 0.064 0.239 0.033 0.039
## 15     0.178      0.299     20.30   134.0 1.950 21.60 0.097 0.322 0.054 0.055
## 16     0.225      0.238     16.80   148.0 1.890 17.40 0.059 0.230 0.034 0.034
## 17     0.327      0.433     32.40   254.0 1.900 21.50 0.076 0.310 0.038 0.049
## 18     0.098      0.377     16.10   169.0 1.520 15.20 0.059 0.299 0.038 0.030
## 19     0.218      0.303     19.20   134.0 1.980 17.90 0.059 0.248 0.043 0.043
## 20     0.207      0.326     18.60   127.0 2.240 15.60 0.067 0.273 0.043 0.043
## 21     0.126      0.048     20.20   180.0 1.560 13.70 0.068 0.187 0.029 0.041
## 22     0.324      0.351     21.10   150.0 1.480 10.80 0.072 0.247 0.037 0.027
## 24     0.190      0.288     17.50   180.0 1.930 12.20 0.061 0.219 0.041 0.032
## 25     0.319      0.382     18.60   235.0 1.720 15.30 0.061 0.328 0.035 0.039
## 26     0.117      0.493     20.30   223.0 1.270 12.30 0.059 0.323 0.041 0.038
## 27     0.249      0.257     19.60   145.0 1.540 15.80 0.062 0.267 0.034 0.031
## 29     0.205      0.316     13.10   150.0 1.380 16.60 0.059 0.137 0.036 0.035
## 30     0.225      0.050     16.50   134.0 1.580 10.70 0.050 0.097 0.028 0.032
## 32     0.149      0.378     16.30   188.0 2.730 13.00 0.078 0.278 0.060 0.045
## 33     0.271      0.577     13.40   178.0 1.390 17.80 0.055 0.229 0.031 0.041
## 34     0.266      0.248     15.40   175.0 1.210 15.10 0.054 0.265 0.029 0.035
## 36     0.287      0.553     15.90   341.0 1.390 13.90 0.073 0.386 0.041 0.038
## 37     0.254      0.218     19.50   150.0 1.310 13.40 0.077 0.319 0.057 0.033
## 40     0.321      0.523     20.10   292.0 1.840 20.40 0.068 0.266 0.025 0.042
## 41     0.088      0.341     25.30   182.0 1.650 19.20 0.062 0.298 0.035 0.043
## 42     0.443      0.255     15.90   147.0 1.560 17.10 0.063 0.331 0.027 0.034
## 43     0.212      0.337     17.40   157.0 1.430 18.30 0.110 0.594 0.073 0.056
## 44     0.140      0.226     20.30   113.0 3.370 18.20 0.072 0.288 0.036 0.039
## 49     0.187      0.191     20.20   129.0 2.170 15.80 0.074 0.309 0.045 0.046
## 51     0.116      0.294     15.70    79.0 1.980 13.50 0.172 0.944 0.103 0.064
## 53     0.367      0.202     15.20   108.0 1.280 10.60 0.070 0.409 0.033 0.026
## 54     0.758      0.500     16.30   303.0 1.820 18.20 0.091 0.317 0.040 0.050
## 56     0.406      0.263     16.90   140.0 1.900 17.80 0.138 0.367 0.041 0.141
## 57     0.527      0.169     35.60   103.0 1.130 20.20 0.083 0.600 0.057 0.033
## 58     0.199      0.210     15.10   141.0 1.410 15.30 0.046 0.307 0.030 0.033
## 59     0.572      0.494     12.80   261.0 2.000 16.80 0.133 0.414 0.043 0.141
## 60     0.234      0.348     19.90   153.0 2.420 23.10 0.213 0.956 0.125 0.087
## 61     0.237      0.276     16.50   112.0 1.340 18.40 0.064 0.349 0.038 0.041
```

```
## 62     0.181        0.072        3.20      47.8 0.409  9.42 0.062 0.305 0.032 0.041
## 63     0.575        0.130        6.72      93.1 0.759 18.00 0.104 0.404 0.048 0.066
## 64     0.410        0.564       20.70        NA 1.780 25.00 0.077 0.335 0.042 0.045
## 65     0.409        0.492       21.10     157.0 2.210 24.40 0.102 0.452 0.043 0.091
## 67     0.126        0.560       26.00     137.0 1.720 25.40 0.062 0.380 0.044 0.047
## 68     0.184        1.090       25.00     292.0 1.690 22.50 0.050 0.264 0.022 0.037
## 69     0.960        0.947       17.20        NA 1.270 35.40 0.109 0.390 0.043 0.073
##    C12.DC C12.1   C14 C14.1 C14.1.OH C14.2 C14.2.OH   C16 C16.OH C16.1 C16.1.OH
## 1   0.042 0.290 0.023 0.019    0.008 0.008    0.006 0.046  0.008 0.009    0.007
## 4   0.048 0.275 0.026 0.028    0.010 0.013    0.011 0.074  0.011 0.015    0.008
## 5   0.079 0.394 0.034 0.043    0.016 0.025    0.017 0.062     NA 0.024    0.014
## 8   0.035 0.174 0.024 0.017    0.007 0.006    0.007 0.060  0.006 0.010    0.005
## 9   0.038 0.228 0.022 0.018    0.007 0.007    0.007 0.054  0.005 0.012    0.005
## 10  0.037 0.284 0.026 0.022    0.008 0.013    0.007 0.076  0.009 0.012    0.007
## 12  0.037 0.201 0.023 0.022    0.007 0.007    0.007 0.070  0.007 0.009    0.007
## 13  0.039 0.201 0.022 0.015    0.007 0.009    0.008 0.067  0.007 0.013    0.005
## 15  0.054 0.242 0.028 0.039    0.015 0.016    0.010 0.126  0.015 0.028    0.011
## 16  0.035 0.208 0.023 0.028    0.009 0.008    0.006 0.055  0.007 0.008    0.005
## 17  0.040 0.260 0.030 0.029    0.011 0.015    0.009 0.095  0.008 0.018    0.008
## 18  0.038 0.258 0.022 0.017    0.007 0.009    0.005 0.069  0.006 0.011    0.006
## 19  0.040 0.214 0.027 0.016    0.010 0.010    0.007 0.068  0.007 0.012    0.008
## 20  0.051 0.205 0.029 0.030    0.007 0.009    0.008 0.067  0.011 0.014    0.010
## 21  0.032 0.163 0.028 0.024    0.007 0.009    0.004 0.070  0.005 0.009    0.009
## 22  0.051 0.223 0.030 0.040    0.010 0.015    0.007 0.097  0.019 0.012    0.011
## 24  0.035 0.186 0.025 0.029    0.005 0.007    0.005 0.065  0.006 0.010    0.006
## 25  0.040 0.312 0.023 0.022    0.006 0.010       NA 0.085  0.007 0.014    0.007
## 26  0.039 0.277 0.023 0.020    0.008 0.007    0.004 0.050  0.006 0.010    0.006
## 27  0.041 0.245 0.020 0.023    0.011 0.010    0.007 0.067  0.011 0.012    0.007
## 29  0.040 0.146 0.022 0.027    0.007 0.006    0.003 0.067  0.005 0.011    0.006
## 30  0.033 0.105 0.023 0.018    0.006 0.007    0.006 0.057  0.007 0.009    0.005
## 32  0.061 0.236 0.022 0.032    0.015 0.017    0.011 0.061  0.017 0.017    0.012
## 33  0.037 0.204 0.028 0.021    0.006 0.009    0.005 0.094  0.006 0.020    0.005
## 34  0.033 0.244 0.024 0.016    0.006 0.008    0.006 0.075  0.006 0.011    0.009
## 36  0.050 0.322 0.023 0.023    0.009 0.014       NA 0.059  0.009 0.015    0.010
## 37  0.058 0.281 0.023 0.034    0.011 0.020    0.010 0.032  0.016 0.015       NA
## 40  0.038 0.199 0.024 0.029    0.006 0.012    0.004 0.101  0.006 0.014    0.007
## 41  0.036 0.244 0.027 0.020    0.008 0.010    0.007 0.088  0.008 0.015    0.007
## 42  0.039 0.292 0.023 0.023    0.006 0.009    0.005 0.071  0.006 0.012    0.008
## 43     NA 0.524 0.036 0.062    0.016 0.044    0.011 0.062  0.026 0.028       NA
## 44  0.037 0.230 0.025 0.021    0.006 0.012    0.004 0.067  0.012 0.011    0.007
## 49  0.041 0.258 0.023 0.019    0.007 0.012    0.006 0.070  0.007 0.011    0.006
## 51  0.156 0.660 0.056 0.075    0.030 0.071    0.019 0.103  0.049 0.029    0.027
## 53  0.041 0.340 0.022 0.027    0.009 0.010    0.005 0.059  0.009 0.012    0.006
## 54  0.041 0.267 0.025 0.021    0.006 0.012    0.005 0.094  0.006 0.021    0.009
## 56  0.039 0.445 0.086 0.074    0.020 0.030    0.008 0.178  0.012 0.073    0.016
## 57  0.059 0.483 0.021 0.030    0.012 0.018    0.008 0.051  0.014 0.016    0.011
## 58  0.042 0.261 0.020 0.024    0.004 0.008    0.004 0.057  0.008 0.008    0.006
## 59  0.038 0.415 0.084 0.060    0.011 0.033    0.006 0.177  0.008 0.063    0.010
## 60  0.083 0.896 0.056 0.069    0.022 0.045    0.016 0.161  0.029 0.044    0.015
## 61  0.038 0.291 0.022 0.022    0.006 0.014    0.004 0.067  0.006 0.016    0.007
## 62  0.040 0.308 0.029 0.059    0.009 0.014    0.005 0.053  0.006 0.026    0.008
## 63  0.039 0.311 0.031 0.081    0.007 0.024    0.005 0.080  0.008 0.013    0.007
## 64  0.043 0.302 0.037 0.019    0.010 0.014    0.005 0.094  0.006 0.017    0.007
## 65  0.040 0.402 0.050 0.044    0.009 0.030    0.006 0.137  0.008 0.040    0.010
```

```
## 67  0.043 0.347 0.025 0.033    0.006 0.013    0.004 0.093  0.006 0.016    0.008
## 68  0.030 0.230 0.024 0.025    0.007 0.011    0.004 0.085  0.005 0.015    0.007
## 69  0.036 0.356 0.047 0.042    0.013 0.026    0.007 0.169  0.008 0.056    0.009
##    C16.2 C16.2.OH   C18 C18.1 C18.1.OH C18.2    C2    C3 C3.OH  C3.1    C4
## 1  0.005    0.013 0.013 0.024    0.003 0.016  1.97 0.354 0.008 0.015 0.082
## 4  0.006    0.009 0.020 0.035    0.004 0.033  2.10 0.278 0.010 0.017 0.110
## 5  0.012    0.025 0.031 0.034    0.012 0.017  5.62 0.436 0.029 0.035 0.106
## 8  0.004    0.008 0.020 0.025    0.004 0.019  1.66 0.258 0.008 0.012 0.082
## 9  0.005    0.009 0.014 0.026    0.003 0.016  2.21 0.233 0.008 0.014 0.088
## 10 0.006    0.014 0.024 0.031    0.004 0.028  2.58 0.364 0.010 0.015 0.100
## 12 0.005    0.010 0.019 0.031    0.003 0.025  2.43 0.962 0.013 0.016 0.150
## 13 0.004    0.011 0.017 0.025    0.004 0.016  3.51 0.302    NA 0.016 0.094
## 15 0.010    0.016 0.030 0.061       NA 0.028  2.38 0.293 0.018 0.016 0.095
## 16 0.004    0.009 0.021 0.031    0.003 0.019  2.69 0.307 0.009 0.012 0.131
## 17 0.009    0.012 0.027 0.044       NA 0.036  4.06 0.449 0.010 0.014 0.128
## 18 0.006    0.011 0.016 0.031    0.005 0.029  2.28 0.330 0.008 0.014 0.073
## 19 0.005    0.011 0.017 0.026    0.003 0.024  2.24 0.193 0.012 0.015 0.099
## 20 0.006    0.010 0.021 0.033    0.007 0.036  1.82 0.298 0.017 0.017 0.091
## 21 0.006    0.011 0.022 0.031    0.004 0.022  2.30 0.318 0.010    NA 0.069
## 22    NA    0.011 0.018 0.032    0.008 0.028  1.74 0.184 0.014 0.016 0.048
## 24 0.004    0.010 0.020 0.029    0.004 0.023  1.88 0.134 0.010 0.015 0.061
## 25 0.006    0.009 0.020 0.036       NA 0.022  2.34 0.235 0.012 0.021 0.083
## 26 0.005    0.012 0.013 0.023    0.003 0.019  2.15 0.218 0.008 0.014 0.074
## 27 0.008    0.012 0.018 0.032    0.005 0.023  2.13 0.287 0.015 0.014 0.106
## 29 0.007    0.009 0.018 0.032    0.005 0.021  2.37 0.319 0.011 0.016 0.091
## 30 0.004    0.010 0.016 0.028    0.003 0.014  1.54 0.180 0.010 0.012 0.066
## 32 0.010    0.012 0.027 0.040    0.009 0.027  1.47 0.218 0.012 0.023 0.099
## 33 0.005    0.011 0.017 0.052    0.003 0.021  2.47 0.436 0.010 0.011 0.114
## 34 0.005    0.010 0.023 0.032    0.005 0.028  1.98 0.298 0.012 0.014 0.082
## 36 0.008    0.014 0.019 0.036    0.008 0.021  2.15 0.306 0.015 0.017 0.111
## 37 0.009    0.012 0.018 0.033    0.007 0.018  2.28 0.218 0.017 0.019 0.061
## 40 0.007    0.013 0.023 0.045    0.005 0.042  3.57 0.400 0.014 0.014 0.132
## 41 0.006    0.012 0.025 0.032    0.005 0.024  3.50 0.374 0.007 0.014 0.152
## 42 0.007    0.012 0.018 0.027    0.004 0.023  2.44 0.182 0.008 0.016 0.108
## 43 0.017    0.018 0.026 0.047    0.013 0.028  1.70 0.236 0.027 0.046 0.074
## 44 0.006    0.011 0.019 0.030    0.004 0.026  2.97 0.311 0.011 0.011 0.076
## 49 0.006    0.015 0.023 0.029    0.003 0.030  2.48 0.278 0.017 0.016 0.073
## 51 0.018    0.026 0.047 0.056    0.021 0.032  1.75 0.291 0.058 0.076 0.120
## 53 0.006    0.010 0.019 0.030    0.004 0.019  2.01 0.203    NA 0.017 0.059
## 54 0.008    0.012 0.017 0.046    0.005 0.030  5.58 0.310 0.009 0.013 0.115
## 56 0.015    0.014 0.035 0.107    0.010 0.030  6.69 0.494 0.012 0.017 0.158
## 57 0.007    0.011 0.019 0.024       NA 0.021  2.51 0.341 0.025 0.022 0.149
## 58 0.005    0.009 0.018 0.025    0.004 0.013  1.66 0.249 0.008 0.013 0.122
## 59 0.017    0.017 0.033 0.099    0.006 0.047  5.73 0.374 0.010 0.018 0.148
## 60 0.016    0.022 0.052 0.100    0.018 0.054  5.87 0.247    NA 0.034 0.179
## 61 0.007    0.013 0.018 0.035    0.002 0.024  3.57 0.309 0.008 0.015 0.085
## 62 0.009    0.010 0.013 0.067    0.010 0.017  5.93 0.079 0.012 0.015 0.028
## 63 0.010    0.013 0.025 0.062    0.005 0.038  4.21 0.261 0.009 0.014 0.148
## 64 0.006    0.011 0.024 0.042    0.005 0.031  8.10 0.584 0.010 0.013 0.190
## 65 0.012    0.015 0.029 0.076    0.007 0.047  6.39 0.358 0.012 0.016 0.156
## 67 0.006    0.013 0.028 0.036    0.005 0.030  3.99 0.553 0.010 0.014 0.178
## 68 0.006    0.013 0.020 0.043    0.003 0.027  4.51 0.648 0.006 0.006 0.129
## 69 0.017    0.017 0.028 0.101    0.010 0.095 10.30 0.582 0.010 0.016 0.199
##    C3.DC..C4.OH.  C4.1    C5 C5.M.DC C5.OH..C3.DC.M.  C5.1 C5.1.DC C6..C4.1.DC.
```

```
## 1         0.045 0.025 0.094    0.023       0.026 0.030   0.020       0.022
## 4         0.077 0.031 0.145    0.034       0.041 0.035   0.016       0.029
## 5         0.099 0.069 0.141    0.094       0.058 0.073   0.049       0.052
## 8         0.047 0.021 0.107    0.023       0.023 0.021   0.017       0.036
## 9         0.029 0.024 0.127    0.024       0.024 0.025   0.016       0.026
## 10        0.038 0.025 0.292    0.024       0.023    NA   0.014       0.044
## 12        0.059 0.029 0.176    0.025       0.021 0.023   0.025       0.035
## 13        0.045 0.031 0.155    0.023       0.025 0.023   0.015       0.037
## 15        0.044 0.032 0.132    0.044       0.044 0.037   0.023       0.041
## 16        0.061 0.022 0.121    0.021       0.025 0.020   0.017       0.026
## 17        0.072 0.029 0.180    0.024       0.029 0.033   0.015       0.061
## 18        0.052 0.019 0.213    0.026       0.027 0.022   0.017       0.031
## 19        0.075 0.031 0.110    0.041       0.033 0.022   0.016       0.028
## 20        0.075 0.018 0.114    0.041       0.048 0.043   0.029       0.032
## 21        0.032 0.028 0.078    0.022       0.020 0.022   0.014       0.033
## 22        0.073 0.038 0.103    0.044       0.039 0.025   0.032       0.037
## 24        0.040 0.024 0.189    0.021       0.030 0.026   0.015       0.030
## 25        0.042 0.029 0.095    0.025       0.021 0.033   0.017       0.062
## 26        0.073 0.031 0.092    0.029       0.025 0.020   0.012       0.026
## 27        0.044 0.028 0.103    0.027       0.036 0.027   0.024       0.036
## 29        0.040 0.025 0.168    0.035       0.024 0.027      NA       0.032
## 30        0.047 0.024 0.079    0.023       0.028 0.021   0.015       0.025
## 32        0.056 0.038 0.103    0.030       0.025 0.036      NA       0.035
## 33        0.045 0.022 0.117    0.017       0.024 0.019   0.016       0.031
## 34        0.049 0.024 0.199    0.022       0.023 0.019   0.013       0.046
## 36        0.048 0.030 0.191    0.038       0.050 0.029   0.023       0.033
## 37        0.051 0.041 0.102    0.050       0.030 0.045   0.034       0.041
## 40        0.052 0.026 0.325    0.021       0.038 0.023   0.009       0.053
## 41        0.056 0.026 0.231    0.025       0.031 0.026   0.017       0.060
## 42        0.046 0.028 0.097    0.022       0.032 0.018   0.023       0.039
## 43        0.094 0.079 0.100    0.084       0.047 0.088   0.066       0.049
## 44        0.045 0.024 0.121    0.022       0.031 0.022   0.014       0.031
## 49        0.043 0.025 0.132    0.030       0.029    NA   0.018       0.039
## 51        0.159 0.081 0.199    0.085       0.069 0.119   0.062       0.069
## 53        0.063 0.032 0.079    0.026       0.025 0.024   0.010       0.045
## 54        0.066 0.026 0.107    0.023       0.026 0.020   0.015       0.057
## 56        0.103 0.020 0.279    0.025       0.028 0.018   0.016       0.087
## 57        0.091 0.052 0.105    0.042       0.036 0.043   0.019       0.035
## 58        0.031 0.019 0.065    0.025       0.022 0.020   0.012       0.028
## 59        0.062 0.016 0.165    0.033       0.033 0.021   0.018       0.070
## 60        0.234 0.065 0.241    0.069       0.053 0.079   0.049       0.092
## 61        0.055 0.024 0.063    0.021       0.026 0.019   0.016       0.033
## 62        0.072 0.021 0.048    0.018       0.021 0.021   0.015       0.033
## 63        0.071 0.026 0.143    0.023       0.022 0.027   0.014       0.031
## 64        0.136 0.029 0.426    0.023       0.041 0.026   0.020       0.112
## 65        0.073 0.025 0.126    0.019       0.023 0.026   0.019       0.126
## 67        0.106 0.024 0.212    0.020       0.045 0.023   0.015       0.045
## 68        0.039 0.008 0.219    0.010       0.037 0.013   0.007       0.051
## 69        0.128 0.027 0.145    0.027       0.043 0.020   0.015       0.189
##    C5.DC..C6.OH.  C6.1 C7.DC    C8   C9 lysoPC.a.C14.0 lysoPC.a.C16.0
## 1         0.014 0.018 0.011 0.062 0.016           2.23           37.9
## 4         0.016 0.027 0.017 0.091 0.018           2.19           32.8
## 5         0.040 0.040 0.036 0.192 0.041           1.88           24.5
## 8         0.011    NA 0.009 0.062 0.011           2.13           33.7
```

```
## 9      0.018 0.015 0.013 0.064 0.014         2.10         36.0
## 10     0.017 0.018 0.014 0.067 0.013         2.06         32.7
## 12     0.016 0.011 0.011 0.055 0.012         2.31         41.3
## 13     0.017 0.015 0.012 0.070 0.012         2.06         34.0
## 15     0.019 0.027 0.018 0.124 0.029         2.02         37.6
## 16     0.014 0.023 0.012 0.050 0.012         2.30         43.9
## 17     0.021 0.018 0.009 0.075 0.017         2.05         31.5
## 18     0.016 0.017 0.011 0.058 0.012         2.21         36.1
## 19     0.017 0.018 0.009 0.066 0.019         1.89         24.2
## 20     0.031 0.028 0.022 0.100 0.017         1.99         29.8
## 21     0.013 0.016    NA 0.060 0.012         2.17         36.7
## 22     0.018 0.036 0.031 0.148 0.021         2.16         33.5
## 24     0.016 0.016 0.012 0.058 0.014         2.07         36.1
## 25     0.017 0.017 0.014 0.084 0.011         2.21         41.4
## 26     0.013 0.018 0.012 0.056 0.012         2.14         33.8
## 27     0.017 0.030 0.019 0.088 0.020         2.16         37.3
## 29     0.016 0.016 0.011 0.063 0.011         2.31         44.1
## 30        NA 0.015 0.010 0.058 0.010         1.99         27.3
## 32     0.028 0.045 0.022 0.138 0.021         2.07         31.6
## 33     0.013 0.014 0.009 0.067 0.013         2.29         39.2
## 34     0.014 0.014 0.011 0.069 0.011         2.04         34.2
## 36     0.021 0.032 0.015 0.105 0.018         2.20         39.7
## 37     0.034 0.038 0.027 0.116 0.019         2.18         38.9
## 40     0.017 0.021 0.009 0.074 0.009         1.84         28.5
## 41     0.018 0.017 0.012 0.072 0.014         1.95         31.5
## 42     0.016 0.018 0.015 0.067 0.013         2.00         31.7
## 43     0.064 0.060 0.049 0.219 0.041         2.04         31.9
## 44     0.017 0.014 0.014 0.077 0.019         2.01         32.4
## 49     0.022 0.018 0.012 0.072 0.019         1.99         33.8
## 51     0.078 0.060 0.057 0.268 0.051         2.00         30.9
## 53     0.015 0.028 0.013 0.110 0.014         2.22         37.9
## 54     0.015 0.014 0.013 0.075 0.017         1.93         34.6
## 56     0.021 0.021 0.022 0.091 0.016         1.92         29.8
## 57     0.025 0.035 0.021 0.110 0.022         2.25         39.0
## 58     0.016 0.013 0.010 0.053 0.014         2.23         35.5
## 59     0.023 0.019 0.015 0.107 0.012         1.94         32.4
## 60     0.075 0.050 0.040 0.242 0.042         2.21         42.6
## 61     0.024 0.017 0.015 0.075 0.015         2.12         40.1
## 62     0.010 0.011 0.011 0.059 0.009         2.54         44.0
## 63     0.018 0.015 0.017 0.081 0.018         2.19         61.2
## 64     0.018 0.017 0.013 0.074 0.013         1.92         27.3
## 65     0.022 0.023 0.019 0.110 0.018         2.15         33.8
## 67     0.018 0.016 0.012 0.065 0.014         1.86         29.0
## 68     0.011 0.013 0.008 0.045 0.010         2.31         57.4
## 69     0.022 0.025 0.014 0.094 0.014         2.37         45.0
##    lysoPC.a.C16.1 lysoPC.a.C17.0 lysoPC.a.C18.0 lysoPC.a.C18.1 lysoPC.a.C18.2
## 1           2.660          0.446           9.00           8.58           7.27
## 4           2.390          0.323           7.21           7.22           7.62
## 5           1.270          0.382           6.66           5.39           3.60
## 8           3.090          0.455           6.96           7.31           7.53
## 9           3.460          0.435           7.27           8.11           6.75
## 10          2.480          0.368           6.49           7.86          10.10
## 12          3.320          0.424           9.12           8.79          13.00
## 13          2.360          0.327           6.44           6.09           7.15
```

```
## 15         2.420         0.348          8.36          6.68          5.62
## 16         3.680         0.529          8.39         12.30         16.20
## 17         2.740         0.324          6.55          8.08          9.61
## 18         2.370         0.441          8.38          7.31          9.30
## 19         1.810         0.410          4.74          5.10          6.57
## 20         2.070         0.397          6.81          6.04          8.32
## 21         3.490         0.382          6.98         10.00         10.30
## 22         3.160         0.416          6.41          8.09          7.65
## 24         3.870         0.366          6.95          9.91         13.00
## 25         3.350         0.322          7.92          9.73          7.77
## 26         3.050         0.460          7.13          8.38          8.37
## 27         3.800         0.330          7.59         10.60          9.94
## 29         3.540         0.440          9.11         10.30         10.30
## 30         2.290         0.308          5.81          6.58          5.34
## 32         3.380         0.269          5.95          9.41          7.79
## 33         4.090         0.350          7.33         10.30          8.56
## 34         2.830         0.364          7.67          8.07          8.96
## 36         2.870         0.453          8.17          8.37          8.44
## 37         3.120         0.462          8.84          8.89          7.69
## 40         1.290         0.323          6.28          4.46          5.01
## 41         2.700         0.325          5.72          6.62          5.32
## 42         2.310         0.307          6.39          7.36          8.17
## 43         2.770         0.232          6.49          8.04          8.60
## 44         2.740         0.306          6.70          7.46          7.44
## 49         2.890         0.442          6.14          6.99         10.90
## 51         1.310         0.443          6.04          4.11          4.93
## 53         3.120         0.378          7.23          9.72         12.10
## 54         1.740         0.325          7.23          5.94          7.08
## 56         2.290         0.257          5.42          5.83          5.25
## 57         1.850         0.456          8.95          6.64          7.47
## 58         2.980         0.385          6.95          9.49         10.10
## 59         1.590         0.432          6.25          4.39          4.82
## 60         2.660         0.443          8.68          7.14          7.52
## 61         2.940         0.451          8.79          8.91          9.10
## 62         2.570         0.588          6.59          7.53          5.43
## 63         0.791         0.861         12.20          5.67          8.67
## 64         1.310         0.363          5.93          3.92          6.00
## 65         2.130         0.334          5.90          5.57          5.81
## 67         1.390         0.281          6.56          4.69          4.18
## 68         3.440         0.728         13.10          9.23          5.08
## 69         2.540         0.672         10.00          7.71         12.00
##     lysoPC.a.C20.3 lysoPC.a.C20.4 lysoPC.a.C24.0 lysoPC.a.C26.0 lysoPC.a.C26.1
## 1            1.830           8.25          0.079          0.113          0.053
## 4            1.640           6.75          0.066          0.086          0.045
## 5            0.970           6.26          0.084          0.118          0.053
## 8            2.350           8.73          0.061          0.083          0.047
## 9            2.080           7.82          0.068          0.083          0.037
## 10           1.860          12.40          0.061          0.086          0.052
## 12           3.150           9.26          0.084          0.117          0.044
## 13           1.720           6.73          0.053          0.063          0.036
## 15           1.320           7.35          0.075          0.108          0.043
## 16           3.060          13.60          0.083          0.132          0.063
## 17           1.590           7.39          0.072          0.097          0.051
## 18           2.040          10.20          0.074          0.096          0.040
```

```
## 19          1.360          5.75          0.059          0.078          0.048
## 20          1.720          6.72          0.090          0.102          0.042
## 21          2.990         12.90          0.079          0.168          0.056
## 22          2.430          7.91          0.096          0.151          0.088
## 24          3.150          7.20          0.069          0.118          0.037
## 25          2.060          8.36          0.081          0.107          0.049
## 26          2.390          7.76          0.073          0.096          0.048
## 27          2.410         10.10          0.052          0.110          0.051
## 29          2.320         11.20          0.081          0.111          0.057
## 30          1.740          6.93          0.065          0.080          0.042
## 32          2.240          9.67          0.055          0.065          0.052
## 33          3.080         10.80          0.066          0.099          0.050
## 34          1.880          9.80          0.074          0.091          0.048
## 36          1.720          7.94          0.076          0.095          0.052
## 37          2.470          7.44          0.122          0.133          0.092
## 40          1.050          6.37          0.104          0.129          0.072
## 41          1.620         10.50          0.075          0.112          0.070
## 42          2.450          6.89          0.079          0.118          0.048
## 43          1.500          9.05          0.103          0.140          0.080
## 44          1.790          8.40          0.083          0.128          0.057
## 49          2.040         10.50          0.071          0.107          0.052
## 51          1.180          4.92          0.131          0.122          0.057
## 53          3.420         10.20          0.100          0.138          0.056
## 54          1.360          6.11          0.083          0.117          0.046
## 56          1.530          7.20          0.095          0.126          0.060
## 57          1.390          8.06          0.102          0.099          0.064
## 58          2.530         10.30          0.104          0.130          0.061
## 59          0.747          5.47          0.090          0.085          0.053
## 60          1.740         11.70          0.111          0.178          0.069
## 61          2.450         10.50          0.088          0.115          0.062
## 62          0.718          1.62          0.056          0.129          0.065
## 63          0.957          2.10          0.098          0.183          0.075
## 64          1.260          7.60          0.102          0.121          0.044
## 65          1.420          6.53          0.094          0.142          0.058
## 67          0.936          4.77          0.097          0.164          0.058
## 68          2.050          7.43          0.110          0.175          0.077
## 69          2.620         15.10          0.152          0.191          0.084
##    lysoPC.a.C28.0 lysoPC.a.C28.1 PC.aa.C24.0 PC.aa.C26.0 PC.aa.C28.1
## 1          0.108          0.072       0.082       0.438       0.571
## 4          0.076          0.076       0.076       0.486       0.685
## 5          0.092          0.072       0.069       0.401       0.513
## 8          0.124          0.078       0.082       0.424       0.605
## 9          0.096          0.061       0.064       0.430       0.486
## 10         0.088          0.074       0.065       0.453       0.578
## 12         0.092          0.081       0.070       0.424       0.775
## 13         0.073          0.057       0.051       0.402       0.439
## 15         0.077          0.086       0.091       0.425       0.633
## 16         0.082          0.102       0.088       0.474       0.996
## 17         0.077          0.095       0.072       0.444       0.775
## 18         0.070          0.063       0.076       0.398       0.553
## 19         0.084          0.068       0.079       0.459       0.504
## 20         0.090          0.084       0.072       0.459       0.727
## 21         0.148          0.085       0.092       0.661       0.757
## 22         0.156          0.089       0.110       0.560       1.030
```

```
## 24         0.096         0.088         0.053         0.457         0.994
## 25         0.074         0.069         0.083         0.480         0.511
## 26         0.118         0.071         0.075         0.466         0.547
## 27         0.096         0.078         0.076         0.422         0.744
## 29         0.096         0.090         0.091         0.468         0.926
## 30         0.095         0.065         0.074         0.422         0.615
## 32         0.087         0.084         0.072         0.481         0.511
## 33         0.085         0.082         0.069         0.426         0.711
## 34         0.095         0.070         0.090         0.437         0.523
## 36         0.098         0.084         0.074         0.451         0.534
## 37         0.124         0.066         0.069         0.613         0.558
## 40         0.107         0.090         0.110         0.509         0.869
## 41         0.065         0.089         0.097         0.443         0.699
## 42         0.104         0.073         0.070         0.475         0.822
## 43         0.148         0.138         0.116         0.504         0.776
## 44         0.130         0.084         0.091         0.500         0.668
## 49         0.124         0.089         0.074         0.460         0.591
## 51         0.142         0.100         0.147         0.508         0.691
## 53         0.111         0.081         0.089         0.485         0.765
## 54         0.085         0.066         0.082         0.519         0.672
## 56         0.110         0.098         0.097         0.518         0.642
## 57         0.076         0.091         0.088         0.435         0.630
## 58         0.087         0.108         0.097         0.473         0.884
## 59         0.081         0.091         0.091         0.450         0.666
## 60         0.094         0.115         0.132         0.474         0.887
## 61         0.118         0.095         0.100         0.471         0.542
## 62         0.097         0.136         0.063         0.752         1.670
## 63         0.150         0.191         0.064         0.703         3.140
## 64         0.119         0.092         0.086         0.450         0.707
## 65         0.106         0.100         0.086         0.488         0.815
## 67         0.118         0.102         0.100         0.522         0.783
## 68         0.109         0.112         0.119         0.526         0.612
## 69         0.141         0.148         0.163         0.531         1.150
##    PC.aa.C30.0 PC.aa.C32.0 PC.aa.C32.1 PC.aa.C32.2 PC.aa.C32.3 PC.aa.C34.1
## 1         2.35       11.40        9.22          NA       0.092       109.0
## 4         3.33       18.60       13.30       0.053       0.079       106.0
## 5         1.78       13.80        5.03          NA       0.102        83.4
## 8         2.32       12.10       11.50          NA       0.093        83.6
## 9         2.05       10.40       11.40          NA       0.082        89.6
## 10        2.28       13.80        8.10          NA       0.111        80.7
## 12        2.79       15.00       10.70          NA       0.123        93.9
## 13        1.58        7.64        4.88          NA       0.068        50.7
## 15        2.28       11.90       10.90          NA       0.094       103.0
## 16        3.65       23.80       14.70          NA       0.156       121.0
## 17        3.59       19.60       13.90       0.120       0.132       123.0
## 18        1.62        7.81        3.95          NA       0.079        55.3
## 19        2.04       11.70        6.35          NA       0.086        71.7
## 20        2.63       15.60        8.19          NA       0.090        74.7
## 21        3.47       20.10       15.20       0.117       0.135       114.0
## 22        4.95       23.20       17.70       0.481       0.158       128.0
## 24        3.98       22.40       18.60       0.101       0.180       125.0
## 25        2.39       11.90       14.70       0.005       0.084       127.0
## 26        2.73       13.60       11.50       0.117       0.093        94.0
## 27        3.13       14.80       11.40          NA       0.105       104.0
```

```
## 29        3.11       15.00       14.60       0.004       0.111       136.0
## 30        2.37       12.60        9.43          NA       0.085        90.3
## 32        2.51       13.70       13.20       0.109       0.117        97.4
## 33        2.65       12.70       12.30          NA       0.120        99.8
## 34        2.21       12.50        8.72          NA       0.082        82.0
## 36        2.31       10.50        9.32          NA       0.090        96.0
## 37        3.24       16.90       14.10          NA       0.108       117.0
## 40        3.55       26.80        9.77          NA       0.106       121.0
## 41        3.49       22.50       15.50       0.138       0.127       102.0
## 42        3.28       19.50       12.50          NA       0.122       118.0
## 43        3.65       21.10       14.20          NA       0.126       123.0
## 44        2.62       13.50       11.10       0.014       0.097       103.0
## 49        2.39       11.80        7.05          NA       0.109        64.9
## 51        1.74       10.90        4.06          NA       0.107        55.9
## 53        2.99       15.40       11.00          NA       0.134        96.2
## 54        2.40       10.70        7.44       0.029       0.098        97.2
## 56        2.76       15.40       12.80       0.069       0.118       103.0
## 57        1.91       10.60        5.14          NA       0.113        74.2
## 58        3.37       18.50       13.00          NA       0.148       112.0
## 59        1.98       11.80        7.77          NA       0.094        93.3
## 60        2.99       17.80        9.96       0.013       0.117       102.0
## 61        2.12       10.50        7.62          NA       0.096        81.1
## 62        4.89       17.40       62.10      11.000       0.373       353.0
## 63        5.74       25.60       31.20      10.500       0.576       367.0
## 64        2.55       15.10        5.43          NA       0.085        66.2
## 65        3.43       19.50       13.40       0.128       0.130       130.0
## 67        3.39       21.90       14.30          NA       0.102       134.0
## 68        2.62       14.70       10.80          NA       0.094       107.0
## 69        3.59       19.90        9.14          NA       0.208       106.0
##    PC.aa.C34.2 PC.aa.C34.3 PC.aa.C34.4 PC.aa.C36.0 PC.aa.C36.1 PC.aa.C36.2
## 1         71.0       1.430       0.200        2.38        21.7        42.4
## 4         93.6       1.590       0.190        2.57        20.9        48.8
## 5         35.9       0.709       0.135        1.83        20.5        28.5
## 8         60.6       1.580       0.251        2.16        18.4        34.4
## 9         55.1       1.390       0.221        1.62        18.3        32.0
## 10        82.6       1.640       0.244        1.75        14.6        38.1
## 12        98.4       1.900       0.252        2.46        20.1        55.0
## 13        49.7       0.836       0.142        1.80        10.5        24.9
## 15        70.1       1.190       0.178        2.42        17.5        37.1
## 16       123.0       2.480       0.325        2.80        20.9        63.1
## 17       106.0       2.200       0.286        2.70        22.3        54.6
## 18        57.5       1.020       0.178        1.84        11.8        30.8
## 19        78.2       1.270       0.185        1.69        11.4        32.3
## 20        91.1       1.390       0.180        2.64        16.0        48.5
## 21        91.3       1.940       0.281        2.73        19.9        45.7
## 22       103.0       1.880       0.248        2.37        21.7        52.7
## 24       141.0       2.730       0.281        3.10        21.8        68.2
## 25        71.3       1.700       0.234        2.47        24.2        39.5
## 26        73.9       1.790       0.228        2.38        19.4        42.4
## 27        83.7       1.810       0.240        2.40        18.6        44.2
## 29        90.9       1.880       0.301        2.92        25.5        47.0
## 30        48.9       1.120       0.179        2.01        17.1        31.5
## 32        57.7       1.360       0.209        2.36        17.3        32.4
## 33        57.7       1.300       0.282        2.18        18.3        35.2
```

```
## 34       68.8      1.170      0.188      1.88      18.2      40.1
## 36       73.3      1.530      0.236      2.23      17.3      38.8
## 37       86.7      1.950      0.247      2.93      26.1      53.7
## 40      131.0      1.870      0.271      3.02      19.2      56.3
## 41       74.8      1.630      0.315      2.40      16.0      31.8
## 42      112.0      1.900      0.245      2.90      20.9      55.0
## 43       99.6      2.050      0.272      2.74      23.6      52.1
## 44       76.6      1.860      0.273      2.18      19.3      42.6
## 49       78.7      1.400      0.219      2.24      10.9      34.0
## 51       67.3      0.921      0.139      2.27      11.1      34.1
## 53       90.9      1.710      0.240      2.86      18.2      45.5
## 54      107.0      1.780      0.216      3.21      17.1      48.4
## 56       80.4      1.860      0.249      2.12      15.6      38.2
## 57       75.9      1.310      0.183      2.57      16.0      43.1
## 58       83.3      1.760      0.273      3.10      21.6      45.6
## 59       91.2      1.560      0.198      2.45      13.7      37.5
## 60       93.1      2.000      0.276      2.27      15.3      43.6
## 61       63.8      1.280      0.200      1.95      15.7      37.2
## 62      374.0     21.500      2.380      2.10      34.4     192.0
## 63      503.0     23.000      2.350      5.16      40.2     324.0
## 64       87.1      1.350      0.187      2.01      11.7      38.4
## 65      121.0      2.250      0.276      2.99      17.6      52.3
## 67      114.0      1.680      0.223      3.35      24.6      53.1
## 68       60.0      1.210      0.190      2.17      19.8      36.6
## 69      126.0      2.770      0.481      3.75      18.8      58.0
##    PC.aa.C36.3 PC.aa.C36.4 PC.aa.C36.5 PC.aa.C36.6 PC.aa.C38.0 PC.aa.C38.3
## 1         42.7       120.0        1.86       0.084       1.230        32.1
## 4         41.2       122.0        1.76       0.070       1.160        28.7
## 5         21.9        98.1        1.70       0.048       1.100        23.3
## 8         41.5       110.0        2.03       0.106       1.150        31.3
## 9         41.8       102.0        1.77       0.081       0.902        31.1
## 10        31.2       138.0        1.80       0.092       0.904        22.2
## 12        60.2       114.0        2.11       0.094       1.520        48.6
## 13        28.6        72.7        1.02       0.051       0.970        21.3
## 15        36.1       129.0        1.70       0.082       1.310        29.5
## 16        52.9       164.0        3.10       0.118       1.650        34.5
## 17        45.9       142.0        2.85       0.112       1.380        33.3
## 18        28.5        97.5        1.40       0.079       0.903        22.6
## 19        38.6       112.0        1.59       0.062       0.752        20.7
## 20        42.1        95.4        2.97       0.091       1.400        32.3
## 21        56.4       147.0        2.77       0.106       1.390        34.3
## 22        55.9       138.0        2.20       0.093       1.180        39.0
## 24        70.7       116.0        2.75       0.106       1.500        44.6
## 25        45.6       118.0        2.12       0.103       1.250        28.9
## 26        47.3        98.1        2.32       0.096       1.170        32.3
## 27        44.6       128.0        2.96       0.114       1.080        33.2
## 29        55.1       178.0        2.44       0.086       1.440        39.4
## 30        37.8       100.0        1.64       0.069       0.935        31.0
## 32        34.9        96.0        1.91       0.078       1.000        26.8
## 33        48.5       122.0        2.28       0.104       1.200        34.9
## 34        34.5       107.0        1.27       0.065       1.010        30.7
## 36        36.5       117.0        2.80       0.114       1.080        26.4
## 37        53.3       101.0        2.75       0.098       1.400        38.9
## 40        47.1       227.0        3.14       0.097       1.780        27.1
```

```
## 41      39.4      193.0      2.22      0.093      1.210      23.0
## 42      62.5      127.0      2.54      0.091      1.520      41.6
## 43      38.8      157.0      2.03      0.080      1.480      29.5
## 44      48.1      127.0      1.96      0.090      1.060      35.2
## 49      36.5      112.0      1.57      0.072      0.955      20.6
## 51      29.6       91.3      2.01      0.077      1.160      22.0
## 53      54.9      116.0      2.20      0.090      1.510      39.6
## 54      37.5      119.0      2.65      0.109      1.520      25.1
## 56      47.5      140.0      1.93      0.077      0.914      29.3
## 57      33.2      115.0      1.47      0.057      1.200      27.4
## 58      44.7      138.0      3.08      0.113      1.680      34.2
## 59      26.0      155.0      2.64      0.092      1.370      18.0
## 60      41.6      195.0      2.34      0.126      1.120      27.0
## 61      40.8      119.0      1.57      0.072      0.916      30.9
## 62     178.0      256.0     12.00      0.552      1.120      37.7
## 63     217.0      347.0     13.70      0.728      3.910      56.2
## 64      34.2      121.0      1.72      0.066      0.955      22.7
## 65      63.2      161.0      3.82      0.100      1.500      35.2
## 67      48.0      161.0      2.30      0.087      1.570      33.8
## 68      46.6      118.0      2.03      0.083      1.120      30.5
## 69      52.9      238.0      3.55      0.187      2.070      35.2
##      PC.aa.C38.4 PC.aa.C38.5 PC.aa.C38.6 PC.aa.C40.1 PC.aa.C40.2 PC.aa.C40.3
## 1       95.1      16.80      41.6      0.195      0.074      0.491
## 4       92.7      14.30      29.9      0.220      0.097      0.433
## 5      101.0      13.80      36.2      0.165      0.044      0.525
## 8       81.7      14.50      42.8      0.225      0.099      0.384
## 9       75.9      13.60      37.6      0.181      0.100      0.298
## 10      98.2      12.70      31.5      0.189      0.130      0.315
## 12      87.1      16.30      43.7      0.226      0.136      0.470
## 13      54.0      10.10      31.2      0.164      0.096      0.293
## 15     105.0      17.40      55.5      0.166      0.090      0.439
## 16     105.0      14.30      49.8      0.260      0.117      0.419
## 17     102.0      14.00      41.3      0.215      0.116      0.469
## 18      73.3      10.10      39.1      0.199      0.090      0.294
## 19      68.9       9.67      25.9      0.208      0.086      0.262
## 20      74.4      12.20      47.7      0.238      0.101      0.383
## 21      95.1      15.60      43.6      0.253      0.077      0.427
## 22     102.0      17.90      35.8      0.175      0.200      0.614
## 24      74.0      12.80      38.9      0.215      0.056      0.498
## 25      77.8      14.40      49.6      0.228      0.092      0.349
## 26      71.3      13.50      39.3      0.213      0.076      0.425
## 27      89.3      13.50      41.1      0.156      0.103      0.376
## 29     124.0      24.10      44.7      0.218      0.100      0.484
## 30      78.3      11.70      31.4      0.182      0.046      0.324
## 32      71.8      12.40      32.1      0.177      0.165      0.332
## 33      85.8      16.50      36.4      0.188      0.079      0.463
## 34      89.5      14.60      40.5      0.181      0.108      0.380
## 36      83.9      14.10      47.5      0.201      0.056      0.367
## 37      73.9      13.20      38.6      0.202      0.150      0.517
## 40     144.0      21.50      54.9      0.230      0.133      0.519
## 41     115.0      19.10      37.3      0.207      0.069      0.315
## 42      84.0      13.60      44.7      0.218      0.041      0.511
## 43     113.0      15.10      34.3      0.187      0.125      0.485
## 44      93.7      16.10      35.2      0.214      0.076      0.487
```

```
## 49       72.5     10.90      27.1      0.199      0.083      0.279
## 51       75.0     10.50      44.4      0.228      0.099      0.287
## 53       79.3     11.70      48.5      0.188      0.061      0.424
## 54       78.8     12.40      63.4      0.182      0.077      0.330
## 56       88.5     16.90      33.9      0.183      0.072      0.362
## 57       92.6     12.90      34.7      0.209      0.070      0.324
## 58      101.0     14.70      53.6      0.239      0.104      0.505
## 59      102.0     15.50      70.3      0.217      0.072      0.248
## 60      131.0     21.60      62.2      0.152      0.020      0.368
## 61       90.0     14.60      32.6      0.177      0.021      0.334
## 62       88.9     47.40      66.0      0.170      0.131      0.359
## 63      120.0     49.20     130.0      0.468      0.393      0.483
## 64       83.0     13.30      37.9      0.193      0.071      0.364
## 65       95.4     16.90      51.3      0.253      0.064      0.407
## 67      108.0     16.40      73.6      0.234      0.105      0.621
## 68       81.2     13.60      33.6      0.199      0.095      0.478
## 69      162.0     21.80      68.0      0.327      0.129      0.493
##    PC.aa.C40.4 PC.aa.C40.5 PC.aa.C40.6 PC.aa.C42.0 PC.aa.C42.1 PC.aa.C42.2
## 1         3.48        5.66       21.80       0.364       0.226       0.108
## 4         3.59        5.06       14.00       0.427       0.223       0.119
## 5         3.37        5.29       22.50       0.125       0.095       0.083
## 8         4.02        5.49       20.60       0.365       0.193       0.089
## 9         2.88        4.88       17.50       0.396       0.216       0.086
## 10        2.87        3.32       12.60       0.301       0.186       0.092
## 12        4.37        6.75       23.20       0.533       0.309       0.122
## 13        2.75        3.94       13.00       0.323       0.153       0.087
## 15        3.69        6.18       27.70       0.329       0.217       0.092
## 16        2.98        3.71       18.50       0.677       0.357       0.138
## 17        2.78        2.88       16.10       0.574       0.315       0.130
## 18        2.47        3.41       18.60       0.295       0.184       0.074
## 19        2.10        2.25        8.12       0.305       0.168       0.093
## 20        3.10        3.66       22.50       0.511       0.290       0.122
## 21        2.97        4.36       16.10       0.691       0.359       0.145
## 22        3.62        4.88       15.80       0.354       0.242       0.148
## 24        2.51        3.06       14.50       0.561       0.276       0.146
## 25        3.19        4.59       20.80       0.406       0.242       0.115
## 26        2.93        4.46       17.80       0.459       0.240       0.118
## 27        2.40        3.03       15.00       0.315       0.204       0.088
## 29        5.49        8.46       19.80       0.505       0.276       0.145
## 30        2.78        3.62       15.90       0.292       0.165       0.078
## 32        2.28        3.31       14.20       0.272       0.164       0.076
## 33        2.97        4.37       15.50       0.415       0.224       0.123
## 34        3.50        5.76       20.30       0.347       0.184       0.091
## 36        2.84        4.04       20.40       0.314       0.196       0.084
## 37        2.92        4.50       18.50       0.533       0.284       0.135
## 40        4.39        4.94       19.90       0.491       0.304       0.155
## 41        3.03        4.07       12.80       0.357       0.224       0.104
## 42        3.63        4.19       17.50       0.465       0.260       0.136
## 43        3.95        4.32       15.20       0.479       0.350       0.122
## 44        3.52        4.93       15.20       0.521       0.343       0.105
## 49        2.53        2.78        9.87       0.410       0.251       0.109
## 51        2.94        3.36       22.10       0.332       0.174       0.134
## 53        2.77        3.16       20.20       0.314       0.173       0.096
## 54        3.28        4.25       30.20       0.289       0.163       0.102
```

```
## 56       2.91        4.72        12.20        0.418        0.251        0.120
## 57       3.38        4.11        16.70        0.462        0.237        0.100
## 58       3.08        3.72        23.40        0.420        0.269        0.127
## 59       3.16        4.72        27.70        0.428        0.234        0.122
## 60       3.80        5.07        21.70        0.291        0.179        0.109
## 61       2.81        4.41        15.80        0.361        0.178        0.087
## 62       3.82        8.69        17.20        0.294        0.127        0.134
## 63       6.62       11.90        34.50        1.050        0.482        0.228
## 64       3.35        4.02        14.50        0.283        0.167        0.095
## 65       3.27        3.54        17.20        0.620        0.334        0.137
## 67       5.18        5.37        30.70        0.454        0.268        0.133
## 68       3.18        3.67        14.40        0.313        0.201        0.108
## 69       4.64        4.73        26.50        0.884        0.531        0.200
##     PC.aa.C42.4 PC.aa.C42.5 PC.aa.C42.6 PC.ae.C30.0 PC.ae.C30.1 PC.ae.C30.2
## 1       0.272        0.272        0.291        0.173        0.027        0.022
## 4       0.268        0.267        0.254        0.223        0.049        0.023
## 5       0.206        0.205        0.280        0.095        0.082        0.023
## 8       0.266        0.237        0.288        0.212        0.028        0.033
## 9       0.215        0.206        0.223        0.179        0.012        0.022
## 10      0.228        0.199        0.224        0.164        0.017        0.024
## 12      0.306        0.378        0.317        0.249        0.028        0.026
## 13      0.192        0.204        0.207        0.128        0.008        0.018
## 15      0.247        0.231        0.234        0.181        0.018        0.033
## 16      0.242        0.252        0.257        0.301        0.023        0.037
## 17      0.225        0.199        0.218        0.248        0.056        0.038
## 18      0.204        0.184        0.209        0.158        0.013        0.024
## 19      0.160        0.150        0.155        0.206        0.038        0.027
## 20      0.276        0.313        0.257        0.252        0.020        0.022
## 21      0.257        0.249        0.257        0.300        0.074        0.026
## 22      0.325        0.352        0.360        0.367        0.034        0.036
## 24      0.203        0.182        0.241        0.337        0.058        0.036
## 25      0.212        0.214        0.256        0.175        0.011        0.020
## 26      0.200        0.187        0.266        0.216        0.022        0.028
## 27      0.177        0.178        0.203        0.225           NA        0.031
## 29      0.315        0.321        0.350        0.226        0.033        0.033
## 30      0.184        0.214        0.227        0.200        0.008        0.029
## 32      0.141        0.133        0.216        0.216        0.033        0.019
## 33      0.193        0.206        0.217        0.194        0.036        0.023
## 34      0.257        0.262        0.265        0.178        0.035        0.026
## 36      0.203        0.230        0.263        0.187        0.014        0.022
## 37      0.210        0.199        0.376        0.203        0.053        0.040
## 40      0.400        0.321        0.306        0.229           NA        0.035
## 41      0.232        0.208        0.210        0.199        0.025        0.030
## 42      0.318        0.270        0.272        0.252        0.029        0.036
## 43      0.355        0.314        0.320        0.212        0.017        0.032
## 44      0.229        0.227        0.259        0.219        0.023        0.032
## 49      0.194        0.183        0.219        0.194        0.016        0.035
## 51      0.323        0.261        0.232        0.147        0.022        0.039
## 53      0.204        0.226        0.268        0.225        0.033        0.039
## 54      0.252        0.273        0.275        0.184        0.024        0.032
## 56      0.227        0.186        0.214        0.209        0.056        0.027
## 57      0.290        0.226        0.236        0.160        0.012        0.025
## 58      0.257        0.259        0.303        0.279        0.025        0.038
## 59      0.221        0.218        0.232        0.178        0.007        0.030
```

```
## 60       0.256       0.238       0.225       0.232       0.016       0.029
## 61       0.186       0.202       0.193       0.171          NA       0.026
## 62       0.209       0.439       0.532       0.274          NA       0.036
## 63       0.338       0.553       0.621       0.486          NA       0.074
## 64       0.281       0.266       0.262       0.206       0.032       0.030
## 65       0.263       0.225       0.252       0.265       0.014       0.033
## 67       0.349       0.300       0.306       0.228       0.030       0.035
## 68       0.250       0.202       0.253       0.206       0.024       0.032
## 69       0.363       0.340       0.322       0.311          NA       0.055
##    PC.ae.C32.1 PC.ae.C32.2 PC.ae.C34.0 PC.ae.C34.1 PC.ae.C34.2 PC.ae.C34.3
## 1         1.65       0.371       0.880        3.66        2.48       0.813
## 4         2.47       0.459       0.964        4.06        3.09       1.020
## 5         1.72       0.316       1.060        3.28        1.70       0.722
## 8         1.68       0.335       1.140        3.51        2.28       0.868
## 9         1.53       0.291       0.683        3.20        2.03       0.663
## 10        1.70       0.341       0.800        3.56        2.52       0.983
## 12        2.21       0.383       0.923        4.26        3.03       0.986
## 13        1.12       0.211       0.482        2.17        1.72       0.599
## 15        1.72       0.391       0.552        3.06        2.15       0.778
## 16        3.16       0.607       1.270        6.33        4.11       1.170
## 17        3.20       0.559       1.150        5.21        3.73       1.180
## 18        1.18       0.247       0.552        2.29        1.80       0.709
## 19        1.81       0.320       0.997        3.38        2.46       0.749
## 20        2.08       0.351       1.030        3.57        2.82       1.170
## 21        3.38       0.586       1.120        5.07        3.69       1.220
## 22        2.63       0.738       1.400        5.48        3.85       1.220
## 24        3.81       0.727       1.150        6.27        4.55       1.520
## 25        1.66       0.327       0.613        3.56        2.25       0.724
## 26        2.14       0.420       0.989        3.82        2.71       1.030
## 27        1.96       0.456       0.696        3.65        2.84       0.987
## 29        2.75       0.565       0.997        4.40        3.47       1.210
## 30        1.82       0.326       0.724        3.40        2.07       0.742
## 32        1.84       0.320       0.681        3.60        2.06       0.592
## 33        2.02       0.438       0.621        3.67        2.47       0.642
## 34        1.89       0.315       0.740        3.62        2.41       0.833
## 36        1.46       0.312       0.703        3.41        2.24       0.806
## 37        1.96       0.451       0.850        3.94        3.03       0.884
## 40        2.88       0.455       1.220        4.97        3.62       1.270
## 41        2.63       0.485       1.070        4.55        2.91       0.660
## 42        2.99       0.526       0.898        4.62        3.64       1.360
## 43        3.09       0.674       0.855        4.68        3.77       1.500
## 44        1.97       0.393       0.839        3.97        2.61       0.893
## 49        1.71       0.348       1.010        3.04        2.22       0.783
## 51        1.42       0.343       0.985        2.42        1.95       0.769
## 53        2.21       0.451       0.853        4.16        3.06       1.100
## 54        1.59       0.316       0.675        3.20        2.50       0.869
## 56        2.08       0.423       0.696        3.75        2.24       0.617
## 57        1.53       0.301       0.654        3.06        2.41       0.983
## 58        2.83       0.539       1.020        5.12        3.57       1.260
## 59        1.52       0.337       0.880        2.94        2.06       0.746
## 60        1.65       0.375       0.800        3.57        2.44       0.788
## 61        1.22       0.279       0.681        2.71        1.83       0.708
## 62        1.76       0.426       1.620       10.90        7.63       2.870
## 63        3.41       0.646       2.210       13.80       22.20       9.730
```

```
## 64        1.89      0.320     0.948        2.84         2.17         0.777
## 65        2.48      0.469     0.939        4.51         3.04         0.865
## 67        3.51      0.555     1.100        4.20         3.70         1.210
## 68        1.82      0.379     0.998        3.93         2.32         0.678
## 69        2.90      0.554     1.480        5.18         4.29         1.910
##      PC.ae.C36.0 PC.ae.C36.1 PC.ae.C36.2 PC.ae.C36.3 PC.ae.C36.4 PC.ae.C36.5
## 1        0.498       5.64        1.90        1.170        6.96         4.79
## 4        0.552       4.75        2.01        1.350        8.36         5.97
## 5        0.553       5.95        1.47        0.760        4.78         4.00
## 8        0.479       5.65        1.97        1.250        7.15         4.04
## 9        0.384       4.79        1.54        1.120        6.43         3.32
## 10       0.498       4.85        1.93        1.040        7.08         4.52
## 12       0.470       5.82        2.33        1.950       10.80         5.10
## 13       0.341       3.26        1.25        0.910        5.46         2.96
## 15       0.391       4.29        1.56        0.985        7.06         4.85
## 16       0.637       7.00        3.13        1.850       12.00         6.83
## 17       0.628       6.24        2.52        1.600        9.62         6.60
## 18       0.342       3.84        1.55        0.807        6.28         3.66
## 19       0.475       5.21        2.32        1.150        7.24         4.28
## 20       0.467       5.27        2.34        1.510        8.74         4.57
## 21       0.591       6.20        2.19        1.840       11.60         7.34
## 22       0.568       6.51        2.31        1.490        8.99         6.16
## 24       0.628       6.03        3.03        2.540       11.40         6.24
## 25       0.460       4.50        1.53        1.320        7.72         4.27
## 26       0.516       5.63        2.19        1.560        6.82         4.29
## 27       0.397       3.96        1.84        1.080        7.77         5.07
## 29       0.640       6.52        2.30        1.730       11.00         7.79
## 30       0.394       4.60        1.46        1.040        6.92         4.23
## 32       0.466       4.12        1.46        1.110        7.25         3.53
## 33       0.467       4.32        1.56        1.340        7.98         5.02
## 34       0.358       4.69        1.67        1.150        8.03         4.11
## 36       0.478       5.03        2.04        1.100        6.01         3.29
## 37       0.676       6.07        2.14        1.510        8.56         4.52
## 40       0.687       7.34        2.84        1.550       12.50         8.91
## 41       0.641       5.55        1.82        1.100       10.50         7.15
## 42       0.665       5.97        2.40        1.810        9.30         6.64
## 43       0.681       4.92        1.91        1.480       10.60         8.14
## 44       0.502       4.92        1.94        1.350        9.38         5.10
## 49       0.395       4.53        1.96        1.120        7.26         4.38
## 51       0.398       5.14        2.02        0.932        5.98         4.25
## 53       0.544       5.09        2.07        1.570        8.92         5.00
## 54       0.478       5.28        2.08        1.160        6.79         4.44
## 56       0.452       4.65        1.81        1.220        7.15         4.63
## 57       0.429       5.01        2.02        0.935        6.39         4.45
## 58       0.611       6.15        2.26        1.550       10.90         6.28
## 59       0.353       5.81        2.08        0.853        6.16         4.60
## 60       0.465       5.45        2.04        1.090        8.34         5.35
## 61       0.398       4.58        1.67        1.100        6.50         3.72
## 62       0.642      22.80       14.50        4.750        7.93         3.66
## 63       0.638      23.50       23.80        9.420       22.30        10.30
## 64       0.425       4.35        1.95        0.928        6.95         5.08
## 65       0.562       5.88        2.61        1.500        9.78         6.15
## 67       0.775       6.22        2.29        1.480        9.89         7.58
## 68       0.558       6.39        2.09        1.180        6.33         4.24
```

```
## 69       0.635         8.37        3.61        2.030        15.10        8.71
##     PC.ae.C38.0 PC.ae.C38.1 PC.ae.C38.2 PC.ae.C38.3 PC.ae.C38.4 PC.ae.C38.5
## 1        0.474       0.287       0.538        2.66        6.33        5.51
## 4        0.397       0.022       0.144        1.97        5.99        5.63
## 5        0.430       0.271       0.246        1.80        5.45        4.34
## 8        0.550       0.078       0.559        2.90        5.73        4.53
## 9        0.442          NA       0.224        2.53        5.03        3.82
## 10       0.458          NA       0.053        1.99        5.79        4.84
## 12       0.497          NA       0.054        3.44        7.32        6.23
## 13       0.368          NA          NA        1.85        4.46        3.70
## 15       0.546          NA       0.066        2.20        5.47        4.86
## 16       0.628          NA       0.041        3.12        8.55        7.44
## 17       0.568          NA       0.109        2.65        7.36        6.49
## 18       0.453          NA       0.153        1.96        4.85        3.40
## 19       0.374       0.157       0.374        2.47        6.74        3.90
## 20       0.551       0.215       0.342        2.76        6.18        5.21
## 21       0.590          NA       0.085        3.22        7.67        6.52
## 22       0.566          NA       0.613        2.89        6.45        5.64
## 24       0.546          NA       0.099        3.90        7.12        6.63
## 25       0.519       0.021       0.252        2.15        5.76        4.84
## 26       0.518       0.041       0.575        2.90        5.66        4.51
## 27       0.535       0.045          NA        1.83        4.76        5.20
## 29       0.554          NA       0.232        3.14        8.31        7.34
## 30       0.379       0.052       0.057        2.31        5.23        4.19
## 32       0.485          NA          NA        2.07        4.80        4.40
## 33       0.535          NA       0.057        2.63        5.53        5.52
## 34       0.388          NA          NA        2.11        5.89        4.81
## 36       0.638          NA       0.031        2.20        5.45        4.27
## 37       0.504       0.331       0.095        3.30        4.87        4.26
## 40       0.569          NA       0.038        3.14       10.30        8.08
## 41       0.636          NA          NA        2.43        8.49        6.51
## 42       0.566          NA          NA        3.17        6.47        5.71
## 43       0.557       0.098       0.134        2.08        6.78        7.20
## 44       0.512          NA       0.156        2.80        7.00        5.76
## 49       0.393          NA       0.090        2.27        5.52        4.05
## 51       0.435       0.157       0.350        2.46        5.56        3.91
## 53       0.604          NA       0.133        2.85        5.57        5.18
## 54       0.651          NA       0.040        1.99        5.60        4.48
## 56       0.511          NA          NA        2.44        5.68        4.79
## 57       0.446          NA          NA        2.40        5.47        4.61
## 58       0.661          NA          NA        2.94        7.26        6.76
## 59       0.660          NA       0.124        1.97        6.14        4.47
## 60       0.737          NA          NA        2.24        6.78        5.07
## 61       0.458          NA          NA        2.36        5.02        4.07
## 62       1.450          NA       0.952        6.50        7.27        6.09
## 63       1.580          NA       2.180        9.75       14.70       14.30
## 64       0.431          NA       0.073        2.03        5.89        4.54
## 65       0.655          NA       0.126        3.00        7.00        6.22
## 67       0.613          NA       0.062        2.68        6.91        6.17
## 68       0.484       0.122       0.380        2.86        5.77        4.56
## 69       0.967          NA          NA        4.05       12.30        8.70
##     PC.ae.C38.6 PC.ae.C40.1 PC.ae.C40.2 PC.ae.C40.3 PC.ae.C40.4 PC.ae.C40.5
## 1        1.95        0.574       0.575       0.940        1.76        1.77
## 4        1.97        0.425       0.540       0.742        1.45        1.62
```

```
## 5       1.51     0.430     0.432     0.632     1.10      1.25
## 8       1.71     0.584     0.499     0.991     1.84      1.53
## 9       1.28     0.472     0.555     0.737     1.35      1.34
## 10      1.58     0.670     0.572     0.757     1.16      1.30
## 12      2.36     0.566     0.580     0.942     1.54      1.97
## 13      1.32     0.285     0.400     0.537     1.09      1.41
## 15      2.11     0.440     0.488     0.642     1.19      1.49
## 16      2.72     0.838     0.860     0.954     1.47      1.95
## 17      2.36     0.748     0.711     0.848     1.47      1.78
## 18      1.43     0.508     0.498     0.691     1.19      1.06
## 19      1.25     0.404     0.606     0.814     1.66      1.18
## 20      2.19     0.449     0.680     0.934     1.77      1.61
## 21      2.58     0.739     0.690     0.855     1.44      2.00
## 22      1.95     0.706     0.812     1.140     1.89      1.73
## 24      2.51     0.586     0.784     1.030     1.21      1.68
## 25      1.89     0.566     0.423     0.555     1.24      1.58
## 26      1.81     0.526     0.553     0.955     1.56      1.60
## 27      1.77     0.667     0.530     0.583     1.01      1.39
## 29      2.43     0.855     0.729     1.030     2.15      2.27
## 30      1.47     0.438     0.531     0.681     1.01      1.20
## 32      1.42     0.666     0.446     0.554     0.95      1.22
## 33      2.02     0.571     0.601     0.701     1.18      1.66
## 34      1.78     0.479     0.453     0.653     1.20      1.51
## 36      1.49     0.612     0.587     0.691     1.26      1.36
## 37      1.39     0.679     0.758     0.772     1.72      1.65
## 40      3.06     0.938     0.632     0.841     1.97      2.09
## 41      2.28     1.040     0.561     0.696     1.44      1.73
## 42      2.32     0.413     0.644     0.852     1.31      1.63
## 43      2.43     0.618     0.575     0.915     1.41      1.77
## 44      1.82     0.567     0.619     0.895     1.74      1.72
## 49      1.57     0.459     0.609     0.725     1.22      1.25
## 51      1.89     0.380     0.527     0.919     1.47      1.36
## 53      2.22     0.632     0.620     0.853     1.22      1.25
## 54      1.96     0.379     0.535     0.710     1.16      1.46
## 56      1.58     0.613     0.526     0.657     1.15      1.61
## 57      1.49     0.357     0.638     0.768     1.29      1.44
## 58      2.75     0.741     0.757     0.932     1.42      1.70
## 59      2.01     0.424     0.655     0.624     1.26      1.59
## 60      2.01     1.010     0.617     0.667     1.15      1.41
## 61      1.38     0.606     0.588     0.816     1.16      1.37
## 62      2.11     0.888     1.210     0.963     1.20      2.31
## 63      6.52     1.410     2.120     2.320     3.26      5.36
## 64      1.69     0.385     0.437     0.641     1.15      1.28
## 65      2.51     0.584     0.756     0.962     1.43      1.75
## 67      2.86     0.656     0.698     0.949     1.57      1.84
## 68      1.49     0.630     0.611     1.030     1.79      1.45
## 69      3.44     0.894     1.090     1.390     2.64      2.55
##     PC.ae.C40.6 PC.ae.C42.0 PC.ae.C42.1 PC.ae.C42.2 PC.ae.C42.3 PC.ae.C42.4
## 1       1.59     0.629     0.316     0.192     0.277      0.264
## 4       1.25     0.637     0.299     0.159     0.208      0.392
## 5       1.47     0.660     0.355     0.138     0.174      0.162
## 8       1.46     0.631     0.271     0.186     0.282      0.333
## 9       1.21     0.645     0.264     0.168     0.229      0.319
## 10      1.18     0.670     0.294     0.186     0.222      0.266
```

```
## 12     1.90     0.667     0.317     0.244     0.317     0.457
## 13     1.14     0.601     0.228     0.133     0.174     0.287
## 15     1.60     0.730     0.317     0.168     0.238     0.291
## 16     1.94     0.681     0.401     0.226     0.415     0.459
## 17     1.73     0.692     0.332     0.193     0.309     0.439
## 18     1.30     0.636     0.240     0.140     0.191     0.264
## 19     1.06     0.630     0.245     0.159     0.196     0.277
## 20     1.81     0.667     0.337     0.168     0.304     0.406
## 21     1.68     0.663     0.337     0.207     0.376     0.480
## 22     1.28     0.735     0.444     0.207     0.235     0.377
## 24     1.64     0.667     0.326     0.243     0.340     0.334
## 25     1.43     0.724     0.295     0.178     0.277     0.415
## 26     1.47     0.638     0.276     0.185     0.256     0.382
## 27     1.01     0.655     0.315     0.152     0.330     0.215
## 29     1.72     0.724     0.381     0.308     0.354     0.454
## 30     1.12     0.638     0.242     0.148     0.207     0.233
## 32     1.08     0.627     0.269     0.205     0.256     0.219
## 33     1.24     0.684     0.327     0.193     0.259     0.294
## 34     1.37     0.635     0.281     0.162     0.218     0.318
## 36     1.44     0.626     0.271     0.167     0.239     0.260
## 37     1.42     0.637     0.380     0.243     0.376     0.416
## 40     2.15     0.797     0.489     0.280     0.370     0.462
## 41     1.47     0.701     0.385     0.261     0.278     0.328
## 42     1.51     0.713     0.308     0.200     0.254     0.342
## 43     1.36     0.657     0.362     0.201     0.265     0.376
## 44     1.37     0.700     0.339     0.201     0.241     0.372
## 49     1.07     0.616     0.304     0.149     0.203     0.266
## 51     1.76     0.687     0.275     0.196     0.217     0.279
## 53     1.55     0.621     0.292     0.159     0.281     0.249
## 54     1.64     0.654     0.274     0.140     0.216     0.334
## 56     1.13     0.718     0.302     0.193     0.220     0.363
## 57     1.41     0.633     0.301     0.132     0.223     0.296
## 58     1.88     0.748     0.326     0.225     0.368     0.357
## 59     2.14     0.693     0.290     0.167     0.248     0.256
## 60     1.61     0.694     0.406     0.227     0.282     0.260
## 61     1.10     0.674     0.322     0.191     0.243     0.282
## 62     1.97     1.010     0.365     0.285     0.458     0.361
## 63     5.11     1.160     0.553     0.644     1.350     1.610
## 64     1.36     0.710     0.292     0.165     0.193     0.236
## 65     1.70     0.730     0.404     0.196     0.316     0.437
## 67     1.82     0.775     0.371     0.225     0.339     0.420
## 68     1.24     0.708     0.343     0.209     0.300     0.312
## 69     2.96     0.743     0.507     0.275     0.403     0.564
##    PC.ae.C42.5 PC.ae.C44.3 PC.ae.C44.4 PC.ae.C44.5 PC.ae.C44.6 SM..OH..C14.1
## 1      0.888     0.065     0.168     0.536     0.494     1.420
## 4      0.863     0.069     0.237     0.517     0.611     1.720
## 5      0.513     0.081     0.154     0.178     0.134     0.987
## 8      0.861     0.085     0.183     0.534     0.429     1.500
## 9      0.925     0.069     0.184     0.671     0.460     1.230
## 10     0.660     0.080     0.156     0.420     0.399     1.760
## 12     1.100     0.102     0.278     0.755     0.813     1.930
## 13     0.766     0.084     0.187     0.512     0.453     1.130
## 15     0.875     0.079     0.205     0.538     0.470     1.400
## 16     1.180     0.109     0.262     0.904     0.949     2.620
```

30

```
## 17        1.120         0.093         0.239         0.804         0.816          2.120
## 18        0.694         0.077         0.156         0.367         0.463          1.380
## 19        0.657         0.067         0.173         0.351         0.311          1.430
## 20        1.000         0.089         0.231         0.709         0.707          1.840
## 21        1.130         0.078         0.273         0.784         0.686          1.740
## 22        0.780         0.096         0.197         0.415         0.489          2.090
## 24        0.998         0.074         0.237         0.676         0.563          2.400
## 25        0.964         0.077         0.245         0.712         0.494          1.110
## 26        0.971         0.075         0.238         0.699         0.630          1.360
## 27        0.823         0.086         0.167         0.492         0.447          1.570
## 29        1.290         0.091         0.284         0.843         0.652          2.040
## 30        0.720         0.072         0.153         0.418         0.372          1.480
## 32        0.654         0.083         0.160         0.395         0.310          1.270
## 33        0.952         0.082         0.199         0.729         0.454          1.330
## 34        0.790         0.071         0.214         0.486         0.440          1.320
## 36        0.790         0.079         0.197         0.550         0.458          1.480
## 37        1.330         0.066         0.300         0.855         0.549          1.420
## 40        0.932         0.107         0.249         0.545         0.641          2.670
## 41        0.769         0.095         0.207         0.409         0.369          1.890
## 42        0.873         0.087         0.228         0.591         0.578          2.050
## 43        0.892         0.078         0.268         0.699         0.659          2.130
## 44        1.130         0.067         0.215         0.746         0.640          1.650
## 49        0.694         0.066         0.173         0.403         0.472          1.560
## 51        0.736         0.097         0.193         0.416         0.398          1.460
## 53        0.670         0.073         0.179         0.374         0.322          1.980
## 54        0.784         0.087         0.144         0.362         0.346          1.340
## 56        0.927         0.068         0.240         0.706         0.515          1.470
## 57        0.861         0.072         0.205         0.570         0.593          2.000
## 58        0.980         0.090         0.190         0.613         0.598          2.450
## 59        0.868         0.077         0.177         0.603         0.530          1.860
## 60        0.673         0.090         0.201         0.477         0.376          1.960
## 61        0.819         0.080         0.181         0.464         0.404          1.500
## 62        1.120         0.077         0.208         0.634         0.371          3.310
## 63        2.970         0.218         0.618         2.360         1.820          7.610
## 64        0.628         0.071         0.156         0.322         0.435          1.740
## 65        1.100         0.088         0.264         0.808         0.680          2.170
## 67        0.910         0.108         0.225         0.575         0.614          2.410
## 68        0.760         0.093         0.245         0.580         0.384          1.650
## 69        1.360         0.108         0.282         0.903         1.070          3.270
##    SM..OH..C16.1 SM..OH..C22.1 SM..OH..C22.2 SM..OH..C24.1 SM.C16.0 SM.C16.1
## 1          1.330          2.07          1.86         0.597     44.9     7.99
## 4          1.480          2.97          2.84         0.682     52.4     8.61
## 5          1.480          1.96          1.74         0.478     40.6     5.86
## 8          1.160          2.98          2.59         0.631     37.9     7.92
## 9          0.984          2.21          2.07         0.507     37.3     6.65
## 10         1.450          2.60          2.45         0.586     48.3     9.66
## 12         1.560          2.74          2.67         0.594     53.3     9.93
## 13         0.983          2.01          1.89         0.502     31.3     6.51
## 15         1.170          2.80          2.15         0.572     47.2     9.05
## 16         2.240          2.98          3.15         0.691     63.1    12.80
## 17         1.750          2.47          2.45         0.556     57.8    11.00
## 18         1.210          2.59          2.02         0.652     35.3     7.34
## 19         1.390          2.36          2.00         0.538     34.5     6.28
## 20         1.430          2.96          2.98         0.892     51.8     8.94
```

```
## 21         1.450          3.15          2.75          0.649          52.3     10.50
## 22         1.550          2.93          2.24          0.858          64.6     11.70
## 24         1.930          2.96          2.98          0.742          68.6     13.40
## 25         0.952          1.66          1.41          0.366          39.5      7.86
## 26         1.150          2.39          1.96          0.563          39.4      7.20
## 27         1.160          2.17          2.27          0.441          53.0     10.50
## 29         1.510          3.26          3.07          0.831          60.9     12.40
## 30         1.230          1.82          1.70          0.478          39.0      7.08
## 32         1.060          1.94          1.93          0.545          38.0      7.75
## 33         1.140          2.26          2.16          0.580          45.8      9.36
## 34         1.130          2.11          1.94          0.488          42.9      8.23
## 36         1.290          2.41          2.31          0.560          42.9      8.09
## 37         1.440          2.20          2.02          0.587          45.2      8.87
## 40         2.040          3.44          2.88          0.644          69.7     10.50
## 41         1.590          2.17          2.08          0.550          49.8      9.10
## 42         1.640          3.39          3.19          0.813          58.6     10.90
## 43         1.690          2.56          2.61          0.719          69.2     13.30
## 44         1.370          2.54          2.32          0.665          47.6      9.65
## 49         1.250          2.91          2.57          0.691          39.2      7.45
## 51         1.090          2.45          2.29          0.707          34.5      6.36
## 53         1.610          3.07          2.82          0.690          56.8     12.80
## 54         1.120          2.98          2.21          0.705          44.7      7.78
## 56         1.250          2.00          2.03          0.475          39.9      7.33
## 57         1.750          3.11          3.07          0.824          46.9      8.38
## 58         1.960          3.43          3.58          0.766          60.0     12.10
## 59         1.510          2.79          2.59          0.727          43.8      8.78
## 60         1.640          2.93          2.94          0.638          55.1     10.70
## 61         1.240          2.78          2.60          0.670          38.9      8.95
## 62         1.970          5.50          5.04          0.489          58.6      9.30
## 63         3.610         16.40          9.66          0.919         134.0     20.70
## 64         1.400          2.18          1.91          0.519          50.7      7.91
## 65         1.560          2.93          2.78          0.708          56.9      9.85
## 67         1.990          3.15          3.00          0.733          76.0     12.00
## 68         1.270          2.94          2.56          0.650          44.0      8.85
## 69         2.700          4.82          4.58          1.230          70.8     14.30
##    SM.C18.0 SM.C18.1 SM.C20.2 SM.C24.0 SM.C24.1 SM.C26.0 SM.C26.1 H1_1   H1
## 1      14.5    10.40    0.290    12.20     27.3    0.147    0.337 3356 3356
## 4      17.2    11.50    0.261    11.80     27.9    0.138    0.353 2652 2652
## 5      13.0     8.34    0.196     9.29     20.5    0.111    0.283 2258 2258
## 8      11.9     9.59    0.199     9.36     18.8    0.117    0.227 2464 2464
## 9      12.0     8.48    0.183    10.30     23.6    0.090    0.268 2725 2725
## 10     15.4    11.90    0.295    10.50     26.7    0.097    0.305 3583 3583
## 12     16.1    12.50    0.308    12.60     28.8    0.127    0.291 4545 4545
## 13     10.4     8.62    0.218    10.00     20.0    0.119    0.219 3314 3314
## 15     14.4    10.40    0.251    13.70     28.7    0.184    0.406 2693 2693
## 16     22.5    18.20    0.398    11.10     32.7    0.152    0.406 4349 4349
## 17     18.7    13.20    0.377    12.90     32.5    0.159    0.424 3308 3308
## 18     12.6    10.30    0.274     9.16     19.7    0.109    0.246 2605 2605
## 19     13.2     9.91    0.299     6.80     15.9    0.105    0.222 3301 3301
## 20     13.3     9.24    0.305    13.30     29.6    0.129    0.297 2417 2417
## 21     16.4    12.10    0.280    12.80     28.7    0.179    0.429 3732 3732
## 22     16.2    12.30    0.425    14.50     26.8    0.136    0.391 3220 3220
## 24     21.5    17.00    0.447    14.80     38.2    0.189    0.466 2932 2932
## 25     13.3    10.30    0.193    11.00     24.0    0.100    0.295 2653 2653
```

```
## 26    12.2    8.58   0.216   11.20   25.4   0.128    0.308 2697 2697
## 27    17.5   13.40   0.297   10.80   28.5   0.139    0.321 2455 2455
## 29    16.4   13.00   0.325   15.50   36.6   0.172    0.418 3709 3709
## 30    12.5    8.87   0.232    9.22   23.4   0.102    0.258 2551 2551
## 32    12.2    9.91   0.269   10.00   25.1   0.111    0.270 2782 2782
## 33    13.9   11.30   0.348   10.90   29.9   0.131    0.347 2420 2420
## 34    13.4   10.70   0.218   10.40   23.8   0.114    0.244 2559 2559
## 36    14.7   11.20   0.257   11.50   27.0   0.135    0.346 2513 2513
## 37    13.5   11.20   0.168   12.10   25.7   0.129    0.343 3207 3207
## 40    19.7   12.70   0.272   14.20   33.4   0.195    0.405 3430 3430
## 41    15.6   11.70   0.342   10.80   23.0   0.124    0.320 2755 2755
## 42    19.1   14.60   0.295   15.40   36.2   0.212    0.481 3046 3046
## 43    20.3   16.00   0.441   15.50   40.0   0.219    0.466 3159 3159
## 44    14.8   11.60   0.309   13.00   31.2   0.144    0.377 2880 2880
## 49    12.9    9.81   0.318    9.90   21.0   0.142    0.289 3207 3207
## 51     9.7    7.00   0.168    7.87   17.6   0.110    0.215 2446 2446
## 53    16.6   14.50   0.346   12.00   31.4   0.160    0.367 3013 3013
## 54    13.6    9.22   0.252   12.70   26.1   0.143    0.281 3928 3928
## 56    13.0   10.30   0.300    9.22   24.1   0.107    0.288 3803 3803
## 57    16.0   12.50   0.396   15.10   32.3   0.200    0.412 3798 3798
## 58    19.5   16.10   0.373   14.00   37.1   0.157    0.387 3107 3107
## 59    13.8   11.40   0.258   10.90   23.5   0.130    0.270 4088 4088
## 60    18.0   14.40   0.426   13.90   34.3   0.177    0.506 2418 2418
## 61    12.8   10.90   0.281   10.90   29.1   0.139    0.378 2492 2492
## 62    15.6    7.75   0.782    9.47   36.2   0.073    0.200 3329 3329
## 63    24.8   12.50   0.894   21.40   50.4   0.100    0.229 2818 2818
## 64    14.0    9.88   0.237   10.90   23.3   0.140    0.275 3287 3287
## 65    15.5   11.00   0.386   13.00   36.2   0.174    0.499 2897 2897
## 67    20.4   13.60   0.224   15.70   39.8   0.183    0.458 2532 2532
## 68    11.8    8.60   0.179   11.20   27.2   0.137    0.326 2774 2774
## 69    24.0   19.00   0.619   16.20   37.3   0.210    0.562 2715 2715
##      Urea_N L.Arginine_N L.Leucine_N EDTAca_N X2.Hydroxybutyrate
## 1        NA           NA          NA       NA                 NA
## 4    500.80         16.0        27.1      2.5               12.7
## 5    132.50         13.2        57.9      2.5               35.2
## 8    182.30         49.8        63.9      0.0               21.7
## 9    255.80         39.0        64.6      2.7               17.1
## 10   184.40         66.0        54.6      2.3               21.3
## 12   247.20         51.4        44.5      0.0               16.9
## 13   184.10         32.7        56.0      2.8               17.2
## 15   227.50         43.0        52.1      4.0               20.2
## 16   193.40         40.0        43.8      3.3               25.5
## 17   117.50         32.2        49.0      0.0               18.0
## 18   200.60         13.2        39.8      1.2               21.8
## 19   155.00         40.1        25.7      4.5               12.8
## 20   105.20         36.5        40.0      0.8               10.4
## 21   185.10         75.9        46.0      3.0               23.5
## 22   217.70         37.1        46.0      0.0               15.1
## 24   310.70         29.2        43.6      5.1               12.9
## 25   140.00         62.3        44.6     37.9               15.7
## 26   185.00         74.1        61.7      4.9               20.4
## 27   234.70         78.6        78.8      5.6               18.1
## 29   246.20         54.9        70.8      4.6               25.4
## 30   597.50         35.7        50.6      3.8               13.3
```

```
## 32  116.98        47.4      33.5     0.0           17.3
## 33  246.30       101.8      69.6     0.0           36.9
## 34 1710.40        41.3      57.0     2.1           16.9
## 36  219.00        61.6      55.8     4.1           36.3
## 37  150.60        34.0      40.5     0.0           20.8
## 40  334.40        12.2      76.2     8.2           12.5
## 41  153.90        62.8      40.4     2.6           19.4
## 42  224.10        30.6      42.8     0.0           12.2
## 43  196.40       113.2      59.7     3.3           17.6
## 44  251.70        46.9      65.3     6.7           13.1
## 49  169.90        52.4      47.3     4.8           11.4
## 51  155.30        55.0      44.2     0.0           27.8
## 53  354.10        50.5      70.0     5.7           24.3
## 54   52.90        24.2      78.2     6.3           43.9
## 56  131.90         0.8      68.5     0.0           43.2
## 57  114.90        60.9      50.0     2.2           15.6
## 58   73.80        47.3      66.3     6.4           17.8
## 59  292.40        30.0      95.4     6.4           96.1
## 60  233.00        47.3      55.7     3.0           39.5
## 61  196.40       113.2      59.7     3.3           26.2
## 62  352.40        37.9      57.4     6.2           44.6
## 63  155.30        55.0      44.2     0.0           82.6
## 64   95.00        44.8      32.0     6.4           25.4
## 65  170.60        46.2      53.9     6.2           34.0
## 67  131.90         0.8      68.5     6.2           65.3
## 68  414.60        42.0      63.4    10.1           46.1
## 69  196.50        36.3      69.4    10.9           50.9
##     X3.Hydroxybutyrate Acetate Acetoacetate Acetone Betaine Carnitine Choline
## 1                   NA      NA           NA      NA      NA        NA      NA
## 4                  7.2     9.8          4.8     4.0    13.9       7.7    11.8
## 5                 44.7    20.2         18.9    18.9    33.9      18.5    27.7
## 8                 20.9    19.5         15.4     6.6    35.3      13.0    21.5
## 9                 37.9    20.0         22.0     9.3    12.0      14.4    15.4
## 10                46.2    22.5         26.2     9.4    29.5      15.7    28.1
## 12                13.1    17.8          9.9     7.0    29.4      12.7    18.0
## 13                55.3    18.6         29.5    13.9    21.9      12.7    24.6
## 15                24.1    21.9         17.4     9.3    48.1      17.1    23.7
## 16                52.2    22.1         25.7    10.6    32.5      13.5    17.1
## 17                64.3    23.6         29.8    25.0    37.2      16.2    11.8
## 18                61.2    18.5         30.4    13.8    28.7      10.3    20.6
## 19                 9.0    15.2          7.1     3.9    38.1       9.1    24.6
## 20                11.4    17.7          7.2     6.2    31.7       9.7    14.4
## 21                80.0    25.6         29.0    11.6    27.6      12.7    20.1
## 22                34.5    18.8         15.4     9.0    41.8      10.4    18.9
## 24                36.0    16.9         16.5    11.8    34.3       8.7    20.7
## 25                60.9    16.8         21.5     9.0    31.3      13.3    18.3
## 26                61.8    23.7         34.3    15.3    40.4      11.0    28.0
## 27                49.7    25.4         25.0    10.7    54.8      17.1    23.9
## 29                43.5    27.2         22.1    11.1    35.6      13.2    22.1
## 30                70.1    17.2         32.7    11.0    30.0       9.3    17.4
## 32                43.2    21.3         24.3    13.1    23.2       8.9    17.4
## 33                35.3    21.2         16.8     6.5    44.4      18.5    29.0
## 34                40.8    21.2         17.2    12.1     2.9      13.0    23.0
## 36                51.4    23.4         82.5    18.2    30.4      13.1    27.2
```

```
## 37                  78.3  20.2       34.3  13.9  26.8      9.0   13.8
## 40                   6.5  10.0        5.3   4.0  16.3      7.7   11.9
## 41                  20.9  14.2       13.7   9.0  27.4     11.0   24.0
## 42                  17.7  18.5       10.8   4.4  29.0     11.4   27.5
## 43                  47.9  19.1       17.4   9.3  29.0     14.1   17.0
## 44                  54.1  27.0       19.0   8.5  41.9     13.9   19.1
## 49                  48.5  20.0       29.9  15.0  29.3      7.7   17.0
## 51                  41.6  20.1       17.9   6.1  44.1      8.9   25.0
## 53                  96.8  19.5       55.5  12.6   4.7     10.2   19.5
## 54                  54.3  43.6       26.6  10.0  56.5     24.4   53.9
## 56                 253.5  37.0       97.3  23.0  37.4     14.7   24.2
## 57                  18.5  14.9       17.6   9.6  53.0     12.5   22.2
## 58                  14.5  20.2       13.1   7.2  54.6     11.7   18.7
## 59                 197.7  37.2       59.3  18.9  37.6     13.9   36.2
## 60                  74.2  28.9       35.3  13.7  75.7     16.6   29.0
## 61                 116.9  22.5       47.4  15.5   3.6     14.8   24.5
## 62                1181.4  53.4      510.8   2.9  19.0      8.9    5.7
## 63                 118.7  19.5       72.1  15.2  17.5     13.1   10.1
## 64                  19.0  17.2       18.6   8.3  20.6     13.3   16.2
## 65                 142.7  49.6       77.8  23.3  40.6     58.5   72.6
## 67                  91.3  33.4       64.7  26.2  67.6     23.2   71.7
## 68                  83.3  37.6       15.4  38.6  56.5     29.5   47.4
## 69                 102.9  85.4       41.9  14.5  48.0     72.1  130.5
##    Creatine Dimethyl.sulfone Ethanol Formate Glucose Glycerol Hypoxanthine
## 1        NA               NA      NA      NA      NA       NA           NA
## 4      14.7              1.3     6.4    14.4   629.5    322.0          8.6
## 5      35.4              5.5    13.0    40.0  1618.0    271.6          0.0
## 8      25.9              5.4    10.2    23.2  2120.5    406.5          5.8
## 9      25.3              3.5     5.1    25.0  1644.2    479.9          5.6
## 10     25.6              2.2     4.4    29.4  2875.0    722.2          5.3
## 12     29.7              3.7     5.7    21.8  2041.3    339.3          6.1
## 13     27.3              3.0    26.6    20.9  2199.9    379.7         14.8
## 15     41.6              3.0     6.1    23.5  2208.5    294.4         10.2
## 16     33.7              3.5     6.2    31.6  2312.8    317.5          9.0
## 17     23.7              1.7     4.0    30.5  1344.5    286.8          6.6
## 18     13.3              2.0     9.0    30.7  1412.8    376.1          4.6
## 19     30.2              4.1     6.9    17.1  1595.3    433.5          5.8
## 20     13.6              3.2     6.6    26.2  1690.7    297.2          5.7
## 21     23.4              1.6     5.0    24.8  2458.2    487.0         14.1
## 22     17.6              1.8    11.5    22.9  2416.7    510.0          7.9
## 24     11.9              5.8     7.8    25.8  2133.6    412.2          8.3
## 25     20.6              1.8     6.5    24.0  1364.4    997.4          6.8
## 26     34.8              5.4     9.1    23.3  2262.1    991.6          5.8
## 27     35.8              7.8     8.9    32.2  2252.7   1270.6          6.6
## 29     27.4              2.7     6.7    33.9  2945.3   1240.9         10.9
## 30     20.5              3.1     6.1    21.6  1518.4    872.9          7.8
## 32     26.5              2.7     5.1    29.3  2530.7   1123.3          7.4
## 33     31.9              3.4     7.1    28.5  2929.0    510.9          9.9
## 34     24.7              5.0     7.0    15.8  2156.6    295.7          6.7
## 36     21.0              2.8     8.1    22.1  2276.4    336.5          5.6
## 37     23.3              3.9     8.0    28.1  2119.9    358.1          5.8
## 40     16.2              1.7     5.3    14.6  1039.2    325.8          5.8
## 41     18.1              2.4    10.1    26.3  1865.1    373.9          6.6
## 42     18.6              3.2     4.9    22.3  1900.1    437.1          5.6
```

```
## 43        20.3              1.5    137.6    30.8  1881.4    402.0       6.0
## 44        17.4              1.5    197.9    32.1  2564.3    474.7       4.6
## 49         7.8              4.6    563.5    33.1  1923.4    288.4       5.5
## 51        16.6              3.8     13.8    12.7  2286.3    600.3       3.5
## 53        40.0              3.4      8.3    31.9  2918.5    423.0       9.3
## 54        53.2              4.7     13.1    37.3  3883.5    343.4      16.6
## 56        32.1              4.3      6.9    36.1  3023.7    461.1      10.2
## 57        30.6              6.3      8.8    26.7  2379.0    583.9       5.9
## 58        37.2              5.3      7.0    34.2  2686.2    418.8       8.9
## 59        71.7              3.9     10.3    32.7  4025.8    900.3      15.7
## 60        28.7              8.6     19.7    43.4  2724.8    693.6       7.0
## 61        40.7              4.8     14.1    41.1  2351.6    501.9       9.9
## 62        14.2              2.0      4.8    37.4  3685.7    690.0       3.4
## 63        18.4              6.2      5.3    14.3  2328.9    782.5       6.5
## 64        41.9              4.7      4.2    29.8  1921.5    415.3       5.4
## 65        36.3              1.4      5.3    30.6  2668.8    606.8      15.2
## 67        84.1              3.6      6.7    31.1  2208.8    827.1       8.3
## 68        47.1              7.3     18.7    37.9  2196.8    590.2      16.5
## 69        46.5              3.3      9.5    40.2  2018.9    560.5      28.2
##      Isobutyrate Isopropanol Lactate Malonate
## 1             NA          NA      NA       NA
## 4            2.5         4.4  1037.7      7.6
## 5            6.1        11.2  2199.9     11.7
## 8            4.5         4.4  1661.4     11.0
## 9            5.9         6.7  2048.5      8.0
## 10           5.5         2.7  1801.7     13.2
## 12           4.3         7.9  1482.8      9.7
## 13           4.9         9.5  1746.4     11.9
## 15           4.6         2.0  1472.2     12.6
## 16           4.3         2.5  1527.8     13.6
## 17           4.6        16.8  2470.5     12.7
## 18           3.6         3.1  1612.2      9.3
## 19           4.3         2.7  1517.5     12.2
## 20           3.2         1.9  1448.5      8.2
## 21           3.4         6.3  3781.8      5.9
## 22           3.4        10.4  1577.8     10.2
## 24           3.8         5.2  1544.7     11.1
## 25           3.4         1.1  2232.2     51.7
## 26           4.3         5.7  2012.1     12.6
## 27           5.5         2.7  1814.3     12.5
## 29           6.1         2.4  2305.9     10.8
## 30           4.2         2.2  1123.8      9.7
## 32           3.7         8.6  1571.5      8.6
## 33           5.9         9.2  2273.9     15.4
## 34           5.0         2.5  1931.7     13.3
## 36           5.4         2.6  1591.7     12.4
## 37           3.6         2.5  1479.2      6.5
## 40           2.1         3.9  1036.2      9.0
## 41           5.0         7.9  1613.8      9.8
## 42           3.3         2.3  1817.3     10.6
## 43           4.0        15.5  1718.7      7.3
## 44           5.0        12.5  1683.3      9.0
## 49           2.7        23.8  1316.9      7.1
## 51           5.8         3.0  2310.0     11.5
```

```
## 53          4.6      2.8  1451.5   12.4
## 54          7.8      1.7  5238.6   18.3
## 56         10.8      0.9  3472.1   11.4
## 57          3.8     16.0  1378.6   10.0
## 58          4.9      6.8  1390.0   11.3
## 59         10.0      3.4  6329.8   14.2
## 60          8.9      1.4  3915.8   18.1
## 61          5.3      5.2  1874.5   12.9
## 62          5.1      1.2  1026.1    3.6
## 63          2.9      0.5  1780.8    8.0
## 64          4.7      3.2  1251.5    8.6
## 65          5.8      3.4  2728.8   16.3
## 67          8.2     29.2  2000.3   18.3
## 68          7.0      3.6  1874.2   31.1
## 69          5.9     11.4  5408.0   32.4
```