

## Приложение 3

### Дополнительные материалы 1

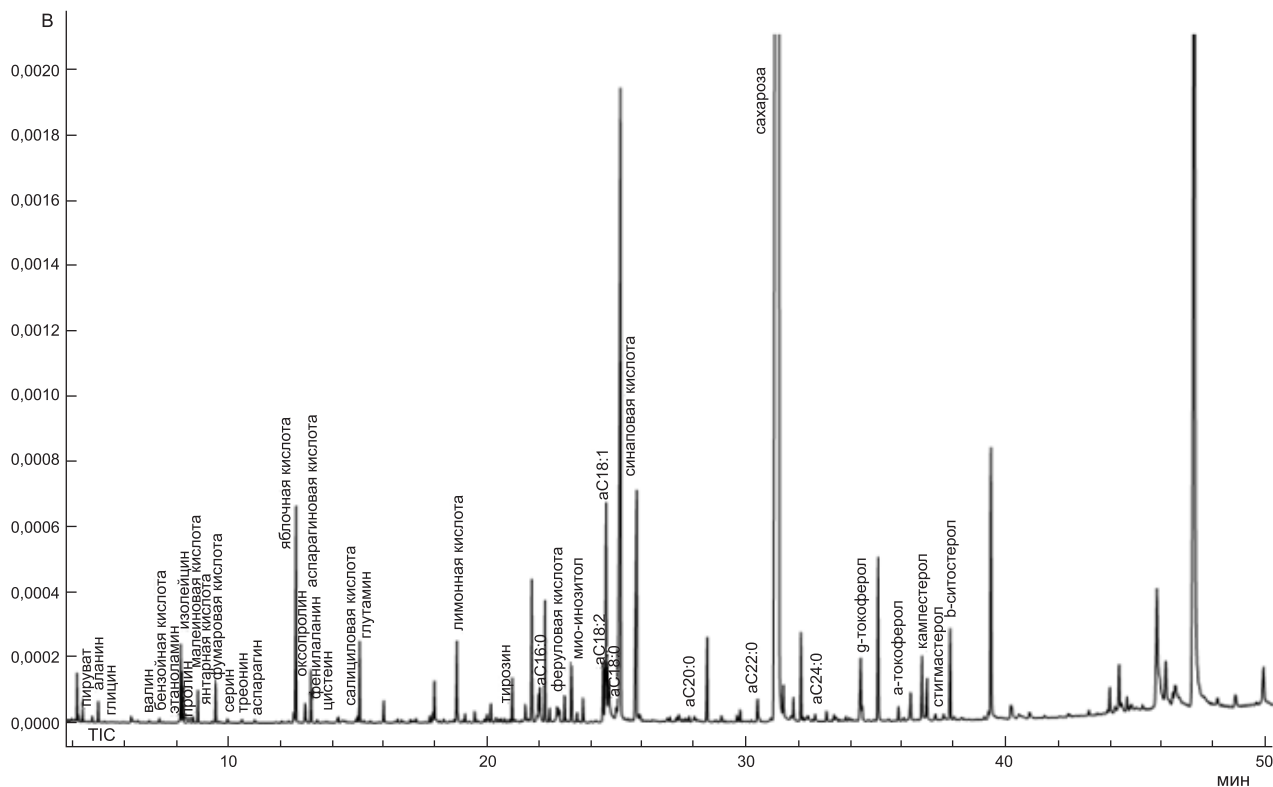


Рис. Хроматограмма экстракта воздушно-сухих семян рапса.

## Дополнительные материалы 2

**Таблица.** Коэффициенты значимости идентифицированных метаболитов при построении модели, рассчитанной по методу главных компонент (модель показана на рис. 1 статьи)

1-я главная компонента (ГК <sub>1</sub> )		2-я главная компонента (ГК <sub>2</sub> )	
Метаболиты	Коэффициенты значимости	Метаболиты	Коэффициенты значимости
<b>Аминокислоты</b>		<b>Аминокислоты</b>	
Фенилаланин	-0,09	Серин	-0,05
Оксипролин	-0,07	Цистеин	-0,05
Валин	0,05	Аспарагиновая кислота	-0,03
Тирозин	0,05	Оксипролин	-0,03
Пролин	0,06	Изолейцин	-0,03
Изолейцин	0,06	Глицин	0,01
Треонин	0,07	Тирозин	0,02
Серин	0,07	Треонин	0,04
Цистеин	0,08	Аланин	0,04
Аспарагиновая кислота	0,08	Пролин	0,04
Глицин	0,09	Валин	0,04
Аланин	0,10	Фенилаланин	0,05
<b>Амиды</b>		<b>Амиды</b>	
Аспарагин	0,05	Аспарагин	-0,07
Глутамин	0,07	Глутамин	0,00
<b>Амины</b>		<b>Амины</b>	
Этаноламин	-0,09	Этаноламин	-0,04
<b>Органические кислоты</b>		<b>Органические кислоты</b>	
Пировиноградная кислота	-0,01	Пировиноградная кислота	-0,11
Феруловая кислота	0,05	Фумаровая кислота	0,03
Янтарная кислота	0,09	Яблочная кислота	0,03
Лимонная кислота	0,10	Малеиновая кислота	0,04
Яблочная кислота	0,10	Лимонная кислота	0,05
Малеиновая кислота	0,10	Янтарная кислота	0,07
Фумаровая кислота	0,10	Феруловая кислота	0,13
<b>Неорганические кислоты</b>		<b>Неорганические кислоты</b>	
Фосфорная кислота	-0,07	Фосфорная кислота	-0,07
<b>Жирные кислоты</b>		<b>Жирные кислоты</b>	
C18:0 (стеариновая)	-0,08	C18:0 (стеариновая)	0,03
C22:0	-0,07	C18:2 (линолевая)	0,04
C24:0	-0,06	C18:1 (олеиновая)	0,05
C20:0	-0,05	C16:0	0,06
C16:0	0,05	C20:0	0,07
C18:1 (олеиновая)	0,08	C22:0	0,09
C18:2 (линолевая)	0,10	C24:0	0,13

### Окончание таблицы

1-я главная компонента (ГК <sub>1</sub> )		2-я главная компонента (ГК <sub>2</sub> )	
Метаболиты	Коэффициенты значимости	Метаболиты	Коэффициенты значимости
<b>Спирты</b>		<b>Спирты</b>	
Мио-инозитол	-0,11	Мио-инозитол	0,01
<b>Сахара</b>		<b>Сахара</b>	
Сахароза	-0,05	Сахароза	0,01
<b>Фенольные соединения</b>		<b>Фенольные соединения</b>	
Бензойная кислота	-0,02	Бензойная кислота	0,04
Салициловая кислота	0,05	Синаповая кислота	0,05
Синаповая кислота	0,10	Салициловая кислота	0,06
<b>Токоферолы</b>		<b>Токоферолы</b>	
α-токоферол	-0,08	γ-токоферол	0,06
γ-токоферол	0,01	α-токоферол	0,08
<b>Стеролы</b>		<b>Стеролы</b>	
β-ситостерол	-0,02	β-ситостерол	0,13
Кампестерол	0,03	Стигмастерол	0,14
Стигмастерол	0,05	Кампестерол	0,16

Здесь и в таблице Доп. материалов 3 отрицательные и положительные значения характеризуют значимость метаболитов в отрицательной и положительной областях модели соответственно. Чем больше значения отклоняются от нуля в отрицательную или положительную область, тем больше их значимость в построении модели. Значения, близкие к нулю, имеют наиболее низкую значимость в построении модели.

### Дополнительные материалы 3

**Таблица.** Коэффициенты значимости идентифицированных метаболитов при построении модели, рассчитанной по методу дискриминантного анализа проекций на латентные структуры (модель показана на рис. 2 статьи).

1-я главная компонента (ГК <sub>1</sub> )		2-я главная компонента (ГК <sub>2</sub> )	
наименование метаболитов	коэффициенты значимости	наименование метаболитов	коэффициенты значимости
<b>Аминокислоты</b>		<b>Аминокислоты</b>	
Аланин	-0,11	Валин	-0,08
Глицин	-0,09	Треонин	-0,06
Аспарагиновая кислота	-0,08	Тирозин	-0,05
Цистеин	-0,08	Фенилаланин	-0,05
Серин	-0,07	Аланин	-0,01
Треонин	-0,07	Пролин	-0,01
Пролин	-0,07	Оксипролин	0,00
Изолейцин	-0,06	Изолейцин	0,00
Тирозин	-0,05	Глицин	0,02
Валин	-0,05	Аспарагиновая кислота	0,04
Оксипролин	0,07	Серин	0,06
Фенилаланин	0,08	Цистеин	0,06
<b>Амиды</b>		<b>Амиды</b>	
Глутамин	-0,07	Глутамин	0,00
Аспарагин	-0,05	Аспарагин	0,08
<b>Амины</b>		<b>Амины</b>	
Этаноламин	0,09	Этаноламин	0,03
<b>Органические кислоты</b>		<b>Органические кислоты</b>	
Фумаровая кислота	-0,11	Феруловая кислота	-0,10
Малеиновая кислота	-0,10	Янтарная кислота	-0,04
Лимонная кислота	-0,10	Лимонная кислота	-0,03
Яблочная кислота	-0,10	Малеиновая кислота	-0,01
Янтарная кислота	-0,09	Яблочная кислота	0,00
Феруловая кислота	-0,06	Фумаровая кислота	0,01
Пирувиноградная кислота	0,02	Пирувиноградная кислота	0,13
<b>Неорганические кислоты</b>		<b>Неорганические кислоты</b>	
Фосфорная кислота	0,06	Фосфорная кислота	-0,14
<b>Жирные кислоты</b>		<b>Жирные кислоты</b>	
C18:2 (линолевая)	-0,11	C24:0	-0,13
C18:1 (олеиновая)	-0,09	C22:0	-0,09
C16:0	-0,06	C20:0	-0,04
C20:0	0,04	C18:0 (стеариновая)	-0,01
C24:0	0,05	C16:0	-0,01
C22:0	0,06	C18:1 (олеиновая)	-0,01
C18:0 (стеариновая)	0,08	C18:2 (линолевая)	0,00

### Окончание таблицы

1-я главная компонента (ГК <sub>1</sub> )		2-я главная компонента (ГК <sub>2</sub> )	
наименование метаболитов	коэффициенты значимости	наименование метаболитов	коэффициенты значимости
<b>Спирты</b>		<b>Спирты</b>	
Мио-инозитол	0,11	Мио-инозитол	-0,03
<b>Сахара</b>		<b>Сахара</b>	
Сахароза	0,05	Сахароза	0,03
<b>Фенольные соединения</b>		<b>Фенольные соединения</b>	
Синаповая кислота	-0,11	Бензойная кислота	-0,07
Бензойная кислота	0,02	Синаповая кислота	-0,01
<b>Токоферолы</b>		<b>Токоферолы</b>	
γ-токоферол	-0,01	α-токоферол	-0,08
α-токоферол	0,08	γ-токоферол	-0,05
<b>Стеролы</b>		<b>Стеролы</b>	
Стигмастерол	-0,07	Кампестерол	-0,16
Кампестерол	-0,04	Стигмастерол	-0,11
β-ситостерол	0,00	β-ситостерол	-0,09