

SUPPLEMENTAL MATERIAL

Table S1 Subgroup analyses for left ventricular ejection fraction

Rank	Metabolite	T1				T2				rANOVA	
		Normal LVEF (N=34)		Reduced LVEF (N=10)		Normal LVEF (N=34)		Reduced LVEF (N=10)		FDR	P- Value
		Mean conc. [ $\mu$ M]	SD	Mean conc. [ $\mu$ M]	SD	Mean conc. [ $\mu$ M]	SD	Mean conc. [ $\mu$ M]	SD		
1	C18	0.06	0.02	0.05	0.01	0.05	0.01	0.05	0.02	0.2275	<b>0.0175</b>
2	C3	0.38	0.16	0.39	0.18	0.43	0.21	0.41	0.16	0.2672	<b>0.0411</b>
3	C18:1	0.17	0.05	0.18	0.06	0.15	0.05	0.15	0.05	0.4169	0.0962
4	C16	0.13	0.03	0.12	0.03	0.12	0.03	0.11	0.03	0.5551	0.1708
5	C5	0.20	0.27	0.22	0.20	0.24	0.28	0.57	0.80	0.6065	0.2835
6	C3.DC.-C4.OH	0.07	0.03	0.10	0.06	0.06	0.03	0.09	0.08	0.6065	0.3095
7	C14:1	0.11	0.03	0.14	0.06	0.11	0.05	0.11	0.04	0.6065	0.3266
8	C2	9.21	3.78	13.21	7.07	8.49	3.92	8.10	3.20	0.6796	0.4182
9	C4	0.30	0.17	0.46	0.22	0.34	0.21	0.43	0.19	0.693	0.5392
10	C18:2	0.04	0.01	0.05	0.02	0.04	0.02	0.04	0.02	0.693	0.5789
11	C0	36.69	10.88	37.78	13.04	35.89	9.71	32.64	11.19	0.693	0.6046
12	C10	0.22	0.07	0.28	0.18	0.22	0.09	0.22	0.10	0.693	0.6538
13	C14:2	0.03	0.01	0.04	0.02	0.03	0.02	0.03	0.01	0.693	0.693

conc. = concentration; FDR = false discovery rate; LVEF = left ventricular ejection fraction;  $\mu$ M = micromolar; SD = standard deviation

**Table S2 Subgroup analyses for renal function**

Rank	Metabolite	T1		Creatinine < 1.2		T2		Creatinine < 1.2		FDR	P-Value
		Creatinine > 1.2		(N=30)		Creatinine > 1.2		(N=30)			
		Mean conc. [μM]	SD	Mean conc. [μM]	SD	Mean conc. [μM]	SD	Mean conc. [μM]	SD		
1	C18:1	0.19	0.06	0.16	0.04	0.16	0.06	0.14	0.05	0.1989	<b>0.019</b>
2	C14:1	0.13	0.05	0.11	0.04	0.12	0.05	0.10	0.04	0.1989	<b>0.0306</b>
3	C16	0.14	0.04	0.12	0.03	0.12	0.03	0.11	0.03	0.2076	<b>0.0479</b>
4	C5	0.34	0.35	0.15	0.16	0.52	0.72	0.22	0.25	0.4858	0.1498
5	C3	0.46	0.18	0.35	0.14	0.48	0.21	0.40	0.18	0.4858	0.2317
6	C2	13.95	6.81	8.34	2.30	9.94	4.41	7.68	3.19	0.4858	0.2946
7	C18	0.06	0.02	0.05	0.01	0.05	0.02	0.05	0.01	0.4858	0.3026
8	C10	0.27	0.16	0.21	0.07	0.26	0.09	0.21	0.08	0.4858	0.3206
9	C14:2	0.04	0.02	0.03	0.01	0.04	0.02	0.03	0.01	0.4858	0.3363
10	C18:2	0.05	0.02	0.04	0.01	0.04	0.02	0.04	0.02	0.5025	0.3865
11	C3.DC-C4.OH	0.09	0.04	0.07	0.04	0.07	0.03	0.07	0.06	0.5282	0.4469
12	C4	0.50	0.18	0.26	0.15	0.48	0.22	0.30	0.18	0.6433	0.5938
13	C0	41.99	13.97	34.58	9.10	34.93	11.38	35.25	9.52	0.7167	0.7167

conc. = concentration, FDR = false discovery rate, μM = micromolar, SD = standard deviation

**Table S3 Subgroup analyses for NT-proBNP levels**

Rank	Metabolite	T1				T2				rANOVA	
		proBNP > 1038 (N=21)		proBNP < 1038 (N=23)		proBNP > 1038 (N=21)		proBNP < 1038 (N=23)		FDR	P- Value
		Mean conc. [µM]	SD	Mean conc. [µM]	SD	Mean conc. [µM]	SD	Mean conc. [µM]	SD		
1	C5	0.18	0.19	0.23	0.30	0.34	0.61	0.29	0.31	0.1677	<b>0.0129</b>
2	C16	0.13	0.03	0.12	0.03	0.12	0.03	0.11	0.03	0.2431	<b>0.0374</b>
3	C18	0.05	0.02	0.05	0.01	0.05	0.02	0.05	0.01	0.2974	0.0788
4	C18:1	0.17	0.04	0.17	0.06	0.16	0.05	0.14	0.05	0.2974	0.0915
5	C10	0.26	0.14	0.20	0.07	0.25	0.10	0.20	0.07	0.3948	0.1614
6	C18:2	0.04	0.02	0.04	0.01	0.04	0.02	0.04	0.02	0.3948	0.2071
7	C2	9.85	5.44	10.37	4.60	8.67	3.73	8.16	3.79	0.3948	0.2359
8	C14:1	0.12	0.05	0.11	0.04	0.12	0.05	0.10	0.04	0.3948	0.2447
9	C14:2	0.04	0.02	0.03	0.01	0.03	0.02	0.03	0.01	0.3948	0.2733
10	C4	0.33	0.16	0.35	0.22	0.38	0.22	0.34	0.20	0.4337	0.3446
11	C3.DC- C4.OH	0.08	0.05	0.07	0.03	0.08	0.06	0.07	0.03	0.4337	0.367
12	C3	0.35	0.14	0.42	0.18	0.43	0.21	0.42	0.19	0.4923	0.4544
13	C0	33.27	10.68	40.28	11.04	33.50	10.42	36.65	9.67	0.59	0.59

BNP = brain natriuretic peptide, conc. = concentration, FDR = false discovery rate, µM = micromolar, SD = standard deviation

**Table S4 Subgroup analyses for diabetes mellitus**

Rank	Metabolite	T1				T2				FDR	P-Value
		Diabetes (N=16)		No Diabetes (N=28)		Diabetes (N=16)		No Diabetes (N=28)			
		Mean conc. [ $\mu$ M]	SD	Mean conc. [ $\mu$ M]	SD	Mean conc. [ $\mu$ M]	SD	Mean conc. [ $\mu$ M]	SD		
1	C0	37.55	14.55	36.58	9.15	36.58	11.28	34.41	9.43	0.0351	<b>0.0027</b>
2	C18:1	0.17	0.05	0.17	0.05	0.16	0.06	0.14	0.05	0.1242	<b>0.0325</b>
3	C18:2	0.04	0.01	0.04	0.01	0.04	0.02	0.04	0.01	0.1242	<b>0.0368</b>
4	C16	0.13	0.04	0.12	0.03	0.12	0.03	0.11	0.03	0.1242	<b>0.0382</b>
5	C2	11.72	6.31	9.21	3.83	10.03	4.63	7.56	2.90	0.1685	0.0648
6	C5	0.31	0.35	0.15	0.14	0.41	0.40	0.26	0.51	0.4621	0.2398
7	C3.DC-C4.OH	0.08	0.04	0.07	0.05	0.08	0.04	0.07	0.06	0.4621	0.2488
8	C14:1	0.12	0.04	0.12	0.04	0.12	0.05	0.10	0.04	0.4815	0.2963
9	C3	0.45	0.20	0.35	0.13	0.54	0.24	0.36	0.14	0.5357	0.3971
10	C18	0.05	0.02	0.05	0.01	0.05	0.01	0.05	0.01	0.5357	0.4428
11	C4	0.41	0.20	0.30	0.18	0.47	0.25	0.30	0.16	0.5357	0.5107
12	C14:2	0.03	0.02	0.03	0.01	0.04	0.02	0.03	0.01	0.5357	0.5225
13	C10	0.24	0.16	0.23	0.07	0.24	0.09	0.22	0.09	0.5357	0.5357

conc. = concentration, FDR = false discovery rate,  $\mu$ M = micromolar, SD = standard deviation