

**Die Vorhersage der phänotypischen Leistung von  
Gerstenlinien mittels Modellierung von Metaboliten und  
Single Nucleotide Polymorphismen (SNPs) und die  
Aufklärung der zugrundeliegenden Genetik mittels  
Genomweiter Assoziationsstudie (GWAS)**

**Dissertation**

**zur Erlangung des Doktorgrades  
der Agrarwissenschaften (Dr. agr.)**

der

Naturwissenschaftlichen Fakultät III  
Agrar- und Ernährungswissenschaften,  
Geowissenschaften und Informatik

der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg

vorgelegt von

Herrn Mathias Ruben Gemmer

Geb. am 19.11.1991 in Limburg a. d. Lahn

1. Gutachter: Prof. Dr. Klaus Pillen
2. Gutachter: Prof. Dr. Rod Snowdon

Verteidigung am: 28.06.2021

# Inhaltsverzeichnis

Abkürzungsverzeichnis.....	IV
Tabellenverzeichnis.....	V
Abbildungsverzeichnis.....	VI
Tabellenverzeichnis des Anhangs.....	VIII
Abbildungsverzeichnis des Anhangs.....	IX
1. Einleitung.....	1
1.1 Gerste ( <i>Hordeum vulgare</i> ssp. <i>vulgare</i> ).....	1
1.1.1 Halle Exotic Barley (HEB-25).....	2
1.2 Methoden der genetischen Analyse.....	3
1.2.1 Genomische Selektion.....	4
1.2.2 Genomweite Assoziationsstudien (GWAS).....	6
1.3 Metaboliten in der Pflanzenzüchtung.....	8
1.4 Zielsetzung.....	10
2. Material und Methoden.....	11
2.1 Pflanzenmaterial.....	11
2.2 Genotypdaten.....	11
2.3 Feldversuche.....	12
2.4 Phänotypdaten.....	13
2.5 Metabolitdaten.....	15
2.6 Statistik.....	18
2.7 Genomische/metabolische Vorhersage.....	19
2.8 Genomweite Assoziationsstudie (GWAS) zur Analyse von mQTL.....	21
3. Ergebnisse und Diskussion.....	23
3.1 Bewertung der metabolischen Vorhersage als Alternative zur genomischen Vorhersage bei Gerste.....	23
3.1.2 Phänotypdaten.....	23
3.1.3 Genomische und metabolische Vorhersage.....	25
3.2 Anwendung von GWAS zur Identifizierung von mQTL.....	37
3.2.1 Metabolitdaten und GWAS.....	37
3.2.2 Analyse der mQTL.....	42
4. Schlussbetrachtung.....	51
4.1 Eignung von Metaboliten zur Phänotypvorhersage in Gerste.....	51
4.2 GWAS zur Metabolitenexpression.....	52
5. Zusammenfassung.....	55
6. Summary.....	57

Literatur .....	59
Danksagung .....	66
Selbstständigkeitserklärung .....	67
Anhang .....	68

## Abkürzungsverzeichnis

AFLP	Amplified Fragment Length Polymorphism
BLUE	Best linear unbiased estimator
DR	Detektionsrate
EAR	Ähren pro m <sup>2</sup>
GBS	Genotyping by sequencing
GC-MS	Gaschromatographie-Massenspektrometrie
GEBV	Genomic estimated breeding value
GNE	Kornzahl pro Ähre
GS	Genomische Selektion
GV	Genomische Vorhersage
GWAS	Genomweite Assoziationsstudie
HEA	Blühzeitpunkt
HEB	Halle Exotic Barley
HEI	Pflanzenhöhe
IBS	Identity by state
KG	Kandidatengen
KV	Kreuzvalidierung
LC-MS	Flüssigchromatographie-Massenspektrometrie
LD	Linkage disequilibrium
MAS	Marker-assisted selection
MAT	Reife
MNI	Mean imputation
mQTL	Metabolic quantitative trait locus
MV	Metabolische Vorhersage
NAM	Nested association mapping
NGS	Next-generation sequencing
NMR-MS	Kernmagnetische Resonanz-Massenspektrometrie
PAMPs	Pathogen-associated molecular patterns
QTL	Quantitative trait locus
$r_{ab}$	Vorhersagefähigkeit
$r_{ac}$	Vorhersagegenauigkeit
RAPD	Randomly Amplified Polymorphic DNA
RFLP	Restriction Fragment Length Polymorphism
RR-BLUP	Ridge-Regression Best Linear Unbiased Prediction
SHO	Schossen
SNP	Single Nucleotide Polymorphism
SSR	Simple Sequence Repeat
TGW	Tausendkorngewicht
TP	Trainingspopulation
YLD	Kornertrag

## Tabellenverzeichnis

<b>Tab. 1.</b> Liste der erhobenen Merkmale für HEB-25 im achtjährigen Feldversuch (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)). .....	14
<b>Tab. 2.</b> Deskriptive Statistik der phänotypischen Merkmale für die Jahre 2011 bis 2018 (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)). .....	24
<b>Tab. 3.</b> Zusammenfassung der genomischen und metabolischen Vorhersage, BayesB-Modell (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)). .....	26
<b>Tab. 4.</b> Ergebnisse der genomischen und metabolischen Vorhersage für beide Probennahmen, BayesB-Modell (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)). .....	29
<b>Tab. 5.</b> Ergebnisse für die metabolische Vorhersage mit dem BayesB-Modell, phänotypischen Daten 2017 und Metaboliten des ersten Probennahmedatums (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)). .....	32
<b>Tab. 6.</b> Zusammenfassung der GWAS Ergebnisse (modifiziert nach Gemmer et al. 2021). .....	38
<b>Tab. 7.</b> Liste ausgewählter mQTL der Metaboliten (modifiziert nach Gemmer et al. 2021). .....	42

## Abbildungsverzeichnis

<b>Abb. 1.</b> Schematische Darstellung des Prozesses in der Genomischen Selektion (GS) (modifiziert nach Heffner et al. (2009)).	6
<b>Abb. 2.</b> Verteilung der Marker auf den Chromosomen, basierend auf der Referenzsequenz 1.0 (Mascher et al. 2017) (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).	12
<b>Abb. 3.</b> Luftbild vom 22. Mai 2017, Datum der ersten Probennahme (aufgenommen von Prof. Dr. Björn Junker).	16
<b>Abb. 4.</b> Darstellung des Ablaufes der Probennahme am 22. Mai 2017 (aufgenommen von Prof. Dr. Björn Junker; auf den Bildern zu sehen sind von links nach rechts: Daniel von Maydell, Mathias Wiegmann, Sebastian Müller und Dr. Andreas Maurer).	16
<b>Abb. 5.</b> Kreuzvalidierte Vorhersagegenauigkeiten der Merkmale mit SNP Daten, jeweils für RR-BLUP und BayesB (Gemmer et al. 2020).	27
<b>Abb. 6.</b> Geschätzte Effekte der Metaboliten im BayesB-Modell ( $\hat{u}$ ) und Pearson'scher Korrelationskoeffizient ( $r$ ) der Metaboliten und HEA. Regressionslinie $r = 0,39$ (Gemmer et al. 2020).	31
<b>Abb. 7.</b> Pearson'sche Korrelationen der <u>SNP-Effekte</u> , geschätzt für die jeweiligen Merkmale im BayesB-Modell. Signifikante Korrelationskoeffizienten sind mit * $p < 0,05$ , ** $p < 0,01$ und *** $p < 0,0001$ gekennzeichnet (Gemmer et al. 2020).	33
<b>Abb. 8.</b> Pearson'sche Korrelationen von <u>Metabolit-Effekten</u> , geschätzt für die jeweiligen Merkmale im BayesB-Modell. Signifikante Korrelationskoeffizienten sind mit * $p < 0,05$ , ** $p < 0,01$ und *** $p < 0,0001$ gekennzeichnet (Gemmer et al. 2020).	33
<b>Abb. 9.</b> Pearson'sche Korrelationen aller Merkmale auf der Grundlage von <u>BLUEs</u> der Merkmale über Jahre hinweg. Signifikante Korrelationskoeffizienten sind mit * $p < 0,05$ , ** $p < 0,01$ und *** $p < 0,0001$ gekennzeichnet (Gemmer et al. 2020).	34
<b>Abb. 10.</b> Variation der Vorhersagegenauigkeit für HEA mit BayesB nach Reduktion der Anzahl von SNP-Markern. Die schwarze Referenzlinie zeigt die Vorhersagegenauigkeit unter Verwendung aller SNP-Marker im Modell an. Die rote Linie zeigt den Trend der Vorhersagegenauigkeit durch Auswahl der besten Metaboliten (Metaboliten mit den höchsten Effekten im BayesB-Modell), die blaue Linie zeigt den Verlauf der Vorhersagegenauigkeit durch zufällige Auswahl der Metaboliten (Gemmer et al. 2020).	35
<b>Abb. 11.</b> Variation der Vorhersagegenauigkeit für HEA mit BayesB nach Reduktion der Anzahl der Metaboliten. Die schwarze Referenzlinie zeigt die Vorhersagegenauigkeit unter Verwendung aller Metaboliten im Modell an. Die rote Linie zeigt den Trend der Vorhersagegenauigkeit durch Auswahl der besten Metaboliten (Metaboliten mit den höchsten Effekten im BayesB-Modell), die blaue Linie zeigt den Verlauf der Vorhersagegenauigkeit durch zufällige Auswahl der Metaboliten (Gemmer et al. 2020).	36
<b>Abb. 12.</b> Geschätzter mittlerer $r^2$ -Wert der Metaboliten in der GWAS ( $r^2$ GWAS), aufgetragen gegen die SNP-basierte Heritabilität ( $h^2$ ) der Metaboliten, erste Probennahme. Regressionslinie (rote Linie) $r = 0,63$ (Gemmer et al. 2021).	39

<b>Abb. 13.</b> Geschätzter mittlerer $r^2$ -Wert der Metaboliten in der GWAS ( $r^2$ -GWAS), aufgetragen gegen die SNP-basierte Heritabilität ( $h^2$ ) der Metaboliten, zweite Probennahme. Regressionslinie (rote Linie) $r = 0,81$ (Gemmer et al. 2021).....	39
<b>Abb. 14.</b> Heatmap des Korrelationsmusters zwischen Metaboliten der ersten Probennahme. Die schwarze Umrandung zeigt einen Korrelations-Hotspot von Zuckern und zuckerähnlichen Metaboliten, einschließlich derer, die für die mQTL-Analyse gefunden wurden (Gemmer et al. 2021). .....	40
<b>Abb. 15.</b> Heatmap des Korrelationsmusters zwischen Metaboliten der zweiten Probennahme. Die schwarze Umrandung zeigt einen Korrelations-Hotspot von Zuckern und zuckerähnlichen Metaboliten, einschließlich derer, die für die mQTL-Analyse gefunden wurden (Gemmer et al. 2021). .....	40
<b>Abb. 16.</b> Heatmap des Korrelationsmusters zwischen Metaboliten der ersten und zweiten Probennahme. Die schwarze Umrandung zeigt den Korrelations-Hotspot der Zucker und zuckerähnlichen Metaboliten beider Probennahmen an, einschließlich derer, die für die in mQTL-Analyse gefunden wurden (Gemmer et al. 2021). .....	41
<b>Abb. 17.</b> Pearson'sche Korrelationskoeffizienten der in dieser Studie untersuchten Metaboliten. Signifikante Korrelationskoeffizienten sind mit * $p < 0,05$ , ** $p < 0,01$ und *** $p < 0,0001$ gekennzeichnet (Gemmer et al. 2021). .....	41
<b>Abb. 18.</b> Manhattan-Plot aller Metaboliten des ersten Probennahmedatums. Alle Metaboliten zeigten signifikante Marker-Merkmal-Assoziationen auf Chromosom 1H. Die verschiedenen Formen und Farben der Punkte unterscheiden die Metaboliten und die assoziierten SNPs. Die x-Achse zeigt die Chromosomen mit SNP-Position basierend auf der Morex-Referenzsequenz 1.0 (Mascher et al. 2017), die Detektionsrate (DR) ist auf der y-Achse angegeben. Die gestrichelte Linie zeigt die Schwelle von $DR > 25$ , die als Signifikanzschwelle verwendet wurde (Gemmer et al. 2021). .....	43
<b>Abb. 19.</b> Manhattan-Plot aller Metaboliten des zweiten Probennahmedatums. Alle Metaboliten zeigten signifikante Marker-Merkmal-Assoziationen auf Chromosom 1H. Die verschiedenen Formen und Farben der Punkte unterscheiden die Metaboliten und die assoziierten SNPs. Die x-Achse zeigt die Chromosomen mit SNP-Position basierend auf der Morex-Referenzsequenz 1.0 (Mascher et al. 2017), die Detektionsrate (DR) ist auf der y-Achse angegeben. Die gestrichelte Linie zeigt die Schwelle von $DR > 25$ , die als Signifikanzschwelle verwendet wurde (Gemmer et al. 2021). .....	44
<b>Abb. 20.</b> Anzahl der gemeinsamen mQTL zwischen fünf korrelierten Metaboliten. Alle Metaboliten haben den Haupt-mQTL auf Chromosom 1H gemeinsam (Gemmer et al. 2021).....	45

## Tabellenverzeichnis des Anhangs

<b>Tab. A1.</b> Detaillierte Informationen über die Feldversuche in den Jahren 2011 bis 2018 (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).	68
<b>Tab. A2.</b> Liste der Metaboliten der ersten Probennahme (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).	69
<b>Tab. A3.</b> Liste der Metaboliten der zweiten Probennahme (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).	73
<b>Tab. A4.</b> Ergebnisse der genomischen und metabolischen (erste Probennahme) Vorhersage mit dem RR-BLUP-Modell (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).	77
<b>Tab. A5.</b> Deskriptive Statistik der Metaboliten der ersten Probennahme (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).	78
<b>Tab. A6.</b> Deskriptive Statistik der Metaboliten der zweiten Probennahme (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).	81
<b>Tab. A7.</b> Pearson'sche Korrelationskoeffizienten zwischen Merkmalen und Metaboliten und geschätzte Metaboliteffekte im BayesB-Modell, erste Probennahme (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).	84
<b>Tab. A8.</b> Pearson'sche Korrelationskoeffizienten zwischen Merkmalen und Metaboliten und geschätzte Metaboliteffekte im BayesB-Modell, zweite Probennahme (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).	98
<b>Tab. A9.</b> Pearson'scher Korrelationskoeffizient zwischen Merkmalen (phänotypische Daten von 2017) und Metaboliten der ersten Probennahme (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).	112
<b>Tab. A10.</b> Detaillierte mQTL-Liste der ersten Probennahme (modifiziert nach Gemmer et al. 2021).	126
<b>Tab. A11.</b> Detaillierte mQTL-Liste der zweiten Probennahme (modifiziert nach Gemmer et al. 2021).	127
<b>Tab. A12.</b> Erklärte phänotypische Varianz ( $r^2$ ) definierter mQTL Regionen für untersuchte Metaboliten (modifiziert nach Gemmer et al. 2021).	128
<b>Tab. A13.</b> Person'sche Korrelationskoeffizienten zwischen Blühzeitpunkt und Metaboliten, beide Probennahmen (modifiziert nach Gemmer et al. 2021).	130
<b>Tab. A14.</b> Geschätzte familienspezifische Effekte für detektierte mQTL, erste Probennahme (modifiziert nach Gemmer et al. 2021).	134
<b>Tab. A15.</b> Geschätzte familienspezifische Effekte für detektierte mQTL, zweite Probennahme (modifiziert nach Gemmer et al. 2021).	135



## Abbildungsverzeichnis des Anhangs

<b>Abb. A 1.</b> Boxplots aller Merkmale für die einzelnen Jahre, über die Behandlungsstufen hinweg (Gemmer et al. 2020).....	141
<b>Abb. A2.</b> Kreuzvalidierte Vorhersagegenauigkeiten der Merkmale unter Verwendung der Metabolitdaten (erste Probennahme) von RR-BLUP und BayesB (Gemmer et al. 2020). .....	141
<b>Abb. A3.</b> Genomische Heritabilitäten aller Metaboliten. Blaue Punkte markieren das $h^2$ des jeweiligen Metaboliten (Gemmer et al. 2020). .....	142
<b>Abb. A4.</b> Euklidische Distanzen, geschätzt mit SNPs bzw. Metaboliten. Gegeneinander aufgetragen. $R = 0,04$ , $p$ -Wert $< 0,0001$ (Gemmer et al. 2020).....	143
<b>Abb. A5.</b> Variation der Vorhersagegenauigkeit für ausgewählte Merkmale in BayesB durch Reduzierung der verwendeten SNPs. Die schwarze Linie zeigt die Vorhersagegenauigkeit unter Verwendung aller SNP-Marker im Modell an (Gemmer et al. 2020).....	145
<b>Abb. A6.</b> Variation der Vorhersagegenauigkeit für ausgewählte Merkmale in BayesB durch Reduzierung der verwendeten Metaboliten. Die schwarze Linie zeigt die Vorhersagegenauigkeit unter Verwendung aller Metaboliten im Modell an (Gemmer et al. 2020).....	147
<b>Abb. A7.</b> Histogramme aller Metaboliten (nach Box-Cox Transformierung) der ersten Probennahme (Gemmer et al. 2021). .....	156
<b>Abb. A8.</b> Histogramme aller Metaboliten (nach Box-Cox Transformierung) der zweiten Probennahme (Gemmer et al. 2021). .....	165

# 1. Einleitung

## 1.1 Gerste (*Hordeum vulgare* ssp. *vulgare*)

Gerste (*Hordeum vulgare* ssp. *vulgare*) ist eine der wichtigsten Getreidearten weltweit. Vor ungefähr 10.000 Jahren wurde sie als eine der ersten Pflanzen aus der Wildform *Hordeum vulgare* ssp. *spontaneum* im Fruchtbaren Halbmond domestiziert (Sakuma et al. 2011; Schmid et al. 2018). Mehrere Studien führten zu dem Ergebnis, dass neben dem Fruchtbaren Halbmond noch mehr Domestikationszentren existieren. Als zusätzliche Domestikationsorte werden die westliche Mittelmeerregion, Äthiopien sowie Tibet diskutiert (Dai et al. 2012; Igartua et al. 2013). Das vermutlich wichtigste Domestikationsereignis war der Verlust der Spindelbrüchigkeit der Ähren. Zwei Gene, *Btr1* und *Btr2*, bestimmen unabhängig voneinander die Expression des Phänotyps (Schmid et al. 2018). In beiden Fällen bewirken rezessive Allele die Nichtbrüchigkeit der Ährenspindel (Pourkheirandish et al. 2015). Diese Mutation der Spindelbrüchigkeit wurde unabhängig voneinander an zwei verschiedenen Orten im Nahen Osten nachgewiesen, was die These multipler Domestikationszentren untermauert (Schmid et al. 2018). Die weltweite Anbaufläche der Gerste betrug in 2017/18 48,1 Millionen Hektar (Statista 2020a), wobei die Sommerform dominiert. Damit ist sie die viertwichtigste Getreideart nach Reis, Mais und Weizen. Mit 2,8 Tonnen pro Hektar liegt die Gerste bezüglich ihres durchschnittlichen Flächenertrags ebenfalls an vierter Stelle weltweit (Statista 2020c). In Deutschland werden deutlich höhere Erträge erzielt. Selbst im von extremer Trockenheit geprägten Jahr 2018 konnte die Sommergerste einen Durchschnittsertrag von 4,95 Tonnen pro Hektar realisieren (Statista 2020b; Wetterdienst 2018). Unter diesen Umständen ist die relativ geringe Differenz zum zehnjährigen Durchschnitt von 5,3 Tonnen pro Hektar beachtlich (Statista 2020b). Dies verdeutlicht die Anpassungsfähigkeit der Gerste und ist ein Grund für die weltweite Kultivierung, auch auf extremen Standorten (Forsberg et al. 2015). Gerste wird hauptsächlich als Tierfutter und für die Produktion von Bier und Whiskey genutzt. Auch die Bedeutung in der Humanernährung steigt seit Jahren (Dockter und Hansson 2015). Der Grund hierfür sind die positiven gesundheitlichen Aspekte, hervorgerufen durch Beta-Glucane der Gerste. Diese können das Risiko kardiovaskulärer Erkrankungen reduzieren. Darüber hinaus wird über eine vorbeugende Wirkung gegenüber Diabetes Typ 2 berichtet (Sullivan et al. 2013).

### 1.1.1 Halle Exotic Barley (HEB-25)

Domestizierung und Züchtung auf Ertragsleistung bei Elitegerste (*Hordeum vulgare* ssp. *vulgare*) führten zu einer Verringerung der Biodiversität durch Allelerosion, dem so genannten genetischen Flaschenhalseffekt. Dieses Phänomen trifft auch auf die meisten anderen Kulturpflanzenarten zu (Tanksley und McCouch 1997; Zamir 2001). Folglich wird eine weitere Verbesserung der Leistungsfähigkeit von Gerste immer schwieriger. Hinzu kommt, dass die aktuellen Szenarien des Klimawandels und die zunehmende Weltbevölkerung die Züchter vor große Herausforderungen stellen.

Die Verwendung von Wildgersten (*Hordeum vulgare* ssp. *spontaneum*) bei der Züchtung von Elitegersten ermöglicht es, der genetischen Verarmung der Elitegersten zu begegnen. Die in gemäßigten Breiten adaptierte Wildgerste zeichnet sich durch ein reiches Repertoire an allelischer Variation aus. Zahlreiche Studien belegen, dass sich darunter vorteilhafte Wildallele befinden, die für eine Verbesserung der agronomisch wichtigen Merkmalskomplexe Krankheitsresistenz, Malz- und Brauqualität, abiotische Stresstoleranz und Ertragsstabilität genutzt werden können (Saade et al. 2016; Schmalenbach et al. 2008; Schmalenbach und Pillen 2009; Wiegmann et al. 2019).

Die Wildgerstenpopulation HEB-25 („Halle Exotic Barley“) stellt die weltweit erste „nested association mapping“ (NAM) Population der Gerste dar. Die NAM Methodik wurde von McMullen et al. (2009) zur Aufklärung der genetischen Architektur komplexer Merkmale bei Mais (*Zea mays*) entwickelt. Bei einer NAM Population ist es möglich, seltene Allele bei gleichzeitig hoher Kartierungsauflösung zu identifizieren. Die HEB-25 wurde zwischen 2007 und 2010 aus der parallelen Kreuzung und Rückkreuzung der Elitegerstensorte Barke mit 25 hoch diversen Wildgersten erzeugt (Maurer et al. 2015; Schnaithmann et al. 2014). Die Population umfasst 1.420 BC<sub>1</sub>S<sub>3</sub> Linien mit einer Häufigkeit des exotischen Allels von 25 %. Die Wildgersten wurden zur Maximierung der genetischen Diversität in der HEB-25 ausgewählt und stammen aus Afghanistan, Iran, Irak, Israel, Libanon, Syrien und der Türkei (*Hordeum vulgare* ssp. *spontaneum*) sowie aus Tibet, China (*Hordeum vulgare* ssp. *agriocrithon* (Åberg)).

Die HEB-25 Population war bereits Gegenstand zahlreicher Publikationen zu verschiedenen Themengebieten wie beispielsweise Blühzeitregulation (Maurer et al. 2015), Pflanzenentwicklung (Maurer et al. 2016), Pilzkrankheiten (Vatter et al. 2017; Vatter et al. 2018) und meiotischen Rekombinationsraten (Dreissig et al. 2020).

## 1.2 Methoden der genetischen Analyse

Die Entwicklung molekularer Markertechnologien in den 80er Jahren des vorigen Jahrhunderts hat die Tier- und Pflanzenzüchtung revolutioniert. Der immense Zuchtfortschritt der letzten Jahrzehnte bei Nutzpflanzen wäre ohne den Einsatz verschiedener Arten von molekularen Markern nicht möglich gewesen (Nadeem et al. 2018). Die heute am häufigsten verwendeten Marker sind Einzelnukleotid-Polymorphismus Marker (engl. Single Nucleotide Polymorphism (SNP)). Weitere Marker sind Amplified Fragment Length Polymorphism (AFLP), Randomly Amplified Polymorphic DNA (RAPD), Restriction Fragment Length Polymorphisms (RFLP) und Simple Sequence Repeat (SSR). Die Genotypisierung ermöglicht es, die genetische Variation innerhalb und zwischen Populationen zu quantifizieren und für die Züchtung zu nutzen. Nachdem die Markeranalysen mit den anfänglichen Markersystemen noch vergleichsweise aufwändig waren, gelang mit der Entwicklung von sog. SNP Chips ein Durchbruch in puncto Hochdurchsatzgenotypisierung.

Die Entwicklung des 50K SNP Illumina Infinium iSelect Chips, mit dem Markerinformationen von 44.040 SNPs gleichzeitig abgefragt werden können, stellt als Weiterentwicklung des 9K SNP Chips (Comadran et al. 2012) einen Meilenstein in der Hochdurchsatzsequenzierung von Gerste dar (Bayer et al. 2017). Zum Design des Chips wurden überwiegend „exome capture“ (Mascher et al. 2013) Daten verwendet, welche sich auf die proteinkodierenden Sequenzen beschränken. Für die HEB-25 stehen 50K SNP Daten (Maurer und Pillen 2019) zur Verfügung. Zurzeit werden zudem „exome capture“ Daten generiert. Neben SNP Chips und „exome capture“ Sequenzierung stellt die Genotypisierung durch Sequenzierung (engl. genotyping by sequencing (GBS)) eine schnelle und kostengünstige Methode dar, um die Verbindung Phänotyp-Genotyp herzustellen (Poland und Rife 2012).

Im Jahre 2012 wurde erstmals eine genomweite, physikalische Karte der Genomsequenz der Elitesorte Morex erstellt (International Barley Genome Sequencing Consortium 2012). Mascher et al. (2017) verbesserten die Assemblierung mittels verschiedener bioinformatischer Methoden, was zur Etablierung der RefSeq 1.0 führte. Die wesentliche Verbesserung beruhte auf der Anwendung des sog. „chromosome conformation capture mapping (Hi-C)“. Die Assemblierung wird bei Gerste durch den hohen Anteil repetitiver Elemente und der reduzierten meiotischen Rekombinationen in den perizentromeren Regionen erschwert. Die Verfügbarkeit der

Referenzsequenz ermöglicht Pangenom-Studien, die sich mit der intraspezifischen Vielfalt und Verwandtschaft der Genome innerhalb einer Klade (alle verwandten Arten bis hin zu ihrem jüngsten gemeinsamen Vorfahren) befassen. Hierzu wurde bereits die weiter optimierte RefSeq 2.0 genutzt (Monat et al. 2019).

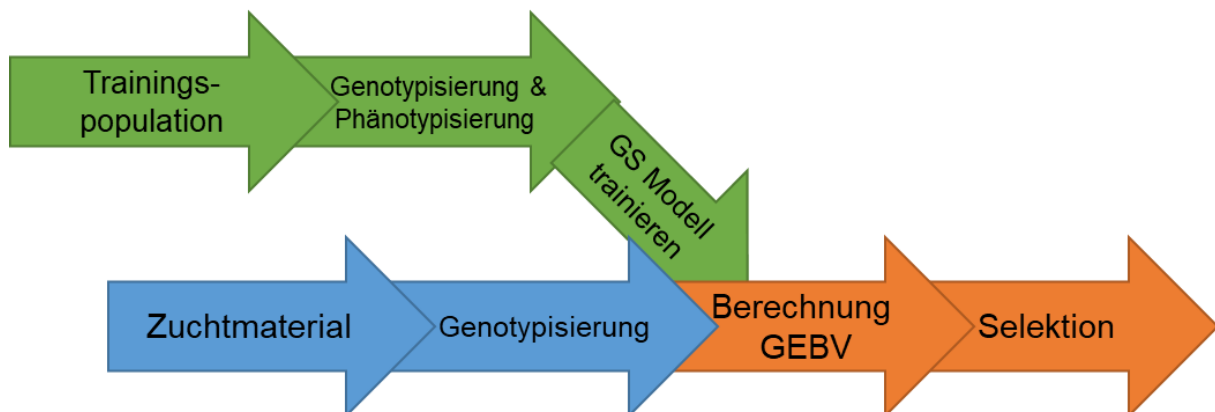
### **1.2.1 Genomische Selektion**

Goddard und Hayes (Goddard und Hayes 2007) definieren die Genomische Selektion (GS) als „eine Form der markergestützten Selektion, bei der genetische Marker verwendet werden, die über das gesamte Genom verteilt sind, so dass alle quantitativen Merkmalsloci (engl. quantitative trait locus (Mehrzahl loci) (QTL)) in einem Kopplungsungleichgewicht (engl. linkage disequilibrium (LD)) mit mindestens einem Marker sind“. Die Grundidee ist, dass genetische Variation in einem quantitativen Merkmal durch verschiedene Allele verursacht wird. Wenn genügend molekulare Marker zur Verfügung stehen, sollten alle Allele mit mindestens einem Marker gekoppelt sein. Hier wird der Unterschied zu klassischen Selektionsmethoden wie Kopplungsstudien und genomweiten Assoziationsstudien (engl. genome wide association study (GWAS)) deutlich. Der Ansatz ist rein statistisch; alle Marker werden in einer multiplen Regression als Variable behandelt. Nicht der Einzeleffekt und die Position eines Markers sind von Interesse, sondern die Gesamtheit aller Markereffekte. Es wird ein genomisch geschätzter Zuchtwert (engl. genomic estimated breeding value (GEBV)) berechnet und für jeden Marker ein niedriger Effekt geschätzt. Für diese Anwendung, die auch als Genomische Vorhersage (engl. genomic prediction (GV)) bezeichnet wird, werden zehn- bis hunderttausende Marker benötigt, welche über das gesamte Genom verteilt sind (Goddard und Hayes 2007; Meuwissen et al. 2001). Diese Quantität ist heutzutage kein Problem mehr, da Hochdurchsatzmethoden, zusammengefasst unter dem englischen Begriff next-generation sequencing (NGS), für die DNA-Sequenzierung zur Verfügung stehen (Barabaschi et al. 2016). Dies erlaubt eine breite Anwendung der GV für prinzipiell alle Lebewesen, einschließlich Tier- und Pflanzenarten sowie in der Humangenetik (Cossa et al. 2014).

GV wurde zuerst in der Tierzucht angewendet, genauer in der Milchviehzucht. Die Milchviehzucht ist sehr zeit- und kostenintensiv, da bis zur Testung der Nachkommen eines Zuchtbullen viel Zeit verstreicht. Durch die Sequenzierung des Rindergenoms wurden viele tausend SNP-Marker verfügbar. Meuwissen et al. (2001) zeigte, dass es

möglich ist, Zuchtwerte für verschiedene Merkmale mit solchen Markerdaten exakt vorherzusagen. Bis zu diesem Zeitpunkt war der Einsatz der klassischen, markergestützten Selektion (engl. marker-assisted selection (MAS)) nur eingeschränkt möglich, da viele wichtige Merkmale, z.B. die Milchleistung, quantitativer Vererbung unterliegen. Quantitative Merkmale werden durch eine große Anzahl von Genen beeinflusst. Hier weisen die klassischen MAS Methoden gewisse Schwächen bei der Quantifizierung von QTL mit kleinen Effekten auf (Hayes et al. 2009). Aus den gleichen Gründen wird GV auch in der Pflanzenzüchtung eingesetzt. Dazu wird eine Trainingspopulation (TP) gebildet. Diese TP ist vollständig phänotypisiert und genotypisiert. Sie dient zur Erstellung eines statistischen Vorhersagemodells. Bevor das Modell angewendet werden kann, ist eine Validierung erforderlich. Dazu sollte es mit einem unabhängigen Satz von Genotypen getestet werden. Die Kreuzvalidierung (KV) ist hier eine geeignete Methode. Zum Beispiel werden bei einer fünffachen KV 80 % der TP verwendet, um die restlichen 20 % vorherzusagen. Dieser Prozess wird mehrmals (meistens 100 Mal) mit wechselnden 80 % Trainings- und 20 % Validierungssätzen wiederholt, was die statistische Robustheit des Modells sicherstellt. Mit diesem Modell wird die Leistung der Individuen vorhergesagt, die nur genotypisiert sind. Abbildung 1 veranschaulicht den Arbeitsablauf der GS. Die Zeit- und Kosteneinsparungen sind offensichtlich. Bereits im Keimblattstadium sind Genotypisierung und damit Genomische Vorhersagen möglich, wodurch auf zeitintensive und teure Feldversuche verzichtet werden kann. Allerdings gibt es Einschränkungen für die Anwendung von GS. Die TP darf sich genetisch nicht zu sehr von der Zuchtpopulation unterscheiden, was eine kontinuierliche Modifikation des Modells notwendig macht. Um das Problem der Überschätzung, engl. overfitting (wegen viel mehr Variablen = DNA-Marker als Beobachtungen = Phänotypen)), zu vermeiden, stehen verschiedene statistische Methoden, lineare gemischte Modelle, zur Verfügung. Gebräuchlich und auch in dieser Arbeit verwendet, sind die Modelle BayesB und Ridge Regression Best Linear Unbiased Prediction (RR-BLUP). In BLUP-Modellen sind die genetischen Varianzen gleichmäßig auf alle Marker verteilt, die Markereffekte sind normalverteilt. Bayes Modelle weisen verschiedenen genomischen Regionen unterschiedliche Varianzanteile zu, wobei eine inverse Chi-Quadrat-Verteilung verwendet wird, die in einer t-Verteilung der Markereffekte resultiert. Die gleichmäßige Schrumpfung aller Markereffekte in BLUP-Modellen führt zu einer Unterschätzung der QTL mit großen Effekten. Das ist der Grund, warum Bayes

Modelle besser für Merkmale geeignet sind, die durch wenige große QTL-Effekte kontrolliert werden (Clark et al. 2011).



**Abb. 1.** Schematische Darstellung des Prozesses in der Genomischen Selektion (GS) (modifiziert nach Heffner et al. (2009)).

Statt der Verwendung von SNP-Markern für GV ist auch die Verwendung von Metaboliten ohne Modellanpassung möglich. Diese Variante der GV wird als metabolische Vorhersage (MV), bezeichnet. MV wurde bereits in mehreren Studien erfolgreich bei verschiedenen Arten wie Reis, Mais und Kartoffeln eingesetzt (Dan et al. 2016; Riedelsheimer et al. 2012a; Steinfath et al. 2010).

Trotz der erwähnten Einschränkungen ist GS eine geeignete Methode, um während des Zuchtprozesses Zeit und Kosten zu sparen. GS ist Gegenstand vieler Forschungsprojekte in der Pflanzengenetik. Auch wenn ihre Bedeutung in der Pflanzenzüchtung noch nicht diejenige der Tierzucht erreicht, besitzt die Methode ein großes Potential für die Zukunft.

### 1.2.2 Genomweite Assoziationsstudien (GWAS)

Genomweite Assoziationsstudien basieren auf der Korrelation zwischen einem genetischen Marker und einem phänotypischen Merkmal innerhalb einer diversen, nicht (eng) verwandten Population. Die Methode stammt aus der Humangenetik und ist ein leistungsfähiges Verfahren, um aus phänotypischen Merkmalsausprägungen Rückschlüsse auf die zugrundeliegende Genetik zu ziehen. Das Ziel ist es, Loci im Genom zu identifizieren, die mit komplexen, quantitativ vererbten Merkmalen in der Population assoziiert sind. Auf diese Weise werden Informationen über die genetische Architektur von Merkmalen und potenziellen Kandidatengenomen generiert. Für letzteres ist jedoch eine Validierung notwendig.

GWAS überwindet zwei grundlegende Einschränkungen klassischer QTL-Studien: Die geringe allelische Diversität (Segregation zwischen zwei Elternteilen) und die begrenzte Kartierungsauflösung aufgrund von geringen Rekombinationsfrequenzen (Korte und Farlow 2013). Durch die Verwendung natürlicher Populationen oder eines ausgewählten Sets von Individuen gibt es eine große genetische Vielfalt, zudem sind mehr als zwei Allele an einem Genort möglich. Wie bei GV ist auch für GWAS eine hohe Anzahl von Markern (zehn- bis hunderttausende) erforderlich, die gleichmäßig über das Genom verteilt sind. Aus diesem Grund und aufgrund zahlreicher Rekombinationsereignisse in der großen, genetisch diversen Population liegt eine hohe Kartierungsauflösung vor. Im Zusammenhang mit GWAS ist LD von enormer Bedeutung. Im Gegensatz zur Kopplung (engl. linkage, Genotypparameter) ist LD ein Populationsparameter, welcher die nicht-zufällige Assoziation von Allelen an zwei oder mehreren Loci beschreibt (Slatkin 2008). Wie bei Kopplung kann die Ursache für das gemeinsame Auftreten eine physische Kopplung sein. Zusätzlich kann alles, was ein häufiges, gemeinsames Auftreten bestimmter Allelkombinationen auf Populationsebene begünstigt, der Grund für LD sein (Populationsstruktur, Populationsgröße, Selektion, Reproduktionssystem) (Visscher et al. 2012).

Wie auch bei GV, liegt die Schwierigkeit der GWAS in der statistischen Auswertung. Der Grund dafür ist die komplexe genetische Zusammensetzung der Kartierungspopulation. Es bestehen unterschiedliche Verwandtschaftsverhältnisse zwischen den Individuen. Wenn diese Punkte bei der Auswertung vernachlässigt werden, führt dies zu einer hohen Typ-I-Fehlerrate (falsch-positiver Fehler). Dies erschwert die Interpretation der identifizierten QTL. Basierend auf gemischten Modellen wurden verschiedene biometrische Verfahren zur Assoziationskartierung bei Pflanzen entwickelt, welche die Typ-I-Fehlerrate niedrig halten. Damit ein QTL zuverlässig erkannt werden kann, darf das Merkmal nicht zu stark mit der Populationsstruktur korreliert sein (alle Merkmale unter lokaler Anpassung). Problematisch ist es auch, wenn die Allelfrequenzen an den QTL sehr niedrig oder sehr hoch sind, was zu geringen Varianzen führt.

Trotz der genannten Einschränkungen werden GWAS in der Pflanzengenetik seit vielen Jahren sehr erfolgreich angewandt. Die Methode hilft, Beziehungen zwischen verschiedenen Merkmalen und den zugrundeliegenden genetischen Regionen



aufzuklären, bei Gerste beispielsweise bezüglich Krankheitsresistenz und Blüte (Aghnoum et al. 2010; Grewal et al. 2012; Maurer et al. 2015).

Wenn GWAS auf Metaboliten angewendet wird, werden die detektierten QTL als metabolic quantitative trait locus (mQTL) bezeichnet. Dies wurde bereits bei Modellpflanzen wie *Arabidopsis* sowie bei wichtigen Kulturpflanzen wie Reis, Weizen und Mais mit Metabolitdaten aus Blättern (Chen et al. 2014; Matros et al. 2016; Riedelsheimer et al. 2012b) oder Körnern (Wen et al. 2014) erfolgreich durchgeführt. Alle Studien berichten über eine komplexe genetische Architektur des Metaboloms, die stark von Umwelteinflüssen beeinflusst wird (Chan et al. 2010).

Frühere mQTL Studien in Gerste konzentrierten sich auf Stressreaktionen. Dürretolerante Genotypen reduzierten den Kohlenstoffmetabolismus im Fahnenblatt signifikant mehr als nicht angepasste Linien (Templer et al. 2017). Eine andere Studie beobachtete Veränderungen bei Ferulasäure- und Sinapinsäurederivaten sowie bei acylierten Glykosiden von Flavonen unter Trockenstress (Piasecka et al. 2017). In beiden Studien wurden mQTL für verschiedene antioxidative Metaboliten gefunden. In einer weiteren Studie wurde die Resistenz von Fusarium Headblight (FHB) in Gerste mit Metaboliten in Verbindung gebracht, die hauptsächlich zu den chemischen Gruppen der Phenylpropanoide, Hydroxyzimtsäureamide, Flavonoide, Fettsäuren, Terpenoide und Alkaloide gehören (Chamarthi et al. 2014).

### **1.3 Metaboliten in der Pflanzenzüchtung**

Metaboliten sind Zwischen- oder Endprodukte im Stoffwechsel lebender Organismen. Beispiele sind Aminosäuren, organische Säuren, Zucker und Alkohole. Der wissenschaftliche Teilbereich, der dieses Thema untersucht, heißt Metabolomik (analog zu den Begriffen Genomik, Transkriptomik und Proteomik). Dies umfasst die Erforschung der Umsatzraten und Enzymaktivitäten der einzelnen Stoffwechselwege, der Wechselwirkung zwischen verschiedenen Stoffwechselwegen und zwischen Metaboliten (Fiehn 2002; Gomez-Casati et al. 2013). Das Metabolom ist ein hochdynamisches System, das sowohl durch Gen- und Proteinvariationen als auch durch Umwelteinflüsse geprägt wird (Fiehn 2002). Wie bei der Genomsequenzierung stehen Hochdurchsatzmethoden für das Metaboliten-Screening zur Verfügung, z.B. eine Kombination von Gaschromatographie und Massenspektrometrie (GC-MS). Andere Hochdurchsatzmethoden wie die Flüssigchromatographie (engl. liquid

chromatography)-Massenspektrometrie (LC-MS) und die kernmagnetische (engl. nuclear) Resonanz-Massenspektrometrie (NMR-MS) wurden ebenfalls für die Metabolitenbestimmung etabliert (Fernie und Schauer 2009). Dies ermöglicht eine zeit- und kosteneffiziente Analyse. Die Anwendungen sind breit gefächert: In der Humanmedizin kann die Hoch- oder Herunterregulierung bestimmter Metaboliten auf Krankheiten hinweisen (Carrola et al. 2010). Bei Pflanzen spielen Metaboliten eine wichtige Rolle bei Stressreaktionen auf Pathogenbefall oder abiotischen Stress wie Trockenheit (Piasecka et al. 2017; Templer et al. 2017). Die Expression von Threhalose-6-Phosphat-Synthase 1 beispielsweise erhöht die Trockentoleranz bei Kartoffeln (Kondrak et al. 2012). Prolin spielt eine Schlüsselrolle in Bezug auf Trocken- und Salztoleranz bei verschiedenen Pflanzen (Kaur et al. 2010; Luo 2015). Phenylpropanoid-Polyamin kommt bei der Abwehr von pflanzenfressenden Insekten in *Nicotiana attenuata* eine Bedeutung zu. Flavonoide sind wichtig für den Schutz der Pflanze vor UV-Licht (Kaur et al. 2010). Verschiedene Schätzungen für die Anzahl der Metaboliten im Pflanzenreich schwanken zwischen 200.000 und 1.000.000 (Dixon 2003). Es wird zwischen zwei Gruppen von Metaboliten unterschieden: Primäre Metaboliten sind für die Pflanzenentwicklung verantwortlich. Sekundäre Metaboliten werden durch Stressreaktionen gebildet. Die beiden Gruppen unterliegen unterschiedlichen genetischen Mechanismen. Primäre Metaboliten werden von mehreren Loci mit geringen Effekten kontrolliert, während sekundäre Metaboliten von wenigen Loci mit großen Effekten kontrolliert werden (Luo 2015).

Metaboliten sind aus mehreren Gründen für die Pflanzenzüchtung interessant. Die Expression von Metaboliten spiegelt die Genotyp-Umweltinteraktionen wider. Metaboliten können als Verbindung zwischen Genotyp und Phänotyp angesehen werden. Etablierte Quantifizierungsmethoden ermöglichen die Verwendung einer großen Anzahl von Metaboliten, um phänotypische Merkmale mit MV vorherzusagen. GWAS zur Metabolitenexpression helfen, verantwortliche Gene zu identifizieren.

Unter den Metaboliten spielen Zucker eine Schlüsselrolle bei der Signalinduktion, dem Pflanzenwachstum und der Pflanzenentwicklung (Evers 2015; Lastdrager et al. 2014; Rolland et al. 2006). Bei Gerste sind zuckerbezogene Gene mit Bestockung und Pflanzenhöhe assoziiert (Alqudah et al. 2016). Mehrere Experimente zeigten den Einfluss unterschiedlicher Zuckergehalte auf die Blüte und Seneszenz (Gibson 2005). Darüber hinaus wird über die Rolle von Zuckern bei den Abwehrmechanismen von

Pflanzen in zahlreichen Studien berichtet (zusammengefasst in Bolouri Moghaddam und Van den Ende (2012)). Generell hat die Aufklärung dieses hochkomplexen Zusammenspiels von Genen, Metaboliten und Umwelt ein großes Potential für die Zukunft und ist Gegenstand zahlreicher Projekte in der Pflanzenforschung.

#### **1.4 Zielsetzung**

In der Arbeit wird die HEB-25 neben den phänotypischen Merkmalen (Entwicklungsparameter wie Schossen, Blühbeginn, Reife sowie Ertragsparameter wie Tausendkorngewicht, Kornzahl pro Ähre und Ähren pro m<sup>2</sup>) auch hinsichtlich des Metabolitenprofils der verschiedenen Genotypen untersucht, welches zu einem frühen und einem späten Entwicklungsstadium der Pflanzen bestimmt wurde. Hier wird ein Augenmerk auf die Variation der Metaboliten aufgrund des Genotyps sowie aufgrund des Zeitpunktes der Probennahme gelegt. Die Arbeit gliedert sich in folgende Punkte:

- Per Genomischer Vorhersage wird die Güte der Vorhersage der untersuchten Merkmale basierend auf a) 50k SNP-Daten, b) Metabolitdaten, c) beiden Datensätzen gemeinsam verglichen.
- Zudem wird geprüft, welchen Einfluss der Zeitpunkt der Probennahme (früh/spät) auf die Vorhersagegenauigkeit hat und inwieweit dies bezüglich der verschiedenen Merkmale variiert.
- Mittels genomweiter Assoziationsstudie (GWAS) werden mQTL und Kandidatengene lokalisiert, welche die Gehalte der gemessenen Metabolite in der HEB-25 kontrollieren. Die Verbindung zwischen Metaboliten, Phänotypen und Genotypen sowie ihre Wechselwirkungen werden hier näher beleuchtet.

## 2. Material und Methoden

### 2.1 Pflanzenmaterial

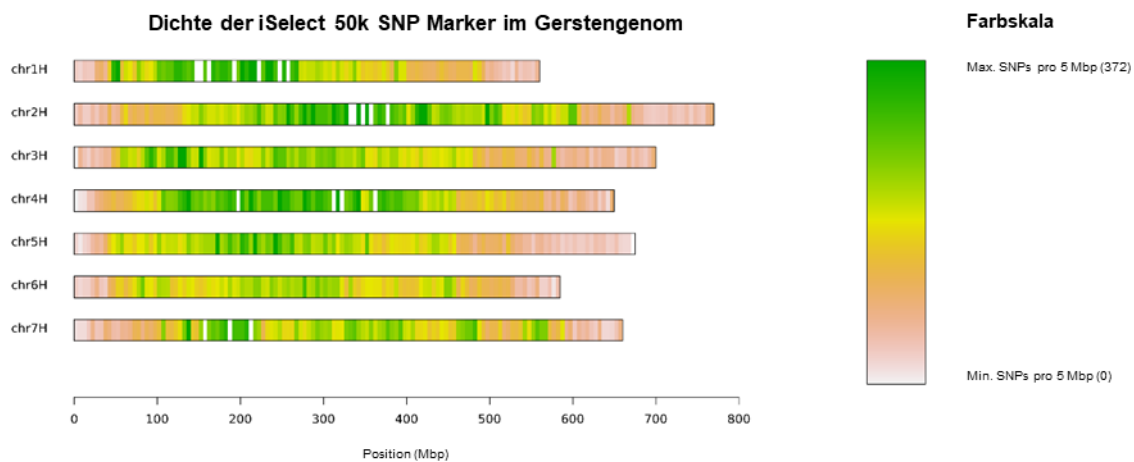
Die Population HEB-25 (Halle Exotic Barley) ist die weltweit erste Gersten-NAM-Population (nested association mapping). Diese wurde durch Kreuzung und anschließende Rückkreuzung von 25 Akzessionen der Wildgerste (24 *Hordeum vulgare* ssp. *spontaneum* und eine *Hordeum vulgare* ssp. *agriocrithon*) mit der deutschen Elitegerste Barke (*Hordeum vulgare* ssp. *vulgare*) erstellt. Die resultierende BC<sub>1</sub>S<sub>3</sub>-Generation umfasst 1.420 Linien (von denen 1.307 bzw. 1.229 in dieser Arbeit verwendet wurden), unterteilt in 25 Familien (für eine detaillierte Beschreibung der Population siehe Maurer et al. (Maurer et al. 2015)).

Neben den HEB Linien wurden auch Kontroll-Genotypen (Elitegersten) angebaut und analysiert. Dies erlaubte es, auf wiederholte Genotypen zurückzugreifen, was insbesondere hinsichtlich der einjährigen Erhebung der Metabolitenprofile einen wichtigen Indikator für die Wiederholbarkeit der Daten darstellte. Im für die Metabolitenanalyse relevanten Jahr 2017 umfasste diese Teilmenge 17 Genotypen (Gemmer et al. 2020).

### 2.2 Genotypdaten

Die DNA von Mischproben aller Linien der BC<sub>1</sub>S<sub>3:8</sub> wurde entsprechend dem Protokoll des Herstellers BioSprint 96 DNA Plant Kit und einer BioSprint Arbeitsplattform (Qiagen, Hilden, Deutschland) extrahiert. Anschließend wurde der Extrakt mit destilliertem Wasser verdünnt, sodass die Konzentration der DNA ca. 50 ng/ µl betrug. Diese Lösung wurde zur Genotypisierung mit dem kürzlich entwickelten Infinium iSelect 50k chip (Bayer et al. 2017) zu TraitGenetics, Gatersleben, gegeben. SNP-Marker, die die Qualitätskriterien nicht erfüllten (polymorph in mindestens einer HEB-Familie, < 10 % Ausfallrate, < 12,5 % Heterozygote), wurden aus dem Datensatz entfernt. Insgesamt erfüllten 33.005 SNPs die Qualitätskriterien, welche entsprechend in dieser Arbeit analysiert wurden (Maurer und Pillen 2019). Diese Marker sind gleichmäßig mit wenigen Lücken über das gesamte Genom verteilt, mit abnehmender Dichte in den Telomerregionen (Abb. 2). Basierend auf dem Referenzgenotyp Barke kann das Wildgersten-Allel in jeder segregierenden Familie spezifiziert werden. Um die quantitative Identity-by-State (IBS) Matrix zu erstellen, wurde das homozygote Barke-Allel als 0 codiert, während HEB-Linien, die einen homozygoten

Wildgerstengenotyp zeigten, ein Wert von 2 zugewiesen wurde. Folglich wurde heterozygoten HEB-Linien ein Wert von 1 zugewiesen. Wenn ein SNP in einer HEB-Familie monomorph, in einer zweiten Familie jedoch polymorph war, wurde den Linien der ersten HEB-Familie ein Genotypwert von 0 zugewiesen, da sich ihr Zustand nicht vom Barke-Allel unterscheidet. Lücken aufgrund fehlender Genotypen (0,84 %) wurden unter Anwendung des MNI-Ansatzes (Mean imputation) geschätzt (Rutkoski et al. 2013). Die Genotypmatrix ist bei e!DAL hinterlegt (Arend et al. 2014; Maurer und Pillen 2019).



**Abb. 2.** Verteilung der Marker auf den Chromosomen, basierend auf der Referenzsequenz 1.0 (Mascher et al. 2017) (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).

### 2.3 Feldversuche

In den Jahren 2017 und 2018 wurden Feldversuche mit der HEB-25 Population auf der Versuchsstation Kühnfeld der Universität Halle (51 ° 29'45,72 "N; 11 ° 59'36,62" E) durchgeführt, um phänotypische Daten zu generieren. Die Beprobung zur Erstellung der Metabolitenprofile wurde in 2017 vorgenommen. Der Versuch wurde als komplett randomisiertes Blockdesign mit zwei unterschiedlichen Behandlungen (Fun0 ohne und Fun1 mit Fungizid) in zwei Blöcken angelegt. 2017 bestanden die Parzellen aus zwei Reihen mit 50 Samen mit einer Reihenlänge von 1,40 m, einem Abstand von 0,20 m zwischen den Reihen und 0,50 m zwischen den Parzellen. 2018 wurden die Pflanzen in dreireihigen Parzellen mit einer Länge von 1 m und einem Abstand von 15 cm zwischen den Reihen ausgesät. Düngung und Pflanzenschutz wurden nach örtlicher Praxis durchgeführt. Detaillierte Informationen können der Tabelle Tab. A1 entnommen werden.

## 2.4 Phänotypdaten

Die folgenden phänotypischen Merkmale wurden im Rahmen der Feldversuche erhoben: Schossen (engl. shooting (SHO)), Blüte (engl. heading (HEA)), Reife (engl. maturity (MAT)); Pflanzenhöhe (engl. plant height (HEI)); Anzahl Ähren pro m<sup>2</sup> (engl. ears per m<sup>2</sup> (EAR)); Kornzahl pro Ähre (engl. grains per ear (GNE)); Tausendkorngewicht (engl. thousand-grain weight (TGW)); Kornertrag (engl. yield (YLD)). Tab. 1 zeigt eine detaillierte Beschreibung der erhobenen Merkmale. Im Rahmen der Arbeit wurde auch auf Phänotypdaten der Jahre 2011 bis 2016 zurückgegriffen (Herzig et al. 2018; Maurer et al. 2015). Detaillierte Informationen zu den Feldversuchen aller Jahre sind in Tab. A1 aufgeführt.

**Tab. 1.** Liste der erhobenen Merkmale für HEB-25 im achtjährigen Feldversuch (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).

<b>Abk.</b>	<b>Merkmal</b>	<b>Einheit</b>	<b>Messmethode</b>	<b>Jahre</b>
SHO	Zeit zum Schossen	Tage	Anzahl der Tage von der Aussaat bis zum Erscheinen des ersten Knotens 1 cm über der Bodenoberfläche, für 50 % aller Pflanzen einer Parzelle, BBCH 31 (Lancashire et al. 1991).	2011-2018
HEA	Zeit zum Ährenspitzen (Blüte)	Tage	Anzahl der Tage von der Aussaat bis zum Erscheinen von 50 % der Ährenspitzen an den Haupttrieben einer Parzelle, BBCH 49 (Lancashire et al. 1991).	2011-2018
MAT	Zeit zur Reife	Tage	Anzahl der Tage von der Aussaat bis zur Gelbreife: Korn ist hart und kein Fingernagelabdruck sichtbar, BBCH 87 (Lancashire et al. 1991).	2012-2018
HEI	Pflanzenhöhe	cm	Durchschnittliche Pflanzenhöhe aller Pflanzen einer Parzelle, gemessen von der Bodenoberfläche bis zur Spitze der aufgerichteten Ähren ohne Grannen bei der Reife.	2011-2018
EAR	Ähren pro m <sup>2</sup>	Anzahl	Anzahl der Ähren pro m <sup>2</sup> , gezählt in einem repräsentativen 50-cm-Rahmen in der Mitte einer Reihe der Parzelle und hochgerechnet auf einen m <sup>2</sup> .	2014-2018
GNE	Kornzahl pro Ähre	Anzahl	Anzahl der Körner pro Ähre, berechnet mit dem MARVIN-Samenanalysegerät (GTA Sensorik GmbH, Neubrandenburg, Deutschland) auf der Grundlage einer repräsentativen Probe von 10 Ähren.	2014-2018
TGW	Tausendkorngewicht	g	Gewicht von 1000 Körnern, berechnet nach der Ernte unter Verwendung des MARVIN-Saatgutanalysegerätes auf der Grundlage einer 200 Korn-Saatgutprobe jeder Parzelle (2011-2013). Zuvor wurde das Saatgut gereinigt und Bruchkorn aussortiert.	2011-2018
YLD	Kornertrag	dt/ha	Kornertrag, bestimmt nach der Ernte der gesamten Parzelle (2014-2016) oder berechnet aus den drei Ertragskomponenten EAR, GNE und TGW (2017/18) und auf dt/ha hochgerechnet.	2014-2018

## 2.5 Metabolitdaten

Eine 2 cm Blattprobe wurde aus dem mittleren Bereich des letzten voll entwickelten Blattes jeder HEB-Linie am 22. Mai 2017 bei klarem Himmel zwischen neun und zehn Uhr geschnitten. 29 Personen waren erforderlich, um diesen Zeitplan einzuhalten (Abb. 3). Zu diesem Zeitpunkt befand sich die Mehrzahl der Pflanzen im Entwicklungsstadium BBCH 30-31 (Beginn des Schossens). Das Blatt wurde etwa 1 cm vom Stängel entfernt abgeschnitten und in ein Eppendorf-Röhrchen gesteckt. Der über dem Eppendorf-Röhrchen hervorstehende Teil des Blattes wurde abgeschnitten, das Eppendorf-Röhrchen wurde verschlossen und sofort in flüssigem Stickstoff gefroren, um die Stoffwechselprozesse zu stoppen. Die Proben wurden in Boxen mit Trockeneis umgefüllt und anschließend bei -80 °C gelagert. Abb. 4 illustriert die Vorgehensweise. Alle Parzellen wurden innerhalb einer Stunde beprobt. Die Probennahme wurde am 22. Juni 2017 unter den gleichen Bedingungen (klarer Himmel, Tageszeit, Probennahmeverfahren) wiederholt. Die Pflanzen waren zu diesem Zeitpunkt heterogener und befanden sich zwischen den Entwicklungsstadien BBCH 59-69 (Ende des Ährenschiebens bis Ende der Blüte).





**Abb. 3.** Luftbild vom 22. Mai 2017, Datum der ersten Probennahme (aufgenommen von Prof. Dr. Björn Junker).



**Abb. 4.** Darstellung des Ablaufes der Probennahme am 22. Mai 2017 (aufgenommen von Prof. Dr. Björn Junker; auf den Bildern zu sehen sind von links nach rechts: Daniel von Maydell, Mathias Wiegmann, Sebastian Müller und Dr. Andreas Maurer).

Die gefrorenen Blattproben wurden mit einer Retsch-Kugelmühle (MM 400, Retsch, Deutschland) 30 Sekunden lang bei 20 Hz pulverisiert. Die homogenisierten Blattproben wurden in 700 µl Methanol:Chloroform:Wasser-Lösung (3:2:4) resuspendiert. Diese Lösung enthielt 13 C Sorbitol (8 µg/ml) als internen quantitativen Standard. Die Mischung wurde 20 min bei Raumtemperatur und bei 500 U/min geschwenkt. Danach wurde die Mischung 5 min bei 4°C auf 11.000 X g zentrifugiert. Nach der Extraktion wurden 10 µl des Überstandes in einem Vakuumkonzentrator für 45 min getrocknet. Die Online-Derivatisierung wurde mit dem Mehrzweckprobengeber (MVS, Gerstel, Deutschland) durchgeführt, indem 30 µl Methoxaminhydrochlorid (20 mg/ml in Pyridin) zu den Proben hinzugefügt und 30 min bei 45 °C geschüttelt wurde. Darüber hinaus wurden 45 µl N,O-Bis(trimethylsilyl)trifluoracetamid und 5 µl Alkanstandard (C10-C28; 6 mg/ml) zugegeben und die Proben nochmals 120 min bei 45 °C geschüttelt. Als Qualitätskontrolle für das Messverfahren wurden Blattproben von 10 zufällig ausgewählten Proben der Referenzlinie Barke extrahiert und zusammengeführt. Diese Standards hatten immer die gleiche chemische Zusammensetzung und wurden für die chargeninterne und chargenübergreifende Korrektur der Datenanalyse herangezogen. Alle Proben sowie 20 % der Qualitätskontrollen wurden mit GC-MS (GC-qTOF-System -7890B/7200, Agilent, Santa Clara, USA) analysiert. Ein µl der derivatisierten Proben wurde bei 250 °C im Splitless-Modus injiziert. Die Chromatographie wurde mit einer 30-m-Zebron-Kapillar-GC-Säule (ZB Semi Volatiles, 30 m, 0,25 mm, 0,25 µm) durchgeführt. Der Heliumfluss war konstant auf 1 ml/min eingestellt. Das Temperaturprogramm wurde auf 60 °C mit einem linearen Temperaturgradienten von 10 °C/min auf 320 °C eingestellt. Die Temperatur wurde für 3 min gehalten. Während des gesamten Laufs wurden die Transferleitung, die Quelle und der Quadrupol auf 290 °C, 230 °C bzw. 150 °C eingestellt.

Die Rohdaten wurden mit der MassHunter-Software für die qualitative Analyse (Agilent, B.07.00) und der MassHunter-Software für die quantitative Analyse für QTOF (Agilent, B.08.00) verarbeitet. Zur Identifizierung und Bestätigung der chromatographischen Peaks wurden die Massenspektrenbibliothek NIST 14 (National Institute of Standards and Technology) und Standardverbindungen verwendet. Die Peakflächen wurden mit dem internen Standard, den Qualitätskontrollen und der Frischmasse normalisiert.

Daraus ergaben sich Daten für 1.307 Linien, in denen 158 Metaboliten (Alkane, Aminosäuren, organische Säuren, Zucker und Unbekannte) bestimmt werden konnten. Metaboliten mit > 10 % fehlenden Werten wurden aus dem Datensatz entfernt, so dass 128 Metaboliten für die weiteren Verrechnungen verwendet wurden (Tab. A2). Die Proben aus dem zweiten Termin ergaben Daten für 1.229 Linien mit 159 Metaboliten (ein zusätzlicher unbekannter Metabolit). Nach der Datenbereinigung verblieben 122 Metaboliten für die nachfolgenden Analysen (Tab. A3). Fehlende Werte wurden durch den Minimalwert des jeweiligen Metaboliten ersetzt. Der Grund hierfür liegt darin, dass bei fehlenden Werten die Konzentration des Metaboliten zu niedrig ist, um von der Maschine gemessen werden zu können.

Für eine Teilmenge von 17 Kontroll-Genotypen (Elite-Sorten) standen biologische Replikate (3-8 Replikate pro Linie) zur Analyse zur Verfügung (Gemmer et al. 2020). Die Kontrolllinien wurden innerhalb der HEB-Linien in den Feldversuch integriert.

## 2.6 Statistik

Alle statistischen Analysen wurden mit SAS 9.4 (SAS 2013) und R (R Core Team 2018) durchgeführt.

Die Schätzung der Heritabilität im weiteren Sinne wurden mit der R-Software und dem lmerTest-Paket (Kuznetsova et al. 2016) über Behandlungen und Jahre hinweg als

$$h^2 = \frac{V_G}{V_G + \frac{V_{GY}}{y} + \frac{V_R}{yr}}$$
 berechnet, wobei  $V_G$ ,  $V_{GY}$  und  $V_R$  die Varianzkomponenten für

Genotyp, Genotyp  $\times$  Jahr sowie die Fehlervarianzkomponente darstellen. Die Variablen  $y$  und  $r$  geben die Anzahl der Jahre bzw. der Wiederholungen an. Um die Varianzkomponenten zu schätzen, wurden alle Effekte als zufällig angenommen.

Der beste lineare, erwartungstreue Schätzwert (engl. best linear unbiased estimator (BLUEs)) aller Merkmale wurden mit dem PROC HPMIXED-Verfahren in SAS für jeden Genotyp unter Annahme fixer Genotypeneffekte berechnet.

Die Korrelationskoeffizienten nach Pearson wurden mit der R-Software und dem Corrgram-Paket berechnet (Friendly 2002).

Die Box-Cox-Power-Transformation (Box und Cox 1964) wurde mit SAS PROC TRANSREG und einem  $\lambda$  von -3 bis 3 in Schritten von 0,25 auf die Metabolitdaten

angewandt. Die deskriptive Statistik der Metaboliten wurde mit dem R-Paket psych berechnet (Revelle 2018).

Die genomischen Heritabilitäten der Metaboliten (auch SNP-basierte Heritabilitäten genannt (Yang et al. 2017)), wurden mit dem R-Paket sommer (Covarrubias-Pazaran 2016) als  $h_{SNP}^2 = \frac{\sigma_A^2 + \sigma_D^2 + \sigma_I^2}{\sigma_A^2 + \sigma_D^2 + \sigma_I^2 + \sigma_R^2}$  geschätzt, wobei  $\sigma_A^2$ ,  $\sigma_D^2$ ,  $\sigma_I^2$  und  $\sigma_R^2$  die Additiv-, Dominanz-, Epistasie- und Residualvarianzkomponente darstellen. Zusätzlich wurde die Wiederholbarkeit der Metaboliten als  $rep = \frac{V_G}{V_G + \frac{V_R}{r}}$  für die Teilmenge von 17 Kontroll-Genotypen (Elite-Sorten) berechnet, bei denen wiederholte Metabolitmessungen verfügbar waren.

Euklidische Distanzmatrizen mit SNP- und Metaboliten-Daten wurden unter Verwendung des R-Paketes Stats berechnet.

Die Abbildungen wurden mit R unter Verwendung des Paketes ggplot2 (Wickham 2016), mit Power Point sowie InteractiveVenn (Heberle et al. 2015) erstellt. Die hier ebenfalls als Abbildungen gekennzeichneten Fotografien wurden von Prof. Dr. Björn Junker aufgenommen.

## 2.7 Genomische/metabolische Vorhersage

Basierend auf den BLUEs der 1.307 HEB-Genotypen (1.307 Linien mit vollständigen Datensätzen von SNP- und Metabolitdaten des ersten Termins der Probennahme, 1.229 Linien des zweiten Termins der Probennahme) wurden zwei Modelle zur genomischen Vorhersage unter Berücksichtigung additiver Effekte angewandt: Ridge Regression Best Linear Unbiased Prediction (RR-BLUP) (Whittaker et al. 2000) und BayesB (Meuwissen et al. 2009). Alle statistischen Verfahren für die genomische Vorhersage wurden mit R durchgeführt. Der R-Code für RR-BLUP basiert auf Zhao et al. (2012). Für das BayesB-Modell wurde das Paket BGLR (Pérez und de Los Campos 2014) verwendet. Die Modelle werden im Folgenden kurz beschrieben.

$N$  sei die Anzahl der Genotypen,  $m$  die Anzahl der Marker und  $l$  die Anzahl der Jahre. Das RR-BLUP-Modell hat die Gleichung  $\mathbf{y} = \mathbf{1}_n\mu + \mathbf{X}\mathbf{g} + \mathbf{e}$ , wobei  $\mathbf{y}$  der Vektor der BLUEs des jeweiligen Merkmals für alle HEB-Genotypen über die Jahre ist,  $\mathbf{1}_n$  den Vektor von 1's bezeichnet,  $\mu$  der gemeinsame Achsenabschnitt ist,  $\mathbf{g} = (g_1, g_2, \dots, g_m)'$  der Vektor der Markereffekte ist,  $\mathbf{X}$  die Matrix der Markerinformation und  $\mathbf{e}$  der

Restfehler ist. In dem Modell wird angenommen, dass  $\mathbf{g} \sim N(0, \sigma_g^2 \mathbf{I})$ ,  $\mathbf{e} \sim N(0, \sigma_e^2 \mathbf{I})$ , mit  $\sigma_g^2 = \sigma_G^2 / m$  für SNP-Marker und  $\sigma_e^2 = \sigma_R^2 / l$ . Hier sind  $\sigma_G^2$  und  $\sigma_R^2$  die genotypischen und residualen Varianzkomponenten, die mit einem gemischten Modell in der phänotypischen Datenanalyse berechnet wurden. Der Strafparameter ist  $\lambda = (\sigma_R^2 / l) / (\sigma_G^2 / m)$ . Die Schätzung der Markereffekte erfolgt mittels der Gleichungen des gemischten Modells (Henderson 1984). Das Basismodell von BayesB ist das gleiche wie RR-BLUP. Allerdings werden alle Parameter als Zufallsvariablen in einem Bayes'schen Modell behandelt, und es wird nicht für alle Markereffekte die gleiche Varianz angenommen. Die a-priori-Verteilung wurde als  $\mathbf{g} \sim N(0, \mathbf{D})$ ,  $\mathbf{e} \sim N(0, \sigma_e^2 \mathbf{I})$  definiert, wobei  $\mathbf{D} = \text{diag}(\sigma_{g_1}^2, \sigma_{g_2}^2, \dots, \sigma_{g_p}^2)$  gilt. Für jedes  $i$  wird die a-priori-Verteilung von  $\sigma_{g_i}^2$  von Null mit einer Wahrscheinlichkeit  $\pi$  und eine skalierte, inverse Chi-Quadrat-Verteilung mit einer Wahrscheinlichkeit  $(1-\pi)$  angenommen. Der Priori von  $\pi$  ist eine Beta-Verteilung. Der Priori von  $\sigma_e^2$  ist ebenfalls eine skalierte inverse Chi-Quadrat-Verteilung. Ein Gibbs Sampling wurde angewandt, um alle Parameter im Modell abzuleiten.

Die Genauigkeit der Vorhersage durch die Modelle wurde mittels fünffacher Kreuzvalidierung bewertet (Hjorth 1993). In jedem Durchlauf der Kreuzvalidierung umfasste der Trainingssatz 80 % der HEB-Linien, die nach dem Zufallsprinzip pro HEB-Familie ausgewählt wurden, während die restlichen 20 % der HEB-Linien für den Aufbau des Testsatzes verwendet wurden. Teilmengen von SNPs oder Metaboliten für GV und MV wurden unter Verwendung des R-Paketes dplyr erstellt (Hadley Wickham 2018). Die Vorhersagefähigkeit (engl. prediction ability ( $r_{ab}$ )) ist die Korrelation zwischen beobachteten und vorhergesagten Werten, gemittelt über alle 100 Kreuzvalidierungsläufe. Die Vorhersagegenauigkeit (engl. prediction accuracy ( $r_{ac}$ )) ist definiert als  $r_{ac} = \frac{r_{ab}}{\sqrt{h^2}}$  (Riedelsheimer et al. 2012a). In R wurden paarweise t-Tests durchgeführt, um signifikante ( $p < 0,01$ ) Unterschiede in der Vorhersagegenauigkeit zwischen Modellen und Vorhersagemethoden (GV/MV) zu bestimmen.

Für die genomische Vorhersage für die im Feld gemessenen agronomischen Merkmale wurden 33.005 SNPs verwendet, die im RR-BLUP-Modell als 0,1,2 und im BayesB-Modell als -1,0,1 kodiert wurden. Die verschiedenen Pakete benötigten unterschiedliche Kodierungsschemata.

Für die metabolische Vorhersage der auf dem Feld gemessenen agronomischen Merkmale wurden in beiden Modellen die Werte von 128 Metaboliten (erste Probennahme) oder 122 Metaboliten (zweite Probennahme) verwendet. Beim kombinierten Ansatz wurden alle 33.005 SNPs und 128 Metaboliten (oder 122) in das Vorhersagemodell einbezogen.

## **2.8 Genomweite Assoziationsstudie (GWAS) zur Analyse von mQTL**

Es wurde ein multiples lineares Regressionsmodell mit SNP-Markern als Haupteffekten angewandt. Die quantitative IBS-Genotyp-Matrix wurde verwendet, um eine genomweite Assoziationskartierung für jeden Box-Cox-transformierten Metaboliten durchzuführen. Die Analyse wurde mittels optimierter Modellselektionsverfahren durch SAS PROC HPREG durchgeführt. Mit diesem Verfahren kann das beste Modell auf der Grundlage einer Reihe von vordefinierten, möglichen Faktoren ausgewählt werden. In diesem Fall wurden zunächst alle 33.005 SNPs als mögliche Faktoren definiert. Signifikante SNPs wurden dann durch schrittweise Vorwärts-Rückwärts-Regression bestimmt. Die SNPs konnten bei jedem Schritt auf der Grundlage des für den marginalen F-Test dieses Begriffs berechneten p-Wertes ( $< 0,001$ ) in das Modell eintreten oder wieder ausgeschlossen werden. Die in das endgültige Modell einbezogenen SNPs werden im Folgenden als signifikante SNPs bezeichnet. Die Effektschätzung eines SNPs kann als Allelsubstitutionseffekt interpretiert werden und stellt den Regressionskoeffizienten des jeweiligen SNPs im endgültigen Modell dar. Es ist zu beachten, dass alle signifikanten SNP-Effektschätzungen im endgültigen Modell gleichzeitig modelliert werden. Eine fünffache Kreuzvalidierung wurde 20 Mal durchgeführt, um die Robustheit der Ergebnisse zu erhöhen. Dazu wurden 100 Teilmengen aus den gesamten phänotypischen (=Metaboliten) Daten extrahiert. Jede Untergruppe bestand zu 80 % aus zufällig ausgewählten HEB-Linien pro Familie. Dieser Satz wurde als Trainingssatz verwendet, um signifikante Marker zu definieren und ihre Auswirkungen abzuschätzen, während die restlichen 20 % der Linien als Validierungssatz verwendet wurden. Die Metabolitdaten der Linien des Validierungssatzes wurden auf der Grundlage der im Trainingssatz geschätzten Marker-Effekte vorhergesagt. Die Vorhersagefähigkeit ( $r^2$ ) wurde dann als quadrierte Pearson-Produkt-Moment-Korrelation zwischen den beobachteten und vorhergesagten Metabolitdaten des Validierungssatzes berechnet. Um mQTL-Regionen zu definieren, wurde die

Detektionsrate (DR) eines SNP-Markers als die Häufigkeit seiner Aufnahme in das endgültige Modell aus 100 Kreuzvalidierungsläufen berechnet. Ein mQTL wurde als robust definiert, wenn er mehr als 25 Mal detektiert wurde. Für die Berechnung der erklärten phänotypischen Varianz eines einzelnen mQTL wurden alle SNPs, die die DR in der jeweiligen mQTL-Region überschritten, in ein multiples lineares Regressionsmodell aufgenommen, um den Metaboliten-Phänotyp im gesamten Datensatz zu erklären. Um einen elternspezifischen mQTL-Effekt abzuschätzen, wurde die Kumulationsmethode angewendet, wie sie in Maurer et al. beschrieben ist (Maurer et al. 2017). Diese Prozedur wurde in jedem der 100 Kreuzvalidierungsläufe durchgeführt. Der Mittelwert der 100 Kreuzvalidierungsläufe wurde als abschließende, elternspezifische mQTL-Effektschätzung verwendet.

### **3. Ergebnisse und Diskussion**

#### **3.1 Bewertung der metabolischen Vorhersage als Alternative zur genomischen Vorhersage bei Gerste**

##### **3.1.2 Phänotypdaten**

Die deskriptive Statistik der phänotypischen Daten zeigte eine hohe Variation zwischen den Linien und zwischen den Jahren, was zu hohen Variationskoeffizienten führte (Tab. 2). Beispielsweise betrug die Differenz zwischen dem Minimal- und Maximalwert des Merkmals HEA 71 Tage. Dies spiegelt die hohe Diversität der HEB-25-Population innerhalb und zwischen den Jahren wider (Abb. A1). Die Heritabilitäten für alle über 4-8 Jahre berechneten Merkmale waren  $> 0,8$  mit Ausnahme von EAR (0,41) und YLD (0,58) (Tab. 2). Dies verdeutlicht die hohe Qualität der phänotypischen Daten und den Einfluss des Genotyps auf die Merkmale und unterstreicht die Eignung für genetische Analysen wie GV und MV.



**Tab. 2.** Deskriptive Statistik der phänotypischen Merkmale für die Jahre 2011 bis 2018 (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).

<b>Merkmal<sup>a</sup></b>	<b>N<sup>b</sup></b>	<b>Jahre<sup>c</sup></b>	<b>Wiederholungen<sup>d</sup></b>	<b>Einheit<sup>e</sup></b>	<b>Mittelwert<sup>f</sup></b>	<b>Min<sup>g</sup></b>	<b>Max<sup>h</sup></b>	<b>SD<sup>i</sup></b>	<b>CV<sup>j</sup></b>	<b>NA<sup>k</sup></b>	<b>V<sub>G</sub><sup>l</sup></b>	<b>V<sub>R</sub><sup>m</sup></b>	<b>V<sub>GY</sub><sup>n</sup></b>	<b>h<sup>2</sup><sup>o</sup></b>
SHO	19481	8	1,88	Tage	53,04	26	103	7,85	14,80	118	18,73	6,11	3,41	0,91
HEA	19495	8	1,88	Tage	66,44	37	108	8,86	13,33	104	23,66	5,46	4,41	0,93
MAT	18163	7	2	Tage	102,5	72	134	9,88	9,64	1436	16,37	10,06	2,89	0,83
HEI	19251	8	1,88	cm	67,85	30	125	12,81	18,88	348	87,24	30,16	10,48	0,91
EAR	10379	5	1,6	Anzahl	647,1	40	1810	230,20	35,57	9220	7212,20	31969,00	0,00	0,41
GNE	12737	5	2	Anzahl	21,91	3,3	69	4,69	21,40	6862	12,98	5,47	1,08	0,84
TGW	16739	8	1,88	g	49,16	17,7	72,9	6,39	13,00	2860	17,06	13,42	2,04	0,83
YLD	10125	5	1,6	dt/ha	70,82	1,6	212,9	28,88	40,78	9474	207,33	462,33	0,00	0,58

<sup>a</sup>Abkürzungen, siehe Tab. 1, <sup>b</sup>Anzahl Beobachtungen, <sup>c</sup>Anzahl der Jahre, in denen das jeweilige Merkmal erhoben wurde, <sup>d</sup>Anzahl der Wiederholungen, gemittelt über die Jahre (Behandlungsstufe als Wdh. gesetzt), <sup>e</sup>Einheit des jeweiligen Merkmals, <sup>f</sup>Arithmetisches Mittel, <sup>g</sup>Minimumwert, <sup>h</sup>Maximumwert, <sup>i</sup>Standardabweichung, <sup>j</sup>Variationskoeffizient (%), <sup>k</sup>Fehlwerte, <sup>l</sup>Genotypische Varianzkomponente, <sup>m</sup>Fehlervarianzkomponente, <sup>n</sup>Genotyp \* Jahr Varianzkomponente, <sup>o</sup>Heritabilität.

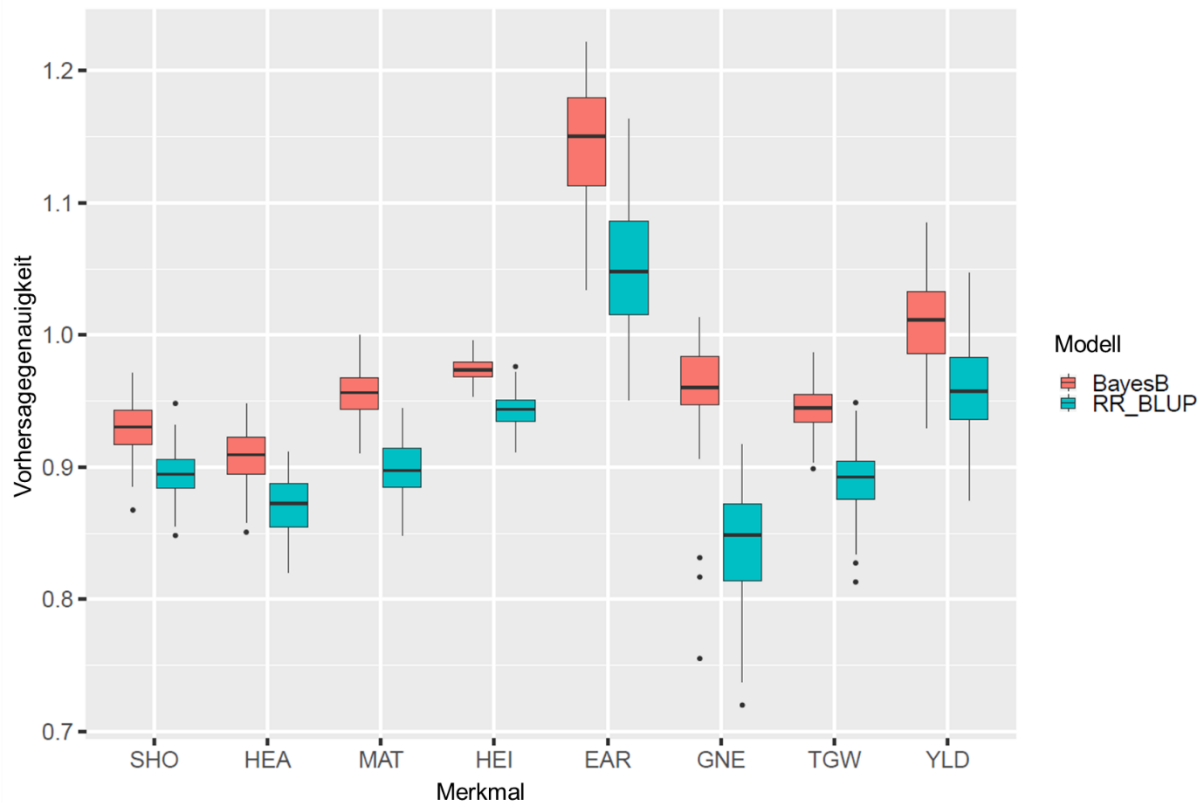
### 3.1.3 Genomische und metabolische Vorhersage

Alle nachfolgend beschriebenen Ergebnisse (einschließlich Abbildungen, Tabellen und Anhänge) beziehen sich auf den Datensatz der Metaboliten des ersten Probennahmedatums, sofern nicht anders angegeben. Generell wurde bei der genomischen Vorhersage mit SNP-Daten eine leicht, für alle Merkmale signifikant bessere Vorhersageleistung von BayesB gegenüber RR-BLUP beobachtet (Abb. 5). Bei den Metabolitdaten schnitten beide Modelle fast gleich gut ab (Tab. A4, Abb. A2). Mit Ausnahme von EAR (bessere Leistung von RR-BLUP) und YLD (bessere Leistung von BayesB) wurden keine signifikanten Unterschiede festgestellt. Die bessere Leistung von BayesB hängt von der genetischen Architektur des Zielmerkmals ab (Clark et al. 2011). Es ist RR-BLUP überlegen, wenn das Merkmal durch wenige große QTL-Effekte kontrolliert wird. Dies trifft sowohl auf HEA (Maurer et al. 2015) als auch auf GNE und TGW (Herzig et al. 2019) in der HEB-25-Population zu. Mit SNP-Daten und BayesB wurden hohe Vorhersagegenauigkeiten ( $\geq 0,91$ ) für alle Merkmale erreicht (Tab. 3). Auffällig ist, dass die Genauigkeiten für die Merkmale EAR und YLD  $> 1$  waren, was auf die niedrigen  $h^2$ -Schätzungen dieser Merkmale zurückzuführen ist. Nichtsdestotrotz ist die Verwendung von  $r_{ac}$  in GV üblich, da es  $r_{ab}$  um nicht-genetische Effekte des Zielmerkmals korrigiert (Riedelsheimer et al. 2012a). Die Korrelation zwischen  $h^2$  und  $r_{ab}$  war stark positiv ( $r = 0,95$ ), folglich war die Korrelation zwischen  $h^2$  und  $r_{ac}$  stark negativ ( $r = -0,94$ ). Dies unterstreicht die Bedeutung qualitativ hochwertiger phänotypischer Daten, die zu einer hohen Vorhersageleistung führen. Die beobachteten Vorhersagegenauigkeiten sind vergleichbar mit anderen Studien bei Weizen, Mais und Gerste (Crossa et al. 2014; Riedelsheimer et al. 2012a; Sallam et al. 2015).

**Tab. 3.** Zusammenfassung der genomischen und metabolischen Vorhersage, BayesB-Modell (modifiziert nach Gemmer et al. (2020).

Merkmal	h <sup>2</sup>	SNPs			Metaboliten			SNPs + Metaboliten			Sig.
		r <sub>ab</sub>	r <sub>ac</sub>	SD	r <sub>ab</sub>	r <sub>ac</sub>	SD	r <sub>ab</sub>	r <sub>ac</sub>	SD	
SHO	0,91	0,88	0,93	0,02	0,57	0,59	0,05	0,89	0,93	0,02	-
HEA	0,93	0,87	0,91	0,02	0,59	0,61	0,05	0,88	0,91	0,02	-
MAT	0,83	0,87	0,95	0,02	0,55	0,61	0,06	0,88	0,96	0,01	*
HEI	0,91	0,93	0,97	0,01	0,37	0,39	0,05	0,93	0,97	0,01	-
EAR	0,41	0,74	1,14	0,04	0,38	0,59	0,09	0,74	1,15	0,04	-
GNE	0,84	0,88	0,96	0,04	0,27	0,29	0,07	0,88	0,96	0,03	-
TGW	0,83	0,86	0,94	0,02	0,26	0,28	0,06	0,86	0,94	0,02	-
YLD	0,58	0,77	1,01	0,03	0,35	0,46	0,08	0,77	1,01	0,03	-

Das BayesB-Modell wurde unter Verwendung von SNP- und/oder Metabolitdaten angewandt. Es werden die Vorhersagefähigkeiten (r<sub>ab</sub>) und die Vorhersagegenauigkeiten (r<sub>ac</sub>) der Merkmale, gemittelt über 100 Kreuzvalidierungsläufe, sowie die Standardabweichung der r<sub>ac</sub> (SD) gezeigt. Zusätzlich werden die Heritabilitäten (h<sup>2</sup>) für die Merkmale angegeben. Sig. gibt die Signifikanz (\*: p < 0,01, -: nicht signifikant) eines t-Tests zwischen r<sub>ac</sub> von SNPs und r<sub>ac</sub> von SNPs + Metaboliten für die jeweiligen Merkmale an. Hier nicht angegeben: SNPs und SNPs + Metaboliten schnitten im Allgemeinen für alle Merkmale signifikant besser ab als Metaboliten allein. Die Abkürzungen der Merkmale sind in Tab. 1 angegeben.



**Abb. 5.** Kreuzvalidierte Vorhersagegenauigkeiten der Merkmale mit SNP Daten, jeweils für RR-BLUP und BayesB (Gemmer et al. 2020).

Das Konzept der Schätzung der SNP-basierten Heritabilität (Yang et al. 2017), auch genomische Heritabilität genannt, wurde auf die Metabolitdaten angewandt, was zu Werten von bis zu 0,50 mit einem Mittelwert von 0,10 führte (Tab. A5 und A6, Abb. A3). Die Wiederholbarkeit der Metabolitmessungen zeigte eine hohe Variation zwischen den Metaboliten (0,00-0,87) mit einem Mittelwert von 0,26 (Tab. A5 und A6), was auf eine begrenzte Datenqualität bei mehreren Metaboliten hindeutet. Dies kann die metabolische Vorhersage negativ beeinflussen.

Die Vorhersagegenauigkeit mit Metabolitdaten war im Allgemeinen geringer als die unter Verwendung von SNP Daten. Die höchsten Genauigkeiten wurden für die Entwicklungsparameter beobachtet ( $r_{ac}$  bis zu 0,61 für HEA und MAT), während für HEI und insbesondere die Ertragsparameter GNE und TGW niedrige Genauigkeiten von maximal 0,29 erzielt wurden (Tab. 3). Der Abfall von  $r_{ac}$  für Ertragsparameter ist nachvollziehbar, da die Probennahme früh, während der Schossphase der Pflanzen, erfolgte. Es wird angenommen, dass Metaboliten, die an der Pflanzenentwicklung beteiligt sind, sich stärker im frühen Metabolitenprofil widerspiegeln als diejenigen, die für Kornfüllung und Ertragsbildung verantwortlich sind und umgekehrt. Um dieser Frage nachzugehen, wurde die  $r_{ac}$  der ersten Beprobung mit den  $r_{ac}$  der zweiten

Beprobung verglichen (Tab. 4). Tatsächlich waren auf der Grundlage der zweiten Metabolitenprobe die Vorhersagegenauigkeiten für Entwicklungsmerkmale schlechter (ca. 0,10 geringer für SHO und HEA). Allerdings konnten auch bei den Ertragsparametern keine nennenswerten Verbesserungen erzielt werden. Die metabolische Vorhersage mit den Metaboliten der ersten Probennahme war für die Merkmale SHO, HEA, HEI und TGW signifikant besser. MAT und EAR zeigten keine signifikanten Unterschiede. Leichte, aber signifikante Verbesserungen unter Verwendung der Metaboliten der zweiten Probennahme konnten für die Ertragsparameter GNE und YLD erzielt werden. Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Probennahme während eines jungen und homogeneren Pflanzenstadiums effektiver erscheint, auch im Hinblick auf das Zeitmanagement.

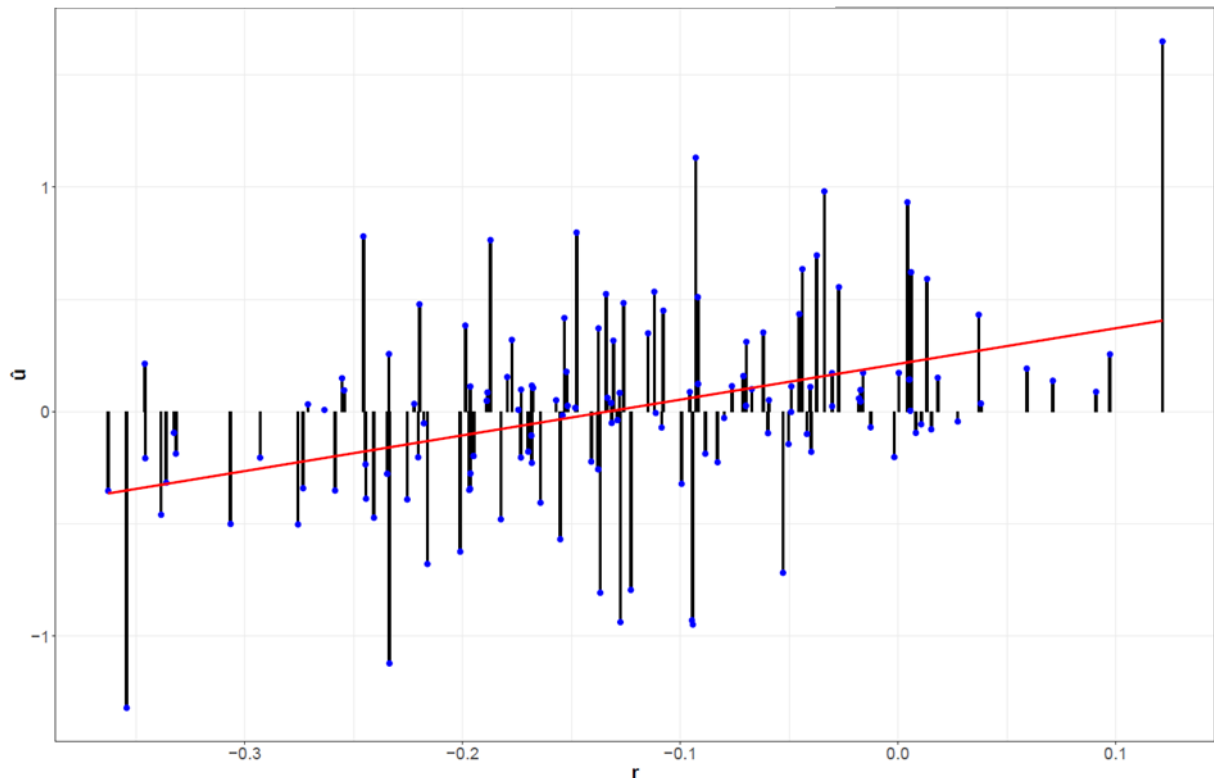
**Tab. 4.** Ergebnisse der genomischen und metabolischen Vorhersage für beide Probennahmen, BayesB-Modell (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).

Trait	SNPs			Metaboliten 1. Probennahme			Metaboliten 2. Probennahme			Sig.	
	$h^2$	$r_{ab}$	$r_{ac}$	SD	$r_{ab}$	$r_{ac}$	SD	$r_{ab}$	$r_{ac}$		SD
SHO	0,91	0,88	0,93	0,02	0,57	0,59	0,05	0,47	0,50	0,05	*
HEA	0,93	0,87	0,91	0,02	0,59	0,61	0,05	0,50	0,52	0,05	*
MAT	0,83	0,87	0,95	0,02	0,56	0,61	0,06	0,54	0,59	0,05	-
HEI	0,91	0,93	0,97	0,01	0,37	0,38	0,06	0,27	0,28	0,05	*
EAR	0,41	0,74	1,14	0,04	0,39	0,61	0,08	0,38	0,59	0,08	-
GNE	0,84	0,88	0,96	0,04	0,27	0,29	0,07	0,29	0,32	0,06	*
TGW	0,83	0,86	0,94	0,02	0,26	0,28	0,05	0,19	0,21	0,06	*
YLD	0,58	0,77	1,01	0,03	0,30	0,39	0,08	0,32	0,42	0,07	*

Das BayesB-Modell wurde unter Verwendung von SNP- oder Metabolitdaten angewandt. Es werden die Vorhersagefähigkeiten ( $r_{ab}$ ) und die Vorhersagegenauigkeiten ( $r_{ac}$ ) der Merkmale, gemittelt über 100 Kreuzvalidierungsläufe, sowie die Standardabweichung der  $r_{ac}$  (SD) gezeigt. Zusätzlich werden die Heritabilitäten ( $h^2$ ) für die Merkmale angegeben. Sign. gibt die Signifikanz (\*  $p < 0,01$ , - nicht signifikant) eines t-Tests zwischen  $r_{ac}$  der Metaboliten der 1. Probennahme und  $r_{ac}$  der Metaboliten der 2. Probennahme an. Die Abkürzungen der Merkmale sind in Tab. 1 angegeben.

Die Vorhersagegenauigkeit von MV lag, abhängig vom jeweiligen Merkmal, unterhalb der Genauigkeiten, die in Studien mit anderen Arten berichtet wurde (Dan et al. 2016; Riedelsheimer et al. 2012a; Steinfath et al. 2010). Die Vergleichbarkeit der verschiedenen Studien zu MV ist jedoch schwierig, da die Metabolitenbestimmung sehr empfindlich ist und von vielen Faktoren beeinflusst wird. Jede Studie verwendet andere Messmethoden und Vorhersagemodelle. Steinfath et al. (2010) sagten die Schwarzfleckenanfälligkeit von Kartoffeln mit Korrelationen zwischen beobachteten und prognostizierten Werten zwischen 0,68 und 0,82 vorher. Riedelsheimer et al. (2012a) erreichten Genauigkeiten von bis zu 0,80 für die Vorhersage des Zeitpunktes der weiblichen Blüte bei Mais. Die kombinierte Verwendung von SNPs und Metaboliten führte zu keiner Verbesserung der Vorhersage im Vergleich zur alleinigen Verwendung von SNPs. Dies gilt sowohl für diese Studie als auch für Riedelsheimer et al. (2012a).

Um Erkenntnisse darüber zu gewinnen, welche Metaboliten für verschiedene Merkmalsvorhersagen entscheidend sind, wurden Pearson'sche Korrelationen zwischen Metabolitmessungen und agronomischen Merkmalen über alle Linien berechnet. Wie erwartet waren die Korrelationen vergleichsweise niedrig ( $-0,36 < r < 0,30$ , Tab. A7). Dies zeigt, dass einzelne Metaboliten im Allgemeinen nur einen mäßigen Einfluss auf die Merkmalsausprägung haben. Interessanterweise wurde eine der stärksten negativen Korrelationen für TMET101 und HEA beobachtet ( $r = -0,35$ ), was darauf hindeutet, dass dieser unbekannte Metabolit direkt an der Regulation des Blühzeitpunktes beteiligt sein könnte. Dies wird durch die hohe Effektschätzung für TMET101 im MV-Modell für HEA bestätigt (Tab. A7). Generell zeigte sich der Trend, dass Metaboliten mit einer hohen Effektschätzung in MV auch eine höhere Korrelation mit dem jeweiligen agronomischen Merkmal aufwiesen, wie am Beispiel HEA deutlich wird (Abb. 6). Ähnliche Beobachtungen konnten im Metabolitensatz der zweiten Probennahme gemacht werden (Tab. A8). Dies deutet darauf hin, dass MV-Effektschätzungen Hinweise auf Metaboliten geben können, die an der Merkmalsausprägung beteiligt sind. Diese Erkenntnis könnte weitere Untersuchungen begründen, z.B. um das Verständnis der molekularen Stoffwechselwege zu vertiefen.



**Abb. 6.** Geschätzte Effekte der Metaboliten im BayesB-Modell ( $\hat{u}$ ) und Pearson'scher Korrelationskoeffizient ( $r$ ) der Metaboliten und HEA. Regressionslinie  $r = 0,39$  (Gemmer et al. 2020).

Die Genauigkeiten unter Verwendung von Metabolitdaten scheinen im Vergleich zu den Genauigkeiten mit SNP-Daten gering zu sein. Es ist jedoch zu beachten, dass 128 Metaboliten 33.005 SNPs (etwa 260 Mal mehr SNPs) gegenüberstehen. Darüber hinaus erfolgte die Probennahme der Metaboliten in einem frühen Entwicklungsstadium der Pflanzen. Diese Probennahme spiegelt demnach nur eine Momentaufnahme im hochdynamischen System des Pflanzenstoffwechsels wider. Diese Daten wurden für die Vorhersage von phänotypischen Daten aus acht Jahren verwendet. Dies wirft die Frage auf, ob die Metaboliten möglicherweise zur Vorhersage von etwas verwendet wurden, was sie gar nicht abbilden können. Deshalb wurde das MV-Modell erneut angewendet, wobei die phänotypischen Daten auf die Saison 2017 beschränkt wurden, das Jahr, in dem auch die Proben zur Bestimmung der Metaboliten gesammelt wurden. Überraschenderweise führte dies im Vergleich zu den achtjährigen Phänotypen nur zu einer ähnlichen oder, wie beispielsweise für MAT ( $r_{ac} = 0,47$ ), sogar zu einer etwas geringeren Vorhersagegenauigkeit (Tab. 5). Die Korrelationen zwischen Metaboliten und Merkmalen waren jedoch dem vollständigen Datensatz recht ähnlich (Tab. A8). Wie SNPs scheinen Metaboliten Informationen über



den zugrundeliegenden Genotyp zu fixieren, welche umweltstabil wirken. Die Ergebnisse stützen die These, dass eine Vorhersage der phänotypischen Merkmale selbst mit Metabolitdaten aus einem Jahr von einer einzelnen Probennahme möglich ist.

**Tab. 5.** Ergebnisse für die metabolische Vorhersage mit dem BayesB-Modell, phänotypischen Daten 2017 und Metaboliten des ersten Probennahmedatums (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).

Merkmal <sup>a</sup>	Metaboliten			SD <sup>e</sup>
	h <sup>2</sup> <sup>b</sup>	r <sub>ab</sub> <sup>c</sup>	r <sub>ac</sub> <sup>d</sup>	
SHO	0,91	0,55	0,57	0,05
HEA	0,93	0,58	0,60	0,05
MAT	0,83	0,43	0,47	0,06
HEI	0,91	0,39	0,41	0,05
EAR	0,41	0,25	0,39	0,09
GNE	0,84	0,21	0,23	0,05
TGW	0,83	0,12	0,14	0,05
YLD	0,58	0,20	0,26	0,08

<sup>a</sup>Merkmale, siehe Tab. 1, <sup>b</sup>Heritabilität, <sup>c</sup>Vorhersagefähigkeit, gemittelt über 100 Kreuzvalidierungsläufe, <sup>d</sup>Vorhersagegenauigkeit, gemittelt über 100 Kreuzvalidierungsläufe, <sup>e</sup>Standardabweichung der Vorhersagegenauigkeit.

Ein genauerer Blick auf die geschätzten Effekte bei GV und MV zeigte, dass es ein klares Korrelationsmuster zwischen den geschätzten Effekten verschiedener Merkmale gab (Abb. 7 und 8). Sowohl bei GV als auch bei MV waren die Marker- und Metaboliten-Effekte für SHO, HEA und MAT hoch korreliert ( $0,88 < r < 0,95$ ). Dies deutet darauf hin, dass die gleichen Gene und Metaboliten für die Expression dieser Merkmale verantwortlich sind. Interessanterweise spiegelte der Korrelationsplot der phänotypischen Merkmale (Abb. 9) die gleichen Muster wider wie die Plots für die geschätzten Effekte von GV und MV in BayesB. Zum Beispiel waren die negativen Korrelationen zwischen TGW und den Entwicklungsparametern ( $-0,22 < r < -0,37$ ) nahe an den Korrelationen ihrer geschätzten Effekte im Vorhersagemodell. Selbiges gilt für die Korrelationen zwischen den Entwicklungsparametern. Offenbar waren die GV- und MV-Modelle in der Lage, diese phänotypischen Zusammenhänge in ihrer Effektschätzung mit hoher Präzision zu quantifizieren. Sie spiegelten die zugrundeliegenden genetischen und metabolischen Mechanismen wider. Bemerkenswerterweise waren die genetischen und metabolischen Distanzmatrizen nicht korreliert ( $r = 0,04$ , Abb. A4). Es scheint, dass SNPs und Metaboliten ähnliche Informationen enthalten, obwohl sie auf unterschiedlichen Hintergründen beruhen.

Effect_SHO								
0.91 ***	Effect_HEA							
0.85 ***	0.88 ***	Effect_MAT						
-0.05 ***	0.12 ***	0.14 ***	Effect_HEI					
-0.34 ***	-0.35 ***	-0.43 ***	-0.09 ***	Effect_EAR				
0.15 ***	0.17 ***	0.19 ***	0.14 ***	-0.09 ***	Effect_GNE			
-0.31 ***	-0.28 ***	-0.21 ***	0.29 ***	0.19 ***	-0.16 ***	Effect_TGW		
-0.16 ***	-0.14 ***	-0.15 ***	0.12 ***	0.66 ***	0.48 ***	0.36 ***	Effect_YLD	

**Abb. 7.** Pearson'sche Korrelationen der SNP-Effekte, geschätzt für die jeweiligen Merkmale im BayesB-Modell. Signifikante Korrelationskoeffizienten sind mit \*  $p < 0,05$ , \*\*  $p < 0,01$  und \*\*\*  $p < 0,0001$  gekennzeichnet (Gemmer et al. 2020).

Effect_SHO								
0.95 ***	Effect_HEA							
0.89 ***	0.94 ***	Effect_MAT						
-0.27 **	-0.07	-0.05	Effect_HEI					
-0.34 ***	-0.39 ***	-0.44 ***	-0.10	Effect_EAR				
0.32 **	0.37 ***	0.35 ***	-0.06	-0.09	Effect_GNE			
-0.36 ***	-0.31 **	-0.29 **	0.31 **	0.31 **	0.03	Effect_TGW		
-0.08	-0.07	-0.10	0.02	0.50 ***	0.23 **	0.25 **	Effect_YLD	

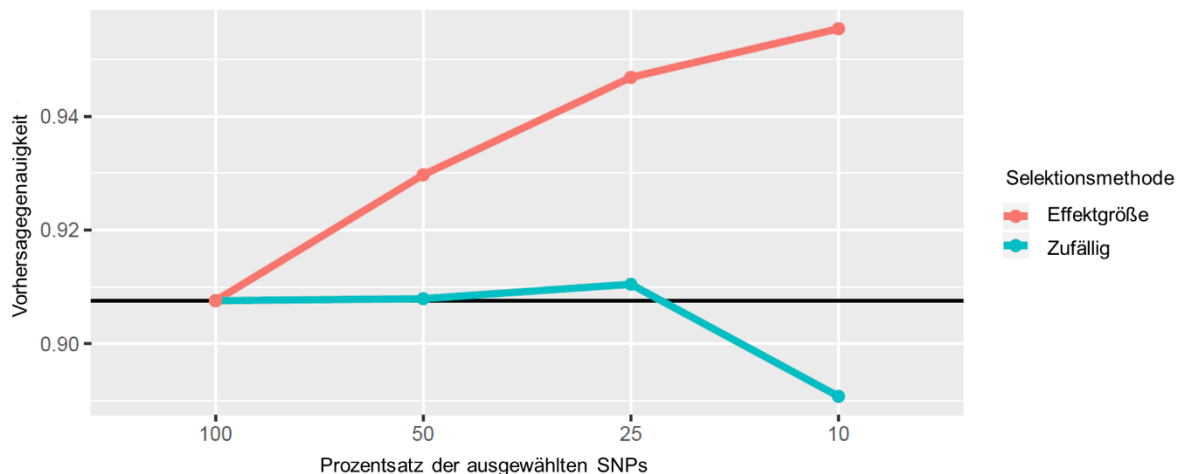
**Abb. 8.** Pearson'sche Korrelationen von Metabolit-Effekten, geschätzt für die jeweiligen Merkmale im BayesB-Modell. Signifikante Korrelationskoeffizienten sind mit \*  $p < 0,05$ , \*\*  $p < 0,01$  und \*\*\*  $p < 0,0001$  gekennzeichnet (Gemmer et al. 2020).

SHO								
0.92 ***	HEA							
0.85 ***	0.91 ***	MAT						
-0.16 ***	0.05	0.05	HEI					
-0.37 ***	-0.43 ***	-0.43 ***	-0.10 **	EAR				
0.15 ***	0.25 ***	0.22 ***	0.06 *	-0.08 **	GNE			
-0.37 ***	-0.32 ***	-0.22 ***	0.25 ***	0.22 ***	-0.02	TGW		
-0.18 ***	-0.14 ***	-0.12 ***	0.05	0.65 ***	0.57 ***	0.47 ***	YLD	

**Abb. 9.** Pearson'sche Korrelationen aller Merkmale auf der Grundlage von BLUEs der Merkmale über Jahre hinweg. Signifikante Korrelationskoeffizienten sind mit \*  $p < 0,05$ , \*\*  $p < 0,01$  und \*\*\*  $p < 0,0001$  gekennzeichnet (Gemmer et al. 2020).

Interessanterweise führte eine Reduktion der verwendeten SNPs und Metaboliten im Vorhersagemodell zu einer Verbesserung oder zumindest zu keiner Verschlechterung der Vorhersagegenauigkeit. So wurde z.B. die Vorhersagegenauigkeit für den Blühzeitpunkt (HEA) stetig erhöht, wenn die Anzahl der SNP-Marker auf Teilmengen von 50 %, 25 % und 10 % reduziert wurde. Vorausgesetzt, dass die Marker mit den größten Effekten in GV aus dem Modell mit der gesamten Anzahl von Markern ausgewählt wurden. Aber selbst bei 25 % zufällig ausgewählten Markern (8.251 SNP-Marker) wurde eine geringe Zunahme der  $r_{ac}$  beobachtet (Abb. 10). Die Auswahl der besten Marker erhöhte die  $r_{ac}$  für alle untersuchten Merkmale, während die Zufallsauswahl, insbesondere durch die Auswahl von nur 10 %, die Genauigkeit deutlich verringerte (Abb. A5). Der Grund für die erhöhte Vorhersagegenauigkeit bei der Auswahl der besten Marker könnte die Abnahme qualitativ schlechter SNPs sein, die das Modell negativ beeinflussen. Aber selbst die Zufallsauswahl hat die Genauigkeit bis zu einem bestimmten Punkt nicht verschlechtert, was darauf hindeutet, dass weniger Marker für eine zuverlässige Erfassung der Genominformation

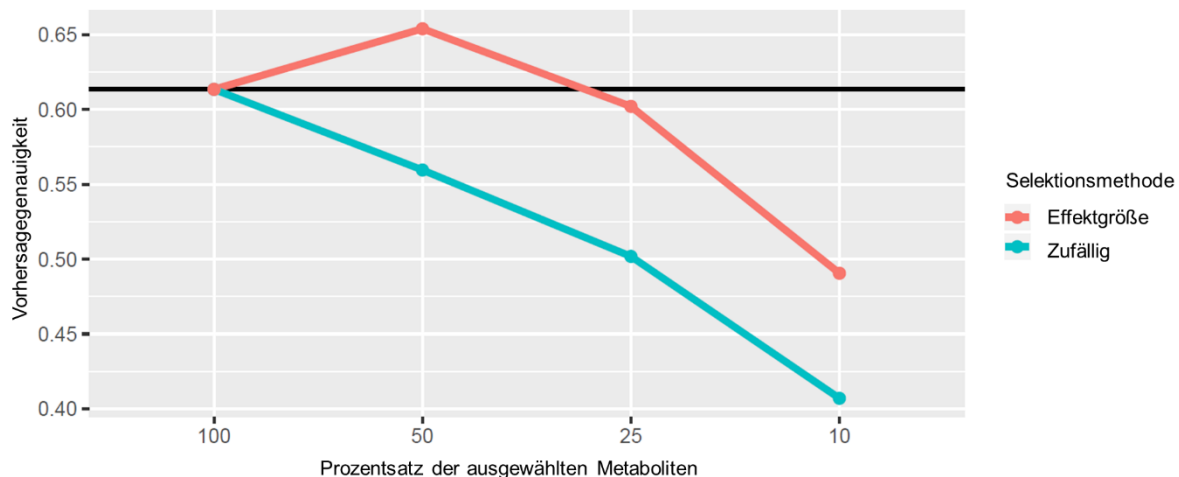
ausreichen.



**Abb. 10.** Variation der Vorhersagegenauigkeit für HEA mit BayesB nach Reduktion der Anzahl von SNP-Markern. Die schwarze Referenzlinie zeigt die Vorhersagegenauigkeit unter Verwendung aller SNP-Marker im Modell an. Die rote Linie zeigt den Trend der Vorhersagegenauigkeit durch Auswahl der besten Metaboliten (Metaboliten mit den höchsten Effekten im BayesB-Modell), die blaue Linie zeigt den Verlauf der Vorhersagegenauigkeit durch zufällige Auswahl der Metaboliten (Gemmer et al. 2020).

Bei MV reduzierten die zufällig ausgewählten Teilmengen der Metaboliten die  $r_{ac}$ . Bei der Auswahl von 50 % der Metaboliten mit den höchsten Effekten, welche in MV unter Verwendung des gesamten Metabolitensatzes geschätzt wurden, stieg die Genauigkeit auf bis zu 0,65 für HEA (Abb. 10). Dieser Trend galt für die meisten Merkmale (Abb. A6). Bei Merkmalen mit einer allgemein schwächeren  $r_{ac}$  in MV auf der Basis aller Metaboliten (EAR und TGW) wurde sogar die Vorhersagegenauigkeit erhöht, wenn nur 10 % der Metaboliten mit den höchsten Effekten ausgewählt wurden (Abb. A6). Bei Verwendung von Metaboliten anstelle von SNPs war das Modell nicht so robust gegenüber einer Reduktion. Dies könnte darauf zurückzuführen sein, dass deutlich weniger Metaboliten als SNPs zur Verfügung standen und somit eine weitere Reduktion einen stärkeren Einfluss auf die Genauigkeit des Modells hat, insbesondere bei zufälliger Auswahl. Der Grund für die Verbesserung in  $r_{ac}$  durch Auswahl von 50 % der besten Metaboliten liegt wahrscheinlich in der Verringerung des Rauschens im Modell, das durch Metaboliten mit fragwürdiger Messqualität entsteht. Eine Studie in Raps zeigte ebenfalls, dass mit einem reduzierten Markersatz hohe Vorhersagegenauigkeiten möglich sind (Werner et al. 2018). Diese Ergebnisse erlauben es, die Verwendung reduzierter und ausgewählter Markersätze für die GV in

Betracht zu ziehen und auf diese Weise Kosten und Rechenzeit zu reduzieren.



**Abb. 11.** Variation der Vorhersagegenauigkeit für HEA mit BayesB nach Reduktion der Anzahl der Metaboliten. Die schwarze Referenzlinie zeigt die Vorhersagegenauigkeit unter Verwendung aller Metaboliten im Modell an. Die rote Linie zeigt den Trend der Vorhersagegenauigkeit durch Auswahl der besten Metaboliten (Metaboliten mit den höchsten Effekten im BayesB-Modell), die blaue Linie zeigt den Verlauf der Vorhersagegenauigkeit durch zufällige Auswahl der Metaboliten (Gemmer et al. 2020).

Die hohen Genauigkeiten, vor allem bei GV, können zum Teil auf die Populationsstruktur der HEB-25 zurückgeführt werden, welche aufgrund der Kreuzungen mit 25 verschiedenen Wildgerste-Akzessionen genetisch sehr breit ist. Zuchtpopulationen weisen in der Regel eine viel geringere genetische Variabilität auf (Riedelsheimer et al. 2012a). Zudem werden die Genauigkeiten durch den großen Stichprobenumfang positiv beeinflusst (Desta und Ortiz 2014). Nichtsdestotrotz bestätigten die hohen Genauigkeiten in dieser Studie den Wert der Anwendung von GV in der Gerstenzüchtung. Insbesondere seien hier die Zeit- und Kosteneinsparungen erwähnt. Die Ergebnisse von MV versprechen unter bestimmten Umständen eine interessante Alternative zu GV. Nach heutigem Stand ist die praktische Anwendung bei Gerste allerdings aufgrund des hohen Arbeits- und Kostenaufwandes nicht von Interesse für die praktische Züchtung. Metaboliten als Prädiktorvariablen sind eine attraktive Alternative zu SNPs, wenn keine genotypischen Daten verfügbar sind, wie dies bei vielen Nutzpflanzenarten, die eine wirtschaftliche Randbedeutung haben, der Fall ist (Steinfath et al. 2010). Darüber hinaus hat MV das Potential, Metaboliten nachzuweisen, die an der Expression wichtiger agronomischer Merkmale beteiligt sind, was bei der Aufklärung der beteiligten molekularen Stoffwechselwege hilfreich sein könnte.

## 3.2 Anwendung von GWAS zur Identifizierung von mQTL

### 3.2.1 Metabolitdaten und GWAS

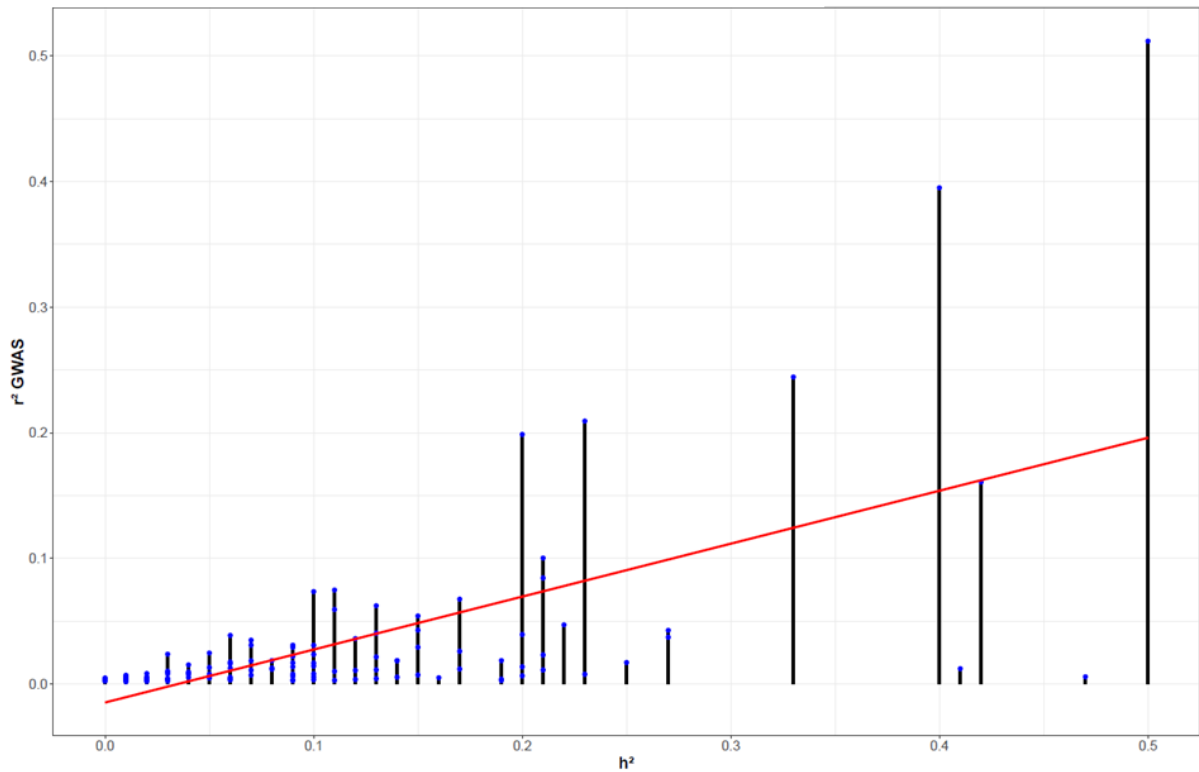
Der analysierte Metabolitensatz umfasst Aminosäuren, Fettsäuren, organische Säuren und Zucker. Für die meisten der unbekannt Metaboliten ist zumindest die Substanzgruppe (meist Zucker) bekannt. Tab. A2 und Tab. A3 zeigen eine detaillierte Liste aller ermittelten Metaboliten und ihrer Substanzgruppierung. Die Variation der einzelnen Metaboliten wird in Abb. A7 und A8 dargestellt. Das Konzept der Schätzung der SNP-basierten Heritabilität (Yang et al. 2017) und der Wiederholbarkeit, berechnet mit einer Teilmenge an Genotypen, wurde bereits oben erörtert. Die hohe Variation der genomischen Heritabilität sowie der Wiederholbarkeiten (Tab. A5 und A6) deuten auf eine begrenzte Datenqualität für mehrere Metaboliten hin, die die mQTL-Erkennung beeinflussen könnten. In diesem Zusammenhang fällt auf, dass die Metaboliten mit relativ hohen Vorhersagefähigkeiten (mittleres  $r^2 > 0,2$ ) in GWAS (TMET109\_1, TMET110\_1, TMET116\_1, TMET147\_1, TMET83\_2, TMET108\_2, TMET110\_2, TMET111\_2, TMET115\_2, TMET116\_2; wobei \_1 und \_2 die erste oder zweite Probennahme angeben; Tab. 6) sowohl überdurchschnittlich hohe SNP-basierte Heritabilitäten als auch Wiederholbarkeiten (mit Ausnahme von TMET115\_2, Wiederholbarkeit = 0,22, Tab. A6) zeigten. Es gab eindeutige, positive Korrelationen zwischen der genomischen Heritabilität der Metaboliten und ihren geschätzten mittleren  $r^2$ -Werten (Vorhersagefähigkeit) in der GWAS, was für beide Probennahmen zutrifft (Tab. A5 und A6, Abb. 12 und 13). Die Bestimmung des genauen Metaboliten ist nicht möglich, mit Ausnahme von TMET83\_2, Threonsäure (Substanzgruppe Zuckersäure). Die Substanzgruppen der übrigen Metaboliten sind jedoch bekannt. TMET109\_1, TMET116 (beide Probennahmen), TMET147\_1, TMET108\_2 und TMET111\_2 werden als zuckerähnliche Metaboliten klassifiziert, während TMET115\_2 ein Disaccharid ist. Nur TMET110 (beide Probennahmen) ist völlig unbekannt. Das Korrelationsmuster zwischen den Metaboliten spiegelt meist die Substanzgruppierung der Metaboliten wider (Abb. 14 und 15). Beispielsweise clustern sieben Zucker der ersten Probennahme, einschließlich der vier, für die mQTL gefunden wurden. Die Metaboliten der ersten und zweiten Probennahme korrelierten nur geringfügig, mit Ausnahme eines Hotspots. Interessanterweise umfasst dieser Hotspot alle Metaboliten aus der ersten Probennahme und fünf von sechs Metaboliten aus der zweiten Probennahme, für die mQTL detektiert wurden (Abb. 16). Abb. 17

veranschaulicht diese Korrelation. Die Abbildung schließt den Metaboliten TMET83\_2 ein, den einzigen Metaboliten in der mQTL-Studie, der nicht mit den anderen korrelierte. Aufgrund der starken Korrelation von TMET110 mit den anderen unbekanntem, zuckerähnlichen Metaboliten kann dieser Metabolit mit hoher Wahrscheinlichkeit ebenfalls als zuckerähnlich eingestuft werden.

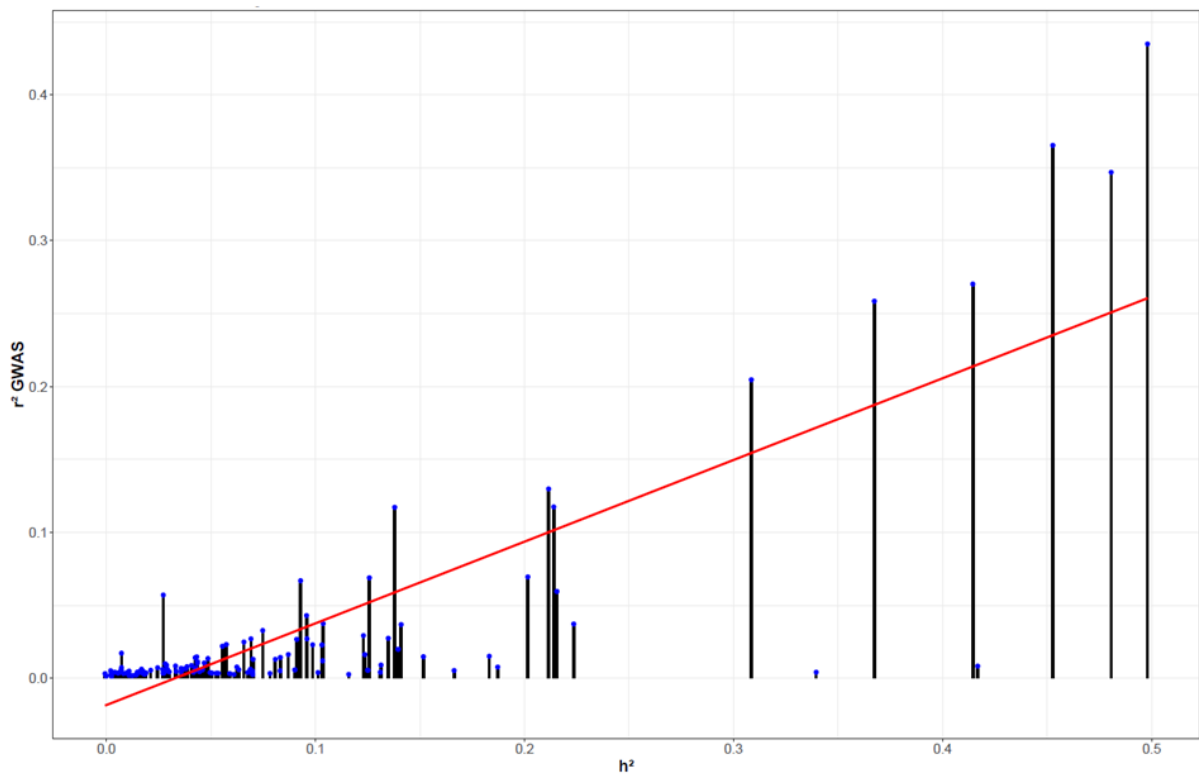
**Tab. 6.** Zusammenfassung der GWAS Ergebnisse (modifiziert nach Gemmer et al. 2021).

<b>Metabolit<sup>a</sup></b>	<b>r<sup>2</sup> GWAS<sup>b</sup></b>	<b>Anzahl signifikanter SNPs<sup>c</sup></b>	<b>r<sup>2</sup> von Haupt- mQTL-1H<sup>d</sup></b>
TMET110_1	0,51	15	0,65
TMET116_1	0,40	15	0,53
TMET109_1	0,24	17	0,38
TMET147_1	0,21	14	0,36
TMET83_2	0,43	10	-
TMET108_2	0,37	12	0,32
TMET111_2	0,35	15	0,15
TMET110_2	0,27	23	0,64
TMET116_2	0,26	25	0,53
TMET115_2	0,20	14	0,36

<sup>a</sup>Metaboliten, siehe Tab. A2 und A3; \_1 und \_2 stehen für erste und zweite Probennahme, <sup>b</sup>Mittlerer, kreuzvalidierter r<sup>2</sup> - Wert, Vorhersagefähigkeit des Metaboliten in GWAS, <sup>c</sup>Anzahl signifikanter SNPs in GWAS, DR ≥ 25, <sup>d</sup>r<sup>2</sup> - Wert (unvalidiert) des Haupt-mQTL-1H, geschätzt in GWAS.

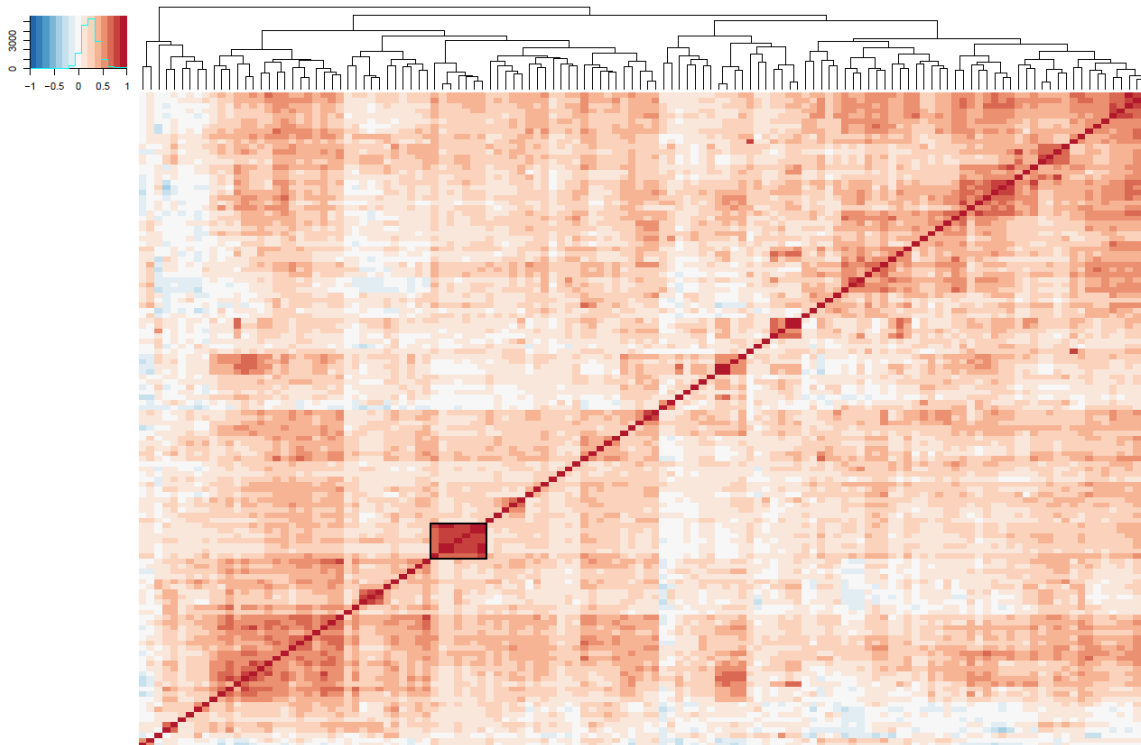


**Abb. 12.** Geschätzter mittlerer  $r^2$ -Wert der Metaboliten in der GWAS ( $r^2$  GWAS), aufgetragen gegen die SNP-basierte Heritabilität ( $h^2$ ) der Metaboliten, erste Probennahme. Regressionslinie (rote Linie)  $r = 0,63$  (Gemmer et al. 2021).

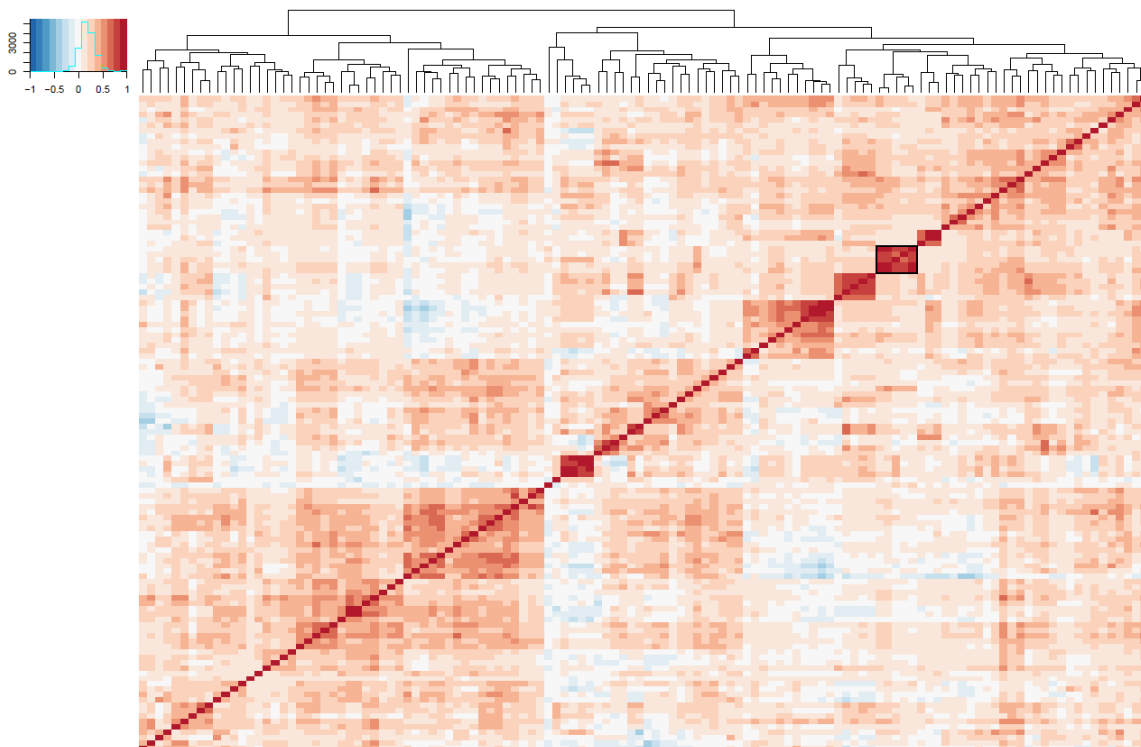


**Abb. 13.** Geschätzter mittlerer  $r^2$ -Wert der Metaboliten in der GWAS ( $r^2$ -GWAS), aufgetragen gegen die SNP-basierte Heritabilität ( $h^2$ ) der Metaboliten, zweite Probennahme. Regressionslinie (rote Linie)  $r = 0,81$  (Gemmer et al. 2021).

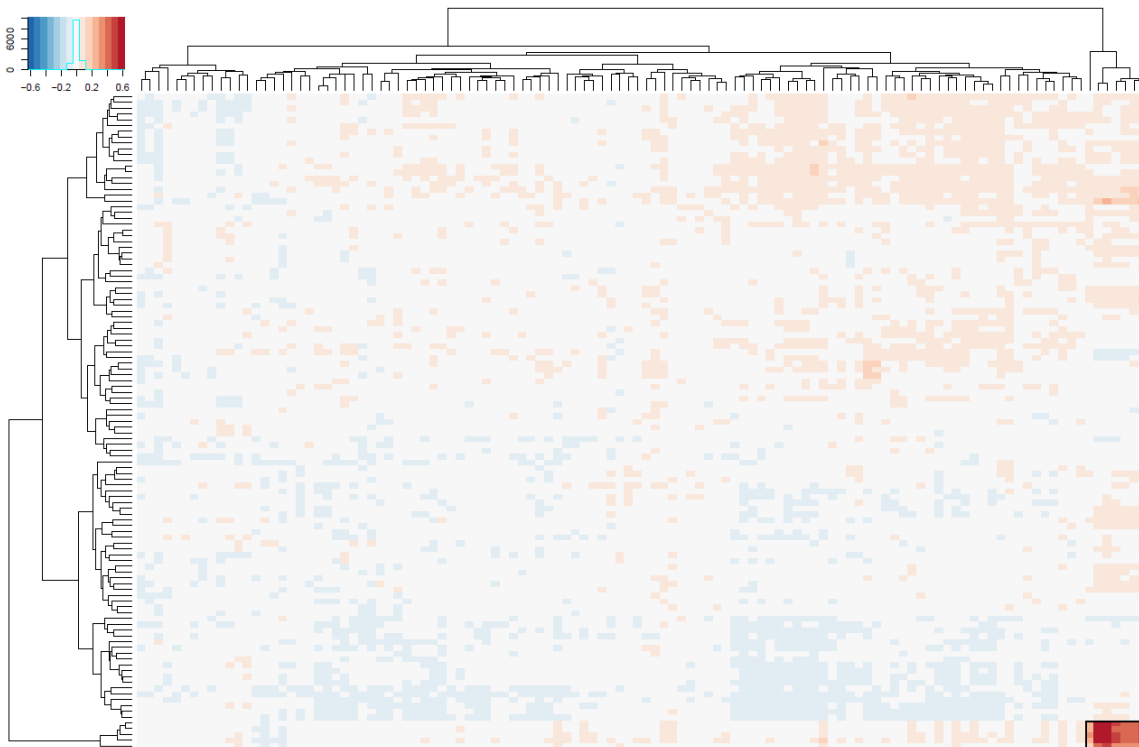




**Abb. 14.** Heatmap des Korrelationsmusters zwischen Metaboliten der ersten Probenahme. Die schwarze Umrandung zeigt einen Korrelations-Hotspot von Zuckern und zuckerähnlichen Metaboliten, einschließlich derer, die für die mQTL-Analyse gefunden wurden (Gemmer et al. 2021).



**Abb. 15.** Heatmap des Korrelationsmusters zwischen Metaboliten der zweiten Probenahme. Die schwarze Umrandung zeigt einen Korrelations-Hotspot von Zuckern und zuckerähnlichen Metaboliten, einschließlich derer, die für die mQTL-Analyse gefunden wurden (Gemmer et al. 2021).



**Abb. 16.** Heatmap des Korrelationsmusters zwischen Metaboliten der ersten und zweiten Probennahme. Die schwarze Umrandung zeigt den Korrelations-Hotspot der Zucker und zuckerähnlichen Metaboliten beider Probennahmen an, einschließlich derer, die für die in mQTL-Analyse gefunden wurden (Gemmer et al. 2021).

TMET109_1										
0.90 ***	TMET110_1									
0.88 ***	0.95 ***	TMET116_1								
0.79 ***	0.83 ***	0.83 ***	TMET147_1							
0.01	-0.01	-0.02	-0.01	TMET83_2						
0.50 ***	0.61 ***	0.56 ***	0.46 ***	0.06 *	TMET108_2					
0.49 ***	0.62 ***	0.57 ***	0.46 ***	0.14 ***	0.88 ***	TMET110_2				
0.49 ***	0.63 ***	0.58 ***	0.46 ***	0.06 *	0.85 ***	0.86 ***	TMET111_2			
0.37 ***	0.48 ***	0.44 ***	0.35 ***	0.08 **	0.77 ***	0.76 ***	0.69 ***	TMET115_2		
0.47 ***	0.60 ***	0.55 ***	0.45 ***	0.11 **	0.88 ***	0.98 ***	0.85 ***	0.76 ***	TMET116_2	

**Abb. 17.** Pearson'sche Korrelationskoeffizienten der in dieser Studie untersuchten Metaboliten. Signifikante Korrelationskoeffizienten sind mit \*  $p < 0,05$ , \*\*  $p < 0,01$  und \*\*\*  $p < 0,0001$  gekennzeichnet (Gemmer et al. 2021).

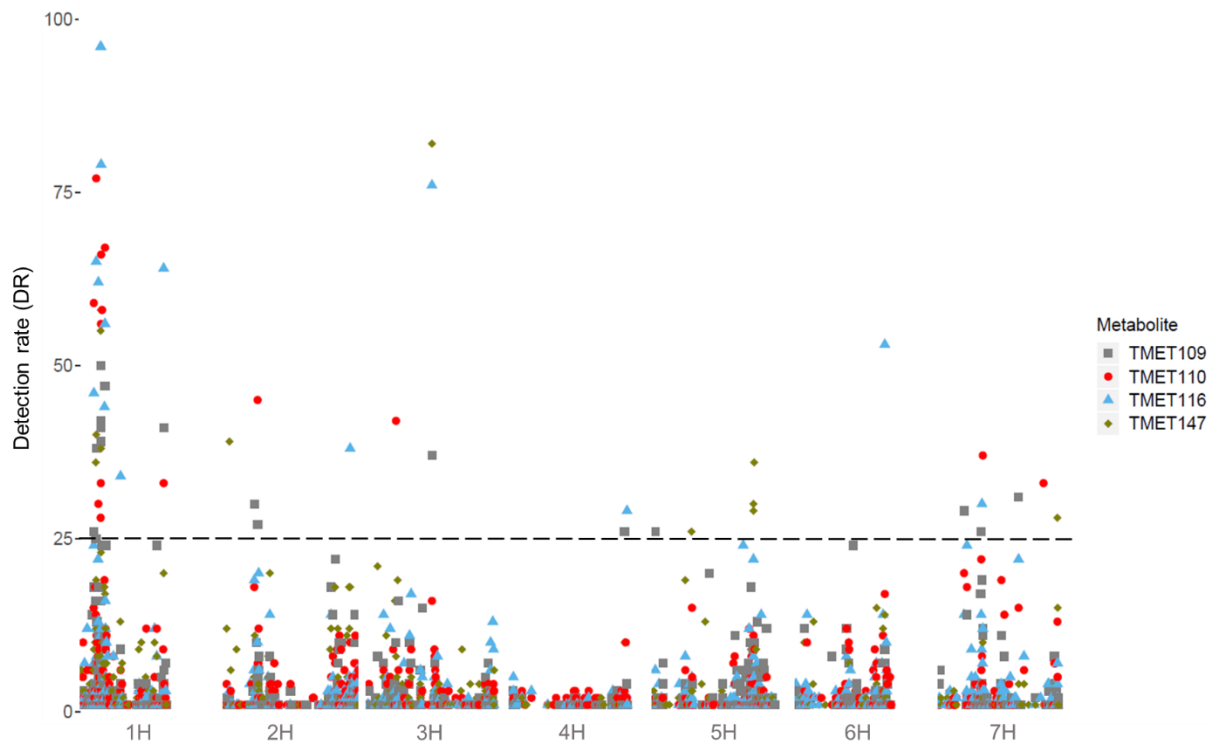
### 3.2.2 Analyse der mQTL

Acht Metaboliten mit Vorhersagefähigkeiten ( $r^2$ ) > 0,2 wurden weiter auf mQTL untersucht. Diese wurden als mQTL definiert, wenn ein SNP in 100 Kreuzvalidierungsläufen eine DR von  $\geq 25$  erreichte. Unter diesen Umständen wurden mQTL für vier Metaboliten aus der ersten und sechs Metaboliten aus der zweiten Probennahme nachgewiesen, mit zwischen zehn und 25 assoziierten SNPs für jeden Metaboliten (Tab. 6, Abb. 18 und 19). Diese konnten in 19 mQTL für die erste Probennahme und 25 mQTL für die zweite Probennahme gruppiert werden (Tab. A10 und A11). Zwei Metaboliten mit signifikanten Marker-Metabolit-Assoziationen wurden für beiden Probennahmen gefunden (TMET110 und TMET116). Der maximale  $r^2$ -Wert betrug 0,51 für den Metaboliten TMET110\_1. Die meisten signifikanten SNPs wurden für TMET116\_2 gefunden (25). Einige mQTL traten für mehrere Metaboliten oder beide Probennahmen gemeinsam auf (Tab. 7, Abb. 20). Die Ergebnisse der zehn interessantesten mQTL (Tab. 7) werden im Folgenden ausführlich diskutiert.

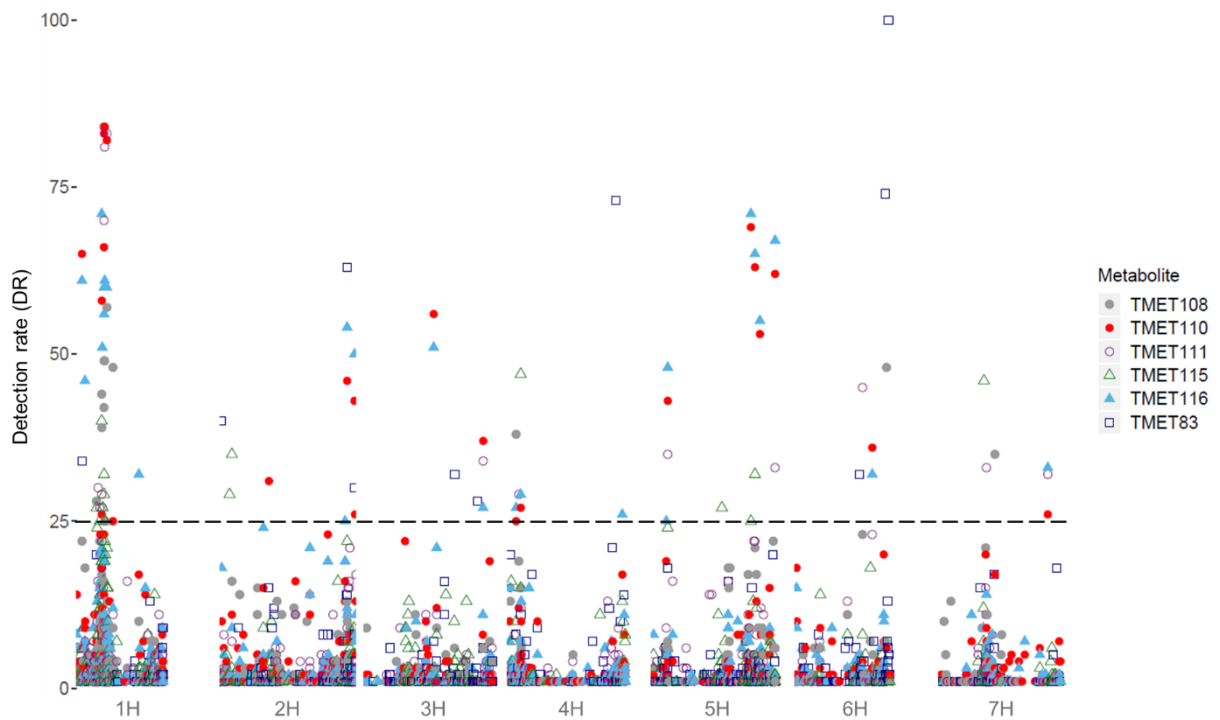
**Tab. 7.** Liste ausgewählter mQTL der Metaboliten (modifiziert nach Gemmer et al. 2021).

Metabolit <sup>a</sup>	mQTL <sup>b</sup>	Position Ref. Seq. 1.0 (bp) <sup>c</sup>	Kandidatengene (KG) <sup>d</sup>
109_1; 110_1; 116_1; 147_1	1H-1_1	14.371.313 – 20.291.169	Disease resistance proteins, UDP-galactose transporter 5
108_2; 110_2; 111_2; 115_2; 116_2	1H-2_2	13.579.164 – 20.291.169	Disease resistance proteins, UDP-galactose transporter 5
116_2	1H-4_2	444.533.575	Trehalose-6-phosphate phosphatase
116_1	1H-2_1	36.457.092	Sugar transporter 1
108_2	1H-3_2	28.823.904	Nucleotide-sugar transporter family protein
115_2	5H-2_2	503.110.566	Sugar transporter protein 7
83_2; 108_2	6H-3_2	570.020.515 – 580.178.325	Sugar transporter SWEET
111_2; 115_2	7H-1_2	47.788.650; 52.114.669	GDP-mannose transporter 1
83_2	1H-1_2	4.228.359 – 6.332.167	Serine/threonine-protein kinase
	2H-3_2	691.870.056	Serine/threonine-protein kinase

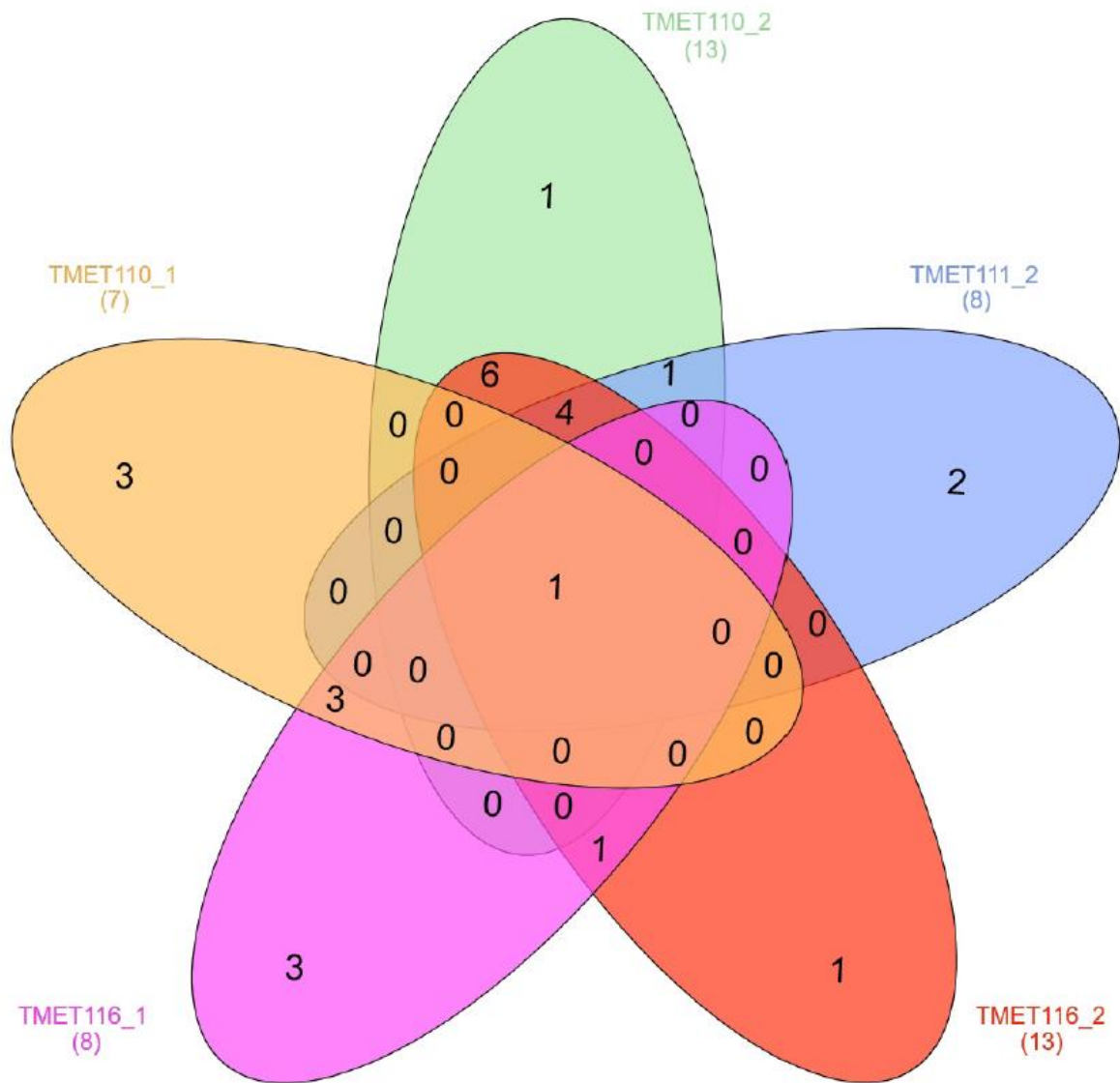
<sup>a</sup>Metaboliten, siehe Tab. A2 und A3; \_1 und \_2 stehen für erste und zweite Probennahme, <sup>b</sup>mQTL Bezeichnung mit Chromosomen und durchgehender Nummerierung (siehe Tab. A8 und A9); \_1 und \_2 stehen für erste und zweite Probennahme, <sup>c</sup>Physikalische Position des mQTL in Basenpaaren, abgeleitet von der Referenzsequenz 1.0 (Mascher et al. 2017), <sup>d</sup>Kandidatengene (abgeleitet von Barleymap (Cantalapiedra et al. 2015)) im Bereich von ca. 1.000.000 bp um den mQTL. Für die exakten Positionen siehe Tab. A8 und Tab. A9.



**Abb. 18.** Manhattan-Plot aller Metaboliten des ersten Probennahmedatums. Alle Metaboliten zeigten signifikante Marker-Merkmal-Assoziationen auf Chromosom 1H. Die verschiedenen Formen und Farben der Punkte unterscheiden die Metaboliten und die assoziierten SNPs. Die x-Achse zeigt die Chromosomen mit SNP-Position basierend auf der Morex-Referenzsequenz 1.0 (Mascher et al. 2017), die Detektionsrate (DR) ist auf der y-Achse angegeben. Die gestrichelte Linie zeigt die Schwelle von  $DR > 25$ , die als Signifikanzschwelle verwendet wurde (Gemmer et al. 2021).



**Abb. 19.** Manhattan-Plot aller Metaboliten des zweiten Probennahmedatums. Alle Metaboliten zeigten signifikante Marker-Merkmal-Assoziationen auf Chromosom 1H. Die verschiedenen Formen und Farben der Punkte unterscheiden die Metaboliten und die assoziierten SNPs. Die x-Achse zeigt die Chromosomen mit SNP-Position basierend auf der Morex-Referenzsequenz 1.0 (Mascher et al. 2017), die Detektionsrate (DR) ist auf der y-Achse angegeben. Die gestrichelte Linie zeigt die Schwelle von  $DR > 25$ , die als Signifikanzschwelle verwendet wurde (Gemmer et al. 2021).



**Abb. 20.** Anzahl der gemeinsamen mQTL zwischen fünf korrelierten Metaboliten. Alle Metaboliten haben den Haupt-mQTL auf Chromosom 1H gemeinsam (Gemmer et al. 2021).

Ein mQTL auf dem Chromosom 1H (zur Vereinfachung als mQTL-1H bezeichnet) in der Region von etwa 13 Mbp bis 20 Mbp (ca. 27-30 cM) war besonders auffällig. Für beide Probennahmen wiesen alle Metaboliten (mit  $r^2 > 0,2$  und  $DR \geq 25$ ), außer TMET83\_2, signifikante Marker-Metabolit-Assoziationen in dieser genomischen Region auf. Hohe Anteile von bis zu 65 % (TMET110) der erklärten phänotypischen Varianz der jeweiligen Metaboliten konnten diesem mQTL zugeschrieben werden (Tab. 6, Tab. A12). Während im Fall von TMET110 dieser mQTL der Hauptverantwortliche für die Metabolitenexpression zu sein scheint, weisen andere Metaboliten wie TMET111\_2 mit nicht mehr als 15 % erklärter phänotypischer Varianz auf eine komplexere genetische Kontrolle hin. Der Nachweis weiterer relevanter mQTL für TMET111\_2, TMET108\_2 und TMET115\_2 unterstützt diese These. Interessanterweise war die erklärte phänotypische Varianz von mQTL-1H für TMET116 für beide Probennahmen die gleiche, wie auch im Fall von TMET110. Dies deutet auf einen stabilen genetischen Einfluss auf die Expression dieser Metaboliten in beiden Entwicklungsstadien der Pflanze hin.

In der entsprechenden Chromosomenregion befinden sich Gene, die sowohl für Resistenzproteine als auch für den *UDP-galactose-transporter 5* (HORVU1Hr1G008350) und eine *Glucose-6-phosphat-isomerase* (HORVU1Hr1G006860) kodieren (Tab. A10 und A11). Neben diesen wichtigen mQTL wurden weitere signifikante Marker-Metabolit-Assoziationen in der Nähe von Genen, die mit Krankheitsresistenz in Zusammenhang stehen, identifiziert (Tab. A10 und A11). Dies verdeutlicht die Rolle von Zucker-Metaboliten im pflanzlichen Abwehrsystem, wo sie hauptsächlich an der Signalinduktion beteiligt sind (Bolouri Moghaddam und Van den Ende 2012; Lastdrager et al. 2014; Rolland et al. 2006). Zucker aktivieren Gene, die pathogen-assoziierte molekulare Muster (engl. pathogene-associated molecular patterns (PAMPs)) erkennen (Herbers et al. 1996). In diesem Zusammenhang ist die Forschung zu Zuckern und zuckerähnlichen Verbindungen als Alternative zum chemischen Pflanzenschutz von großem Interesse (Brilisauer et al. 2019).

Der *UDP-galactose-transporter 5* gehört zur Gruppe der Nukleotid-Zuckertransporter. Im Allgemeinen sind die Zuckertransporter für die Verteilung des Zuckers in der Pflanze verantwortlich. Es wird zwischen Kurzstreckentransporten (Zelle-zu-Zelle) und Langstreckentransporten (Phloem) unterschieden. Neben der Versorgung von Zellen sind sie wichtig für die Signalinduktion (Williams et al. 2000). Neben den Haupt-mQTL

mQTL-1H-1\_1 und mQTL-1H-2\_2 schließen auch mQTL-1H-2\_1, mQTL-1H-3\_2, mQTL-5H-2\_2, mQTL-6H-3\_2 und mQTL-7H-1\_2 verschiedene Zuckertransporter-KG ein: *Sugar transporter 1*, ein *Nucleotide-sugar transporter family protein*, *Sugar transporter protein 7*, *Sugar transporter SWEET* und *GDP-mannose transporter 1*. Die mQTL und KG treffen auf alle acht Metaboliten zu.

Wie der *UDP-galactose-transporter 5* gehören auch die Proteine der *Nucleotide-sugar transporter family* und der *GDP-mannose-transporter 1* zur Gruppe der Nukleotid-Zuckertransporter. Sie befinden sich im Golgi-Apparat und im endoplasmatischen Retikulum von eukaryotischen Zellen (Jack et al. 2001). Nukleotid-Zucker sind Substrate von Glykosyltransferasen und werden im Cytoplasma synthetisiert. Glykosyltransferasen benötigen die Nukleotid-Zucker, um Zuckerreste an Proteine und Lipide anzufügen. Glykosylierungsreaktionen finden hauptsächlich im Golgi-Apparat statt. Über diese Nukleotid-Zuckertransporter werden die Zucker zum Reaktionsort transportiert (Gerardy-Schahn et al. 2001). *Sugar transporter 1* und *sugar transporter protein 7* sind unspezifische Zuckertransporter, die Zucker durch die Zellmembran transportieren. *SWEET sugar transporter* sind für den Transport von Hexose und Saccharose für verschiedene Zwecke wie Kornfüllung und Nektarsekretion zuständig (Eom et al. 2015). Darüber hinaus wird die Expression der *SWEET*-Gene durch pilzliche und bakterielle Pathogene induziert. Dies deutet darauf hin, dass die Zucker-Efflux-Funktion der Transporter das Ziel von Krankheitserregern ist, um ihre eigene Ernährung sicherzustellen (Chen et al. 2010). Das sind Hinweise auf die Involvierung von Zucker-Metaboliten in der Reaktion auf Krankheitserreger.

*Glucose-6-phosphat-isomerase* ist ein essentielles Enzym der katabolen Glykolyse und anabolen Glukoneogenese, welches die reversible Isomerisierung von Glukose-6-Phosphat und Fruktose-6-Phosphat katalysiert (Grauvogel et al. 2007). Diese Reaktion ist für jeden lebenden Organismus notwendig, um die Energie aus Kohlenhydraten zu verwerten. Was Pflanzen betrifft, so wurde es als ein salzinduziertes Protein in der Grünalge *Dunaliella salina* identifiziert (Cui et al. 2010). Unter Salzstress ist die *Glucose-6-phosphat-isomerase* erhöht und an der Anpassung an hohe Salinität beteiligt (Cui et al. 2010).

TMET83\_2, Threonsäure, ist der einzige bekannte Metabolit mit hohem  $r^2$  in der mQTL-Studie. Es handelt sich um eine von Threose abgeleitete Zuckersäure, die die Grundstruktur der essentiellen Aminosäure Threonin bildet. Vier mQTL für TMET83\_2



enthalten *Serine/threonine-protein kinases* als KG (auf 1H, 2H und 3H), während für mQTL6H-3\_2 das KG *Serine/threonine-protein phosphatase 2A* (HORVU6Hr1G091550) definiert wurde. Im Allgemeinen phosphorylieren Proteinkinasen in Pflanzen Proteine und sind an vielen verschiedenen wichtigen Prozessen beteiligt, vor allem an der Signalinduktion bezüglich Ernährung, Befall durch Krankheitserreger und abiotischem Stress. Der Einfluss von Proteinkinasen auf den Pflanzenstoffwechsel wird durch die Schätzung unterstrichen, dass 1-3 % der funktionellen Gene für Proteinkinasen kodieren (Stone und Walker 1995).

Neben TMET83\_2 wurden mehrere Protein-KG der Proteinkinasefamilie auf verschiedenen Chromosomen für mehrere Metaboliten gefunden (Tab. A10 und A11). Serin/Threonin-Proteinkinasen spielen eine Schlüsselrolle bei der Apoptose. Die Phosphorylierung verschiedener Substanzen bestimmt ihre Funktion im apoptotischen Prozess, der durch biotischen und abiotischen Stress ausgelöst wird (Cross et al. 2000). Die in dieser Studie beobachteten Threonsäurespiegel könnten daher die Reaktion einer Pflanze auf Stress widerspiegeln.

Für mQTL-1H-4\_2 (TMET116\_2) ist die *Trehalose 6-phosphate phosphatase* ein potentiell KG. Die phosphorylierte Form der Trehalose ist ein wichtiger Regulator des Wachstums, der Entwicklung und der Seneszenz bei Pflanzen (Wingler et al. 2012). Obwohl die meisten Korrelationen von zuckerähnlichen Metaboliten und Blütezeit schwach waren (Tab. A13), co-lokalisieren mehrere mQTL mit bekannten Blühzeit-assoziierten Genen wie *HvELF3* (1H), *Ppd-H1* (2H), *Vrn-H1* (5H), *Vrn-H2* (4H) und *Vrn-H3* (7H) (Tab. A10 und A11) (Maurer et al. 2015). In dieser Hinsicht ist TMET109\_1 auffallend, da er negativ ( $r = -0,22$ ,  $p < 0,0001$ ) mit der Blütezeit korreliert ist und signifikante Assoziationen mit *HvELF3*, *Ppd-H1*, *Vrn-H2* und *Vrn-H3* zeigt (Tab. A10). Dies deutet auf seine Beteiligung an der Blühzeitregulierung hin. Im Allgemeinen waren die Korrelationen mit dem Blühzeitpunkt der ersten Probennahme ausgeprägter, was wahrscheinlich auf die höhere Variation der Blühinduktion während dieser Zeit zurückzuführen ist. Bei der zweiten Probennahme blühten die meisten Genotypen bereits. Zur Verknüpfung von Metaboliten und Phänotypen sind MV Modelle wie BayesB geeignet, die alle Metaboliten gleichzeitig in die Vorhersage miteinbeziehen.

Die Tatsache, dass mQTL für verschiedene Metaboliten zuverlässig nachgewiesen wurden, zeigt, dass in der HEB-25-Population genetische Variation für die Expression

dieser Metaboliten vorhanden ist. Um zu untersuchen, welche der 25 verschiedenen Donorallele in HEB-25 die Unterschiede in den jeweiligen Metaboliten verursachen, wurden familienspezifische Effekte für die detektierten mQTL berechnet (Tab. A14 und A15). Im Fall von mQTL-1H, der die höchste Wirkung auf alle Metaboliten zeigte, variierten die geschätzten Effekte zwischen den Familien beträchtlich. Je nach Familie verursacht dieser mQTL unterschiedlich starke oder sogar unterschiedlich gerichtete Effekte, wobei die Hälfte der Familien kaum Unterschiede zum kultivierten Allel aufweisen. Interessanterweise korrespondieren die familienspezifischen Effekte der verschiedenen Metaboliten miteinander, d.h. mQTL-1H hat einen ähnlichen Einfluss auf verschiedene Metaboliten. Dies deutet darauf hin, dass diese Metaboliten sehr ähnlich sind und auf der gleichen genetischen Regulation beruhen. Dies gilt für beide Probennahmen. Bei der zweiten Probennahme zeigte die Familie 06 bei mehreren mQTL (z.B. mQTL2H-3\_2 und mQTL5H-4\_2) die extremsten Effekte im Vergleich zu den anderen Familien, insbesondere bei TMET110 und TMET116. Das gilt auch für Familie 16 bei mQTL3H-3\_2. Der mQTL6H-3\_2 verursacht in allen Familien hohe Effekte der gleichen Richtung für den einzigen Nicht-Zucker-Metaboliten TMET83. Dies deutet darauf hin, dass alle Wildallele einen deutlichen Unterschied zum Kulturallel aufweisen.

Die unterschiedliche Wirkungsrichtung und damit die Variation der Metaboliten in Abhängigkeit von den Familien zeigt den Einfluss unterschiedlicher Wildgerstenhintergründe (25 verschiedene Wildgerstenakzessionen) auf die Metabolitenprofile. Bis auf eine Ausnahme sind alle Metaboliten, für die mQTL nachgewiesen wurden, Zucker. Dies lässt ebenfalls einige Schlussfolgerungen zu. Wie oben diskutiert, spielen Zucker eine wichtige Rolle bei der Krankheitsresistenz und Pflanzenentwicklung. Aufgrund des eingekreuzten Wildgerstengenoms in HEB-25 wurde bei diesen Merkmalen eine Variation erzeugt, die bei den genetisch eng verwandten modernen Elitesorten deutlich geringer ist. Die treibende Kraft für die Variation der Metaboliten in der vorliegenden Studie könnten verschiedene Resistenzmechanismen und die Entwicklungsunterschiede gewesen sein. Für GWAS ist eine ausreichende Heritabilität wesentlich, um QTL zu erkennen. Niedrige SNP-basierte Heritabilitäten und Wiederholbarkeiten bei der Mehrzahl der Metaboliten könnten der Grund dafür gewesen sein, dass nur wenige zuverlässige Ergebnisse durch GWAS erzielt wurden. So wurde für den Metaboliten TMET101 eine Korrelation mit HEA von  $r = -0,35$  nachgewiesen, auch im MV-Modell wurde diesem Metaboliten

ein hoher Effekt hinsichtlich des Merkmals HEA zugewiesen. In der GWAS hingegen wurde dieser Metabolit nicht detektiert. Auch das mag mit der geringen SNP-basierten Heritabilität ( $h^2 = 0,12$ ) und der geringen Wiederholbarkeit ( $rep = 0,17$ ) in diesem Fall zusammenhängen. Außerdem ist es ein Hinweis darauf, dass die detektierten mQTL zwar mit den Genen zur Blühinduktion co-lokalisieren, die konkrete Kontrolle der Expression des Metaboliten jedoch anderen Genen unterliegt. Die Datenqualität sollte in zukünftigen Studien verbessert werden, beispielsweise durch wiederholte Messungen von Metaboliten für alle Linien.

## 4. Schlussbetrachtung

### 4.1 Eignung von Metaboliten zur Phänotypvorhersage in Gerste

Die SNP-basierte Schätzung von Zuchtwerten durch genomische Vorhersage ist eine etablierte und wertvolle Methode. Eine wissenschaftlich hochrangige Studie an Mais bestätigte, dass auch eine zuverlässige Schätzung quantitativer Merkmale mit Metabolitdaten möglich ist (Riedelsheimer et al. 2012a). Die Absicht der vorliegenden Studie war eine Validierung dieser Methode bei Gerste. Daher wurden GV und MV zur Vorhersage der Phänotypen (Entwicklungs- und Ertragsparameter) von HEB-25 mit SNP- bzw. Metaboliten-Daten verwendet.

Eine Vorhersage von Phänotypen mit Metabolitdaten anstelle von SNPs in Gerste ist möglich, jedoch mit wesentlich geringerer Genauigkeit. Dafür gibt es mehrere Gründe. Der Hauptfaktor dürfte die im Vergleich zu SNPs deutlich geringere Anzahl von Metaboliten sein. Außerdem war die Zuverlässigkeit der Messung aufgrund der hohen Anzahl von Genotypen im Feldversuch eingeschränkt. Dies verhinderte replizierte Blattproben pro Genotyp (keine biologischen Replikate). Obwohl die Variation der Metaboliten durch die Durchführung der gesamten Probennahme innerhalb von einer Stunde so gering wie möglich gehalten wurde, könnten metabolische Veränderungen innerhalb dieses Zeitfensters die Ergebnisse beeinflusst haben. Die Erwartung, dass Metaboliten aus der zweiten Probennahme bei Ertragsparametern wie Tausendkorngewicht und Kornzahl pro Ähre besser abschneiden, wurde widerlegt. Mit hoher Wahrscheinlichkeit verzerrte die fortgeschrittene Seneszenz der Pflanzen in diesem späten Stadium das Metabolitenprofil.

Dennoch brachte die Studie neue und interessante Erkenntnisse. Die höchste Vorhersagegenauigkeit wurde mit Metabolitdaten der ersten Probennahme für die Entwicklungsparameter SHO, HEA und Reife MAT erreicht (0,59 - 0,61). Es ist zu bedenken, dass diese Genauigkeiten mit nur 128 Metaboliten erreicht wurden, die zu einem frühen Zeitpunkt innerhalb der Vegetationsperiode beprobt wurden. Die phänotypischen Daten wurden in achtjährigen Feldversuchen erhoben, die Metabolitdaten stammen hingegen nur aus einem Versuchsjahr. Dies weist auf eine gewisse Umweltstabilität der Metaboliten hin. Sie scheinen, ähnlich wie SNPs, in der Lage zu sein, Genotypunterschiede zu quantifizieren. Verbesserungen bei der Probennahme und Messung sollten zu einer höheren Vorhersagegenauigkeit führen.

Es konnten interessante Korrelationen zwischen den geschätzten Effekten von einigen Metaboliten beobachtet werden. Die für die Entwicklungsparameter (SHO, HEA, MAT) geschätzten Metaboliten-Effekte sind hoch korreliert ( $0,88 < r < 0,95$ ). Dies deutet darauf hin, dass die gleichen Metaboliten und damit deren kodierenden Gene die Hauptrolle in der Entwicklung der ganzen Pflanze spielen. Dies gilt auch für geschätzte SNP-Effekte. Darüber hinaus stimmen diese beiden Korrelationsmuster in hohem Maße mit den für die phänotypischen Merkmale geschätzten Korrelationen überein. So konnten beide Datensätze die Phänotypen und ihre Beziehungen abbilden, wenn auch mit unterschiedlicher Vorhersagegenauigkeit.

Eine weitere interessante Erkenntnis der Studie war die Beobachtung, dass selbst eine Reduzierung der Metaboliten oder SNPs die Vorhersagegenauigkeit erhöhen kann. Durch Auswahl der Marker oder Metaboliten mit den größten Effekten wurde beispielsweise die Vorhersagegenauigkeit bei Metaboliten für HEA auf bis zu 0,65 erhöht. Dieser Selektionsansatz setzt voraus, dass die Phänotyp-Metabolit/Marker-Beziehungen im Voraus bekannt sind und scheint die Grundidee der genomischen Vorhersage ad absurdum zu führen.

Der Ansatz dieser Studie war eher experimentell und bis zu diesem Punkt ist eine Anwendung in der praktischen Züchtung nicht vorstellbar. Die Vorhersagen mit Metaboliten sind dafür zu vage und die SNP-basierte Vorhersage phänotypischer Merkmale ist eine etablierte Methode für die wichtigsten Kulturpflanzenarten. Selbst bei Nutzpflanzen, für die keine SNP Chips zur Verfügung stehen, könnte GBS die bessere Alternative zum Metaboliten-Screening sein.

#### **4.2 GWAS zur Metabolitenexpression**

Der zweite Teil der Metabolitenstudie in Gerste war eine GWAS mit beiden Datensätzen der frühen und späten Probennahme. Zuverlässige Ergebnisse für vier Metaboliten aus der ersten und sechs Metaboliten aus der zweiten Probennahme wurden erzielt. In zwei Fällen wurden signifikante Marker-Metabolit-Assoziationen für die gleichen Metaboliten für beide Probennahmen festgestellt. Sieben dieser acht Metaboliten sind unbekannt. Die funktionelle Gruppe ist jedoch bekannt: alle sind Zucker oder zuckerähnlich. Der einzige bekannte Metabolit, die Threonsäure, wird als Zuckersäure gruppiert. Phänotypische Varianzen bis zu 0,51 wurden durch das GWAS-Modell erklärt.

Wie für die MV war die mangelnde Qualität der Metabolitdaten problematisch. Dies könnte der Grund dafür sein, dass nur für wenige Metaboliten signifikante mQTL gefunden wurden, die eine ausreichend hohe phänotypische Varianz erklären. Als Indikator für die Datenqualität wurde die SNP-basierte Heritabilität für jeden Metaboliten berechnet. Neben der geschätzten Wiederholbarkeit aus einer Teilmenge mit wiederholten Messungen (Sorten wurden im Feldversuch wiederholt und somit mehrfach beprobt) war dies die einzige Alternative, um die Datenqualität für die nicht wiederholten Proben zu beurteilen. Beide Indikatoren bewiesen, dass es eine Korrelation zwischen der Datenqualität und der mQTL-Erkennung gab. Sowohl die Wiederholbarkeit als auch die SNP-basierten Heritabilitäten waren bei den nachgewiesenen Metaboliten überdurchschnittlich hoch. Für genetische Analysen ist eine hohe Qualität der phänotypischen Daten (in diesem Fall Metabolitdaten) unerlässlich, um zuverlässige Ergebnisse zu erzielen. Die große Populationsgröße von HEB-25 liefert genügend statistische Güte für den QTL-Nachweis, schrumpft aber gleichzeitig die Kapazitäten für Wiederholungen der Genotypen. Wiederholungen würden die Ergebnisse mit Sicherheit stabilisieren. Die Tatsache, dass es sich bei allen nachgewiesenen Metaboliten um Zucker handelt, führt zu unterschiedlichen Hypothesen. Ein Grund dafür könnte die gute Messbarkeit von Zuckern im Vergleich zu anderen Metaboliten sein. Darüber hinaus ist in der HEB-25 eine breite Variation (die erforderlich ist, damit das Modell zuverlässige mQTL nachweisen kann) bei diesen speziellen Metaboliten vertreten. Die unterschiedlichen Effekte in den verschiedenen Familien stützen diese Annahme. Ein wichtiger mQTL, der den Hauptanteil der phänotypischen Variationen für sieben von acht Metaboliten erklärt, verursacht je nach Familie Effekte in unterschiedliche Richtungen. Verschiedene Allele der Wildgerste erzeugen diese genetische Vielfalt. Obwohl das Beprobungsdatum für alle Linien gleich war, unterschieden sich die Genotypen in ihrer Entwicklung erheblich. Die Vielfalt an Zucker-Metaboliten war wahrscheinlich ein Nebeneffekt hiervon. Es ist bekannt, dass Zucker eine Schlüsselrolle in der Pflanzenentwicklung spielen (Koeck et al. 2011; Lastdrager et al. 2014; Rolland et al. 2006).

Diese mQTL-Studie kann als erster Schritt für die weitere Untersuchung von Metaboliten in Gerste angesehen werden. Im Gegensatz zu anderen Studien wurden keine verschiedenen Behandlungen und ihr Einfluss auf die Metabolitenexpression untersucht (z.B. Bewässerung/Trockenstress) (Koeck et al. 2011). Daher wären weitere Experimente mit definierten Gruppen (z.B. frühe/späte Blüte, zwei

verschiedene HEB-Familienhintergründe) mit Fokus auf hoch- oder herunterregulierte Metaboliten empfehlenswert. Dann könnte eine mQTL-Studie Einblicke in die Kontrolle bestimmter Metaboliten und deren Zusammenhang mit dem Blühzeitpunkt liefern. Dies ist auf weitere Merkmale anwendbar und kann dazu beitragen, die komplexen Wechselwirkungen von Genen, Metaboliten und daraus resultierenden Phänotypen aufzuklären.

## 5. Zusammenfassung

Die Gerste (*Hordeum vulgare* ssp. *vulgare*) ist die viertwichtigste Kulturpflanze weltweit. Wie andere Nutzpflanzenarten leidet Gerste unter dem genetischen Flaschenhalseffekt, durch den weitere Leistungssteigerungen durch klassische Züchtungsmethoden zunehmend schwieriger werden. Deshalb sind indirekte Selektionsmethoden von großem Interesse.

In dieser Arbeit wurden genomische Vorhersagen (GV) auf der Grundlage von 33.005 SNP-Markern und alternativ metabolische Vorhersagen (MV) auf der Grundlage von 128 Metaboliten berechnet. Die Bestimmung der Metaboliten erfolgte anhand von Blattmaterial, welches an zwei Zeitpunkten innerhalb eines Jahres gesammelt wurde. Der erste Zeitpunkt repräsentierte ein frühes (Schossbeginn), der zweite ein spätes Entwicklungsstadium (Blüte) der Pflanzen. Mit diesen Daten wurden mehrjährige agronomische Merkmale in der Nested Association Mapping (NAM)-Population HEB-25 vorhergesagt. Vorhersagefähigkeiten von bis zu 0,93 für die Pflanzenhöhe mit SNP-Markern und bis zu 0,59 für den Blühzeitpunkt mit Metaboliten wurden realisiert. Interessanterweise erhöhten sich die Vorhersagefähigkeiten bei GV, nachdem die Anzahl der verwendeten SNP-Marker reduziert wurde. Dies traf insbesondere zu, wenn auf die SNPs mit den höchsten Effekten selektiert wurde. Grund für die Verbesserung ist die Verringerung des Rauschens im Modell. Die geschätzten Effekte von GV und MV stimmten in hohem Maße überein. Daher ist MV eine interessante Alternative zu GV, da es ein stabiles, genotypspezifisches Metabolitenprofil widerspiegelt. Bei MV wurden mit den Metabolitdaten der ersten Probennahme bessere Ergebnisse erzielt als mit jenen der zweiten Probennahme. Die Ergebnisse bestätigen den Nutzen von GV für die Züchtung. Mit MV wurde auch eine interessante Alternative erfolgreich angewandt. Auf der Grundlage der Ergebnisse kann die Verwendung von MV in Gerste nach jetzigem Stand jedoch nicht empfohlen werden. Die Kosten (Personal, Probennahme, Metabolitenanalyse) sind zu hoch. Nichtsdestotrotz kann MV bei der Aufklärung physiologischer Stoffwechselwege helfen, welche die Expression agronomisch wichtiger Merkmale beeinflussen.

Metaboliten spielen bei Pflanzen eine Schlüsselrolle, da sie pflanzliche Entwicklungsprozesse steuern und an biotischen und abiotischen Stressreaktionen beteiligt sind. Ihre Analyse kann wichtige Informationen über die zugrundeliegenden Prozesse liefern. Deshalb wurde im zweiten Teil dieser Arbeit eine genomweite



Assoziationsstudie (GWAS) in HEB-25 durchgeführt, um metabolische quantitative Merkmalsloci (mQTL) zu identifizieren. Für vier Metaboliten aus der frühen und sechs Metaboliten aus der späten Probennahme wurden signifikante mQTL (gruppiert als 19 mQTL für die frühe und 25 mQTL für die späte Probennahme) gefunden. Alle diese Metaboliten konnten als Zucker klassifiziert werden. Es ist bekannt, dass Zucker an der Signalinduktion, dem Pflanzenwachstum und der Pflanzenentwicklung beteiligt sind. Zucker-assoziierte Gene, die hauptsächlich für Zuckertransporter kodieren, wurden als Kandidatengene für die meisten mQTL identifiziert. Darüber hinaus colokalisierten mehrere von ihnen mit bekannten Genen für den Blühzeitpunkt wie *Ppd-H1*, *HvELF3*, *Vrn-H1*, *Vrn-H2* und *Vrn-H3*. Dies deutet auf die in früheren Studien berichtete Rolle von Zuckern bei der Regulation des Blühzeitpunktes hin. Darüber hinaus wurden zahlreiche Gene entdeckt, die mit Pathogenresistenz assoziiert sind. Dies ist ein Hinweis auf die Signalfunktion von Zuckern bei der Resistenzreaktion. Hervorzuheben ist ein mQTL auf dem Chromosom 1H im Bereich von 13 Mbp bis 20 Mbp. Dieser alleine erklärt bis zu 65 % der gesamten phänotypischen Variation eines einzelnen Metaboliten. In der entsprechenden Chromosomenregion befinden sich Gene, die sowohl für Resistenzproteine als auch für den *UDP-galactose-transporter 5* (HORVU1Hr1G008350) und eine *Glucose-6-phosphat-isomerase* (HORVU1Hr1G006860) kodieren. Die Analyse der familienspezifischen Effekte innerhalb der diversen NAM-Population zeigte die große, natürliche genetische Variation bezüglich der Metaboliten aufgrund von verschiedenen Wildallelen. Die Studie stellt einen Schritt in Richtung eines besseren Verständnisses der genetischen Komponenten der Metabolitenexpression, insbesondere der Zucker, dar. Die Verbindung zu ihren biologischen Funktionen in Gerste wurde ebenfalls beleuchtet.

Die im Rahmen dieser Dissertation erworbenen Erkenntnisse im Bereich Gerstengenetik und ihre Verknüpfung mit Metabolitdaten können die Grundlagen für weitere Forschungen auf diesem Gebiet legen. Unter Berücksichtigung der diskutierten Einschränkungen und entsprechenden Verbesserungen bei zukünftigen Studien, erscheint es durchaus lohnenswert, diesem noch wenig erforschten Gebiet weiteren Raum zu geben.

## 6. Summary

Like other crops, barley (*Hordeum vulgare* ssp. *vulgare*), the fourth most important crop in the world, suffers from the genetic bottleneck effect, which makes further performance improvements through classical breeding methods difficult. Therefore, indirect selection methods are of great interest.

In this work genomic prediction (GP) based on 33,005 SNP markers and alternatively, metabolic prediction (MP) based on 128 metabolites were applied. Metabolites were determined using leaf material collected at two points in time in one year. The first time represented an early (shooting) and the second a late stage (flowering) of plant development. These data were used to predict multi-year agronomic traits in the Nested Association Mapping (NAM) population HEB-25. Predictive abilities of up to 0.93 for plant height with SNP markers and up to 0.59 for flowering time with metabolites were realized. Interestingly, the predictive abilities at GP increased after the number of used SNP markers was reduced. This was especially true when selecting for the SNPs with the highest effects. The reason for the improvement is the reduction of noise in the model. The estimated effects of GP and MP were highly concordant, suggesting that MP is an interesting alternative to GP as it reflects a stable genotype-specific metabolite profile. In MP, sampling at an early stage of development outperformed sampling at a later stage. The results confirm the value of GP for breeding. With MP an interesting alternative was also successfully applied. However, based on our results, the use of MP in barley cannot be recommended at this stage. The costs (personnel, sampling, metabolite analysis) are too high. Nevertheless, MP can help to clarify physiological metabolic pathways that influence the expression of agronomically important traits.

Metabolites play a key role in plants as they control plant development processes and are involved in biotic and abiotic stress responses. Their analysis can provide important information about the underlying processes. Thus, in the second part of this work, a genome-wide association study (GWAS) was conducted in HEB-25 to identify metabolic quantitative trait loci (mQTL). For this purpose, the two sets of metabolites were analysed. Significant mQTL (grouped as 19 mQTL for early and 25 mQTL for late sampling) were found for four early and six late metabolites. Interestingly, all these metabolites could be classified as sugars. Sugars are known to be involved in signal induction, plant growth and plant development. Sugar-associated genes, which mainly

code for sugar transporters, have been identified as candidate genes for most mQTL. Also, several of them co-localized with known genes for flowering time such as *Ppd-H1*, *HvELF3*, *Vrn-H1*, *Vrn-H2* and *Vrn-H3*, suggesting the role of sugars in flowering reported in previous studies. In addition, numerous genes associated with pathogen resistance have been discovered. This suggests the signalling function of sugars in the resistance response. Of particular interest is an mQTL on chromosome 1H in the range of 13 Mbp to 20 Mbp, which alone explains up to 65 % of the total phenotypic variation of a single metabolite. In the corresponding chromosome region, there are genes coding for both resistance proteins and the *UDP-galactose transporter 5* (HORVU1Hr1G008350) and a *glucose-6-phosphate isomerase* (HORVU1Hr1G006860). The analysis of family-specific effects within the diverse NAM population showed the large, natural genetic variation in metabolites due to different wild alleles. The study represents a step towards a better understanding of the genetic components of metabolite expression, especially sugars. The link to biological functions in barley was also investigated.

The knowledge gained in this dissertation in the field of barley genetics and its linkage to metabolite data can lay the foundations for further research in this area. Considering the described limitations and corresponding improvements in future studies, it seems worthwhile to give space to this still little researched area.

## Literatur

- Aghnoum R, Marcel TC, Johrde A, Pecchioni N, Schweizer P, Niks RE (2010) Basal host resistance of barley to powdery mildew: connecting quantitative trait loci and candidate genes. *Molecular plant-microbe interactions* 23:91-102
- Alqudah AM, Koppolu R, Wolde GM, Graner A, Schnurbusch T (2016) The genetic architecture of barley plant stature. *Frontiers in genetics* 7:117
- Arend D, Lange M, Chen J, Colmsee C, Flemming S, Hecht D, Scholz U (2014) e!DAL-a framework to store, share and publish research data. *BMC bioinformatics* 15:214
- Barabaschi D, Tondelli A, Desiderio F, Volante A, Vaccino P, Valè G, Cattivelli L (2016) Next generation breeding. *Plant Science* 242:3-13
- Bayer MM, Rapazote-Flores P, Ganal M, Hedley PE, Macaulay M, Plieske J, Ramsay L, Russell J, Shaw PD, Thomas W (2017) Development and evaluation of a barley 50k iSelect SNP array. *Frontiers in plant science* 8:1792
- Bolouri Moghaddam MR, Van den Ende W (2012) Sugars and plant innate immunity. *Journal of experimental botany* 63:3989-3998
- Box GE, Cox DR (1964) An analysis of transformations. *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological)* 26:211-243
- Brilisauer K, Rapp J, Rath P, Schöllhorn A, Bleul L, Weiß E, Stahl M, Grond S, Forchhammer K (2019) Cyanobacterial antimetabolite 7-deoxy-sedoheptulose blocks the shikimate pathway to inhibit the growth of prototrophic organisms. *Nature communications* 10:545
- Cantalapiedra CP, Boudiar R, Casas AM, Igartua E, Contreras-Moreira B (2015) BARLEYMAP: physical and genetic mapping of nucleotide sequences and annotation of surrounding loci in barley. *Molecular breeding* 35:13
- Carrola J, Rocha CuM, Barros AnS, Gil AM, Goodfellow BJ, Carreira IM, Bernardo Jo, Gomes A, Sousa V, Carvalho L (2010) Metabolic signatures of lung cancer in biofluids: NMR-based metabonomics of urine. *Journal of proteome research* 10:221-230
- Chamarthi SK, Kumar K, Gunnaiah R, Kushalappa AC, Dion Y, Choo TM (2014) Identification of fusarium head blight resistance related metabolites specific to doubled-haploid lines in barley. *European Journal of Plant Pathology* 138:67-78
- Chan EK, Rowe HC, Hansen BG, Kliebenstein DJ (2010) The complex genetic architecture of the metabolome. *PLoS genetics* 6:e1001198
- Chen L-Q, Hou B-H, Lalonde S, Takanaga H, Hartung ML, Qu X-Q, Guo W-J, Kim J-G, Underwood W, Chaudhuri B (2010) Sugar transporters for intercellular exchange and nutrition of pathogens. *Nature* 468:527
- Chen W, Gao Y, Xie W, Gong L, Lu K, Wang W, Li Y, Liu X, Zhang H, Dong H (2014) Genome-wide association analyses provide genetic and biochemical insights into natural variation in rice metabolism. *Nature genetics* 46:714
- Clark SA, Hickey JM, Van der Werf JH (2011) Different models of genetic variation and their effect on genomic evaluation. *Genetics Selection Evolution* 43:18
- Comadran J, Kilian B, Russell J, Ramsay L, Stein N, Ganal M, Shaw P, Bayer M, Thomas W, Marshall D (2012) Natural variation in a homolog of *Antirrhinum CENTRORADIALIS* contributed to spring growth habit and environmental adaptation in cultivated barley. *Nature genetics* 44:1388-1392
- Covarrubias-Pazarán G (2016) Genome-assisted prediction of quantitative traits using the R package sommer. *PloS one* 11:e0156744

Cross TG, Scheel-Toellner D, Henriquez NV, Deacon E, Salmon M, Lord JM (2000) Serine/threonine protein kinases and apoptosis. *Experimental cell research* 256:34-41

Crossa J, Perez P, Hickey J, Burgueno J, Ornella L, Cerón-Rojas J, Zhang X, Dreisigacker S, Babu R, Li Y (2014) Genomic prediction in CIMMYT maize and wheat breeding programs. *Heredity* 112:48

Cui L, Chai Y, Li J, Liu H, Zhang L, Xue L (2010) Identification of a glucose-6-phosphate isomerase involved in adaptation to salt stress of *Dunaliella salina*. *Journal of applied Phycology* 22:563-568

Dai F, Nevo E, Wu D, Comadran J, Zhou M, Qiu L, Chen Z, Beiles A, Chen G, Zhang G (2012) Tibet is one of the centers of domestication of cultivated barley. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 109:16969-16973

Dan Z, Hu J, Zhou W, Yao G, Zhu R, Zhu Y, Huang W (2016) Metabolic prediction of important agronomic traits in hybrid rice (*Oryza sativa* L.). *Scientific reports* 6:21732

Desta ZA, Ortiz R (2014) Genomic selection: genome-wide prediction in plant improvement. *Trends in plant science* 19:592-601

Dixon RA (2003) Phytochemistry meets genome analysis, and beyond. *Phytochemistry* 62:815-816

Dockter C, Hansson M (2015) Improving barley culm robustness for secured crop yield in a changing climate. *Journal of experimental botany* 66:3499-3509

Dreissig S, Maurer A, Sharma R, Milne L, Flavell AJ, Schmutzer T, Pillen K (2020) Natural variation in meiotic recombination rate shapes introgression patterns in intraspecific hybrids between wild and domesticated barley. *New Phytologist*

Eom J-S, Chen L-Q, Sosso D, Julius BT, Lin I, Qu X-Q, Braun DM, Frommer WB (2015) SWEETs, transporters for intracellular and intercellular sugar translocation. *Current opinion in plant biology* 25:53-62

Evers JB (2015) Sugar as a key component of the shoot branching regulation network. *Plant, cell & environment* 38:1455-1456

Fernie AR, Schauer N (2009) Metabolomics-assisted breeding: a viable option for crop improvement? *Trends in genetics* 25:39-48

Fiehn O (2002) Metabolomics—the link between genotypes and phenotypes. *Functional genomics*. Springer, pp 155-171

Forsberg N, Russell J, Macaulay M, Leino M, Hagenblad J (2015) Farmers without borders—genetic structuring in century old barley (*Hordeum vulgare*). *Heredity* 114:195-206

Friendly M (2002) Corrgrams: Exploratory displays for correlation matrices. *The American Statistician* 56:316-324

Gemmer MR, Richter C, Jiang Y, Schmutzer T, Raorane ML, Junker B, Pillen K, Maurer A (2020) Can metabolic prediction be an alternative to genomic prediction in barley? *PLOS ONE* 15:e0234052

Gemmer MR, Richter C, Schmutzer T, Raorane ML, Junker B, Pillen K, Maurer A (2021) Genome-wide association study on metabolite accumulation in a wild barley NAM population reveals natural variation in sugar metabolism. *PLOS ONE*. 2021;16(2): e0246510

Gerardy-Schahn R, Oelmann S, Bakker H (2001) Nucleotide sugar transporters: biological and functional aspects. *Biochimie* 83:775-782

Gibson SI (2005) Control of plant development and gene expression by sugar signaling. *Current opinion in plant biology* 8:93-102

Goddard M, Hayes B (2007) Genomic selection. *Journal of Animal breeding and Genetics* 124:323-330

Gomez-Casati DF, Zanol MI, Busi MV (2013) Metabolomics in plants and humans: applications in the prevention and diagnosis of diseases. *BioMed research international* 2013

Grauvogel C, Brinkmann H, Petersen J (2007) Evolution of the glucose-6-phosphate isomerase: the plasticity of primary metabolism in photosynthetic eukaryotes. *Molecular biology and evolution* 24:1611-1621

Grewal TS, Rosnagel BG, Scoles GJ (2012) Mapping quantitative trait loci associated with spot blotch and net blotch resistance in a doubled-haploid barley population. *Molecular breeding* 30:267-279

Hadley Wickham RF, Lionel Henry and Kirill Müller (2018) *A Grammar of Data Manipulation*. R package version 075

Hayes B, Bowman P, Chamberlain A, Goddard M (2009) Invited review: Genomic selection in dairy cattle: Progress and challenges. *Journal of dairy science* 92:433-443

Heberle H, Meirelles GV, da Silva FR, Telles GP, Minghim R (2015) InteractiVenn: a web-based tool for the analysis of sets through Venn diagrams. *BMC bioinformatics* 16:169

Heffner EL, Sorrells ME, Jannink J-L (2009) Genomic selection for crop improvement. *Crop Science* 49:1-12

Henderson CR (1984) *Applications of linear models in animal breeding*. University of Guelph Guelph

Herbers K, Meuwly P, Frommer WB, Metraux J-P, Sonnewald U (1996) Systemic acquired resistance mediated by the ectopic expression of invertase: possible hexose sensing in the secretory pathway. *The Plant Cell* 8:793-803

Herzig P, Backhaus A, Seiffert U, von Wirén N, Pillen K, Maurer A (2019) Genetic dissection of grain elements predicted by hyperspectral imaging associated with yield-related traits in a wild barley NAM population. *Plant Science* 285:151-164

Herzig P, Maurer A, Draba V, Sharma R, Draicchio F, Bull H, Milne L, Thomas WT, Flavell AJ, Pillen K (2018) Contrasting genetic regulation of plant development in wild barley grown in two European environments revealed by nested association mapping. *Journal of experimental botany* 69:1517-1531

Hjorth JU (1993) *Computer intensive statistical methods: Validation, model selection, and bootstrap*. Routledge

Igartua E, Moralejo M, Casas AM, Torres L, Molina-Cano J-L (2013) Whole-genome analysis with SNPs from BOPA1 shows clearly defined groupings of Western Mediterranean, Ethiopian, and Fertile Crescent barleys. *Genetic resources and crop evolution* 60:251-264

International Barley Genome Sequencing Consortium (2012) A physical, genetic and functional sequence assembly of the barley genome. *Nature* 491:711-716

Jack DL, Yang NM, Saier MH (2001) The drug/metabolite transporter superfamily. *European Journal of Biochemistry* 268:3620-3639

Kaur H, Heinzl N, Schöttner M, Baldwin IT, Gális I (2010) R2R3-NaMYB8 regulates the accumulation of phenylpropanoid-polyamine conjugates, which are essential for local and systemic defense against insect herbivores in *Nicotiana attenuata*. *Plant physiology* 152:1731-1747

Koeck M, Hardham AR, Dodds PN (2011) The role of effectors of biotrophic and hemibiotrophic fungi in infection. *Cellular microbiology* 13:1849-1857

Kondrák M, Marincs F, Antal F, Juhász Z, Bánfalvi Z (2012) Effects of yeast trehalose-6-phosphate synthase 1 on gene expression and carbohydrate contents of potato leaves under drought stress conditions. *BMC plant biology* 12:74

Korte A, Farlow A (2013) The advantages and limitations of trait analysis with GWAS: a review. *Plant methods* 9:29

Kuznetsova A, Brockhoff PB, Christensen RHB (2016) lmerTest: Tests in Linear Mixed Effects Models. R package version 2.0-33.

Lancashire PD, Bleiholder H, Boom Tvd, Langelüddeke P, Stauss R, WEBER E, Witzemberger A (1991) A uniform decimal code for growth stages of crops and weeds. *Annals of applied Biology* 119:561-601

Lastdrager J, Hanson J, Smeekens S (2014) Sugar signals and the control of plant growth and development. *Journal of experimental botany* 65:799-807

Luo J (2015) Metabolite-based genome-wide association studies in plants. *Current opinion in plant biology* 24:31-38

Mascher M, Gundlach H, Himmelbach A, Beier S, Twardziok SO, Wicker T, Radchuk V, Dockter C, Hedley PE, Russell J (2017) A chromosome conformation capture ordered sequence of the barley genome. *Nature* 544:427

Mascher M, Richmond TA, Gerhardt DJ, Himmelbach A, Clissold L, Sampath D, Ayling S, Steuernagel B, Pfeifer M, D'Ascenzo M (2013) Barley whole exome capture: a tool for genomic research in the genus *Hordeum* and beyond. *The Plant Journal* 76:494-505

Matros A, Liu G, Hartmann A, Jiang Y, Zhao Y, Wang H, Ebmeyer E, Korzun V, Schachschneider R, Kazman E (2016) Genome–metabolite associations revealed low heritability, high genetic complexity, and causal relations for leaf metabolites in winter wheat (*Triticum aestivum*). *Journal of experimental botany* 68:415-428

Maurer A, Draba V, Jiang Y, Schnaithmann F, Sharma R, Schumann E, Kilian B, Reif JC, Pillen K (2015) Modelling the genetic architecture of flowering time control in barley through nested association mapping. *Bmc Genomics* 16:290

Maurer A, Draba V, Pillen K (2016) Genomic dissection of plant development and its impact on thousand grain weight in barley through nested association mapping. *Journal of Experimental Botany* 67:2507-2518

Maurer A, Sannemann W, Léon J, Pillen K (2017) Estimating parent-specific QTL effects through cumulating linked identity-by-state SNP effects in multiparental populations. *Heredity* 118(5):477-485

Maurer A, Pillen K (2019) 50k Illumina Infinium iSelect SNP Array data for the wild barley NAM population HEB-25 e!DAL - Plant Genomics and Phenomics Research Data Repository (PGP)

McMullen MD, Kresovich S, Villeda HS, Bradbury P, Li H, Sun Q, Flint-Garcia S, Thornsberry J, Acharya C, Bottoms C (2009) Genetic properties of the maize nested association mapping population. *Science* 325:737-740

Meuwissen T, Hayes B, Goddard M (2001) Prediction of total genetic value using genome-wide dense marker maps. *Genetics* 157:1819-1829

Meuwissen TH, Solberg TR, Shepherd R, Woolliams JA (2009) A fast algorithm for BayesB type of prediction of genome-wide estimates of genetic value. *Genetics Selection Evolution* 41:2

Monat C, Schreiber M, Stein N, Mascher M (2019) Prospects of pan-genomics in barley. *Theoretical and Applied Genetics* 132:785-796

Nadeem MA, Nawaz MA, Shahid MQ, Doğan Y, Comertpay G, Yıldız M, Hatipoğlu R, Ahmad F, Alsaleh A, Labhane N (2018) DNA molecular markers in plant breeding: current status and recent advancements in genomic selection and genome editing. *Biotechnology & Biotechnological Equipment* 32:261-285

Pérez P, de Los Campos G (2014) Genome-wide regression and prediction with the BGLR statistical package. *Genetics* 198:483-495

Piasecka A, Sawikowska A, Kuczyńska A, Ogradowicz P, Mikołajczak K, Krystkowiak K, Gudyś K, Guzy-Wróbelska J, Krajewski P, Kachlicki P (2017) Drought-related secondary metabolites of barley (*Hordeum vulgare* L.) leaves and their metabolomic quantitative trait loci. *The Plant Journal* 89:898-913

Poland JA, Rife TW (2012) Genotyping-by-sequencing for plant breeding and genetics. *The Plant Genome* 5:92-102

Pourkheirandish M, Hensel G, Kilian B, Senthil N, Chen G, Sameri M, Azhaguvel P, Sakuma S, Dhanagond S, Sharma R (2015) Evolution of the grain dispersal system in barley. *Cell* 162:527-539

R Core Team (2018) R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria

Revelle W (2018) psych: Procedures for Personality and Psychological Research, Northwestern University, Evanston, Illinois, USA

Riedelsheimer C, Czedik-Eysenberg A, Grieder C, Lisec J, Technow F, Sulpice R, Altmann T, Stitt M, Willmitzer L, Melchinger AE (2012a) Genomic and metabolic prediction of complex heterotic traits in hybrid maize. *Nature genetics* 44:217

Riedelsheimer C, Lisec J, Czedik-Eysenberg A, Sulpice R, Flis A, Grieder C, Altmann T, Stitt M, Willmitzer L, Melchinger AE (2012b) Genome-wide association mapping of leaf metabolic profiles for dissecting complex traits in maize. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 109:8872-8877

Rolland F, Baena-Gonzalez E, Sheen J (2006) Sugar sensing and signaling in plants: conserved and novel mechanisms. *Annu Rev Plant Biol* 57:675-709

Rutkoski JE, Poland J, Jannink J-L, Sorrells ME (2013) Imputation of unordered markers and the impact on genomic selection accuracy. *G3: Genes, Genomes, Genetics* 3:427-439

Saade S, Maurer A, Shahid M, Oakey H, Schmöckel SM, Negrão S, Pillen K, Tester M (2016) Yield-related salinity tolerance traits identified in a nested association mapping (NAM) population of wild barley. *Scientific reports* 6:32586

Sakuma S, Salomon B, Komatsuda T (2011) The domestication syndrome genes responsible for the major changes in plant form in the Triticeae crops. *Plant and cell physiology* 52:738-749

Sallam A, Endelman J, Jannink J-L, Smith K (2015) Assessing genomic selection prediction accuracy in a dynamic barley breeding population. *The Plant Genome* 8

SAS Slic, North Carolina, USA (2013)

Schmalenbach I, Körber N, Pillen K (2008) Selecting a set of wild barley introgression lines and verification of QTL effects for resistance to powdery mildew and leaf rust. *Theoretical and Applied Genetics* 117:1093-1106

Schmalenbach I, Pillen K (2009) Detection and verification of malting quality QTLs using wild barley introgression lines. *Theoretical and applied genetics* 118:1411-1427

Schmid K, Kilian B, Russell J (2018) Barley domestication, adaptation and population genomics. *The Barley Genome*. Springer, pp 317-336

Schnaithmann F, Kopahnke D, Pillen K (2014) A first step toward the development of a barley NAM population and its utilization to detect QTLs conferring leaf rust seedling resistance. *Theoretical and applied genetics* 127:1513-1525

Slatkin M (2008) Linkage disequilibrium—understanding the evolutionary past and mapping the medical future. *Nature Reviews Genetics* 9:477-485

Statista (2020a) Anbaufläche der wichtigsten Getreidearten weltweit in den Jahren 2010/11 bis 2018/19.

Statista (2020b) Ertrag je Hektar Anbaufläche von Gerste in Deutschland in den Jahren 2006 bis 2018.



Statista (2020c) Getreideertrag pro Hektar Anbaufläche der wichtigsten Getreidearten weltweit in den Jahren 1993/94 bis 2018/2019.

Steinfath M, Strehmel N, Peters R, Schauer N, Groth D, Hummel J, Steup M, Selbig J, Kopka J, Geigenberger P (2010) Discovering plant metabolic biomarkers for phenotype prediction using an untargeted approach. *Plant Biotechnology Journal* 8:900-911

Stone JM, Walker JC (1995) Plant protein kinase families and signal transduction. *Plant Physiology* 108:451-457

Sullivan P, Arendt E, Gallagher E (2013) The increasing use of barley and barley by-products in the production of healthier baked goods. *Trends in Food Science & Technology* 29:124-134

Tanksley SD, McCouch SR (1997) Seed banks and molecular maps: unlocking genetic potential from the wild. *Science* 277:1063-1066

Templer SE, Ammon A, Pscheidt D, Ciobotea O, Schuy C, McCollum C, Sonnewald U, Hanemann A, Förster J, Ordon F (2017) Metabolite profiling of barley flag leaves under drought and combined heat and drought stress reveals metabolic QTLs for metabolites associated with antioxidant defense. *Journal of experimental botany* 68:1697-1713

Vatter T, Maurer A, Kopahnke D, Perovic D, Ordon F, Pillen K (2017) A nested association mapping population identifies multiple small effect QTL conferring resistance against net blotch (*Pyrenophora teres* f. *teres*) in wild barley. *PloS one* 12:e0186803

Vatter T, Maurer A, Perovic D, Kopahnke D, Pillen K, Ordon F (2018) Identification of QTL conferring resistance to stripe rust (*Puccinia striiformis* f. sp. *hordei*) and leaf rust (*Puccinia hordei*) in barley using nested association mapping (NAM). *PloS one* 13:e0191666

Visscher PM, Brown MA, McCarthy MI, Yang J (2012) Five years of GWAS discovery. *The American Journal of Human Genetics* 90:7-24

Wen W, Li D, Li X, Gao Y, Li W, Li H, Liu J, Liu H, Chen W, Luo J (2014) Metabolome-based genome-wide association study of maize kernel leads to novel biochemical insights. *Nature communications* 5:3438

Werner CR, Voss-Fels KP, Miller CN, Qian W, Hua W, Guan C-Y, Snowdon RJ, Qian L (2018) Effective Genomic Selection in a Narrow-Genepool Crop with Low-Density Markers: Asian Rapeseed as an Example. *The plant genome*

Wetterdienst D (2018) Deutschlandwetter im Jahr 2018. 2018-ein außergewöhnliches Wetterjahr mit vielen Rekorden

Whittaker JC, Thompson R, Denham MC (2000) Marker-assisted selection using ridge regression. *Genetics Research* 75:249-252

Wickham H (2016) *ggplot2: elegant graphics for data analysis*. Springer

Wiegmann M, Maurer A, Pham A, March TJ, Al-Abdallat A, Thomas WT, Bull HJ, Shahid M, Eglinton J, Baum M (2019) Barley yield formation under abiotic stress depends on the interplay between flowering time genes and environmental cues. *Scientific reports* 9:1-16

Williams LE, Lemoine R, Sauer N (2000) Sugar transporters in higher plants—a diversity of roles and complex regulation. *Trends in plant science* 5:283-290

Wingler A, Delatte TL, O'Hara LE, Primavesi LF, Jhurrea D, Paul MJ, Schlupepmann H (2012) Trehalose 6-phosphate is required for the onset of leaf senescence associated with high carbon availability. *Plant physiology* 158:1241-1251

Yang J, Zeng J, Goddard ME, Wray NR, Visscher PM (2017) Concepts, estimation and interpretation of SNP-based heritability. *Nature genetics* 49:1304

Zamir D (2001) Improving plant breeding with exotic genetic libraries. *Nature reviews genetics* 2:983

Zhao Y, Gowda M, Liu W, Würschum T, Maurer HP, Longin FH, Ranc N, Reif JC (2012) Accuracy of genomic selection in European maize elite breeding populations. *Theoretical and Applied Genetics* 124:769-776

## **Danksagung**

Zunächst möchte ich meinem Doktorvater Prof. Dr. Klaus Pillen dafür danken, dass er mir die Möglichkeit gab, an seinem Lehrstuhl zu promovieren. Er hat das Forschungsprojekt geplant und mich bei der erfolgreichen Durchführung meiner Arbeit unterstützt.

Besonderer Dank geht an Dr. Andreas Maurer für die intensive Betreuung meiner Arbeit und die kritische Durchsicht der Dissertationsschrift.

Dank gebührt auch Prof. Dr. Björn Junker und seiner Gruppe vom Institut für Pharmazie. Besonders zu erwähnen ist Chris Richter, der die Metaboliten bestimmt hat.

Danken möchte ich auch Dr. Yong Jiang vom IPK, einem Experten auf dem Gebiet der Genomischen Vorhersage. Seine Unterstützung war mir eine große Hilfe.

Weiterhin möchte ich der gesamten Arbeitsgruppe Pflanzenzüchtung danken, die meine Arbeit begleitet und fruchtbare Impulse gegeben hat.

Nicht zuletzt bin ich auch meiner Familie dankbar, die den Grundstein für mein Interesse an der Landwirtschaft gelegt hat.

## Selbstständigkeitserklärung

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und ohne fremde Hilfe verfasst habe, keine anderen als die von mir angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe und die den benutzten Werken wörtlich oder inhaltlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe.

*I declare under penalty of perjury that this thesis is my own work entirely and has been written without any help from other people. I used only the sources mentioned and included all the citations correctly both in word or content.*

Halle (Saale), 29.06.2021

\_\_\_\_\_

Unterschrift

Teile der Ergebnisse dieser Arbeit wurden veröffentlicht in:

Gemmer MR, Richter C, Jiang Y, Schmutzer T, Raorane ML, Junker B, Pillen K, Maurer A (2020). Can metabolic prediction be an alternative to genomic prediction in barley? PLOS ONE. 2020;15(6): e0234052

Gemmer MR, Richter C, Schmutzer T, Raorane ML, Junker B, Pillen K, Maurer A (2021). Genome-wide association study on metabolite accumulation in a wild barley NAM population reveals natural variation in sugar metabolism. PLOS ONE. 2021;16(2): e0246510

## Anhang

**Tab. A1.** Detaillierte Informationen über die Feldversuche in den Jahren 2011 bis 2018 (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).

Jahr	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018
Aussaat	24.03.	21.03	18./19.03.	20./24.03	18./20.03.	14./15.03.	27./28.03.	09.04.
Ernte	ab Juli	ab Juli	ab Juli	ab Juli	ab Juli	ab 04.07.2016	ab 18.07.2017	ab 05.07.2018
Behandlungsstufe	-	-	-	Stickstoff	Stickstoff	Stickstoff	Fungizid	Fungizid
Kontrolle	-	-	-	Stickstoffdüngung	Stickstoffdüngung	Stickstoffdüngung	Fungizidapplikation	Fungizidapplikation
Stressvariante	-	-	-	keine Stickstoffdüngung	keine Stickstoffdüngung	keine Stickstoffdüngung	keine Fungizidapplikation	keine Fungizidapplikation
Anzahl Parzellen	1424	2833	2825	2840	2838	2840	2840	2836
NAs <sup>d</sup>	4	1	0	2	40	30	13	34
Blöcke	1	2	2	2	2	2	2	2
Wiederholungen <sup>e</sup>	-	2	2	-	-	-	-	-
N <sub>min</sub> Probe (kg N/ha)	-	-	-	40	30	30	70	-
N Düngung (kg N/ha)	-	-	-	60	70	60	-	-
N gesamt (kg N/ha)	-	-	-	100	100	90	-	-
Düngerart	-	-	-	KAS <sup>a</sup>	KAS <sup>a</sup>	ENTEC 26	-	-
Datum der Düngerapplikation	-	-	-	28.04.	12.05.	31.03.	-	-
Fungizid	-	-	-	-	-	-	23.05.: Vegas SF245 <sup>b</sup> 26.06.: Bontima <sup>c</sup>	Vegas SD245 <sup>b</sup>

Bemerkung: Die Informationen über Stickstoffdüngung und Fungizidapplikation beziehen sich auf die Behandlungsstufen. Pflanzenschutz und Düngung abseits der Behandlungsstufen wurde nach örtlicher Praxis durchgeführt (-). <sup>a</sup>Kalkammonsalpeter, <sup>b</sup>Wirkstoff: Cyflufenamid, <sup>c</sup>Wirkstoff: Cyprodinil Isopyrazam, <sup>d</sup>Linien, welche nicht phänotypisiert werden konnten, <sup>e</sup>2012/2013: Beide Blöcke mit gleicher Behandlungsstufe, daher als Wiederholung angesehen.

**Tab. A2.** Liste der Metaboliten der ersten Probennahme (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).

Metabolit	Substanzgruppe	Kodierung <sup>a</sup>	NA <sup>b</sup>
Butansäure	Carbonsäure	TMET1	1
Mannosephosphat	Zucker	TMET2	1
Hexandisäure	Dicarbonsäure	TMET3	4
L-Threitol	Zuckeralkohol C4	TMET4	70
2-Ketoglutarsäure	Dicarbonsäure	TMET5	6
2-Ketoglutarsäure 2	Dicarbonsäure	TMET6	12
5-Hydroxytryptophan	Aminosäure	TMET7	2
Alanin	Aminosäure	TMET8	45
Allylamin	Amid	TMET9	17
Arabinose	Zucker C5	TMET10	10
Arbutin	Glucosid	TMET11	264
Ascorbinsäure	Carbonsäure	TMET12	0
Aspartat	Aminosäure	TMET13	76
Azelainsäure	Dicarbonsäure	TMET14	98
Butendisäure	Dicarbonsäure	TMET15	66
C32	Standard <sup>c</sup>	TMET16	32
Decansäure	Fettsäure	TMET17	599
D-Erythro-2-Pentulosephosphat	Zucker C5	TMET18	4
Dihydroxybutansäure	Fettsäure	TMET19	455
Diphenylisophthalat	Aromatische Verbindung	TMET20	33
Docosan	Standard <sup>c</sup>	TMET21	0
Dodekan	Standard <sup>c</sup>	TMET22	2
Dodecansäure	Fettsäure	TMET23	10
Fruktose	Zucker C6	TMET24	1
Fruktose 2	Zucker C6	TMET25	0
Fucose	Zucker C6	TMET26	1
Fumerat	Dicarbonsäure	TMET27	5
GABA	Aminosäure	TMET28	571
Galactarsäure	Dicarbonsäure	TMET29	193
Galactarsäure 2	Dicarbonsäure	TMET30	56
Galactinol	Zuckeralkohol C6	TMET31	227
Galaktose	Zucker C6	TMET32	6
Gluconsäure	Carbonsäure C6	TMET33	71
Gluconsäure 2	Carbonsäure C6	TMET34	66
Glukose	Zucker C6	TMET35	4
Glukose 2	Zucker C6	TMET36	1
Glutamat	Aminosäure	TMET37	215
Glycerinsäure	Carbonsäure C3	TMET38	0
Glycin	Aminosäure	TMET39	0
Glykolsäure	Carbonsäure	TMET40	185
Hexaconsäure	Fettsäure	TMET41	6
Hexadecansäure, Butylester	Carbonsäureester	TMET42	636
Isocitronensäure	Carbonsäure	TMET43	6
Isocitronensäure-Lacton	Dicarbonsäure	TMET44	133
Isoleucin	Aminosäure	TMET45	6
Itaconsäure	Dicarbonsäure	TMET46	74

Metabolit	Substanzgruppe	Kodierung <sup>a</sup>	NA <sup>b</sup>
Laktat	Zucker C3	TMET47	174
Leucin	Aminosäure	TMET48	4
Maleinsäure	Dicarbonsäure	TMET49	374
Apfelsäure	Dicarbonsäure	TMET50	2
Malonsäure	Dicarbonsäure	TMET51	4
Mannose	Zucker C6	TMET52	68
Methylhistidin	Aminosäure	TMET53	14
Methylmaleinsäure	Dicarbonsäure	TMET54	113
Methylmalonsäure	Dicarbonsäure	TMET55	2
Methylbernsteinsäure	Dicarbonsäure	TMET56	992
Myo-Inositol	C6-Alkohol	TMET57	1
N,N-Diethylcarbammat	Carbammat	TMET58	19
Nonadecan	Standard <sup>c</sup>	TMET59	26
Octacosan	Standard <sup>c</sup>	TMET60	1
Oktadecan	Standard <sup>c</sup>	TMET61	35
Oxalsäure	Dicarbonsäure	TMET62	19
Oxoglutarsäure	Dicarbonsäure	TMET63	7
Oxoprolin	Aminosäure	TMET64	2
Palmitinsäure	Fettsäure	TMET65	11
Pentadecan	Standard <sup>c</sup>	TMET66	0
Phenylalanin	Aminosäure	TMET67	1237
Phosphorsäure	Phosphat	TMET68	4
Phosphorsäure Propylester	Ester	TMET69	12
Pipecolinsäure	Aminosäure	TMET70	33
Proline	Aminosäure	TMET71	288
Putrescine	Diamin	TMET72	40
Pyruvat	Ketocarboxyl-Säure	TMET73	174
Chininsäure	Cyclohexancarbonsäure	TMET74	13
Rhamnose	Zucker C6	TMET75	13
Ribitol	Zuckeralkohol C5	TMET76	26
Ribonsäure	Zuckeralkohol C5	TMET77	0
Serin	Aminosäure	TMET78	87
Shikimisäure	Cyclohexancarbonsäure	TMET79	18
Stearinsäure	Fettsäure	TMET80	16
Bernsteinsäure	Dicarbonsäure	TMET81	46
Saccharose	Disaccharid	TMET82	0
Threonsäure	Zuckersäure	TMET83	1
Threonsäure 2	Zuckersäure	TMET84	2
Threonin	Aminosäure	TMET85	2
Turanose	Disaccharid	TMET86	17
Unbekannt_0008	Unbekannt	TMET87	20
Unbekannt_0016	Unbekannt	TMET88	0
Unbekannt_0019	Zuckerähnlich	TMET89	255
Unbekannt_0023	Zuckerähnlich	TMET90	1
Unbekannt_0024	Unbekannt	TMET91	3
Unbekannt_0028	Zuckerähnlich	TMET92	1
Unbekannt_0029	Zuckerähnlich	TMET93	3
Unbekannt_0030	2-Keto-l-gluconsäure	TMET94	1

<b>Metabolit</b>	<b>Substanzgruppe</b>	<b>Kodierung<sup>a</sup></b>	<b>NA<sup>b</sup></b>
Unbekannt_0031	Unbekannt	TMET95	1
Unbekannt_0034	Unbekannt	TMET96	10
<b>Unbekannt_0041</b>	<b>Unbekannt</b>	<b>TMET97</b>	<b>871</b>
Unbekannt_0044	Unbekannt	TMET98	17
Unbekannt_0046	Unbekannt	TMET99	1
Unbekannt_0048	Disaccharid	TMET100	4
Unbekannt_0049	Unbekannt	TMET101	2
Unbekannt_0050	Zuckerähnlich	TMET102	0
Unbekannt_0053	Fettsäure	TMET103	1
Unbekannt_0055	Unbekannt	TMET104	1
Unbekannt_0057	Unbekannt	TMET105	1
Unbekannt_0058	Unbekannt	TMET106	2
Unbekannt_0059	Zuckerähnlich	TMET107	54
Unbekannt_0060	Zuckerähnlich	TMET108	32
Unbekannt_0061	Zuckerähnlich	TMET109	1
Unbekannt_0064	Unbekannt	TMET110	1
Unbekannt_0065	Zuckerähnlich	TMET111	0
Unbekannt_0066	Zuckerähnlich	TMET112	93
Unbekannt_0067	Zuckerähnlich	TMET113	78
Unbekannt_0068	Zuckerähnlich	TMET114	3
Unbekannt_0071	Disaccharid	TMET115	39
Unbekannt_0072	Zuckerähnlich	TMET116	1
Unbekannt_0073	Disaccharid	TMET117	3
Unbekannt_0074	Zuckerähnlich	TMET118	8
Unbekannt_0075	Disaccharid	TMET119	0
Unbekannt_0076	Quinone	TMET120	82
Unbekannt_0078	Disaccharid	TMET121	3
Unbekannt_0080	Disaccharid	TMET122	0
Unbekannt_0081	Disaccharid	TMET123	19
Unbekannt_0082	Disaccharid	TMET124	17
<b>Unbekannt_0083</b>	<b>Disaccharid</b>	<b>TMET125</b>	<b>137</b>
Unbekannt_0086	Disaccharid	TMET126	35
Unbekannt_0087	Disaccharid	TMET127	9
Unbekannt_0089	Disaccharid	TMET128	33
Unbekannt_0090	Unbekannt	TMET129	32
Unbekannt_0091	Disaccharid	TMET130	10
<b>Unbekannt_0092</b>	<b>Unbekannt</b>	<b>TMET131</b>	<b>415</b>
Unbekannt_0093	Unbekannt	TMET132	30
Unbekannt_0094	Unbekannt	TMET133	52
<b>Unbekannt_0095</b>	<b>Unbekannt</b>	<b>TMET134</b>	<b>603</b>
Unbekannt_0096	Unbekannt	TMET135	4
Unbekannt_0097	Unbekannt	TMET136	6
Unbekannt_0098	Unbekannt	TMET137	28
<b>Unbekannt_0099</b>	<b>Zuckerähnlich</b>	<b>TMET138</b>	<b>280</b>
Unbekannt_0100	Unbekannt	TMET139	120
Unbekannt_0101	organische Säure	TMET140	16
Unbekannt_0102	Zuckerähnlich	TMET141	13
Unbekannt_0103	Zuckerähnlich	TMET142	60



Metabolit	Substanzgruppe	Kodierung <sup>a</sup>	NA <sup>b</sup>
Unbekannt_0104	Unbekannt	TMET143	58
Unbekannt_0105	Zuckerähnlich	TMET144	17
Unbekannt_0106	Unbekannt	TMET145	106
Unbekannt_0109	Unbekannt	TMET146	26
Unbekannt_0110	Zuckerähnlich	TMET147	40
Unbekannt_0111	Disaccharid	TMET148	1284
Unbekannt_0114	Disaccharid	TMET149	144
Unbekannt_0115	Disaccharid	TMET150	49
Unbekannt_0117	Disaccharid/Polysaccharid	TMET151	79
Unbekannt_0118	Polysaccharid	TMET152	55
Unbekannt_0119	Disaccharid	TMET153	93
Unbekannt_0120	Zuckerähnlich	TMET154	34
Unbekannt_0121	Disaccharid/Polysaccharid	TMET155	11
Valin	Aminosäure	TMET156	2
Xylitol	Zuckeralkohol	TMET157	37
Xylose	Zucker C5	TMET158	2

<sup>a</sup>Kodierung des Metaboliten in der Datenanalyse, <sup>b</sup>Anzahl der Fehlwerte, Metaboliten mit > 10 % Fehlwerten wurden entfernt (rot markiert), <sup>c</sup>Interne Standards, wurden zur weiteren Analyse entfernt (gelb markiert).

**Tab. A3.** Liste der Metaboliten der zweiten Probenahme (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).

Metabolit	Substanzgruppe	Kodierung <sup>a</sup>	NA <sup>b</sup>
Butansäure	Carbonsäure	TMET1	10
D-Mannosephosphat	Zucker	TMET2	2
Hexandisäure	Dicarbonsäure	TMET3	1
L-Threitol	Zuckeralkohol C4	TMET4	3
2-Ketoglutarinsäure	Dicarbonsäure	TMET5	13
2-Ketoglutarinsäure 2	Dicarbonsäure	TMET6	5
5-Hydroxytryptophan	Aminosäure	TMET7	5
Alanin	Aminosäure	TMET8	3
Allylamin	Amide	TMET9	2
Arabinose	Zucker C5	TMET10	0
Arbutin	Glucosid	TMET11	0
Ascorbinsäure	Carbonsäure	TMET12	0
Aspartat	Aminosäure	TMET13	13
Azelainsäure	Dicarbonsäure	TMET14	29
Butendisäure	Dicarbonsäure	TMET15	136
<b>C32</b>	<b>Standard<sup>c</sup></b>	<b>TMET16</b>	<b>0</b>
Decansäure	Fettsäure	TMET17	42
D-Erythro-2-Pentulosephosphat	Zucker C5	TMET18	202
Dihydroxybutansäure	Fettsäure	TMET19	166
Diphenylisophthalat	Aromatische Verbindung	TMET20	1007
Docosan	Standard <sup>c</sup>	TMET21	0
Dodekan	Standard <sup>c</sup>	TMET22	0
Dodecansäure	Fettsäure	TMET23	2
Fruktose	Zucker C6	TMET24	1
Fruktose 2	Zucker C6	TMET25	1
Fucose	Zucker C6	TMET26	2
Fumerat	Dicarbonsäure	TMET27	23
GABA	Aminosäure	TMET28	1323
Galactarsäure	Dicarbonsäure	TMET29	202
Galactarsäure 2	Dicarbonsäure	TMET30	18
Galactinol	Zuckeralkohol C6	TMET31	307
Galaktose	Zucker C6	TMET32	0
Gluconsäure	Carbonsäure C6	TMET33	12
Gluconsäure	Carbonsäure C6	TMET34	383
Glukose	Zucker C6	TMET35	2
Glukose 2	Zucker C6	TMET36	0
Glutamat	Aminosäure	TMET37	843
Glycerinsäure	Carbonsäure C3	TMET38	0
Glycin	Aminosäure	TMET39	0
Glykolsäure	Carbonsäure	TMET40	197
Hexaconsäure	Fettsäure	TMET41	0
Hexadecansäure, Butylester	Carbonsäureester	TMET42	39
Isocitronensäure	Carbonsäure	TMET43	4
Isocitronensäure-Lacton	Dicarbonsäure	TMET44	20
Isoleucin	Aminosäure	TMET45	8
Itaconsäure	Dicarbonsäure	TMET46	160

Metabolit	Substanzgruppe	Kodierung <sup>a</sup>	NA <sup>b</sup>
Laktat	Zucker C3	TMET47	58
Leucin	Aminosäure	TMET48	15
Maleinsäure	Dicarbonsäure	TMET49	411
Apfelsäure	Dicarbonsäure	TMET50	0
Malonsäure	Dicarbonsäure	TMET51	70
Mannose	Zucker C6	TMET52	4
Methylhistidin	Aminosäure	TMET53	4
Methylmaleinsäure	Dicarbonsäure	TMET54	15
Methylmalonsäure	Dicarbonsäure	TMET55	805
Methylbernsteinsäure	Dicarbonsäure	TMET56	610
Myo-Inositol	C6-Alkohol	TMET57	0
N,N-Diethylcarbammat	Carbammat	TMET58	11
Nonadecan	Standard <sup>c</sup>	TMET59	0
Octacosan	Standard <sup>c</sup>	TMET60	0
Oktadecan	Standard <sup>c</sup>	TMET61	0
Oxalsäure	Dicarbonsäure	TMET62	2
Oxoglutarsäure	Dicarbonsäure	TMET63	7
Oxoprolin	Aminosäure	TMET64	3
Palmitinsäure	Fettsäure	TMET65	0
Pentadecan	Standard <sup>c</sup>	TMET66	0
Phenylalanin	Aminosäure	TMET67	1374
Phosphorsäure	Phosphat	TMET68	2
Phosphorsäure Propylester	Ester	TMET69	21
Pipecolinsäure	Aminosäure	TMET70	1
Proline	Aminosäure	TMET71	481
Putrescine	Diamin	TMET72	8
Pyruvat	Ketocarbonsäure	TMET73	47
Chininsäure	Cyclohexancarbonsäure	TMET74	18
Rhamnose	Zucker C6	TMET75	15
Ribitol	Zuckeralkohol C5	TMET76	95
Ribonsäure	Zuckeralkohol C5	TMET77	2
Serin	Aminosäure	TMET78	263
Shikimisäure	Cyclohexancarbonsäure	TMET79	10
Stearinsäure	Fettsäure	TMET80	0
Bernsteinsäure	Dicarbonsäure	TMET81	216
Saccharose	Disaccharid	TMET82	0
Threonsäure	Zuckersäure	TMET83	0
Threonsäure 2	Zuckersäure	TMET84	3
Threonin	Aminosäure	TMET85	0
Turanose	Disaccharid	TMET86	0
Unbekannt_0008	Unbekannt	TMET87	3
Unbekannt_0016	Unbekannt	TMET88	0
Unbekannt_0019	Zuckerähnlich	TMET89	13
Unbekannt_0023	Zuckerähnlich	TMET90	2
Unbekannt_0024	Unbekannt	TMET91	0
Unbekannt_0028	Zuckerähnlich	TMET92	1
Unbekannt_0029	Zuckerähnlich	TMET93	8
Unbekannt_0030	2-Keto-l-gluconsäure	TMET94	1

Metabolit	Substanzgruppe	Kodierung <sup>a</sup>	NA <sup>b</sup>
Unbekannt_0031	Unbekannt	TMET95	0
Unbekannt_0034	Unbekannt	TMET96	1
Unbekannt_0041	Unbekannt	TMET97	153
Unbekannt_0044	Unbekannt	TMET98	671
Unbekannt_0046	Unbekannt	TMET99	1
Unbekannt_0048	Disaccharid	TMET100	119
Unbekannt_0049	Unbekannt	TMET101	6
Unbekannt_0050	Zuckerähnlich	TMET102	0
Unbekannt_0053	Fettsäure	TMET103	3
Unbekannt_0055	Unbekannt	TMET104	0
Unbekannt_0057	Unbekannt	TMET105	0
Unbekannt_0058	Unbekannt	TMET106	2
Unbekannt_0059	Zuckerähnlich	TMET107	39
Unbekannt_0060	Zuckerähnlich	TMET108	1
Unbekannt_0061	Zuckerähnlich	TMET109	0
Unbekannt_0064	Unbekannt	TMET110	0
Unbekannt_0065	Zuckerähnlich	TMET111	0
Unbekannt_0066	Zuckerähnlich	TMET112	76
Unbekannt_0067	Zuckerähnlich	TMET113	1285
Unbekannt_0068	Zuckerähnlich	TMET114	0
Unbekannt_0071	Disaccharid	TMET115	2
Unbekannt_0072	Zuckerähnlich	TMET116	0
Unbekannt_0073	Disaccharid	TMET117	0
Unbekannt_0074	Zuckerähnlich	TMET118	11
Unbekannt_0075	Disaccharid	TMET119	0
Unbekannt_0076	Quinone	TMET120	2
Unbekannt_0078	Disaccharid	TMET121	1
Unbekannt_0080	Disaccharid	TMET122	1
Unbekannt_0081	Disaccharid	TMET123	0
Unbekannt_0082	Disaccharid	TMET124	4
Unbekannt_0083	Disaccharid	TMET125	251
Unbekannt_0086	Disaccharid	TMET126	131
Unbekannt_0087	Disaccharid	TMET127	473
Unbekannt_0089	Disaccharid	TMET128	98
Unbekannt_0090	Unbekannt	TMET129	58
Unbekannt_0091	Disaccharid	TMET130	169
Unbekannt_0092	Unbekannt	TMET131	893
Unbekannt_0093	Unbekannt	TMET132	1
Unbekannt_0094	Unbekannt	TMET133	8
Unbekannt_0095	Unbekannt	TMET134	435
Unbekannt_0096	Unbekannt	TMET135	2
Unbekannt_0097	Unbekannt	TMET136	1
Unbekannt_0098	Unbekannt	TMET137	44
Unbekannt_0099	Zuckerähnlich	TMET138	1
Unbekannt_0100	Unbekannt	TMET139	133
Unbekannt_0101	organische Säure	TMET140	1
Unbekannt_0102	Zuckerähnlich	TMET141	0
Unbekannt_0103	Zuckerähnlich	TMET142	63

<b>Metabolit</b>	<b>Substanzgruppe</b>	<b>Kodierung<sup>a</sup></b>	<b>NA<sup>b</sup></b>
Unbekannt_0104	Unbekannt	TMET143	83
Unbekannt_0105	Zuckerähnlich	TMET144	18
Unbekannt_0106	Unbekannt	TMET145	15
<b>Unbekannt_0109</b>	<b>Unbekannt</b>	<b>TMET146</b>	<b>203</b>
Unbekannt_0110	Zuckerähnlich	TMET147	0
<b>Unbekannt_0111</b>	<b>Disaccharid</b>	<b>TMET148</b>	<b>1332</b>
Unbekannt_0114	Disaccharid	TMET149	79
Unbekannt_0115	Disaccharid	TMET150	126
<b>Unbekannt_0117</b>	<b>Disaccharid/Polysaccharid</b>	<b>TMET151</b>	<b>192</b>
<b>Unbekannt_0118</b>	<b>Polysaccharid</b>	<b>TMET152</b>	<b>534</b>
<b>Unbekannt_0119</b>	<b>Disaccharid</b>	<b>TMET153</b>	<b>822</b>
Unbekannt_0120	Zuckerähnlich	TMET154	61
Unbekannt_0121	Disaccharid/Polysaccharid	TMET155	117
Unbekannt_0122	Unbekannt	TMET156	100
Valin	Aminosäure	TMET157	0
Xylitol	Zuckeralkohol	TMET158	0
Xylose	Zucker C5	TMET159	0

<sup>a</sup>Kodierung des Metaboliten in der Datenanalyse, <sup>b</sup>Anzahl der Fehlwerte, Metaboliten mit > 10 % Fehlwerten wurden entfernt (rot markiert), <sup>c</sup>Interne Standards, wurden zur weiteren Analyse entfernt (gelb markiert).

**Tab. A4.** Ergebnisse der genomischen und metabolischen (erste Probennahme) Vorhersage mit dem RR-BLUP-Modell (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).

Merkmal <sup>a</sup>	h <sup>2b</sup>	SNPs			Metaboliten			SNPs + Metaboliten		
		r <sub>ab</sub> <sup>c</sup>	r <sub>ac</sub> <sup>d</sup>	SD <sup>e</sup>	r <sub>ab</sub> <sup>c</sup>	r <sub>ac</sub> <sup>d</sup>	SD <sup>e</sup>	r <sub>ab</sub> <sup>c</sup>	r <sub>ac</sub> <sup>d</sup>	SD <sup>e</sup>
SHO	0,91	0,85	0,89	0,02	0,57	0,59	0,05	0,86	0,90	0,02
HEA	0,93	0,84	0,87	0,02	0,59	0,61	0,05	0,85	0,88	0,02
MAT	0,83	0,82	0,90	0,02	0,56	0,61	0,06	0,83	0,91	0,02
HEI	0,91	0,90	0,94	0,01	0,37	0,38	0,06	0,90	0,95	0,01
EAR	0,41	0,67	1,05	0,05	0,39	0,61	0,08	0,68	1,06	0,06
GNE	0,84	0,77	0,84	0,04	0,27	0,29	0,07	0,77	0,84	0,04
TGW	0,83	0,81	0,89	0,02	0,26	0,28	0,05	0,81	0,89	0,02
YLD	0,58	0,73	0,96	0,04	0,30	0,39	0,08	0,74	0,97	0,03

<sup>a</sup>Merkmale, siehe Tab. 1, <sup>b</sup>Heritabilität, <sup>c</sup>Vorhersagefähigkeit, gemittelt über 100 Kreuzvalidierungsläufe, <sup>d</sup>Vorhersagegenauigkeit, gemittelt über 100 Kreuzvalidierungsläufe, <sup>e</sup>Standardabweichung der Vorhersagegenauigkeit.

**Tab. A5.** Deskriptive Statistik der Metaboliten der ersten Probennahme (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).

Metabolit <sup>a</sup>	N <sup>b</sup>	Mittelwert <sup>c</sup>	Min <sup>d</sup>	Max <sup>e</sup>	SD <sup>f</sup>	CV <sup>g</sup>	V <sub>A</sub> <sup>h</sup>	V <sub>D</sub> <sup>i</sup>	V <sub>I</sub> <sup>j</sup>	V <sub>R</sub> <sup>k</sup>	h <sup>2</sup> <sub>SNP</sub> <sup>l</sup>	V <sub>G</sub> <sup>m</sup>	V <sub>E</sub> <sup>n</sup>	rep <sup>o</sup>
TMET1	1307	-7,92	-13,02	0,25	0,9	-11,36	0,05	0,04	0,03	0,60	0,17	0,00	0,01	0,19
TMET2	1307	-6,96	-15,63	1,39	1,15	-16,52	0,07	0,00	0,00	1,21	0,05	0,00	0,00	0,40
TMET3	1307	-8,98	-16,82	0,31	1,17	-13,03	0,04	0,00	0,00	1,29	0,03	0,00	0,00	0,00
TMET4	1307	-8,85	-12,5	0,18	1,06	-11,98	0,01	0,06	0,00	1,11	0,06	0,00	0,00	0,23
TMET5	1307	-3,6	-7,08	5,49	0,71	-19,72	0,02	0,00	0,00	0,46	0,05	0,00	0,01	0,00
TMET6	1307	-5,13	-8,43	3,08	0,81	-15,79	0,02	0,16	0,00	0,60	0,23	0,00	0,00	0,00
TMET7	1307	-9,08	-14,75	0,17	1,29	-14,21	0,02	0,00	0,00	1,64	0,01	0,00	0,00	0,44
TMET8	1307	-3,38	-3,91	0,77	0,28	-8,28	0,00	0,00	0,00	0,07	0,02	0,00	0,03	0,00
TMET9	1307	-8,9	-15,08	0,72	1,48	-16,63	0,00	-0,01	0,00	2,18	0,00	0,00	0,01	0,29
TMET10	1307	-6,74	-10,89	1,98	0,79	-11,72	0,02	0,00	0,00	0,58	0,03	0,00	0,00	0,19
TMET12	1307	-4,33	-7,57	2,91	0,82	-18,94	0,05	0,00	0,01	0,55	0,10	0,00	0,06	0,15
TMET13	1307	-6,77	-13,81	-0,05	2,7	-39,88	0,10	0,00	0,00	7,10	0,01	0,06	0,12	0,62
TMET14	1307	-3,23	-3,8	1,54	0,3	-9,29	0,00	0,00	0,00	0,09	0,03	0,02	0,75	0,08
TMET15	1307	-8,85	-13,78	1,35	1,67	-18,87	0,01	0,22	0,04	2,58	0,09	0,00	1,35	0,00
TMET18	1307	-7,41	-13,51	-0,57	1,17	-15,79	0,09	0,00	0,02	1,17	0,08	0,00	0,67	0,00
TMET20	1307	-11,52	-16,1	-4,14	1,78	-15,45	0,04	0,00	0,00	3,11	0,01	0,00	2,62	0,00
TMET23	1307	-9,56	-14,51	-2,53	1,02	-10,67	0,01	0,00	0,00	1,02	0,01	0,00	0,00	0,00
TMET24	1307	-3,27	-6,45	4,73	0,8	-24,46	0,02	0,00	0,02	0,53	0,07	0,04	0,06	0,72
TMET25	1307	-3,5	-11,51	4,71	0,86	-24,57	0,01	0,01	0,06	0,49	0,14	0,01	0,01	0,73
TMET26	1307	-7,87	-12,67	1,67	1,11	-14,10	0,04	0,08	0,01	1,12	0,10	0,01	0,02	0,57
TMET27	1307	-6,75	-15,33	2,41	1,31	-19,41	0,00	0,00	0,00	1,71	0,00	0,00	0,00	0,42
TMET30	1307	-9,29	-15,29	0,49	1,81	-19,48	0,17	0,00	0,00	2,94	0,06	0,00	0,01	0,54
TMET32	1307	-5,81	-10,33	2,31	0,75	-12,91	0,02	0,11	0,00	0,50	0,21	0,00	0,01	0,56
TMET33	1307	-3,21	-3,85	2,59	0,26	-8,10	0,00	0,00	0,00	0,05	0,09	0,09	0,17	0,65
TMET34	1307	-3,42	-3,91	0,16	0,23	-6,73	0,00	0,00	0,00	0,04	0,13	0,01	0,01	0,75
TMET35	1307	-0,98	-4,23	7,06	0,6	-61,22	0,00	0,00	0,00	0,34	0,02	0,01	0,06	0,26
TMET36	1307	-3,4	-13,14	2,91	0,94	-27,65	0,05	0,00	0,02	0,72	0,09	0,00	0,00	0,57
TMET38	1307	-4,45	-13,09	3,86	0,97	-21,80	0,02	0,00	0,01	0,88	0,03	0,01	0,27	0,12
TMET39	1307	-3,02	-3,89	0,42	0,27	-8,94	0,00	0,00	0,00	0,07	0,03	0,00	0,07	0,00
TMET41	1307	-9,78	-15,06	-2,1	1,14	-11,66	0,01	0,00	0,00	1,28	0,01	0,00	0,00	0,05
TMET43	1307	-1,68	-7,45	7,51	0,78	-46,43	0,01	0,00	0,00	0,59	0,02	0,02	0,12	0,32
TMET44	1307	-3,26	-3,78	1,6	0,31	-9,51	0,00	0,01	0,00	0,08	0,21	0,28	4,44	0,18
TMET45	1307	-8,55	-14,99	-1,37	1,31	-15,32	0,05	0,36	0,00	1,58	0,20	0,10	1,19	0,22
TMET46	1307	-6,87	-11,17	2,39	1,24	-18,05	0,00	0,10	0,00	1,54	0,06	0,00	0,00	0,44
TMET48	1307	-9,07	-14,07	-0,95	1,19	-13,12	0,03	0,06	0,01	1,30	0,08	0,00	0,01	0,00
TMET50	1307	-1,65	-12,14	7,52	0,87	-52,73	0,00	0,00	0,02	0,68	0,03	0,00	0,04	0,24
TMET51	1307	-5,7	-11,96	2,96	0,82	-14,39	0,00	0,00	0,02	0,68	0,03	0,00	0,01	0,42
TMET52	1307	-7,25	-11,97	1,35	1,51	-20,83	0,00	0,00	0,02	2,19	0,01	0,01	0,02	0,64
TMET53	1307	-3,59	-3,91	-2,33	0,12	-3,34	0,00	0,00	0,00	0,01	0,10	0,00	0,00	0,40
TMET54	1307	-11,76	-16,56	-1,46	1,84	-15,65	0,00	0,00	0,07	3,11	0,02	0,00	0,00	0,00
TMET55	1307	-3,97	-12,14	4,7	0,85	-21,41	0,00	0,05	0,01	0,67	0,09	0,00	0,00	0,00
TMET57	1307	-4,75	-12,5	4,07	0,73	-15,37	0,01	0,00	0,00	0,52	0,02	0,00	0,02	0,00
TMET58	1307	-9,74	-16,71	0,12	2,93	-30,08	0,05	0,00	0,12	8,06	0,02	0,00	7,90	0,00
TMET62	1307	-1,65	-3,75	15,26	0,64	-38,79	0,00	0,00	0,05	0,23	0,19	0,00	0,54	0,00
TMET63	1307	-7,66	-15,5	0,44	1,07	-13,97	0,02	0,00	0,00	1,12	0,02	0,00	0,38	0,00
TMET64	1307	-7,67	-16,15	2,67	2,08	-27,12	0,34	0,65	0,00	3,58	0,22	0,00	2,77	0,00

Metabolit <sup>a</sup>	N <sup>b</sup>	Mittelwert <sup>c</sup>	Min <sup>d</sup>	Max <sup>e</sup>	SD <sup>f</sup>	CV <sup>g</sup>	V <sub>A</sub> <sup>h</sup>	V <sub>D</sub> <sup>i</sup>	V <sub>I</sub> <sup>j</sup>	V <sub>R</sub> <sup>k</sup>	h <sup>2</sup> <sub>SNP</sub> <sup>l</sup>	V <sub>G</sub> <sup>m</sup>	V <sub>E</sub> <sup>n</sup>	rep <sup>o</sup>
TMET65	1307	-6,73	-11,78	2,16	0,96	-14,26	0,02	0,00	0,00	0,89	0,02	0,00	14,23	0,00
TMET68	1307	-4,31	-13,48	5,06	1,31	-30,39	0,04	0,17	0,00	1,62	0,11	0,02	0,12	0,38
TMET69	1307	-7,26	-14,68	0,93	1,56	-21,49	0,07	0,00	0,07	2,07	0,06	0,00	0,03	0,28
TMET70	1307	-11,33	-15,1	-4,62	1,34	-11,83	0,00	0,00	0,01	1,76	0,01	0,00	390,96	0,00
TMET72	1307	-9,33	-13,68	0,74	1,67	-17,90	0,09	0,00	0,01	2,57	0,04	0,00	3,00	0,00
TMET74	1307	-2,93	-6,51	3,91	1,19	-40,61	0,07	0,22	0,00	1,26	0,19	0,01	0,23	0,18
TMET75	1307	-6,82	-11,5	1,65	1,25	-18,33	0,05	0,00	0,01	1,46	0,04	0,00	0,00	0,59
TMET76	1307	-8,11	-13,14	-0,38	1,11	-13,69	0,06	0,00	0,04	0,97	0,09	0,00	0,00	0,37
TMET77	1307	-6,26	-14,26	2,16	0,88	-14,06	0,04	0,00	0,00	0,69	0,06	0,00	0,00	0,37
TMET78	1307	-9,09	-14,45	-1,03	2,19	-24,09	0,37	0,46	0,00	3,98	0,17	0,00	3,80	0,00
TMET79	1307	-4,82	-8,03	2,82	0,96	-19,92	0,05	0,05	0,00	0,84	0,10	0,02	0,55	0,13
TMET80	1307	-6,65	-12,41	2,35	1,33	-20,00	0,02	0,00	0,00	1,75	0,01	0,00	22,15	0,00
TMET81	1307	-5,3	-8,74	3,13	0,99	-18,68	0,00	0,00	0,00	0,98	0,00	0,02	0,41	0,17
TMET82	1307	-0,27	-7,15	8,66	1,05	-388,89	0,00	0,00	0,00	1,11	0,00	0,05	0,75	0,18
TMET83	1307	-5,72	-13,58	3,06	0,92	-16,08	0,08	0,04	0,00	0,69	0,15	0,17	0,32	0,65
TMET84	1307	-6,26	-12,88	2,52	0,83	-13,26	0,02	0,11	0,00	0,64	0,16	0,00	0,01	0,27
TMET85	1307	-9,06	-14,25	-3,01	1,31	-14,46	0,10	0,15	0,00	1,47	0,15	0,00	1,46	0,00
TMET86	1307	-4,77	-9,54	3,81	1,21	-25,37	0,02	0,00	0,02	1,36	0,02	0,00	1,03	0,00
TMET87	1307	-2,23	-3,83	10,38	0,5	-22,42	0,01	0,00	0,06	0,07	0,47	0,00	4,61	0,00
TMET88	1307	-7,54	-12,23	1,5	0,59	-7,82	0,02	0,00	0,00	0,32	0,05	1,27	3,96	0,53
TMET90	1307	-15,67	-38,03	2,23	3,89	-24,82	0,94	0,00	0,00	13,28	0,07	0,00	0,01	0,30
TMET91	1307	-5,98	-9,32	2,8	0,73	-12,21	0,01	0,07	0,00	0,49	0,15	0,15	0,26	0,66
TMET92	1307	-6,93	-12,03	1,96	1,06	-15,30	0,07	0,00	0,00	0,98	0,07	0,00	0,02	0,39
TMET93	1307	-6,91	-11,52	0,74	1,02	-14,76	0,03	0,08	0,00	0,97	0,11	0,00	0,00	0,20
TMET94	1307	-8,71	-13,7	0,12	0,81	-9,30	0,02	0,00	0,00	0,62	0,03	0,00	0,00	0,44
TMET95	1307	-5,11	-8,4	3,93	0,64	-12,52	0,01	0,00	0,00	0,38	0,03	0,00	0,00	0,13
TMET96	1307	-3,45	-3,89	-1,6	0,12	-3,48	0,00	0,00	0,00	0,01	0,07	0,00	0,00	0,39
TMET98	1307	-2,63	-5,47	5,31	0,82	-31,18	0,04	0,00	0,04	0,46	0,14	0,01	0,01	0,67
TMET99	1307	-15,47	-31	1,63	1,94	-12,54	0,40	0,00	0,05	2,94	0,13	0,00	0,01	0,00
TMET100	1307	-5,44	-10,04	1,48	0,7	-12,87	0,03	0,01	0,02	0,35	0,15	0,00	0,32	0,03
TMET101	1307	-5,11	-9,07	2,26	0,78	-15,26	0,06	0,00	0,01	0,48	0,12	0,00	0,00	0,17
TMET102	1307	-2,26	-5,67	5,53	0,82	-36,28	0,06	0,03	0,02	0,48	0,20	0,00	0,01	0,61
TMET103	1307	-8,49	-12,87	-0,77	0,89	-10,48	0,05	0,07	0,00	0,71	0,14	0,00	0,00	0,00
TMET104	1307	-7	-11,86	1,17	0,85	-12,14	0,04	0,05	0,00	0,64	0,13	0,00	0,00	0,00
TMET105	1307	-5,94	-13,25	2,89	0,95	-15,99	0,03	0,00	0,00	0,85	0,04	0,00	0,00	0,14
TMET106	1307	-3,55	-3,89	-2,16	0,12	-3,38	0,00	0,00	0,00	0,01	0,09	0,00	0,00	0,00
TMET107	1307	-3,23	-3,92	1,24	0,27	-8,36	0,00	0,00	0,00	0,07	0,05	0,00	0,00	0,00
TMET108	1307	-7,87	-14,51	2,34	1,74	-22,11	0,50	0,94	0,01	2,03	0,42	0,02	0,01	0,87
TMET109	1307	-5,58	-12,89	4,37	1,42	-25,45	0,46	0,12	0,01	1,22	0,33	0,06	0,03	0,86
TMET110	1307	-5,21	-12,87	5,32	2,12	-40,69	1,79	0,00	0,00	1,78	0,50	0,12	0,06	0,87
TMET111	1307	-4,48	-10,85	4,99	1,1	-24,55	0,09	0,00	0,01	1,00	0,10	0,41	0,38	0,79
TMET112	1307	-3,19	-3,88	-0,95	0,26	-8,15	0,00	0,00	0,00	0,07	0,01	0,00	0,02	0,00
TMET113	1307	-3,47	-3,92	0,44	0,19	-5,48	0,00	0,00	0,00	0,04	0,01	0,00	0,00	0,04
TMET114	1307	-8,33	-12,66	0,89	0,9	-10,80	0,02	0,00	0,00	0,75	0,03	0,00	0,01	0,25
TMET115	1307	-8,22	-12,94	1,97	1,67	-20,32	0,50	0,00	0,00	1,96	0,20	0,63	0,61	0,78
TMET116	1307	-4,54	-10,92	5,98	1,81	-39,87	1,04	0,00	0,02	1,61	0,40	0,15	0,09	0,86
TMET117	1307	-5,94	-14,54	2,48	0,94	-15,82	0,09	0,00	0,00	0,72	0,11	0,00	0,00	0,15
TMET118	1307	-6,48	-12,29	0,67	1,61	-24,85	0,07	0,05	0,05	2,28	0,07	0,00	1,89	0,00



Metabolit <sup>a</sup>	N <sup>b</sup>	Mittelwert <sup>c</sup>	Min <sup>d</sup>	Max <sup>e</sup>	SD <sup>f</sup>	CV <sup>g</sup>	V <sub>A</sub> <sup>h</sup>	V <sub>D</sub> <sup>i</sup>	V <sub>I</sub> <sup>j</sup>	V <sub>R</sub> <sup>k</sup>	h <sup>2</sup> <sub>SNP</sub> <sup>l</sup>	V <sub>G</sub> <sup>m</sup>	V <sub>E</sub> <sup>n</sup>	rep <sup>o</sup>
TMET119	1307	-3,03	-8,83	2,97	1,54	-50,83	0,22	0,00	0,00	1,97	0,10	0,00	0,42	0,00
TMET120	1307	-7,14	-11,58	0,11	1,74	-24,37	0,17	0,00	0,00	2,72	0,06	0,06	1,30	0,14
TMET121	1307	-5,94	-12,6	1,92	1,03	-17,34	0,13	0,05	0,02	0,74	0,21	0,00	0,01	0,00
TMET122	1307	-1,26	-3,43	5,17	0,78	-61,90	0,06	0,00	0,00	0,49	0,11	0,00	0,15	0,00
TMET123	1307	-5,22	-10,79	3,76	1,25	-23,95	0,00	0,21	0,00	1,54	0,12	0,00	0,08	0,13
TMET124	1307	-4,91	-8	3,92	0,91	-18,53	0,02	0,01	0,01	0,78	0,05	0,00	0,06	0,00
TMET126	1307	-7,49	-11,07	0,75	1,08	-14,42	0,02	0,05	0,02	1,04	0,09	0,00	0,01	0,64
TMET127	1307	-4,39	-13,57	4,02	1,31	-29,84	0,08	0,00	0,09	1,25	0,12	0,00	0,41	0,00
TMET128	1307	-2,92	-3,82	1,32	0,38	-13,01	0,02	0,00	0,00	0,12	0,13	0,01	0,05	0,28
TMET129	1307	-2,49	-3,87	7,92	0,49	-19,68	0,01	0,00	0,01	0,19	0,10	0,00	0,01	0,52
TMET130	1307	-1,6	-3,85	4,09	0,84	-52,50	0,09	0,05	0,05	0,52	0,21	0,00	0,34	0,00
TMET132	1307	-4,86	-13	5,29	1,82	-37,45	0,04	0,71	0,00	3,13	0,19	0,00	0,00	0,40
TMET133	1307	-3,43	-3,86	-1,66	0,16	-4,66	0,00	0,00	0,00	0,02	0,06	0,00	0,00	0,31
TMET135	1307	-3	-7,25	2,84	0,77	-25,67	0,02	0,15	0,00	0,53	0,25	0,01	0,07	0,35
TMET136	1307	-8,51	-11,12	0,6	0,61	-7,17	0,01	0,03	0,00	0,36	0,10	0,00	0,00	0,00
TMET137	1307	-8,48	-11,39	-0,62	0,78	-9,20	0,02	0,04	0,00	0,57	0,09	2,22	28,22	0,21
TMET139	1307	-9,26	-12,39	-0,15	1,24	-13,39	0,03	0,00	0,00	1,47	0,02	0,00	0,00	0,53
TMET140	1307	-8,41	-13,11	0,34	1,11	-13,20	0,08	0,30	0,00	1,04	0,27	0,00	0,00	0,68
TMET141	1307	-7,69	-12,79	-0,11	1,13	-14,69	0,05	0,00	0,00	1,19	0,04	0,00	0,00	0,45
TMET142	1307	-3,43	-3,85	-1,33	0,17	-4,96	0,00	0,01	0,00	0,02	0,27	0,01	0,31	0,09
TMET143	1307	-8,98	-14,45	0,25	1,72	-19,15	0,00	0,00	0,00	2,97	0,00	0,33	1,33	0,46
TMET144	1307	-9,66	-14,95	-1,02	1,12	-11,59	0,03	0,59	0,04	0,96	0,41	0,00	0,00	0,00
TMET145	1307	-3,57	-3,9	-2,92	0,16	-4,48	0,00	0,00	0,00	0,02	0,09	0,00	1,00	0,00
TMET146	1307	-9,85	-14,93	-0,66	1,27	-12,89	0,05	0,32	0,00	1,48	0,20	0,00	0,00	0,14
TMET147	1307	-8,21	-13,51	1,29	1,84	-22,41	0,69	0,00	0,00	2,30	0,23	0,56	0,99	0,66
TMET150	1307	-6,91	-9,67	2,17	0,8	-11,58	0,04	0,01	0,00	0,57	0,08	46,27	222,78	0,42
TMET151	1307	-7,88	-12,71	2,53	1,43	-18,15	0,02	0,00	0,10	1,65	0,06	0,18	0,93	0,41
TMET152	1307	-3,45	-3,84	-1,47	0,17	-4,93	0,00	0,00	0,00	0,03	0,00	0,00	0,00	0,00
TMET153	1307	-7,32	-10,65	1,34	1,24	-16,94	0,01	0,00	0,07	1,25	0,06	0,39	0,35	0,79
TMET154	1307	-7,1	-12,14	1,14	1,22	-17,18	0,02	0,19	0,00	1,42	0,13	0,00	0,02	0,00
TMET155	1307	-5,62	-12,31	1,77	0,99	-17,62	0,06	0,00	0,07	0,63	0,17	0,00	0,00	0,30
TMET156	1307	-3,18	-3,91	0,11	0,2	-6,29	0,00	0,00	0,00	0,04	0,04	0,00	0,00	0,00
TMET157	1307	-8,51	-12,18	0,63	0,92	-10,81	0,01	0,00	0,00	0,82	0,01	0,01	0,23	0,16
TMET158	1307	-6,61	-13,55	1,86	0,71	-10,74	0,02	0,00	0,00	0,47	0,04	0,00	0,00	0,47

<sup>a</sup>Metaboliten, siehe Tab. A2, <sup>b</sup>Anzahl der Beobachtungen, <sup>c</sup>Arithmetisches Mittel, <sup>d</sup>Minimumwert, <sup>e</sup>Maximumwert, <sup>f</sup>Standardabweichung, <sup>g</sup>Variationskoeffizient (%), <sup>h</sup>Additive Varianzkomponente, <sup>i</sup>Dominante Varianzkomponente, <sup>j</sup>Epistatische Varianzkomponente, <sup>k</sup>Fehler Varianzkomponente, <sup>l</sup>SNP basierte Heritabilität, <sup>m</sup>Genotypische Varianzkomponente, geschätzt mit der Teilmenge von 17 Kontrolllinien, <sup>n</sup>Fehler Varianzkomponente, geschätzt mit der Teilmenge von 17 Kontrolllinien, <sup>o</sup>Wiederholbarkeit, geschätzt mit der Teilmenge von 17 Kontrolllinien.

**Tab. A6.** Deskriptive Statistik der Metaboliten der zweiten Probennahme (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).

Metabolit <sup>a</sup>	N <sup>b</sup>	Mean <sup>c</sup>	min <sup>d</sup>	max <sup>e</sup>	SD <sup>f</sup>	CV <sup>g</sup>	V <sub>A</sub> <sup>h</sup>	V <sub>D</sub> <sup>i</sup>	V <sub>I</sub> <sup>j</sup>	V <sub>R</sub> <sup>k</sup>	h <sup>2</sup> <sub>SNP</sub> <sup>l</sup>	V <sub>G</sub> <sup>m</sup>	V <sub>E</sub> <sup>n</sup>	rep <sup>o</sup>
TMET1	1229	-9,36	-13,16	-1,4	0,72	-7,69	0,02	0,00	0,01	0,43	0,06	0,00	0,23	0,00
TMET2	1229	-8,94	-15,8	-0,88	1,22	-13,65	0,01	0,00	0,00	1,47	0,01	0,00	0,01	0,62
TMET3	1229	-9,44	-12,92	-1,24	0,81	-8,58	0,09	0,00	0,02	0,43	0,20	0,10	0,29	0,52
TMET4	1229	-26,67	-59,25	-1,09	3,98	-14,92	0,00	0,00	2,87	102,50	0,03	0,00	0,00	0,00
TMET5	1229	-3,72	-7,16	4,27	0,66	-17,74	0,02	0,00	0,00	0,39	0,04	0,00	0,00	0,22
TMET6	1229	-5,41	-9,09	2,54	0,66	-12,20	0,03	0,00	0,00	0,38	0,07	0,00	0,00	0,13
TMET7	1229	-9,73	-14,6	-0,94	1,13	-11,61	0,03	0,04	0,02	1,16	0,07	0,00	0,00	0,16
TMET8	1229	-5,06	-13,49	3,04	0,98	-19,37	0,03	0,00	0,00	0,90	0,03	0,00	0,41	0,00
TMET9	1229	-7,51	-13,13	-0,18	0,83	-11,05	0,00	0,08	0,01	0,65	0,12	0,00	0,01	0,00
TMET10	1229	-6,3	-11,05	1,09	0,51	-8,10	0,01	0,00	0,00	0,22	0,04	0,00	0,00	0,52
TMET11	1229	-38,24	-91,17	-3,13	5,42	-14,17	1,08	0,00	0,98	22,70	0,08	0,00	1646,45	0,00
TMET12	1229	-5,48	-11,31	2,14	1,07	-19,53	0,01	0,00	0,04	1,00	0,04	0,03	0,96	0,09
TMET13	1229	-8,55	-13,19	-0,69	0,88	-10,29	0,02	0,05	0,00	0,75	0,08	0,00	0,01	0,15
TMET14	1229	-6,34	-8,47	1,38	0,68	-10,73	0,03	0,00	0,01	0,37	0,10	5,16	176,38	0,08
TMET15	1229	-3,45	-3,82	-0,22	0,18	-5,22	0,00	0,00	0,00	0,03	0,03	0,12	0,16	0,70
TMET17	1229	-7,79	-12,75	-0,3	1,2	-15,40	0,00	0,59	0,04	1,22	0,34	0,00	0,02	0,26
TMET23	1229	-7,16	-11,79	-0,2	0,95	-13,27	0,01	0,00	0,01	0,85	0,02	0,00	0,01	0,54
TMET24	1229	-2,98	-9,82	4,96	0,95	-31,88	0,03	0,16	0,00	0,82	0,19	0,03	0,09	0,53
TMET25	1229	-3,27	-10,5	4,85	0,9	-27,52	0,04	0,03	0,01	0,69	0,10	0,03	0,08	0,53
TMET26	1229	-6,32	-11,87	-0,34	0,98	-15,51	0,03	0,00	0,01	0,90	0,04	0,07	0,78	0,22
TMET27	1229	-3,37	-3,91	0,2	0,17	-5,04	0,00	0,00	0,00	0,03	0,00	0,02	0,13	0,31
TMET30	1229	-9,66	-14,76	-0,02	1,26	-13,04	0,14	0,00	0,00	1,36	0,09	0,00	0,00	0,46
TMET32	1229	-4,26	-8,5	2,91	0,79	-18,54	0,02	0,00	0,01	0,57	0,05	0,00	0,03	0,34
TMET33	1229	-6,4	-12,3	1,56	0,89	-13,91	0,10	0,00	0,00	0,61	0,14	0,00	0,00	0,73
TMET35	1229	-1,73	-4,52	5,23	0,8	-46,24	0,04	0,05	0,00	0,57	0,12	0,07	0,15	0,59
TMET36	1229	-3,11	-5,89	4,93	0,96	-30,87	0,06	0,05	0,00	0,81	0,12	0,06	0,11	0,63
TMET38	1229	-4,93	-12,08	3,53	0,62	-12,58	0,01	0,00	0,02	0,28	0,10	0,00	0,00	0,51
TMET39	1229	-5,26	-12,2	3,44	0,84	-15,97	0,01	0,00	0,01	0,65	0,03	0,00	0,28	0,00
TMET41	1229	-6,62	-13,69	0,67	0,74	-11,18	0,01	0,08	0,01	0,47	0,17	0,00	0,23	0,05
TMET42	1229	-3,17	-3,85	1,05	0,31	-9,78	0,00	0,00	0,00	0,09	0,01	0,00	0,08	0,00
TMET43	1229	-2,83	-7,15	4,88	0,72	-25,44	0,02	0,00	0,01	0,44	0,06	0,00	0,02	0,48
TMET44	1229	-7,88	-11,42	-0,24	0,74	-9,39	0,01	0,00	0,00	0,55	0,01	0,00	0,00	0,33
TMET45	1229	-8,61	-13,51	-0,11	1,24	-14,40	0,06	0,00	0,00	1,43	0,04	0,00	0,02	0,00
TMET47	1229	-3,6	-3,88	-1,8	0,11	-3,06	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01	0,08	0,32	0,43
TMET48	1229	-8,59	-13,81	-2,37	1,31	-15,25	0,05	0,12	0,00	1,64	0,09	0,00	0,02	0,07
TMET50	1229	-2,69	-10,65	4,98	0,96	-35,69	0,00	0,62	0,00	0,87	0,42	0,09	0,21	0,57
TMET51	1229	-3,32	-3,81	1,54	0,21	-6,33	0,00	0,00	0,00	0,04	0,04	0,00	0,00	0,41
TMET52	1229	-6,14	-11,14	1,48	0,97	-15,80	0,03	0,00	0,00	0,88	0,03	0,04	0,44	0,21
TMET53	1229	-3,65	-3,9	-2,39	0,1	-2,74	0,00	0,00	0,00	0,01	0,02	0,00	0,01	0,00
TMET54	1229	-10,97	-14,81	-2,39	1,2	-10,94	0,00	0,00	0,00	1,40	0,00	0,09	0,92	0,23
TMET57	1229	-12,39	-40,71	1,74	2,17	-17,51	0,33	0,00	0,21	3,28	0,14	201,55	492,42	0,56
TMET58	1229	-3,23	-3,86	0,2	0,2	-6,19	0,00	0,00	0,00	0,04	0,01	0,00	0,00	0,02
TMET62	1229	-0,8	-8,49	5,56	0,75	-93,75	0,02	0,00	0,01	0,57	0,05	0,00	0,27	0,00
TMET63	1229	-8,1	-15,16	0,41	0,98	-12,10	0,01	0,00	0,04	0,76	0,06	0,00	0,00	0,49
TMET64	1229	-2,48	-3,87	8,02	0,41	-16,53	0,00	0,00	0,00	0,16	0,00	0,00	0,00	0,38
TMET65	1229	-4,36	-11,05	2,5	1,06	-24,31	0,08	0,00	0,01	0,87	0,10	0,01	0,16	0,19

Metabolit <sup>a</sup>	N <sup>b</sup>	Mean <sup>c</sup>	min <sup>d</sup>	max <sup>e</sup>	SD <sup>f</sup>	CV <sup>g</sup>	V <sub>A</sub> <sup>h</sup>	V <sub>D</sub> <sup>i</sup>	V <sub>I</sub> <sup>j</sup>	V <sub>R</sub> <sup>k</sup>	h <sup>2</sup> <sub>SNP</sub> <sup>l</sup>	V <sub>G</sub> <sup>m</sup>	V <sub>E</sub> <sup>n</sup>	rep <sup>o</sup>
TMET68	1229	-6,07	-13,72	2,6	1,21	-19,93	0,04	0,00	0,05	1,20	0,07	0,02	0,05	0,46
TMET69	1229	-7,49	-11,49	0,65	0,9	-12,02	0,02	0,00	0,01	0,72	0,04	0,00	0,00	0,00
TMET70	1229	-10,35	-14,64	-2,7	0,74	-7,15	0,00	0,02	0,01	0,52	0,05	0,00	0,00	0,26
TMET72	1229	-8,02	-13,07	1,58	1,51	-18,83	0,08	0,31	0,04	1,90	0,18	0,00	1,62	0,00
TMET73	1229	-2,99	-3,78	0,85	0,25	-8,36	0,00	0,00	0,00	0,06	0,02	0,00	0,00	0,00
TMET74	1229	-6,35	-11,29	1,7	0,95	-14,96	0,01	0,00	0,01	0,86	0,02	35,20	275,57	0,28
TMET75	1229	-7,01	-10,41	0,32	1,42	-20,26	0,05	0,00	0,00	1,92	0,03	0,41	1,38	0,48
TMET76	1229	-8,38	-11,05	-1,34	0,95	-11,34	0,01	0,00	0,00	0,86	0,02	0,00	0,00	0,44
TMET77	1229	-4,68	-12,09	2,88	0,7	-14,96	0,09	0,00	0,00	0,34	0,21	0,13	0,13	0,76
TMET79	1229	-17,51	-30,01	1,15	3,33	-19,02	0,45	0,38	0,59	7,98	0,15	20,87	227,61	0,22
TMET80	1229	-3,6	-9,03	2,72	1	-27,78	0,06	0,01	0,02	0,77	0,10	0,00	0,00	0,39
TMET82	1229	0,05	-4,54	3,22	0,67	1340,00	0,00	0,00	0,02	0,38	0,04	0,00	0,16	0,00
TMET83	1229	-3,81	-11,4	3,93	0,93	-24,41	0,28	0,00	0,01	0,29	0,50	0,06	0,02	0,89
TMET84	1229	-6,33	-13,16	1,1	0,9	-14,22	0,01	0,00	0,03	0,65	0,06	0,00	95,23	0,00
TMET85	1229	-8,48	-13,36	-2,89	1,29	-15,21	0,03	0,00	0,00	1,60	0,02	0,00	0,02	0,00
TMET86	1229	-7,18	-15,85	2,44	1,53	-21,31	0,10	0,00	0,01	2,14	0,05	0,00	69,21	0,00
TMET87	1229	-1,31	-3,81	9,61	0,62	-47,33	0,01	0,00	0,00	0,35	0,03	0,00	0,20	0,00
TMET88	1229	-8,39	-12,45	0,37	0,77	-9,18	0,03	0,04	0,01	0,49	0,13	0,00	0,00	0,00
TMET89	1229	-7,26	-9,9	0,5	0,7	-9,64	0,01	0,00	0,02	0,38	0,08	0,00	0,00	0,45
TMET90	1229	-17,15	-40,53	0,62	2,91	-16,97	0,49	0,00	0,81	4,52	0,22	16,96	54,65	0,49
TMET91	1229	-5,93	-10,22	1,69	0,94	-15,85	0,07	0,00	0,02	0,68	0,13	0,76	0,44	0,84
TMET92	1229	-3,87	-10,88	3,64	0,77	-19,90	0,01	0,00	0,00	0,58	0,02	0,00	0,00	0,23
TMET93	1229	-3,06	-3,79	0,22	0,42	-13,73	0,00	0,00	0,00	0,18	0,01	0,00	0,15	0,00
TMET94	1229	-6,98	-12,66	0,91	0,58	-8,31	0,01	0,00	0,00	0,31	0,04	0,00	0,00	0,30
TMET95	1229	-7,27	-20,4	2,11	1,59	-21,87	0,09	0,00	0,07	2,08	0,07	0,23	7,49	0,09
TMET96	1229	-11,36	-27,97	1,34	2,43	-21,39	0,54	0,66	0,08	4,67	0,22	0,01	0,02	0,47
TMET99	1229	-13,23	-28,88	1,83	2,05	-15,50	0,34	0,00	0,03	3,50	0,10	0,00	0,00	0,23
TMET100	1229	-6,74	-9,48	1,57	1,13	-16,77	0,03	0,00	0,00	1,24	0,02	0,01	0,01	0,65
TMET101	1229	-6,45	-9,86	-0,2	0,92	-14,26	0,00	0,00	0,00	0,86	0,01	0,00	0,00	0,29
TMET102	1229	-6,77	-21,79	2,53	2,73	-40,32	0,34	0,00	0,00	6,82	0,05	1,30	6,22	0,39
TMET103	1229	-8,49	-12,04	-0,89	0,73	-8,60	0,03	0,02	0,00	0,48	0,09	0,00	0,00	0,07
TMET104	1229	-6,94	-13,28	1,24	0,71	-10,23	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,00	0,00	0,02
TMET105	1229	-3,46	-8,62	4,02	0,5	-14,45	0,00	0,00	0,01	0,92	0,01	0,00	0,00	0,21
TMET106	1229	-8,7	-11,98	-1,54	0,72	-8,28	0,01	0,00	0,00	0,48	0,02	0,00	0,14	0,00
TMET107	1229	-5,85	-8,45	2,44	0,76	-12,99	0,03	0,00	0,00	0,52	0,06	0,00	0,00	0,52
TMET108	1229	-6,18	-11,74	2,18	1,12	-18,12	0,36	0,00	0,06	0,06	0,45	0,00	0,00	0,66
TMET109	1229	-3,69	-6,51	3,31	0,67	-18,16	0,02	0,00	0,01	0,37	0,07	0,00	0,07	0,00
TMET110	1229	-1,97	-3,53	10,61	0,72	-36,55	0,16	0,00	0,01	0,24	0,41	0,00	0,01	0,60
TMET111	1229	-3,49	-9,33	4,8	1,22	-34,96	0,47	0,04	0,05	0,60	0,48	0,00	0,00	0,62
TMET112	1229	-10,24	-14,27	-0,72	1,32	-12,89	0,01	0,24	0,00	1,68	0,13	0,00	0,00	0,45
TMET114	1229	-11,52	-24,86	1,51	2,57	-22,31	0,20	0,00	0,00	6,38	0,03	0,00	0,00	0,14
TMET115	1229	-6,38	-9,51	2,32	0,84	-13,17	0,18	0,01	0,01	0,43	0,31	0,00	0,02	0,22
TMET116	1229	-2,07	-3,63	10,52	0,7	-33,82	0,14	0,00	0,01	0,25	0,37	0,01	0,01	0,68
TMET117	1229	-3,96	-8,81	3,4	0,72	-18,18	0,02	0,00	0,01	0,45	0,07	0,00	0,00	0,39
TMET118	1229	-7,03	-11,56	-3,66	1,38	-19,63	0,03	0,00	0,03	1,69	0,03	0,00	0,03	0,12
TMET119	1229	-4,68	-9,21	3,43	0,61	-13,03	0,01	0,00	0,02	0,30	0,08	0,00	159,81	0,00
TMET120	1229	-7,51	-11,65	0,27	0,77	-10,25	0,02	0,00	0,00	0,54	0,04	0,00	0,01	0,00
TMET121	1229	-6,32	-11,55	2,47	0,92	-14,56	0,05	0,02	0,01	0,70	0,10	0,00	0,02	0,20

Metabolit <sup>a</sup>	N <sup>b</sup>	Mean <sup>c</sup>	min <sup>d</sup>	max <sup>e</sup>	SD <sup>f</sup>	CV <sup>g</sup>	V <sub>A</sub> <sup>h</sup>	V <sub>D</sub> <sup>i</sup>	V <sub>I</sub> <sup>j</sup>	V <sub>R</sub> <sup>k</sup>	h <sup>2</sup> <sub>SNP</sub> <sup>l</sup>	V <sub>G</sub> <sup>m</sup>	V <sub>E</sub> <sup>n</sup>	rep <sup>o</sup>
TMET122	1229	-4,63	-7,68	2,57	0,9	-19,44	0,00	0,00	0,00	0,82	0,00	0,00	0,45	0,00
TMET123	1229	-4,29	-9,28	3,47	0,71	-16,55	0,02	0,00	0,00	0,46	0,04	0,00	16,68	0,00
TMET124	1229	-4,35	-7,83	3,47	0,68	-15,63	0,02	0,00	0,00	0,43	0,04	0,00	20,27	0,00
TMET126	1229	-6,02	-8,31	2,31	0,95	-15,78	0,03	0,05	0,03	0,72	0,13	4,07	5,09	0,71
TMET128	1229	-7,63	-13,81	2,15	2,21	-28,96	0,28	0,00	0,25	3,29	0,14	0,00	0,05	0,00
TMET129	1229	-2,07	-3,82	8,75	0,65	-31,40	0,00	0,00	0,00	0,41	0,01	0,03	0,14	0,38
TMET132	1229	-25,12	-94,86	-0,04	7,01	-27,91	0,03	0,00	1,28	46,48	0,03	0,00	1479,30	0,00
TMET133	1229	-5,66	-10,39	1,9	0,63	-11,13	0,00	0,00	0,00	0,41	0,01	0,00	0,00	0,50
TMET135	1229	-4,16	-10,3	2,47	1,1	-26,44	0,03	0,03	0,02	1,09	0,07	0,00	0,10	0,00
TMET136	1229	-31,19	-59,85	-1,02	4,09	-13,11	0,08	0,75	0,31	15,12	0,07	0,00	0,11	0,00
TMET137	1229	-7,09	-10,44	-0,78	1,25	-17,63	0,04	0,16	0,01	1,41	0,13	0,00	30,86	0,00
TMET138	1229	-18,65	-44,04	0,43	3,4	-18,23	1,81	0,00	0,19	7,48	0,21	0,00	0,00	0,72
TMET139	1229	-3,36	-3,77	0,21	0,21	-6,25	0,00	0,00	0,00	0,04	0,03	0,00	0,01	0,38
TMET140	1229	-7,42	-13,05	0,48	0,79	-10,65	0,03	0,00	0,00	0,55	0,06	0,00	0,00	0,36
TMET141	1229	-21,58	-77,83	1,05	4,67	-21,64	1,23	0,00	0,11	19,06	0,07	0,14	0,14	0,75
TMET142	1229	-3,27	-3,79	-1,81	0,26	-7,95	0,00	0,00	0,00	0,07	0,00	0,00	0,04	0,24
TMET143	1229	-2,97	-3,89	2,32	0,36	-12,12	0,00	0,00	0,00	0,12	0,02	0,00	0,00	0,33
TMET144	1229	-9,44	-12,86	-1,41	0,79	-8,37	0,00	0,00	0,00	0,61	0,01	0,00	0,00	0,34
TMET145	1229	-9,88	-13,63	-2,42	0,71	-7,19	0,00	0,00	0,00	0,52	0,00	2,29	28,94	0,20
TMET147	1229	-6,98	-10,81	-0,18	0,81	-11,60	0,00	0,00	0,01	0,64	0,02	0,00	0,03	0,00
TMET149	1229	-6,12	-9,97	2,31	1,21	-19,77	0,01	0,00	0,00	1,47	0,00	0,00	17,66	0,00
TMET150	1229	-6,06	-8,24	1,61	0,74	-12,21	0,01	0,00	0,02	0,45	0,07	0,00	0,00	0,00
TMET154	1229	-5,88	-8,32	2,68	0,85	-14,46	0,01	0,02	0,00	0,69	0,04	0,00	0,02	0,45
TMET155	1229	-2,98	-3,68	4,37	0,35	-11,74	0,00	0,00	0,00	0,12	0,01	0,00	0,00	0,52
TMET156	1229	-3,15	-3,87	3,02	0,35	-11,11	0,00	0,00	0,00	0,12	0,01	0,07	0,85	0,20
TMET157	1229	-5,05	-13,17	2,48	0,76	-15,05	0,01	0,00	0,01	0,51	0,05	0,00	0,02	0,00
TMET158	1229	-15,19	-52,85	0,86	2,63	-17,31	0,16	0,00	0,18	5,94	0,05	0,00	0,00	0,31
TMET159	1229	-6,22	-10,84	1,47	0,53	-8,52	0,02	0,00	0,01	0,23	0,09	0,00	0,00	0,72

<sup>a</sup>Metaboliten, siehe Tab. A3, <sup>b</sup>Anzahl der Beobachtungen, <sup>c</sup>Arithmetisches Mittel, <sup>d</sup>Minimumwert, <sup>e</sup>Maximumwert, <sup>f</sup>Standardabweichung, <sup>g</sup>Variationskoeffizient (%), <sup>h</sup>Additive Varianzkomponente, <sup>i</sup>Dominante Varianzkomponente, <sup>j</sup>Epistatische Varianzkomponente, <sup>k</sup>Fehler Varianzkomponente, <sup>l</sup>SNP basierte Heritabilität, <sup>m</sup>Genotypische Varianzkomponente, geschätzt mit der Teilmenge von 17 Kontrolllinien, <sup>n</sup>Fehler Varianzkomponente, geschätzt mit der Teilmenge von 17 Kontrolllinien, <sup>o</sup>Wiederholbarkeit, geschätzt mit der Teilmenge von 17 Kontrolllinien.

**Tab. A7.** Pearson'sche Korrelationskoeffizienten zwischen Merkmalen und Metaboliten und geschätzte Metaboliteffekte im BayesB-Modell, erste Probennahme (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
EAR	TMET1	-0,035	0,204	-4,876
EAR	TMET2	0,211	0,000	3,872
EAR	TMET3	0,041	0,143	-1,454
EAR	TMET4	0,027	0,338	-3,415
EAR	TMET5	0,143	0,000	1,169
EAR	TMET6	0,119	0,000	-4,803
EAR	TMET7	0,031	0,266	-4,611
EAR	TMET8	-0,004	0,897	-0,934
EAR	TMET9	-0,074	0,008	-3,316
EAR	TMET10	0,066	0,017	3,998
EAR	TMET12	0,153	0,000	-3,780
EAR	TMET13	0,059	0,033	-2,130
EAR	TMET14	0,042	0,128	-0,600
EAR	TMET15	0,054	0,050	1,411
EAR	TMET18	0,170	0,000	2,519
EAR	TMET20	-0,017	0,536	0,816
EAR	TMET23	0,059	0,032	1,289
EAR	TMET24	0,052	0,060	-1,714
EAR	TMET25	0,073	0,008	1,975
EAR	TMET26	0,098	0,000	2,982
EAR	TMET27	-0,071	0,010	-3,217
EAR	TMET30	0,099	0,000	0,932
EAR	TMET32	0,058	0,037	-0,335
EAR	TMET33	0,017	0,545	-1,550
EAR	TMET34	0,057	0,039	-1,392
EAR	TMET35	0,035	0,202	-2,517
EAR	TMET36	0,061	0,027	0,831
EAR	TMET38	0,076	0,006	0,563
EAR	TMET39	-0,056	0,041	-1,228
EAR	TMET41	0,066	0,018	3,903
EAR	TMET43	0,056	0,044	-2,233
EAR	TMET44	-0,046	0,098	-2,474
EAR	TMET45	0,119	0,000	-2,939
EAR	TMET46	-0,065	0,020	-0,940
EAR	TMET48	0,097	0,000	-2,912
EAR	TMET50	-0,001	0,972	-0,619
EAR	TMET51	-0,003	0,904	-1,937
EAR	TMET52	0,038	0,172	1,836
EAR	TMET53	0,147	0,000	-0,377
EAR	TMET54	-0,070	0,011	-3,222
EAR	TMET55	-0,011	0,703	-2,503
EAR	TMET57	0,043	0,120	-0,449
EAR	TMET58	-0,007	0,813	2,166
EAR	TMET62	0,040	0,144	-1,526
EAR	TMET63	0,086	0,002	2,245
EAR	TMET64	0,102	0,000	3,238
EAR	TMET65	0,096	0,001	2,500
EAR	TMET68	-0,025	0,375	-2,671
EAR	TMET69	0,125	0,000	1,631
EAR	TMET70	0,029	0,295	-0,280
EAR	TMET72	-0,087	0,002	0,115
EAR	TMET74	0,142	0,000	2,619
EAR	TMET75	0,140	0,000	2,439
EAR	TMET76	0,202	0,000	7,617
EAR	TMET77	0,111	0,000	4,089
EAR	TMET78	0,246	0,000	3,954
EAR	TMET79	0,126	0,000	-0,423
EAR	TMET80	0,069	0,013	0,073
EAR	TMET81	0,021	0,456	-0,704
EAR	TMET82	0,036	0,200	-0,824
EAR	TMET83	0,095	0,001	-1,355
EAR	TMET84	0,040	0,153	-4,092
EAR	TMET85	0,181	0,000	1,518
EAR	TMET86	0,076	0,006	1,247
EAR	TMET87	0,019	0,491	-4,364
EAR	TMET88	0,056	0,043	0,367
EAR	TMET90	-0,154	0,000	-6,760
EAR	TMET91	0,084	0,002	1,481
EAR	TMET92	0,130	0,000	2,349
EAR	TMET93	0,187	0,000	4,510

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
EAR	TMET94	0,089	0,001	2,902
EAR	TMET95	0,015	0,583	-1,572
EAR	TMET96	0,025	0,375	-0,612
EAR	TMET98	0,094	0,001	-1,634
EAR	TMET99	0,134	0,000	-0,590
EAR	TMET100	0,122	0,000	-0,263
EAR	TMET101	0,221	0,000	0,053
EAR	TMET102	0,093	0,001	-0,735
EAR	TMET103	0,198	0,000	-0,266
EAR	TMET104	0,180	0,000	1,309
EAR	TMET105	0,079	0,004	-1,483
EAR	TMET106	0,175	0,000	-0,446
EAR	TMET107	0,056	0,043	-0,772
EAR	TMET108	0,092	0,001	3,571
EAR	TMET109	0,073	0,008	1,796
EAR	TMET110	0,028	0,318	-4,119
EAR	TMET111	0,064	0,020	1,979
EAR	TMET112	0,041	0,137	-0,876
EAR	TMET113	0,084	0,002	0,173
EAR	TMET114	0,024	0,390	3,108
EAR	TMET115	0,051	0,065	0,188
EAR	TMET116	0,056	0,044	-0,376
EAR	TMET117	0,170	0,000	-0,068
EAR	TMET118	0,114	0,000	-0,224
EAR	TMET119	0,280	0,000	3,179
EAR	TMET120	0,245	0,000	2,288
EAR	TMET121	0,250	0,000	1,191
EAR	TMET122	0,303	0,000	4,090
EAR	TMET123	0,049	0,078	1,831
EAR	TMET124	0,045	0,101	2,871
EAR	TMET126	0,032	0,254	1,356
EAR	TMET127	0,174	0,000	4,587
EAR	TMET128	0,256	0,000	1,233
EAR	TMET129	0,122	0,000	0,503
EAR	TMET130	0,272	0,000	6,158
EAR	TMET132	0,122	0,000	4,715
EAR	TMET133	0,131	0,000	0,765
EAR	TMET135	0,079	0,004	1,782
EAR	TMET136	0,100	0,000	0,574
EAR	TMET137	0,073	0,008	1,689
EAR	TMET139	0,068	0,013	-0,731
EAR	TMET140	0,115	0,000	-2,091
EAR	TMET141	0,019	0,496	-4,065
EAR	TMET142	0,215	0,000	0,822
EAR	TMET143	0,062	0,026	1,036
EAR	TMET144	0,128	0,000	-0,200
EAR	TMET145	0,141	0,000	0,277
EAR	TMET146	0,113	0,000	0,368
EAR	TMET147	0,087	0,002	0,432
EAR	TMET150	0,087	0,002	-1,920
EAR	TMET151	0,069	0,013	-0,258
EAR	TMET152	0,078	0,005	0,594
EAR	TMET153	-0,093	0,001	-2,554
EAR	TMET154	0,045	0,107	-0,880
EAR	TMET155	0,167	0,000	1,919
EAR	TMET156	0,089	0,001	-0,651
EAR	TMET157	0,014	0,603	0,268
EAR	TMET158	0,043	0,117	-2,287
GNE	TMET1	0,053	0,056	0,252
GNE	TMET2	-0,064	0,020	-0,186
GNE	TMET3	-0,005	0,847	-0,081
GNE	TMET4	-0,035	0,207	0,137
GNE	TMET5	-0,059	0,032	0,158
GNE	TMET6	-0,045	0,103	0,077
GNE	TMET7	-0,046	0,097	-0,019
GNE	TMET8	-0,093	0,001	-0,156
GNE	TMET9	-0,048	0,082	-0,074
GNE	TMET10	-0,019	0,483	-0,248
GNE	TMET12	-0,047	0,092	-0,060
GNE	TMET13	-0,081	0,003	0,064
GNE	TMET14	0,056	0,043	0,358
GNE	TMET15	-0,029	0,303	0,058
GNE	TMET18	0,015	0,592	0,063
GNE	TMET20	-0,023	0,405	-0,048
GNE	TMET23	-0,080	0,004	0,139

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
GNE	TMET24	-0,063	0,024	-0,088
GNE	TMET25	-0,054	0,049	-0,015
GNE	TMET26	-0,097	0,000	-0,286
GNE	TMET27	-0,015	0,579	0,029
GNE	TMET30	0,011	0,703	0,141
GNE	TMET32	-0,031	0,257	-0,067
GNE	TMET33	-0,015	0,590	0,459
GNE	TMET34	0,028	0,314	0,062
GNE	TMET35	-0,003	0,904	0,039
GNE	TMET36	0,053	0,058	0,060
GNE	TMET38	-0,040	0,149	0,261
GNE	TMET39	-0,059	0,033	0,343
GNE	TMET41	-0,046	0,093	-0,109
GNE	TMET43	-0,006	0,837	0,121
GNE	TMET44	0,016	0,561	0,216
GNE	TMET45	-0,077	0,006	0,184
GNE	TMET46	-0,001	0,962	0,066
GNE	TMET48	-0,059	0,033	0,102
GNE	TMET50	-0,050	0,071	-0,013
GNE	TMET51	0,018	0,513	0,025
GNE	TMET52	-0,005	0,864	0,135
GNE	TMET53	-0,070	0,011	-0,013
GNE	TMET54	0,010	0,721	0,075
GNE	TMET55	-0,094	0,001	-0,073
GNE	TMET57	-0,061	0,027	-0,102
GNE	TMET58	-0,024	0,389	0,011
GNE	TMET62	-0,077	0,005	-0,194
GNE	TMET63	-0,050	0,073	-0,020
GNE	TMET64	-0,162	0,000	-0,201
GNE	TMET65	-0,027	0,330	-0,020
GNE	TMET68	0,105	0,000	0,354
GNE	TMET69	0,038	0,173	0,058
GNE	TMET70	-0,097	0,000	-0,218
GNE	TMET72	-0,060	0,031	-0,072
GNE	TMET74	0,039	0,161	-0,407
GNE	TMET75	-0,035	0,206	0,010
GNE	TMET76	-0,071	0,010	-0,258
GNE	TMET77	-0,095	0,001	0,064
GNE	TMET78	-0,126	0,000	-0,017
GNE	TMET79	0,029	0,296	0,312
GNE	TMET80	-0,052	0,058	0,051
GNE	TMET81	-0,001	0,982	0,043
GNE	TMET82	-0,040	0,152	-0,106
GNE	TMET83	-0,097	0,000	0,154
GNE	TMET84	-0,075	0,007	-0,248
GNE	TMET85	-0,177	0,000	-0,219
GNE	TMET86	-0,045	0,105	-0,064
GNE	TMET87	-0,066	0,018	-0,080
GNE	TMET88	-0,100	0,000	-0,220
GNE	TMET90	-0,068	0,014	-0,070
GNE	TMET91	-0,100	0,000	0,423
GNE	TMET92	-0,133	0,000	0,407
GNE	TMET93	-0,006	0,815	0,375
GNE	TMET94	-0,044	0,112	0,252
GNE	TMET95	-0,131	0,000	-0,423
GNE	TMET96	-0,141	0,000	-0,010
GNE	TMET98	0,056	0,042	0,114
GNE	TMET99	-0,164	0,000	-0,334
GNE	TMET100	0,036	0,192	-0,049
GNE	TMET101	-0,064	0,020	-0,048
GNE	TMET102	0,074	0,007	-0,096
GNE	TMET103	-0,031	0,262	0,250
GNE	TMET104	-0,046	0,098	-0,117
GNE	TMET105	-0,126	0,000	-0,250
GNE	TMET106	-0,036	0,195	-0,051
GNE	TMET107	-0,092	0,001	-0,032
GNE	TMET108	-0,019	0,482	-0,054
GNE	TMET109	-0,018	0,521	-0,281
GNE	TMET110	0,028	0,315	0,040
GNE	TMET111	-0,015	0,576	0,182
GNE	TMET112	0,030	0,286	0,218
GNE	TMET113	0,004	0,887	0,200
GNE	TMET114	-0,099	0,000	0,008
GNE	TMET115	0,007	0,793	0,006
GNE	TMET116	0,030	0,279	0,337

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
GNE	TMET117	-0,121	0,000	-0,269
GNE	TMET118	-0,112	0,000	-0,158
GNE	TMET119	-0,080	0,004	-0,298
GNE	TMET120	-0,017	0,528	0,109
GNE	TMET121	-0,077	0,005	0,394
GNE	TMET122	-0,045	0,104	0,441
GNE	TMET123	-0,003	0,909	-0,028
GNE	TMET124	-0,038	0,175	-0,110
GNE	TMET126	0,108	0,000	0,215
GNE	TMET127	0,009	0,742	-0,080
GNE	TMET128	-0,100	0,000	-0,123
GNE	TMET129	-0,045	0,104	0,195
GNE	TMET130	-0,096	0,000	-0,285
GNE	TMET132	-0,008	0,761	0,040
GNE	TMET133	-0,115	0,000	0,008
GNE	TMET135	-0,091	0,001	-0,487
GNE	TMET136	-0,064	0,020	0,209
GNE	TMET137	-0,098	0,000	-0,292
GNE	TMET139	-0,072	0,010	-0,085
GNE	TMET140	-0,085	0,002	-0,305
GNE	TMET141	0,029	0,298	0,147
GNE	TMET142	-0,055	0,048	-0,027
GNE	TMET143	-0,043	0,123	-0,064
GNE	TMET144	0,012	0,669	0,252
GNE	TMET145	0,038	0,175	0,202
GNE	TMET146	-0,062	0,025	-0,141
GNE	TMET147	0,020	0,472	-0,085
GNE	TMET150	-0,099	0,000	-0,021
GNE	TMET151	0,037	0,183	0,082
GNE	TMET152	0,006	0,822	0,205
GNE	TMET153	0,070	0,011	0,086
GNE	TMET154	-0,084	0,002	-0,156
GNE	TMET155	0,023	0,414	0,148
GNE	TMET156	-0,108	0,000	-0,008
GNE	TMET157	-0,090	0,001	-0,462
GNE	TMET158	-0,071	0,011	-0,032
HEA	TMET1	0,037	0,180	0,432
HEA	TMET2	-0,235	0,000	-0,277
HEA	TMET3	-0,030	0,274	0,172
HEA	TMET4	-0,129	0,000	-0,038
HEA	TMET5	-0,187	0,000	0,765
HEA	TMET6	-0,199	0,000	0,384
HEA	TMET7	-0,045	0,101	0,435
HEA	TMET8	-0,099	0,000	-0,321
HEA	TMET9	0,005	0,850	0,143
HEA	TMET10	-0,094	0,001	-0,948
HEA	TMET12	-0,254	0,000	0,096
HEA	TMET13	-0,168	0,000	0,117
HEA	TMET14	-0,095	0,001	-0,929
HEA	TMET15	-0,017	0,534	0,097
HEA	TMET18	-0,152	0,000	0,178
HEA	TMET20	0,015	0,581	-0,079
HEA	TMET23	-0,132	0,000	0,039
HEA	TMET24	-0,148	0,000	0,798
HEA	TMET25	-0,138	0,000	0,371
HEA	TMET26	-0,071	0,010	0,159
HEA	TMET27	0,038	0,169	0,037
HEA	TMET30	-0,133	0,000	0,062
HEA	TMET32	-0,201	0,000	-0,624
HEA	TMET33	-0,092	0,001	0,510
HEA	TMET34	-0,126	0,000	0,484
HEA	TMET35	-0,044	0,113	0,635
HEA	TMET36	-0,083	0,003	-0,225
HEA	TMET38	-0,154	0,000	-0,016
HEA	TMET39	0,006	0,827	0,622
HEA	TMET41	-0,018	0,517	0,059
HEA	TMET43	-0,027	0,327	0,555
HEA	TMET44	0,121	0,000	1,649
HEA	TMET45	-0,173	0,000	0,099
HEA	TMET46	0,027	0,321	-0,043
HEA	TMET48	-0,112	0,000	0,534
HEA	TMET50	-0,049	0,076	-0,001
HEA	TMET51	0,018	0,510	0,151
HEA	TMET52	-0,070	0,012	0,026
HEA	TMET53	-0,179	0,000	0,155



Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
HEA	TMET54	0,059	0,033	0,192
HEA	TMET55	-0,040	0,146	0,111
HEA	TMET57	-0,170	0,000	-0,178
HEA	TMET58	-0,013	0,650	-0,069
HEA	TMET62	-0,070	0,012	0,311
HEA	TMET63	-0,173	0,000	-0,204
HEA	TMET64	-0,259	0,000	-0,351
HEA	TMET65	-0,089	0,001	-0,187
HEA	TMET68	0,071	0,010	0,138
HEA	TMET69	-0,109	0,000	-0,071
HEA	TMET70	-0,080	0,004	-0,028
HEA	TMET72	-0,002	0,951	-0,202
HEA	TMET74	-0,137	0,000	-0,806
HEA	TMET75	-0,195	0,000	-0,198
HEA	TMET76	-0,225	0,000	-0,391
HEA	TMET77	-0,196	0,000	0,113
HEA	TMET78	-0,333	0,000	-0,094
HEA	TMET79	-0,093	0,001	1,132
HEA	TMET80	-0,067	0,015	0,100
HEA	TMET81	-0,042	0,131	-0,099
HEA	TMET82	-0,059	0,032	0,052
HEA	TMET83	-0,263	0,000	0,008
HEA	TMET84	-0,197	0,000	-0,349
HEA	TMET85	-0,307	0,000	-0,500
HEA	TMET86	-0,062	0,025	0,353
HEA	TMET87	-0,034	0,221	0,982
HEA	TMET88	-0,234	0,000	-1,121
HEA	TMET90	0,097	0,000	0,256
HEA	TMET91	-0,108	0,000	0,450
HEA	TMET92	-0,271	0,000	0,033
HEA	TMET93	-0,189	0,000	0,086
HEA	TMET94	-0,141	0,000	-0,222
HEA	TMET95	-0,076	0,006	0,114
HEA	TMET96	-0,153	0,000	0,418
HEA	TMET98	-0,148	0,000	0,018
HEA	TMET99	-0,273	0,000	-0,341
HEA	TMET100	-0,168	0,000	-0,228
HEA	TMET101	-0,354	0,000	-1,319
HEA	TMET102	-0,131	0,000	0,317
HEA	TMET103	-0,246	0,000	0,781
HEA	TMET104	-0,245	0,000	-0,234
HEA	TMET105	-0,244	0,000	-0,387
HEA	TMET106	-0,220	0,000	0,479
HEA	TMET107	-0,177	0,000	0,320
HEA	TMET108	-0,220	0,000	-0,203
HEA	TMET109	-0,216	0,000	-0,678
HEA	TMET110	-0,134	0,000	0,525
HEA	TMET111	-0,182	0,000	-0,479
HEA	TMET112	0,004	0,876	0,933
HEA	TMET113	-0,049	0,077	0,113
HEA	TMET114	-0,123	0,000	-0,794
HEA	TMET115	-0,132	0,000	-0,050
HEA	TMET116	-0,157	0,000	0,051
HEA	TMET117	-0,293	0,000	-0,204
HEA	TMET118	-0,189	0,000	0,049
HEA	TMET119	-0,336	0,000	-0,316
HEA	TMET120	-0,255	0,000	0,149
HEA	TMET121	-0,346	0,000	0,214
HEA	TMET122	-0,338	0,000	-0,459
HEA	TMET123	-0,016	0,563	0,174
HEA	TMET124	-0,053	0,056	-0,717
HEA	TMET126	0,011	0,701	-0,056
HEA	TMET127	-0,196	0,000	-0,275
HEA	TMET128	-0,363	0,000	-0,352
HEA	TMET129	-0,218	0,000	-0,052
HEA	TMET130	-0,346	0,000	-0,207
HEA	TMET132	-0,111	0,000	-0,006
HEA	TMET133	-0,234	0,000	0,257
HEA	TMET135	-0,127	0,000	-0,937
HEA	TMET136	-0,115	0,000	0,349
HEA	TMET137	-0,164	0,000	-0,405
HEA	TMET139	-0,174	0,000	0,009
HEA	TMET140	-0,276	0,000	-0,502
HEA	TMET141	-0,092	0,001	0,124
HEA	TMET142	-0,332	0,000	-0,187

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
HEA	TMET143	-0,050	0,069	-0,144
HEA	TMET144	-0,168	0,000	0,106
HEA	TMET145	-0,138	0,000	-0,257
HEA	TMET146	-0,152	0,000	0,026
HEA	TMET147	-0,168	0,000	-0,106
HEA	TMET150	-0,222	0,000	0,035
HEA	TMET151	-0,096	0,001	0,088
HEA	TMET152	-0,037	0,178	0,697
HEA	TMET153	0,091	0,001	0,089
HEA	TMET154	-0,128	0,000	0,084
HEA	TMET155	-0,241	0,000	-0,472
HEA	TMET156	-0,196	0,000	-0,343
HEA	TMET157	-0,040	0,150	-0,179
HEA	TMET158	-0,155	0,000	-0,568
HEI	TMET1	0,151	0,000	2,112
HEI	TMET2	-0,026	0,342	-0,238
HEI	TMET3	0,047	0,089	0,560
HEI	TMET4	-0,023	0,416	-0,076
HEI	TMET5	-0,097	0,000	0,060
HEI	TMET6	-0,082	0,003	-0,114
HEI	TMET7	0,012	0,675	0,670
HEI	TMET8	-0,070	0,012	-0,879
HEI	TMET9	-0,001	0,971	0,065
HEI	TMET10	-0,009	0,756	-0,540
HEI	TMET12	-0,149	0,000	-1,410
HEI	TMET13	-0,029	0,292	0,086
HEI	TMET14	-0,013	0,646	0,220
HEI	TMET15	-0,026	0,341	0,028
HEI	TMET18	-0,025	0,373	-0,254
HEI	TMET20	-0,041	0,134	-0,247
HEI	TMET23	-0,004	0,890	0,942
HEI	TMET24	0,004	0,894	-0,203
HEI	TMET25	-0,011	0,690	-0,283
HEI	TMET26	-0,078	0,005	-0,067
HEI	TMET27	0,023	0,401	0,099
HEI	TMET30	-0,037	0,181	-0,671
HEI	TMET32	0,065	0,019	1,055
HEI	TMET33	-0,067	0,015	-0,650
HEI	TMET34	0,075	0,007	0,424
HEI	TMET35	0,079	0,004	0,441
HEI	TMET36	0,171	0,000	0,965
HEI	TMET38	-0,068	0,014	-0,090
HEI	TMET39	0,026	0,340	1,517
HEI	TMET41	-0,043	0,119	-0,269
HEI	TMET43	0,002	0,928	0,841
HEI	TMET44	-0,072	0,009	-1,897
HEI	TMET45	-0,097	0,000	-0,857
HEI	TMET46	0,009	0,740	0,085
HEI	TMET48	-0,074	0,007	0,002
HEI	TMET50	-0,019	0,486	-0,448
HEI	TMET51	0,072	0,010	0,827
HEI	TMET52	-0,011	0,680	-0,053
HEI	TMET53	-0,051	0,067	0,179
HEI	TMET54	-0,034	0,225	-0,219
HEI	TMET55	-0,016	0,568	0,578
HEI	TMET57	-0,040	0,152	-1,273
HEI	TMET58	-0,011	0,685	0,041
HEI	TMET62	-0,030	0,283	-0,168
HEI	TMET63	-0,045	0,101	-0,331
HEI	TMET64	-0,055	0,048	0,345
HEI	TMET65	-0,031	0,269	-0,311
HEI	TMET68	0,009	0,734	-0,377
HEI	TMET69	-0,048	0,083	-0,600
HEI	TMET70	0,014	0,618	0,470
HEI	TMET72	-0,012	0,673	-0,200
HEI	TMET74	0,053	0,053	0,279
HEI	TMET75	-0,047	0,091	0,014
HEI	TMET76	-0,029	0,289	0,295
HEI	TMET77	-0,082	0,003	-0,132
HEI	TMET78	-0,134	0,000	-0,235
HEI	TMET79	0,008	0,761	-0,189
HEI	TMET80	-0,056	0,045	-0,640
HEI	TMET81	0,002	0,938	-0,189
HEI	TMET82	-0,040	0,144	-0,397
HEI	TMET83	-0,132	0,000	-1,176

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
HEI	TMET84	-0,003	0,908	-0,127
HEI	TMET85	-0,128	0,000	-0,029
HEI	TMET86	-0,081	0,003	-0,003
HEI	TMET87	-0,082	0,003	-1,082
HEI	TMET88	-0,032	0,250	-0,242
HEI	TMET90	-0,051	0,066	0,063
HEI	TMET91	-0,075	0,006	-1,142
HEI	TMET92	-0,157	0,000	-1,578
HEI	TMET93	-0,030	0,271	-0,498
HEI	TMET94	-0,080	0,004	-0,601
HEI	TMET95	-0,067	0,016	-0,149
HEI	TMET96	-0,140	0,000	-0,512
HEI	TMET98	0,079	0,004	0,549
HEI	TMET99	-0,179	0,000	-0,642
HEI	TMET100	0,103	0,000	-0,479
HEI	TMET101	-0,060	0,030	0,448
HEI	TMET102	0,095	0,001	0,358
HEI	TMET103	-0,078	0,005	-0,510
HEI	TMET104	-0,078	0,005	0,088
HEI	TMET105	-0,085	0,002	0,631
HEI	TMET106	-0,074	0,007	0,558
HEI	TMET107	-0,009	0,743	0,624
HEI	TMET108	-0,094	0,001	-0,397
HEI	TMET109	-0,091	0,001	-1,175
HEI	TMET110	-0,041	0,139	0,613
HEI	TMET111	-0,069	0,013	-0,725
HEI	TMET112	0,029	0,295	0,630
HEI	TMET113	-0,036	0,196	-0,479
HEI	TMET114	-0,071	0,010	0,819
HEI	TMET115	-0,080	0,004	-0,247
HEI	TMET116	-0,037	0,186	0,460
HEI	TMET117	-0,073	0,009	1,047
HEI	TMET118	-0,006	0,827	0,381
HEI	TMET119	-0,078	0,005	0,630
HEI	TMET120	-0,047	0,088	0,185
HEI	TMET121	-0,104	0,000	-0,685
HEI	TMET122	-0,081	0,004	-0,498
HEI	TMET123	-0,066	0,017	-0,128
HEI	TMET124	-0,083	0,003	-0,127
HEI	TMET126	0,112	0,000	0,877
HEI	TMET127	0,029	0,299	-0,557
HEI	TMET128	-0,027	0,321	1,616
HEI	TMET129	0,025	0,367	2,095
HEI	TMET130	-0,052	0,062	-0,321
HEI	TMET132	-0,028	0,315	-0,114
HEI	TMET133	-0,060	0,029	0,370
HEI	TMET135	-0,012	0,677	0,089
HEI	TMET136	-0,005	0,870	0,782
HEI	TMET137	-0,095	0,001	-0,567
HEI	TMET139	-0,008	0,775	0,261
HEI	TMET140	-0,036	0,199	0,698
HEI	TMET141	0,112	0,000	0,268
HEI	TMET142	-0,088	0,001	-0,707
HEI	TMET143	0,017	0,545	0,529
HEI	TMET144	-0,064	0,020	0,715
HEI	TMET145	-0,022	0,437	0,206
HEI	TMET146	-0,030	0,276	0,141
HEI	TMET147	-0,065	0,018	0,172
HEI	TMET150	-0,063	0,023	0,196
HEI	TMET151	0,027	0,321	-0,149
HEI	TMET152	-0,001	0,983	0,075
HEI	TMET153	0,051	0,064	-0,222
HEI	TMET154	0,009	0,736	0,549
HEI	TMET155	0,089	0,001	1,334
HEI	TMET156	-0,070	0,012	0,421
HEI	TMET157	-0,021	0,438	0,469
HEI	TMET158	-0,044	0,109	-0,409
MAT	TMET1	0,026	0,346	0,165
MAT	TMET2	-0,225	0,000	-0,213
MAT	TMET3	-0,017	0,532	0,230
MAT	TMET4	-0,118	0,000	-0,055
MAT	TMET5	-0,168	0,000	0,382
MAT	TMET6	-0,176	0,000	0,368
MAT	TMET7	-0,040	0,153	0,312
MAT	TMET8	-0,078	0,005	-0,099

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
MAT	TMET9	0,002	0,943	0,070
MAT	TMET10	-0,093	0,001	-0,797
MAT	TMET12	-0,240	0,000	0,088
MAT	TMET13	-0,182	0,000	0,046
MAT	TMET14	-0,075	0,007	-0,290
MAT	TMET15	-0,013	0,647	0,056
MAT	TMET18	-0,131	0,000	0,255
MAT	TMET20	0,025	0,362	-0,083
MAT	TMET23	-0,107	0,000	0,088
MAT	TMET24	-0,133	0,000	0,539
MAT	TMET25	-0,128	0,000	0,324
MAT	TMET26	-0,054	0,053	0,164
MAT	TMET27	0,044	0,115	0,061
MAT	TMET30	-0,128	0,000	0,056
MAT	TMET32	-0,182	0,000	-0,469
MAT	TMET33	-0,074	0,008	0,358
MAT	TMET34	-0,123	0,000	0,212
MAT	TMET35	-0,045	0,101	0,394
MAT	TMET36	-0,091	0,001	-0,207
MAT	TMET38	-0,143	0,000	-0,122
MAT	TMET39	0,007	0,791	0,305
MAT	TMET41	-0,013	0,650	0,030
MAT	TMET43	-0,026	0,354	0,309
MAT	TMET44	0,112	0,000	0,782
MAT	TMET45	-0,157	0,000	0,085
MAT	TMET46	0,034	0,214	-0,020
MAT	TMET48	-0,097	0,000	0,397
MAT	TMET50	-0,033	0,233	0,066
MAT	TMET51	0,015	0,576	0,051
MAT	TMET52	-0,064	0,021	0,039
MAT	TMET53	-0,163	0,000	0,055
MAT	TMET54	0,085	0,002	0,221
MAT	TMET55	-0,016	0,565	0,157
MAT	TMET57	-0,148	0,000	-0,193
MAT	TMET58	0,002	0,952	-0,042
MAT	TMET62	-0,040	0,153	0,375
MAT	TMET63	-0,163	0,000	-0,157
MAT	TMET64	-0,250	0,000	-0,355
MAT	TMET65	-0,093	0,001	-0,161
MAT	TMET68	0,062	0,024	0,135
MAT	TMET69	-0,104	0,000	-0,055
MAT	TMET70	-0,067	0,016	0,001
MAT	TMET72	0,010	0,715	-0,147
MAT	TMET74	-0,140	0,000	-0,503
MAT	TMET75	-0,184	0,000	-0,068
MAT	TMET76	-0,217	0,000	-0,345
MAT	TMET77	-0,176	0,000	-0,056
MAT	TMET78	-0,316	0,000	-0,107
MAT	TMET79	-0,097	0,000	0,552
MAT	TMET80	-0,051	0,068	0,124
MAT	TMET81	-0,050	0,070	-0,169
MAT	TMET82	-0,060	0,031	-0,065
MAT	TMET83	-0,245	0,000	-0,038
MAT	TMET84	-0,183	0,000	-0,220
MAT	TMET85	-0,277	0,000	-0,277
MAT	TMET86	-0,047	0,087	0,313
MAT	TMET87	-0,006	0,835	0,744
MAT	TMET88	-0,214	0,000	-0,631
MAT	TMET90	0,110	0,000	0,221
MAT	TMET91	-0,092	0,001	0,307
MAT	TMET92	-0,246	0,000	-0,118
MAT	TMET93	-0,176	0,000	0,193
MAT	TMET94	-0,125	0,000	-0,316
MAT	TMET95	-0,048	0,085	0,245
MAT	TMET96	-0,136	0,000	0,081
MAT	TMET98	-0,153	0,000	0,117
MAT	TMET99	-0,234	0,000	-0,197
MAT	TMET100	-0,165	0,000	0,002
MAT	TMET101	-0,343	0,000	-0,834
MAT	TMET102	-0,144	0,000	0,070
MAT	TMET103	-0,234	0,000	0,425
MAT	TMET104	-0,224	0,000	-0,062
MAT	TMET105	-0,216	0,000	-0,185
MAT	TMET106	-0,187	0,000	0,240
MAT	TMET107	-0,149	0,000	0,219

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
MAT	TMET108	-0,169	0,000	-0,101
MAT	TMET109	-0,170	0,000	-0,459
MAT	TMET110	-0,098	0,000	0,258
MAT	TMET111	-0,148	0,000	-0,392
MAT	TMET112	0,014	0,619	0,560
MAT	TMET113	-0,023	0,404	0,246
MAT	TMET114	-0,088	0,001	-0,219
MAT	TMET115	-0,091	0,001	-0,004
MAT	TMET116	-0,119	0,000	0,079
MAT	TMET117	-0,258	0,000	-0,090
MAT	TMET118	-0,173	0,000	0,099
MAT	TMET119	-0,326	0,000	-0,297
MAT	TMET120	-0,254	0,000	0,069
MAT	TMET121	-0,331	0,000	0,022
MAT	TMET122	-0,327	0,000	-0,266
MAT	TMET123	-0,009	0,745	0,043
MAT	TMET124	-0,044	0,111	-0,535
MAT	TMET126	0,012	0,665	-0,025
MAT	TMET127	-0,196	0,000	-0,312
MAT	TMET128	-0,354	0,000	-0,284
MAT	TMET129	-0,203	0,000	-0,117
MAT	TMET130	-0,343	0,000	-0,222
MAT	TMET132	-0,107	0,000	-0,033
MAT	TMET133	-0,239	0,000	-0,052
MAT	TMET135	-0,120	0,000	-0,408
MAT	TMET136	-0,102	0,000	0,197
MAT	TMET137	-0,135	0,000	-0,215
MAT	TMET139	-0,169	0,000	-0,013
MAT	TMET140	-0,267	0,000	-0,427
MAT	TMET141	-0,104	0,000	-0,028
MAT	TMET142	-0,321	0,000	-0,129
MAT	TMET143	-0,036	0,194	-0,067
MAT	TMET144	-0,144	0,000	0,137
MAT	TMET145	-0,116	0,000	-0,037
MAT	TMET146	-0,145	0,000	-0,034
MAT	TMET147	-0,129	0,000	0,017
MAT	TMET150	-0,196	0,000	0,039
MAT	TMET151	-0,082	0,003	0,099
MAT	TMET152	-0,048	0,080	0,258
MAT	TMET153	0,103	0,000	0,188
MAT	TMET154	-0,121	0,000	0,007
MAT	TMET155	-0,226	0,000	-0,178
MAT	TMET156	-0,183	0,000	-0,127
MAT	TMET157	-0,026	0,353	-0,168
MAT	TMET158	-0,135	0,000	-0,452
SHO	TMET1	-0,021	0,439	-0,179
SHO	TMET2	-0,219	0,000	-0,129
SHO	TMET3	-0,030	0,279	0,157
SHO	TMET4	-0,112	0,000	-0,026
SHO	TMET5	-0,159	0,000	0,582
SHO	TMET6	-0,180	0,000	0,338
SHO	TMET7	-0,042	0,133	0,390
SHO	TMET8	-0,061	0,028	-0,042
SHO	TMET9	-0,006	0,816	0,068
SHO	TMET10	-0,087	0,002	-0,650
SHO	TMET12	-0,220	0,000	0,192
SHO	TMET13	-0,159	0,000	0,052
SHO	TMET14	-0,105	0,000	-0,885
SHO	TMET15	-0,010	0,720	0,071
SHO	TMET18	-0,143	0,000	0,180
SHO	TMET20	0,035	0,209	-0,017
SHO	TMET23	-0,127	0,000	-0,115
SHO	TMET24	-0,157	0,000	0,726
SHO	TMET25	-0,148	0,000	0,329
SHO	TMET26	-0,044	0,109	0,076
SHO	TMET27	0,021	0,458	-0,005
SHO	TMET30	-0,155	0,000	-0,053
SHO	TMET32	-0,218	0,000	-0,756
SHO	TMET33	-0,095	0,001	0,248
SHO	TMET34	-0,135	0,000	0,546
SHO	TMET35	-0,053	0,056	0,502
SHO	TMET36	-0,116	0,000	-0,340
SHO	TMET38	-0,134	0,000	0,007
SHO	TMET39	0,004	0,876	0,298
SHO	TMET41	0,017	0,528	0,218

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
SHO	TMET43	-0,008	0,763	0,522
SHO	TMET44	0,158	0,000	1,702
SHO	TMET45	-0,119	0,000	0,187
SHO	TMET46	0,022	0,425	-0,096
SHO	TMET48	-0,065	0,019	0,487
SHO	TMET50	-0,055	0,047	0,042
SHO	TMET51	0,004	0,876	0,075
SHO	TMET52	-0,070	0,012	0,016
SHO	TMET53	-0,170	0,000	-0,004
SHO	TMET54	0,062	0,025	0,166
SHO	TMET55	-0,030	0,282	0,001
SHO	TMET57	-0,175	0,000	-0,093
SHO	TMET58	-0,005	0,847	-0,088
SHO	TMET62	-0,047	0,086	0,450
SHO	TMET63	-0,154	0,000	-0,133
SHO	TMET64	-0,209	0,000	-0,237
SHO	TMET65	-0,085	0,002	-0,064
SHO	TMET68	0,057	0,038	0,219
SHO	TMET69	-0,114	0,000	-0,113
SHO	TMET70	-0,064	0,020	-0,014
SHO	TMET72	-0,003	0,922	-0,146
SHO	TMET74	-0,149	0,000	-0,708
SHO	TMET75	-0,187	0,000	-0,297
SHO	TMET76	-0,210	0,000	-0,356
SHO	TMET77	-0,180	0,000	0,056
SHO	TMET78	-0,270	0,000	-0,079
SHO	TMET79	-0,096	0,001	0,881
SHO	TMET80	-0,060	0,030	0,038
SHO	TMET81	-0,052	0,059	-0,014
SHO	TMET82	-0,041	0,137	0,148
SHO	TMET83	-0,249	0,000	-0,019
SHO	TMET84	-0,192	0,000	-0,100
SHO	TMET85	-0,238	0,000	-0,312
SHO	TMET86	-0,039	0,159	0,257
SHO	TMET87	-0,010	0,727	0,779
SHO	TMET88	-0,222	0,000	-0,921
SHO	TMET90	0,105	0,000	0,238
SHO	TMET91	-0,083	0,003	0,502
SHO	TMET92	-0,236	0,000	0,201
SHO	TMET93	-0,172	0,000	0,241
SHO	TMET94	-0,111	0,000	-0,167
SHO	TMET95	-0,051	0,067	0,156
SHO	TMET96	-0,112	0,000	0,331
SHO	TMET98	-0,169	0,000	-0,047
SHO	TMET99	-0,201	0,000	-0,128
SHO	TMET100	-0,195	0,000	-0,200
SHO	TMET101	-0,333	0,000	-1,167
SHO	TMET102	-0,154	0,000	0,517
SHO	TMET103	-0,219	0,000	0,601
SHO	TMET104	-0,226	0,000	-0,187
SHO	TMET105	-0,231	0,000	-0,403
SHO	TMET106	-0,192	0,000	0,244
SHO	TMET107	-0,178	0,000	0,141
SHO	TMET108	-0,191	0,000	-0,127
SHO	TMET109	-0,187	0,000	-0,315
SHO	TMET110	-0,125	0,000	0,339
SHO	TMET111	-0,150	0,000	-0,306
SHO	TMET112	0,009	0,756	0,714
SHO	TMET113	-0,040	0,151	0,304
SHO	TMET114	-0,117	0,000	-0,823
SHO	TMET115	-0,115	0,000	-0,065
SHO	TMET116	-0,147	0,000	-0,077
SHO	TMET117	-0,255	0,000	-0,100
SHO	TMET118	-0,171	0,000	-0,032
SHO	TMET119	-0,296	0,000	-0,254
SHO	TMET120	-0,236	0,000	0,097
SHO	TMET121	-0,304	0,000	0,285
SHO	TMET122	-0,306	0,000	-0,430
SHO	TMET123	-0,004	0,895	0,120
SHO	TMET124	-0,024	0,390	-0,544
SHO	TMET126	-0,022	0,436	-0,123
SHO	TMET127	-0,196	0,000	-0,151
SHO	TMET128	-0,364	0,000	-0,648
SHO	TMET129	-0,246	0,000	-0,486
SHO	TMET130	-0,348	0,000	-0,297

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
SHO	TMET132	-0,103	0,000	-0,018
SHO	TMET133	-0,224	0,000	0,074
SHO	TMET135	-0,122	0,000	-0,786
SHO	TMET136	-0,109	0,000	0,227
SHO	TMET137	-0,134	0,000	-0,268
SHO	TMET139	-0,178	0,000	-0,028
SHO	TMET140	-0,292	0,000	-0,648
SHO	TMET141	-0,138	0,000	0,098
SHO	TMET142	-0,315	0,000	-0,108
SHO	TMET143	-0,044	0,110	-0,110
SHO	TMET144	-0,164	0,000	0,004
SHO	TMET145	-0,131	0,000	-0,221
SHO	TMET146	-0,125	0,000	0,203
SHO	TMET147	-0,146	0,000	-0,070
SHO	TMET150	-0,209	0,000	0,022
SHO	TMET151	-0,100	0,000	0,136
SHO	TMET152	-0,039	0,156	0,515
SHO	TMET153	0,065	0,019	-0,004
SHO	TMET154	-0,134	0,000	0,014
SHO	TMET155	-0,257	0,000	-0,420
SHO	TMET156	-0,134	0,000	-0,025
SHO	TMET157	-0,034	0,216	-0,272
SHO	TMET158	-0,153	0,000	-0,661
TGW	TMET1	0,022	0,429	-0,091
TGW	TMET2	0,109	0,000	0,311
TGW	TMET3	0,025	0,362	-0,005
TGW	TMET4	0,063	0,022	0,248
TGW	TMET5	0,067	0,015	0,093
TGW	TMET6	0,065	0,019	-0,220
TGW	TMET7	0,013	0,646	-0,086
TGW	TMET8	-0,049	0,076	-0,319
TGW	TMET9	-0,025	0,359	-0,057
TGW	TMET10	0,051	0,066	0,050
TGW	TMET12	0,075	0,007	-0,051
TGW	TMET13	-0,008	0,785	-0,105
TGW	TMET14	0,075	0,007	0,353
TGW	TMET15	-0,002	0,944	-0,001
TGW	TMET18	0,116	0,000	0,114
TGW	TMET20	-0,013	0,651	0,014
TGW	TMET23	0,023	0,403	0,061
TGW	TMET24	0,091	0,001	0,092
TGW	TMET25	0,093	0,001	0,252
TGW	TMET26	-0,010	0,724	-0,018
TGW	TMET27	-0,073	0,008	-0,158
TGW	TMET30	0,039	0,164	-0,101
TGW	TMET32	0,102	0,000	0,220
TGW	TMET33	0,022	0,425	-0,019
TGW	TMET34	0,058	0,035	-0,236
TGW	TMET35	0,047	0,090	0,084
TGW	TMET36	0,111	0,000	0,104
TGW	TMET38	0,045	0,103	0,122
TGW	TMET39	-0,029	0,291	0,088
TGW	TMET41	-0,046	0,093	-0,412
TGW	TMET43	-0,002	0,929	-0,163
TGW	TMET44	-0,024	0,380	-0,116
TGW	TMET45	0,012	0,672	-0,035
TGW	TMET46	-0,045	0,106	0,009
TGW	TMET48	-0,036	0,199	-0,346
TGW	TMET50	-0,016	0,563	-0,119
TGW	TMET51	0,016	0,575	0,023
TGW	TMET52	0,051	0,065	0,076
TGW	TMET53	0,038	0,169	-0,081
TGW	TMET54	-0,031	0,263	0,008
TGW	TMET55	-0,031	0,268	0,047
TGW	TMET57	0,057	0,041	-0,260
TGW	TMET58	0,003	0,912	-0,005
TGW	TMET62	-0,014	0,604	-0,316
TGW	TMET63	0,033	0,237	-0,056
TGW	TMET64	-0,017	0,531	0,026
TGW	TMET65	0,035	0,211	-0,084
TGW	TMET68	-0,013	0,634	-0,144
TGW	TMET69	0,052	0,060	-0,004
TGW	TMET70	0,016	0,564	0,009
TGW	TMET72	-0,064	0,021	-0,110
TGW	TMET74	0,116	0,000	0,588

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
TGW	TMET75	0,091	0,001	0,107
TGW	TMET76	0,141	0,000	0,568
TGW	TMET77	0,060	0,031	0,336
TGW	TMET78	0,084	0,002	0,056
TGW	TMET79	0,062	0,025	-0,546
TGW	TMET80	0,034	0,220	0,074
TGW	TMET81	0,014	0,623	0,067
TGW	TMET82	0,004	0,889	-0,077
TGW	TMET83	0,051	0,067	0,046
TGW	TMET84	0,017	0,534	-0,360
TGW	TMET85	0,054	0,051	0,164
TGW	TMET86	-0,019	0,497	-0,253
TGW	TMET87	-0,034	0,219	-0,463
TGW	TMET88	0,040	0,148	0,582
TGW	TMET90	-0,079	0,004	-0,091
TGW	TMET91	0,007	0,807	-0,014
TGW	TMET92	0,044	0,108	-0,028
TGW	TMET93	0,100	0,000	0,116
TGW	TMET94	0,036	0,198	-0,088
TGW	TMET95	-0,030	0,280	-0,227
TGW	TMET96	-0,073	0,009	-0,368
TGW	TMET98	0,106	0,000	-0,128
TGW	TMET99	0,037	0,182	-0,103
TGW	TMET100	0,121	0,000	-0,174
TGW	TMET101	0,122	0,000	0,048
TGW	TMET102	0,117	0,000	0,040
TGW	TMET103	0,112	0,000	0,096
TGW	TMET104	0,111	0,000	0,258
TGW	TMET105	0,059	0,033	0,016
TGW	TMET106	0,112	0,000	0,056
TGW	TMET107	0,102	0,000	0,356
TGW	TMET108	0,048	0,084	-0,068
TGW	TMET109	0,047	0,089	-0,108
TGW	TMET110	0,052	0,060	0,249
TGW	TMET111	0,033	0,239	-0,024
TGW	TMET112	0,063	0,022	0,211
TGW	TMET113	0,019	0,500	-0,083
TGW	TMET114	0,021	0,439	0,499
TGW	TMET115	0,015	0,590	-0,147
TGW	TMET116	0,049	0,078	0,028
TGW	TMET117	0,090	0,001	-0,009
TGW	TMET118	0,074	0,007	0,126
TGW	TMET119	0,137	0,000	0,080
TGW	TMET120	0,105	0,000	-0,109
TGW	TMET121	0,146	0,000	0,302
TGW	TMET122	0,140	0,000	-0,001
TGW	TMET123	-0,020	0,471	0,004
TGW	TMET124	-0,028	0,305	0,081
TGW	TMET126	0,134	0,000	0,670
TGW	TMET127	0,111	0,000	-0,032
TGW	TMET128	0,126	0,000	0,016
TGW	TMET129	0,086	0,002	0,336
TGW	TMET130	0,103	0,000	-0,278
TGW	TMET132	-0,026	0,346	-0,127
TGW	TMET133	0,105	0,000	0,275
TGW	TMET135	0,000	0,999	0,092
TGW	TMET136	0,033	0,230	-0,023
TGW	TMET137	0,033	0,236	0,098
TGW	TMET139	0,026	0,351	-0,080
TGW	TMET140	0,056	0,042	-0,148
TGW	TMET141	0,061	0,027	-0,007
TGW	TMET142	0,128	0,000	0,008
TGW	TMET143	0,045	0,103	0,092
TGW	TMET144	0,103	0,000	0,239
TGW	TMET145	0,135	0,000	0,173
TGW	TMET146	0,049	0,077	-0,117
TGW	TMET147	0,046	0,096	-0,029
TGW	TMET150	-0,010	0,716	-0,630
TGW	TMET151	0,065	0,018	0,015
TGW	TMET152	-0,006	0,817	-0,169
TGW	TMET153	0,004	0,899	-0,004
TGW	TMET154	0,066	0,018	0,016
TGW	TMET155	0,150	0,000	0,440
TGW	TMET156	-0,005	0,857	-0,083
TGW	TMET157	-0,008	0,781	0,102



Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
TGW	TMET158	0,027	0,337	-0,275
YLD	TMET1	0,014	0,611	0,002
YLD	TMET2	0,102	0,000	0,046
YLD	TMET3	0,024	0,377	0,007
YLD	TMET4	0,004	0,893	-0,004
YLD	TMET5	0,057	0,041	0,009
YLD	TMET6	0,052	0,060	0,008
YLD	TMET7	-0,006	0,833	-0,016
YLD	TMET8	-0,098	0,000	-0,015
YLD	TMET9	-0,089	0,001	-0,063
YLD	TMET10	0,044	0,114	0,021
YLD	TMET12	0,070	0,012	0,018
YLD	TMET13	-0,041	0,142	-0,074
YLD	TMET14	0,073	0,008	0,012
YLD	TMET15	0,017	0,531	0,019
YLD	TMET18	0,130	0,000	0,071
YLD	TMET20	-0,015	0,576	0,003
YLD	TMET23	-0,012	0,674	0,000
YLD	TMET24	0,005	0,857	0,005
YLD	TMET25	0,024	0,395	0,015
YLD	TMET26	-0,006	0,827	-0,012
YLD	TMET27	-0,082	0,003	-0,055
YLD	TMET30	0,059	0,033	0,025
YLD	TMET32	0,036	0,194	0,012
YLD	TMET33	-0,007	0,814	-0,002
YLD	TMET34	0,058	0,035	0,003
YLD	TMET35	0,020	0,481	-0,002
YLD	TMET36	0,087	0,002	0,034
YLD	TMET38	0,016	0,557	0,011
YLD	TMET39	-0,096	0,001	-0,012
YLD	TMET41	-0,009	0,758	-0,004
YLD	TMET43	0,020	0,479	-0,005
YLD	TMET44	-0,015	0,583	-0,004
YLD	TMET45	0,005	0,846	-0,010
YLD	TMET46	-0,053	0,053	-0,027
YLD	TMET48	-0,005	0,868	-0,014
YLD	TMET50	-0,053	0,053	-0,030
YLD	TMET51	0,010	0,710	0,001
YLD	TMET52	0,031	0,258	0,035
YLD	TMET53	0,039	0,158	0,001
YLD	TMET54	-0,033	0,228	-0,021
YLD	TMET55	-0,090	0,001	-0,044
YLD	TMET57	-0,011	0,684	-0,004
YLD	TMET58	-0,016	0,568	0,004
YLD	TMET62	-0,044	0,114	-0,022
YLD	TMET63	0,017	0,542	0,003
YLD	TMET64	-0,082	0,003	-0,094
YLD	TMET65	0,050	0,069	0,022
YLD	TMET68	0,050	0,073	0,027
YLD	TMET69	0,119	0,000	0,076
YLD	TMET70	-0,045	0,107	-0,034
YLD	TMET72	-0,125	0,000	-0,091
YLD	TMET74	0,142	0,000	0,066
YLD	TMET75	0,079	0,004	0,051
YLD	TMET76	0,112	0,000	0,064
YLD	TMET77	0,018	0,516	0,012
YLD	TMET78	0,072	0,009	0,058
YLD	TMET79	0,111	0,000	0,047
YLD	TMET80	0,015	0,594	0,009
YLD	TMET81	0,010	0,722	0,003
YLD	TMET82	-0,011	0,697	-0,010
YLD	TMET83	-0,008	0,784	-0,004
YLD	TMET84	-0,036	0,190	-0,024
YLD	TMET85	-0,012	0,655	-0,019
YLD	TMET86	0,017	0,548	0,015
YLD	TMET87	-0,051	0,064	-0,020
YLD	TMET88	-0,043	0,119	-0,020
YLD	TMET90	-0,171	0,000	-0,281
YLD	TMET91	-0,014	0,614	-0,006
YLD	TMET92	-0,015	0,598	-0,001
YLD	TMET93	0,131	0,000	0,066
YLD	TMET94	0,028	0,313	0,015
YLD	TMET95	-0,098	0,000	-0,034
YLD	TMET96	-0,115	0,000	-0,007
YLD	TMET98	0,113	0,000	0,040

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
YLD	TMET99	-0,041	0,137	-0,078
YLD	TMET100	0,116	0,000	0,033
YLD	TMET101	0,106	0,000	0,029
YLD	TMET102	0,133	0,000	0,049
YLD	TMET103	0,125	0,000	0,042
YLD	TMET104	0,102	0,000	0,033
YLD	TMET105	-0,032	0,245	-0,013
YLD	TMET106	0,113	0,000	0,005
YLD	TMET107	-0,012	0,668	-0,002
YLD	TMET108	0,053	0,057	0,029
YLD	TMET109	0,041	0,136	0,015
YLD	TMET110	0,052	0,060	0,035
YLD	TMET111	0,028	0,309	0,009
YLD	TMET112	0,076	0,006	0,009
YLD	TMET113	0,052	0,060	0,003
YLD	TMET114	-0,054	0,052	-0,012
YLD	TMET115	0,041	0,134	0,024
YLD	TMET116	0,069	0,013	0,045
YLD	TMET117	0,034	0,214	0,010
YLD	TMET118	0,007	0,806	-0,011
YLD	TMET119	0,145	0,000	0,090
YLD	TMET120	0,156	0,000	0,119
YLD	TMET121	0,124	0,000	0,057
YLD	TMET122	0,186	0,000	0,064
YLD	TMET123	0,024	0,382	0,022
YLD	TMET124	-0,011	0,702	0,002
YLD	TMET126	0,147	0,000	0,082
YLD	TMET127	0,138	0,000	0,074
YLD	TMET128	0,106	0,000	0,014
YLD	TMET129	0,055	0,045	0,011
YLD	TMET130	0,112	0,000	0,040
YLD	TMET132	0,044	0,115	0,036
YLD	TMET133	0,026	0,340	0,003
YLD	TMET135	-0,030	0,278	-0,023
YLD	TMET136	0,013	0,632	-0,002
YLD	TMET137	-0,016	0,551	-0,009
YLD	TMET139	-0,016	0,559	-0,022
YLD	TMET140	0,010	0,717	-0,011
YLD	TMET141	0,038	0,173	0,013
YLD	TMET142	0,122	0,000	0,010
YLD	TMET143	0,028	0,320	0,025
YLD	TMET144	0,120	0,000	0,068
YLD	TMET145	0,146	0,000	0,012
YLD	TMET146	0,033	0,231	0,009
YLD	TMET147	0,078	0,005	0,052
YLD	TMET150	-0,037	0,180	-0,025
YLD	TMET151	0,086	0,002	0,057
YLD	TMET152	0,053	0,054	0,004
YLD	TMET153	-0,005	0,857	-0,005
YLD	TMET154	-0,024	0,377	-0,010
YLD	TMET155	0,147	0,000	0,062
YLD	TMET156	-0,037	0,182	-0,005
YLD	TMET157	-0,057	0,040	-0,026
YLD	TMET158	-0,019	0,493	-0,009

<sup>a</sup>Merkmale, siehe Tab. 1, <sup>b</sup>Metaboliten, siehe Tab. A2, <sup>c</sup>Pearson'scher Korrelationskoeffizient, <sup>d</sup>P-Wert des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten, <sup>e</sup>Geschätzter Effekt des Metaboliten im BayesB-Modell.

**Tab. A8.** Pearson'sche Korrelationskoeffizienten zwischen Merkmalen und Metaboliten und geschätzte Metaboliteffekte im BayesB-Modell, zweite Probennahme (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
EAR	TMET1	-0,033	0,229	-0,720
EAR	TMET2	0,017	0,524	0,095
EAR	TMET3	-0,148	0,000	-13,723
EAR	TMET4	0,092	0,001	3,687
EAR	TMET5	-0,160	0,000	-1,937
EAR	TMET6	-0,175	0,000	-0,555
EAR	TMET7	0,019	0,480	-1,666
EAR	TMET8	-0,078	0,004	-1,544
EAR	TMET9	0,043	0,115	-1,289
EAR	TMET10	0,030	0,269	21,654
EAR	TMET11	0,033	0,223	-0,428
EAR	TMET12	-0,143	0,000	-9,606
EAR	TMET13	-0,066	0,016	-0,047
EAR	TMET14	-0,002	0,935	-1,945
EAR	TMET15	0,025	0,360	-2,270
EAR	TMET17	0,020	0,469	-0,643
EAR	TMET23	0,008	0,783	-0,359
EAR	TMET24	-0,044	0,107	0,832
EAR	TMET25	-0,056	0,040	-1,063
EAR	TMET26	0,111	0,000	0,358
EAR	TMET27	-0,063	0,020	-2,993
EAR	TMET30	0,061	0,025	1,540
EAR	TMET32	0,080	0,003	4,821
EAR	TMET33	0,029	0,290	0,444
EAR	TMET35	-0,006	0,839	9,732
EAR	TMET36	-0,062	0,023	-7,348
EAR	TMET38	-0,066	0,015	5,148
EAR	TMET39	0,012	0,666	0,195
EAR	TMET41	0,103	0,000	1,040
EAR	TMET42	0,069	0,012	0,927
EAR	TMET43	-0,090	0,001	-18,138
EAR	TMET44	0,004	0,889	-0,160
EAR	TMET45	-0,074	0,007	-1,199
EAR	TMET47	0,017	0,536	-2,512
EAR	TMET48	0,083	0,002	0,283
EAR	TMET50	0,019	0,488	0,335
EAR	TMET51	-0,120	0,000	-5,275
EAR	TMET52	0,025	0,370	-0,832
EAR	TMET53	-0,110	0,000	6,091
EAR	TMET54	-0,011	0,686	0,051
EAR	TMET57	-0,047	0,084	-0,150
EAR	TMET58	0,047	0,087	4,611
EAR	TMET62	0,146	0,000	7,717
EAR	TMET63	-0,082	0,003	0,763
EAR	TMET64	-0,087	0,002	-5,113
EAR	TMET65	0,211	0,000	8,427
EAR	TMET68	-0,004	0,897	11,734
EAR	TMET69	0,106	0,000	8,486
EAR	TMET70	-0,074	0,007	-9,903
EAR	TMET72	0,009	0,739	-2,186
EAR	TMET73	0,079	0,004	0,421
EAR	TMET74	-0,105	0,000	-5,533
EAR	TMET75	-0,049	0,074	0,154
EAR	TMET76	0,041	0,129	-0,382
EAR	TMET77	0,039	0,150	-0,522
EAR	TMET79	-0,046	0,089	0,033
EAR	TMET80	0,191	0,000	-0,332
EAR	TMET82	0,084	0,002	2,796
EAR	TMET83	0,029	0,290	1,708
EAR	TMET84	0,017	0,526	1,494
EAR	TMET85	-0,027	0,316	-5,826
EAR	TMET86	-0,115	0,000	-1,523
EAR	TMET87	0,120	0,000	13,171
EAR	TMET88	-0,083	0,002	-0,112
EAR	TMET89	-0,042	0,126	-8,461
EAR	TMET90	-0,022	0,428	-0,849
EAR	TMET91	0,096	0,000	7,086
EAR	TMET92	0,069	0,011	0,078
EAR	TMET93	0,052	0,057	1,146
EAR	TMET94	0,039	0,153	9,903

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
EAR	TMET95	0,080	0,003	0,695
EAR	TMET96	0,162	0,000	0,526
EAR	TMET99	-0,152	0,000	-0,222
EAR	TMET100	-0,029	0,282	-0,057
EAR	TMET101	-0,031	0,264	0,112
EAR	TMET102	-0,035	0,203	-0,303
EAR	TMET103	-0,153	0,000	-0,199
EAR	TMET104	-0,163	0,000	-0,647
EAR	TMET105	0,073	0,007	2,831
EAR	TMET106	-0,069	0,012	-1,302
EAR	TMET107	-0,081	0,003	0,212
EAR	TMET108	0,006	0,839	2,739
EAR	TMET109	0,096	0,000	1,740
EAR	TMET110	-0,018	0,504	-0,587
EAR	TMET111	-0,034	0,209	-2,686
EAR	TMET112	-0,036	0,182	-0,308
EAR	TMET114	0,133	0,000	1,388
EAR	TMET115	-0,066	0,016	-2,337
EAR	TMET116	-0,037	0,172	-0,533
EAR	TMET117	0,040	0,148	-3,750
EAR	TMET118	0,071	0,010	1,946
EAR	TMET119	-0,089	0,001	0,635
EAR	TMET120	0,075	0,006	-1,146
EAR	TMET121	-0,086	0,002	-0,090
EAR	TMET122	-0,062	0,023	1,700
EAR	TMET123	-0,127	0,000	0,017
EAR	TMET124	-0,106	0,000	0,591
EAR	TMET126	-0,014	0,612	0,088
EAR	TMET128	-0,127	0,000	-0,395
EAR	TMET129	-0,026	0,345	3,099
EAR	TMET132	0,012	0,654	-0,277
EAR	TMET133	-0,029	0,286	-10,288
EAR	TMET135	0,034	0,210	-4,677
EAR	TMET136	-0,044	0,105	0,095
EAR	TMET137	0,056	0,040	-0,318
EAR	TMET138	0,170	0,000	2,085
EAR	TMET139	0,047	0,082	-1,842
EAR	TMET140	0,051	0,061	-1,147
EAR	TMET141	-0,005	0,851	0,168
EAR	TMET142	0,013	0,637	-1,380
EAR	TMET143	0,024	0,379	-9,004
EAR	TMET144	-0,082	0,003	0,843
EAR	TMET145	0,002	0,941	0,199
EAR	TMET147	-0,016	0,549	-0,557
EAR	TMET149	0,012	0,654	0,345
EAR	TMET150	0,041	0,136	4,194
EAR	TMET154	-0,045	0,100	0,955
EAR	TMET155	-0,012	0,666	1,176
EAR	TMET156	-0,053	0,054	-1,191
EAR	TMET157	0,015	0,574	14,648
EAR	TMET158	0,085	0,002	0,724
EAR	TMET159	-0,111	0,000	-55,788
GNE	TMET1	-0,047	0,083	-0,040
GNE	TMET2	-0,024	0,384	0,001
GNE	TMET3	-0,085	0,002	-0,428
GNE	TMET4	-0,127	0,000	0,002
GNE	TMET5	0,080	0,003	0,016
GNE	TMET6	0,108	0,000	0,080
GNE	TMET7	-0,030	0,265	-0,010
GNE	TMET8	0,022	0,427	0,016
GNE	TMET9	-0,011	0,688	0,126
GNE	TMET10	0,027	0,317	0,732
GNE	TMET11	-0,106	0,000	-0,015
GNE	TMET12	0,062	0,023	0,012
GNE	TMET13	-0,003	0,926	-0,038
GNE	TMET14	0,020	0,473	0,167
GNE	TMET15	-0,027	0,319	0,016
GNE	TMET17	-0,072	0,008	0,013
GNE	TMET23	-0,042	0,122	0,013
GNE	TMET24	-0,073	0,008	-0,157
GNE	TMET25	-0,068	0,013	-0,426
GNE	TMET26	-0,074	0,007	-0,005
GNE	TMET27	-0,010	0,709	-0,016
GNE	TMET30	-0,065	0,018	0,016
GNE	TMET32	0,002	0,953	0,054

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
GNE	TMET33	-0,066	0,015	-0,049
GNE	TMET35	-0,061	0,027	-0,025
GNE	TMET36	-0,050	0,070	-0,152
GNE	TMET38	0,043	0,113	0,026
GNE	TMET39	0,005	0,868	-0,017
GNE	TMET41	-0,116	0,000	-0,012
GNE	TMET42	-0,087	0,001	-0,052
GNE	TMET43	-0,036	0,182	0,132
GNE	TMET44	-0,061	0,025	-0,008
GNE	TMET45	0,114	0,000	0,198
GNE	TMET47	-0,089	0,001	0,017
GNE	TMET48	0,007	0,808	0,021
GNE	TMET50	-0,038	0,162	-0,009
GNE	TMET51	0,060	0,028	0,062
GNE	TMET52	0,030	0,273	0,089
GNE	TMET53	0,039	0,155	0,054
GNE	TMET54	-0,018	0,503	-0,009
GNE	TMET57	0,011	0,684	0,046
GNE	TMET58	-0,078	0,004	0,017
GNE	TMET62	-0,180	0,000	-0,415
GNE	TMET63	0,060	0,027	0,049
GNE	TMET64	0,003	0,902	-0,035
GNE	TMET65	-0,181	0,000	-0,093
GNE	TMET68	-0,069	0,012	-0,081
GNE	TMET69	-0,053	0,053	-0,014
GNE	TMET70	-0,016	0,569	0,020
GNE	TMET72	-0,015	0,593	0,026
GNE	TMET73	-0,089	0,001	-0,034
GNE	TMET74	-0,063	0,021	-0,126
GNE	TMET75	-0,038	0,166	0,000
GNE	TMET76	-0,030	0,269	0,094
GNE	TMET77	-0,082	0,003	-0,010
GNE	TMET79	-0,016	0,567	0,004
GNE	TMET80	-0,175	0,000	-0,155
GNE	TMET82	-0,088	0,001	-0,073
GNE	TMET83	-0,018	0,514	0,025
GNE	TMET84	-0,103	0,000	0,021
GNE	TMET85	0,040	0,141	0,033
GNE	TMET86	0,073	0,007	0,009
GNE	TMET87	-0,099	0,000	0,018
GNE	TMET88	0,000	0,993	0,067
GNE	TMET89	0,016	0,547	0,171
GNE	TMET90	-0,168	0,000	-0,195
GNE	TMET91	-0,066	0,016	-0,021
GNE	TMET92	-0,061	0,026	-0,118
GNE	TMET93	-0,033	0,221	-0,011
GNE	TMET94	-0,045	0,100	0,145
GNE	TMET95	-0,161	0,000	-0,027
GNE	TMET96	-0,141	0,000	-0,215
GNE	TMET99	0,090	0,001	0,002
GNE	TMET100	-0,060	0,027	-0,118
GNE	TMET101	-0,001	0,960	0,144
GNE	TMET102	-0,032	0,237	-0,002
GNE	TMET103	0,084	0,002	0,103
GNE	TMET104	0,105	0,000	0,094
GNE	TMET105	-0,055	0,044	-0,078
GNE	TMET106	-0,031	0,261	-0,058
GNE	TMET107	0,007	0,807	0,108
GNE	TMET108	-0,007	0,795	-0,103
GNE	TMET109	-0,084	0,002	-0,031
GNE	TMET110	0,001	0,968	-0,060
GNE	TMET111	0,018	0,504	0,026
GNE	TMET112	-0,014	0,610	-0,010
GNE	TMET114	-0,043	0,120	0,014
GNE	TMET115	0,091	0,001	0,386
GNE	TMET116	0,013	0,647	-0,033
GNE	TMET117	-0,045	0,098	0,234
GNE	TMET118	-0,002	0,956	-0,028
GNE	TMET119	0,059	0,032	-0,009
GNE	TMET120	-0,030	0,274	0,017
GNE	TMET121	0,091	0,001	0,154
GNE	TMET122	0,005	0,858	-0,030
GNE	TMET123	0,093	0,001	0,163
GNE	TMET124	0,080	0,003	0,047
GNE	TMET126	0,013	0,632	-0,006

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
GNE	TMET128	0,044	0,106	-0,020
GNE	TMET129	0,095	0,001	0,212
GNE	TMET132	0,010	0,711	0,054
GNE	TMET133	-0,003	0,917	0,038
GNE	TMET135	-0,065	0,018	0,017
GNE	TMET136	-0,012	0,667	-0,002
GNE	TMET137	-0,101	0,000	-0,098
GNE	TMET138	-0,077	0,005	0,006
GNE	TMET139	-0,066	0,016	-0,002
GNE	TMET140	-0,116	0,000	-0,013
GNE	TMET141	-0,059	0,031	-0,011
GNE	TMET142	-0,045	0,101	-0,090
GNE	TMET143	-0,094	0,001	-0,066
GNE	TMET144	0,040	0,147	0,093
GNE	TMET145	-0,059	0,032	-0,040
GNE	TMET147	0,029	0,296	0,058
GNE	TMET149	-0,041	0,132	-0,001
GNE	TMET150	-0,051	0,062	-0,111
GNE	TMET154	0,001	0,976	0,014
GNE	TMET155	-0,037	0,177	-0,140
GNE	TMET156	0,011	0,685	-0,079
GNE	TMET157	0,003	0,918	-0,018
GNE	TMET158	-0,096	0,000	-0,012
GNE	TMET159	-0,073	0,008	0,006
HEA	TMET1	-0,079	0,004	-0,213
HEA	TMET2	-0,028	0,304	-0,018
HEA	TMET3	0,093	0,001	0,271
HEA	TMET4	-0,201	0,000	-0,162
HEA	TMET5	0,180	0,000	-0,094
HEA	TMET6	0,245	0,000	0,302
HEA	TMET7	-0,097	0,000	0,069
HEA	TMET8	0,108	0,000	0,127
HEA	TMET9	-0,094	0,001	0,158
HEA	TMET10	-0,057	0,037	-0,263
HEA	TMET11	-0,140	0,000	0,002
HEA	TMET12	0,094	0,001	0,082
HEA	TMET13	0,042	0,124	-0,053
HEA	TMET14	-0,114	0,000	-0,001
HEA	TMET15	-0,081	0,003	0,120
HEA	TMET17	-0,076	0,005	0,025
HEA	TMET23	-0,103	0,000	-0,216
HEA	TMET24	-0,016	0,564	-0,070
HEA	TMET25	-0,010	0,707	-0,058
HEA	TMET26	-0,066	0,016	0,352
HEA	TMET27	-0,013	0,646	0,128
HEA	TMET30	-0,166	0,000	-0,107
HEA	TMET32	-0,110	0,000	-0,149
HEA	TMET33	-0,117	0,000	-0,034
HEA	TMET35	-0,003	0,900	0,014
HEA	TMET36	0,021	0,447	0,177
HEA	TMET38	0,099	0,000	0,015
HEA	TMET39	0,016	0,558	0,386
HEA	TMET41	-0,109	0,000	0,034
HEA	TMET42	-0,056	0,039	-0,077
HEA	TMET43	0,079	0,004	1,697
HEA	TMET44	-0,075	0,006	-0,025
HEA	TMET45	0,102	0,000	0,167
HEA	TMET47	-0,043	0,120	0,271
HEA	TMET48	-0,027	0,330	0,387
HEA	TMET50	-0,045	0,101	-0,019
HEA	TMET51	0,059	0,031	0,257
HEA	TMET52	-0,019	0,489	-0,013
HEA	TMET53	0,121	0,000	0,467
HEA	TMET54	-0,035	0,202	0,034
HEA	TMET57	0,058	0,034	0,016
HEA	TMET58	-0,043	0,118	0,081
HEA	TMET62	-0,136	0,000	0,001
HEA	TMET63	0,107	0,000	0,218
HEA	TMET64	0,030	0,273	-0,010
HEA	TMET65	-0,203	0,000	-0,070
HEA	TMET68	-0,074	0,007	-0,836
HEA	TMET69	-0,072	0,008	-0,105
HEA	TMET70	0,040	0,144	0,025
HEA	TMET72	-0,046	0,095	0,226
HEA	TMET73	-0,072	0,008	0,220

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
HEA	TMET74	0,044	0,106	-0,019
HEA	TMET75	-0,023	0,407	0,014
HEA	TMET76	-0,016	0,552	0,222
HEA	TMET77	-0,158	0,000	-0,107
HEA	TMET79	-0,014	0,608	0,002
HEA	TMET80	-0,199	0,000	-0,173
HEA	TMET82	-0,076	0,005	-0,239
HEA	TMET83	-0,057	0,038	0,079
HEA	TMET84	-0,082	0,003	0,046
HEA	TMET85	0,093	0,001	0,267
HEA	TMET86	0,144	0,000	0,485
HEA	TMET87	-0,118	0,000	-0,227
HEA	TMET88	0,074	0,007	0,153
HEA	TMET89	-0,034	0,217	0,704
HEA	TMET90	-0,158	0,000	-0,111
HEA	TMET91	-0,068	0,013	-0,001
HEA	TMET92	-0,150	0,000	-0,052
HEA	TMET93	-0,087	0,001	-0,150
HEA	TMET94	-0,114	0,000	-0,494
HEA	TMET95	-0,149	0,000	-0,006
HEA	TMET96	-0,236	0,000	-0,241
HEA	TMET99	0,257	0,000	0,373
HEA	TMET100	-0,048	0,078	-0,053
HEA	TMET101	0,059	0,030	0,215
HEA	TMET102	-0,052	0,058	0,023
HEA	TMET103	0,227	0,000	0,078
HEA	TMET104	0,207	0,000	-0,141
HEA	TMET105	-0,094	0,001	0,104
HEA	TMET106	0,066	0,015	0,184
HEA	TMET107	0,073	0,008	0,174
HEA	TMET108	-0,103	0,000	-0,592
HEA	TMET109	-0,182	0,000	-0,232
HEA	TMET110	-0,062	0,024	-0,016
HEA	TMET111	-0,045	0,101	0,214
HEA	TMET112	-0,004	0,895	0,007
HEA	TMET114	-0,173	0,000	-0,070
HEA	TMET115	-0,010	0,716	0,166
HEA	TMET116	-0,041	0,132	0,061
HEA	TMET117	-0,101	0,000	0,480
HEA	TMET118	-0,090	0,001	-0,307
HEA	TMET119	0,104	0,000	0,002
HEA	TMET120	-0,124	0,000	0,003
HEA	TMET121	0,028	0,308	-0,022
HEA	TMET122	0,070	0,010	-0,029
HEA	TMET123	0,136	0,000	0,125
HEA	TMET124	0,099	0,000	-0,780
HEA	TMET126	0,060	0,029	0,434
HEA	TMET128	0,053	0,054	-0,204
HEA	TMET129	0,045	0,098	-0,006
HEA	TMET132	-0,029	0,291	0,005
HEA	TMET133	-0,040	0,147	0,279
HEA	TMET135	-0,096	0,000	0,027
HEA	TMET136	0,074	0,006	0,017
HEA	TMET137	-0,113	0,000	-0,100
HEA	TMET138	-0,296	0,000	-0,156
HEA	TMET139	-0,110	0,000	-0,276
HEA	TMET140	-0,216	0,000	-0,971
HEA	TMET141	-0,100	0,000	-0,029
HEA	TMET142	-0,035	0,203	0,134
HEA	TMET143	-0,074	0,007	-0,033
HEA	TMET144	0,117	0,000	0,047
HEA	TMET145	-0,041	0,136	-0,149
HEA	TMET147	-0,018	0,516	0,028
HEA	TMET149	-0,079	0,004	-0,077
HEA	TMET150	-0,102	0,000	-0,422
HEA	TMET154	0,013	0,643	-0,071
HEA	TMET155	-0,072	0,009	-1,165
HEA	TMET156	0,045	0,102	-0,052
HEA	TMET157	0,006	0,825	-0,780
HEA	TMET158	-0,179	0,000	-0,090
HEA	TMET159	0,019	0,479	1,349
HEI	TMET1	0,046	0,096	0,043
HEI	TMET2	0,024	0,385	-0,018
HEI	TMET3	0,021	0,443	-0,018
HEI	TMET4	-0,009	0,742	0,015

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
HEI	TMET5	0,011	0,690	-0,180
HEI	TMET6	0,021	0,437	-0,025
HEI	TMET7	0,030	0,281	0,119
HEI	TMET8	0,009	0,751	-0,031
HEI	TMET9	0,033	0,230	0,038
HEI	TMET10	-0,078	0,004	-0,280
HEI	TMET11	0,115	0,000	0,202
HEI	TMET12	0,006	0,836	-0,009
HEI	TMET13	0,001	0,966	-0,095
HEI	TMET14	0,016	0,566	0,053
HEI	TMET15	0,029	0,286	0,281
HEI	TMET17	-0,003	0,902	-0,016
HEI	TMET23	-0,012	0,664	-0,016
HEI	TMET24	-0,017	0,533	-0,025
HEI	TMET25	-0,016	0,555	0,099
HEI	TMET26	0,026	0,341	0,001
HEI	TMET27	0,027	0,331	0,101
HEI	TMET30	-0,025	0,354	-0,650
HEI	TMET32	-0,016	0,567	0,195
HEI	TMET33	-0,034	0,214	-0,456
HEI	TMET35	-0,050	0,066	-0,563
HEI	TMET36	-0,037	0,170	-0,104
HEI	TMET38	-0,001	0,969	-0,027
HEI	TMET39	0,011	0,691	-0,021
HEI	TMET41	-0,015	0,584	-0,032
HEI	TMET42	-0,013	0,632	-0,064
HEI	TMET43	0,100	0,000	0,713
HEI	TMET44	0,018	0,509	0,068
HEI	TMET45	0,026	0,337	0,047
HEI	TMET47	-0,013	0,638	0,033
HEI	TMET48	0,020	0,475	0,021
HEI	TMET50	0,028	0,302	-0,012
HEI	TMET51	0,031	0,259	-0,022
HEI	TMET52	-0,036	0,185	0,053
HEI	TMET53	0,014	0,611	0,028
HEI	TMET54	-0,018	0,510	0,014
HEI	TMET57	0,035	0,205	0,118
HEI	TMET58	-0,022	0,429	-0,086
HEI	TMET62	-0,017	0,535	-0,265
HEI	TMET63	-0,021	0,439	-0,083
HEI	TMET64	-0,006	0,832	-0,095
HEI	TMET65	0,000	0,995	0,077
HEI	TMET68	-0,011	0,693	-0,045
HEI	TMET69	-0,018	0,522	-0,022
HEI	TMET70	-0,004	0,890	-0,020
HEI	TMET72	-0,026	0,340	-0,037
HEI	TMET73	-0,023	0,408	-0,041
HEI	TMET74	-0,016	0,568	0,062
HEI	TMET75	-0,002	0,929	-0,019
HEI	TMET76	-0,018	0,522	0,000
HEI	TMET77	0,008	0,758	-0,213
HEI	TMET79	-0,082	0,003	-0,265
HEI	TMET80	0,004	0,889	0,117
HEI	TMET82	-0,001	0,982	-0,122
HEI	TMET83	0,013	0,644	0,023
HEI	TMET84	0,047	0,084	0,056
HEI	TMET85	0,020	0,464	0,064
HEI	TMET86	0,034	0,209	0,093
HEI	TMET87	-0,032	0,236	-0,221
HEI	TMET88	0,036	0,194	0,105
HEI	TMET89	0,023	0,408	0,034
HEI	TMET90	0,048	0,076	0,146
HEI	TMET91	-0,073	0,007	-1,115
HEI	TMET92	0,053	0,052	0,137
HEI	TMET93	-0,003	0,904	-0,214
HEI	TMET94	-0,004	0,886	-0,262
HEI	TMET95	0,015	0,589	-0,077
HEI	TMET96	0,050	0,070	-0,003
HEI	TMET99	0,053	0,051	0,088
HEI	TMET100	-0,017	0,523	0,008
HEI	TMET101	0,027	0,316	-0,053
HEI	TMET102	-0,021	0,441	-0,010
HEI	TMET103	0,044	0,105	-0,012
HEI	TMET104	0,048	0,082	0,131
HEI	TMET105	0,006	0,820	-0,431



Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
HEI	TMET106	0,009	0,739	-0,086
HEI	TMET107	0,021	0,448	0,089
HEI	TMET108	-0,038	0,164	0,010
HEI	TMET109	-0,044	0,107	-0,671
HEI	TMET110	-0,030	0,272	-0,094
HEI	TMET111	-0,018	0,522	0,007
HEI	TMET112	0,037	0,179	0,050
HEI	TMET114	0,042	0,122	-0,006
HEI	TMET115	0,013	0,644	0,433
HEI	TMET116	-0,038	0,162	-0,086
HEI	TMET117	0,056	0,041	0,059
HEI	TMET118	-0,095	0,000	-0,426
HEI	TMET119	0,034	0,216	0,029
HEI	TMET120	0,045	0,103	0,337
HEI	TMET121	0,041	0,130	0,085
HEI	TMET122	0,062	0,024	0,511
HEI	TMET123	0,030	0,279	-0,051
HEI	TMET124	0,029	0,286	0,165
HEI	TMET126	0,032	0,242	0,267
HEI	TMET128	0,049	0,071	0,028
HEI	TMET129	0,027	0,330	0,044
HEI	TMET132	0,004	0,888	-0,008
HEI	TMET133	0,079	0,004	0,117
HEI	TMET135	0,083	0,002	0,086
HEI	TMET136	0,039	0,149	-0,028
HEI	TMET137	0,010	0,708	-0,053
HEI	TMET138	-0,112	0,000	-0,420
HEI	TMET139	-0,073	0,008	-0,344
HEI	TMET140	0,111	0,000	2,468
HEI	TMET141	-0,061	0,025	0,010
HEI	TMET142	-0,012	0,663	-0,112
HEI	TMET143	0,001	0,972	-0,017
HEI	TMET144	-0,024	0,372	-0,383
HEI	TMET145	0,002	0,937	-0,005
HEI	TMET147	0,068	0,013	0,213
HEI	TMET149	-0,020	0,466	-0,084
HEI	TMET150	0,020	0,469	0,061
HEI	TMET154	-0,004	0,890	0,029
HEI	TMET155	0,002	0,941	0,080
HEI	TMET156	-0,020	0,468	-0,205
HEI	TMET157	0,029	0,293	0,210
HEI	TMET158	0,014	0,602	-0,015
HEI	TMET159	-0,060	0,029	-0,080
MAT	TMET1	-0,068	0,013	-0,163
MAT	TMET2	-0,021	0,441	0,002
MAT	TMET3	0,111	0,000	0,267
MAT	TMET4	-0,218	0,000	-0,175
MAT	TMET5	0,192	0,000	-0,184
MAT	TMET6	0,258	0,000	0,143
MAT	TMET7	-0,113	0,000	0,006
MAT	TMET8	0,132	0,000	0,169
MAT	TMET9	-0,097	0,000	0,045
MAT	TMET10	-0,072	0,009	-0,362
MAT	TMET11	-0,138	0,000	0,002
MAT	TMET12	0,099	0,000	0,064
MAT	TMET13	0,038	0,165	-0,129
MAT	TMET14	-0,106	0,000	0,028
MAT	TMET15	-0,072	0,008	0,062
MAT	TMET17	-0,072	0,008	0,017
MAT	TMET23	-0,090	0,001	-0,152
MAT	TMET24	-0,039	0,155	-0,050
MAT	TMET25	-0,037	0,181	-0,004
MAT	TMET26	-0,059	0,032	0,317
MAT	TMET27	-0,008	0,763	-0,008
MAT	TMET30	-0,172	0,000	-0,120
MAT	TMET32	-0,145	0,000	-0,410
MAT	TMET33	-0,130	0,000	-0,156
MAT	TMET35	-0,033	0,221	0,008
MAT	TMET36	-0,016	0,559	0,114
MAT	TMET38	0,112	0,000	-0,029
MAT	TMET39	0,016	0,548	0,212
MAT	TMET41	-0,103	0,000	0,047
MAT	TMET42	-0,050	0,065	-0,007
MAT	TMET43	0,095	0,001	1,378
MAT	TMET44	-0,060	0,028	0,001

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
MAT	TMET45	0,103	0,000	0,155
MAT	TMET47	-0,030	0,276	0,334
MAT	TMET48	-0,026	0,335	0,189
MAT	TMET50	-0,027	0,329	0,012
MAT	TMET51	0,062	0,023	0,113
MAT	TMET52	-0,028	0,312	0,089
MAT	TMET53	0,128	0,000	0,225
MAT	TMET54	-0,027	0,317	0,026
MAT	TMET57	0,039	0,154	-0,008
MAT	TMET58	-0,028	0,311	0,188
MAT	TMET62	-0,143	0,000	-0,116
MAT	TMET63	0,105	0,000	0,180
MAT	TMET64	0,042	0,128	0,065
MAT	TMET65	-0,201	0,000	-0,025
MAT	TMET68	-0,068	0,013	-0,606
MAT	TMET69	-0,074	0,006	-0,037
MAT	TMET70	0,039	0,158	0,032
MAT	TMET72	-0,077	0,005	0,087
MAT	TMET73	-0,055	0,044	0,069
MAT	TMET74	0,043	0,114	-0,027
MAT	TMET75	-0,034	0,217	0,011
MAT	TMET76	-0,014	0,608	0,174
MAT	TMET77	-0,159	0,000	-0,049
MAT	TMET79	-0,002	0,956	-0,015
MAT	TMET80	-0,200	0,000	-0,108
MAT	TMET82	-0,078	0,004	-0,201
MAT	TMET83	-0,066	0,016	0,070
MAT	TMET84	-0,070	0,010	0,036
MAT	TMET85	0,100	0,000	0,318
MAT	TMET86	0,150	0,000	0,175
MAT	TMET87	-0,101	0,000	-0,035
MAT	TMET88	0,085	0,002	0,271
MAT	TMET89	-0,049	0,073	0,391
MAT	TMET90	-0,155	0,000	-0,045
MAT	TMET91	-0,083	0,002	-0,275
MAT	TMET92	-0,121	0,000	0,132
MAT	TMET93	-0,070	0,010	-0,039
MAT	TMET94	-0,139	0,000	-0,693
MAT	TMET95	-0,143	0,000	-0,014
MAT	TMET96	-0,248	0,000	-0,331
MAT	TMET99	0,277	0,000	0,387
MAT	TMET100	-0,064	0,019	-0,012
MAT	TMET101	0,071	0,009	0,104
MAT	TMET102	-0,080	0,003	0,017
MAT	TMET103	0,242	0,000	0,129
MAT	TMET104	0,220	0,000	-0,085
MAT	TMET105	-0,089	0,001	0,123
MAT	TMET106	0,079	0,004	0,058
MAT	TMET107	0,051	0,065	0,112
MAT	TMET108	-0,086	0,002	-0,431
MAT	TMET109	-0,175	0,000	-0,168
MAT	TMET110	-0,040	0,142	0,051
MAT	TMET111	-0,024	0,373	0,147
MAT	TMET112	-0,008	0,782	0,018
MAT	TMET114	-0,165	0,000	-0,002
MAT	TMET115	-0,006	0,835	0,085
MAT	TMET116	-0,021	0,439	0,027
MAT	TMET117	-0,106	0,000	0,473
MAT	TMET118	-0,083	0,002	-0,221
MAT	TMET119	0,107	0,000	-0,095
MAT	TMET120	-0,130	0,000	0,141
MAT	TMET121	0,009	0,736	-0,015
MAT	TMET122	0,082	0,003	-0,014
MAT	TMET123	0,152	0,000	0,132
MAT	TMET124	0,108	0,000	-0,139
MAT	TMET126	0,062	0,024	0,427
MAT	TMET128	0,048	0,078	-0,180
MAT	TMET129	0,060	0,029	0,032
MAT	TMET132	-0,037	0,177	-0,011
MAT	TMET133	-0,036	0,189	0,256
MAT	TMET135	-0,065	0,017	0,182
MAT	TMET136	0,078	0,004	-0,002
MAT	TMET137	-0,101	0,000	-0,162
MAT	TMET138	-0,310	0,000	-0,112
MAT	TMET139	-0,117	0,000	-0,239

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
MAT	TMET140	-0,219	0,000	-0,652
MAT	TMET141	-0,145	0,000	-0,006
MAT	TMET142	-0,029	0,290	0,097
MAT	TMET143	-0,073	0,007	-0,031
MAT	TMET144	0,131	0,000	0,024
MAT	TMET145	-0,023	0,393	0,051
MAT	TMET147	-0,021	0,449	0,009
MAT	TMET149	-0,098	0,000	-0,111
MAT	TMET150	-0,105	0,000	-0,425
MAT	TMET154	0,000	0,988	-0,047
MAT	TMET155	-0,091	0,001	-1,225
MAT	TMET156	0,056	0,041	-0,014
MAT	TMET157	0,010	0,723	-0,441
MAT	TMET158	-0,161	0,000	0,002
MAT	TMET159	0,010	0,712	1,402
SHO	TMET1	-0,091	0,001	-0,016
SHO	TMET2	-0,016	0,548	-0,018
SHO	TMET3	0,078	0,004	0,371
SHO	TMET4	-0,204	0,000	-0,214
SHO	TMET5	0,174	0,000	0,024
SHO	TMET6	0,231	0,000	0,244
SHO	TMET7	-0,079	0,004	0,034
SHO	TMET8	0,084	0,002	0,016
SHO	TMET9	-0,100	0,000	0,047
SHO	TMET10	-0,026	0,336	-0,031
SHO	TMET11	-0,133	0,000	0,001
SHO	TMET12	0,075	0,006	0,069
SHO	TMET13	0,048	0,082	-0,028
SHO	TMET14	-0,131	0,000	-0,165
SHO	TMET15	-0,078	0,004	-0,043
SHO	TMET17	-0,067	0,015	0,014
SHO	TMET23	-0,080	0,003	-0,096
SHO	TMET24	0,000	0,995	-0,171
SHO	TMET25	0,007	0,797	-0,122
SHO	TMET26	-0,052	0,057	0,084
SHO	TMET27	-0,017	0,534	0,001
SHO	TMET30	-0,179	0,000	-0,401
SHO	TMET32	-0,067	0,014	-0,397
SHO	TMET33	-0,106	0,000	-0,029
SHO	TMET35	0,032	0,243	0,093
SHO	TMET36	0,051	0,064	0,670
SHO	TMET38	0,094	0,001	0,080
SHO	TMET39	-0,001	0,973	0,145
SHO	TMET41	-0,096	0,000	0,055
SHO	TMET42	-0,044	0,110	0,022
SHO	TMET43	0,055	0,045	1,287
SHO	TMET44	-0,071	0,009	0,007
SHO	TMET45	0,097	0,000	0,032
SHO	TMET47	-0,022	0,420	1,648
SHO	TMET48	-0,005	0,855	0,256
SHO	TMET50	-0,036	0,194	0,012
SHO	TMET51	0,054	0,049	0,049
SHO	TMET52	0,020	0,457	0,011
SHO	TMET53	0,113	0,000	0,232
SHO	TMET54	-0,029	0,288	0,007
SHO	TMET57	0,035	0,200	0,008
SHO	TMET58	-0,020	0,463	-0,003
SHO	TMET62	-0,110	0,000	0,021
SHO	TMET63	0,096	0,000	0,203
SHO	TMET64	0,032	0,235	0,078
SHO	TMET65	-0,171	0,000	-0,100
SHO	TMET68	-0,081	0,003	-0,808
SHO	TMET69	-0,067	0,015	-0,036
SHO	TMET70	0,037	0,179	0,053
SHO	TMET72	-0,030	0,274	0,227
SHO	TMET73	-0,059	0,030	0,025
SHO	TMET74	0,018	0,509	-0,037
SHO	TMET75	-0,023	0,409	0,009
SHO	TMET76	-0,014	0,603	0,159
SHO	TMET77	-0,150	0,000	-0,116
SHO	TMET79	-0,026	0,339	-0,016
SHO	TMET80	-0,173	0,000	-0,210
SHO	TMET82	-0,058	0,033	-0,054
SHO	TMET83	-0,064	0,018	0,031
SHO	TMET84	-0,088	0,001	-0,001

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
SHO	TMET85	0,091	0,001	0,285
SHO	TMET86	0,106	0,000	0,113
SHO	TMET87	-0,095	0,000	-0,066
SHO	TMET88	0,045	0,099	0,011
SHO	TMET89	-0,032	0,241	0,522
SHO	TMET90	-0,154	0,000	-0,104
SHO	TMET91	-0,036	0,186	0,083
SHO	TMET92	-0,142	0,000	-0,044
SHO	TMET93	-0,084	0,002	-0,048
SHO	TMET94	-0,102	0,000	-0,074
SHO	TMET95	-0,137	0,000	0,005
SHO	TMET96	-0,216	0,000	-0,042
SHO	TMET99	0,235	0,000	0,312
SHO	TMET100	-0,028	0,310	-0,016
SHO	TMET101	0,061	0,026	0,099
SHO	TMET102	-0,046	0,089	-0,002
SHO	TMET103	0,212	0,000	0,021
SHO	TMET104	0,180	0,000	-0,090
SHO	TMET105	-0,077	0,005	0,167
SHO	TMET106	0,066	0,015	0,176
SHO	TMET107	0,076	0,006	0,187
SHO	TMET108	-0,102	0,000	-0,282
SHO	TMET109	-0,147	0,000	-0,048
SHO	TMET110	-0,069	0,012	-0,088
SHO	TMET111	-0,056	0,042	0,007
SHO	TMET112	-0,006	0,818	0,044
SHO	TMET114	-0,157	0,000	-0,009
SHO	TMET115	-0,041	0,134	0,052
SHO	TMET116	-0,049	0,074	-0,041
SHO	TMET117	-0,094	0,001	0,073
SHO	TMET118	-0,070	0,010	-0,145
SHO	TMET119	0,072	0,009	-0,010
SHO	TMET120	-0,121	0,000	0,015
SHO	TMET121	0,008	0,767	-0,003
SHO	TMET122	0,057	0,036	-0,014
SHO	TMET123	0,105	0,000	0,028
SHO	TMET124	0,068	0,013	-0,403
SHO	TMET126	0,040	0,142	0,293
SHO	TMET128	0,012	0,673	-0,243
SHO	TMET129	0,025	0,361	-0,042
SHO	TMET132	-0,024	0,371	0,018
SHO	TMET133	-0,057	0,037	0,126
SHO	TMET135	-0,086	0,002	0,138
SHO	TMET136	0,066	0,016	-0,013
SHO	TMET137	-0,098	0,000	-0,011
SHO	TMET138	-0,245	0,000	-0,086
SHO	TMET139	-0,076	0,005	-0,110
SHO	TMET140	-0,212	0,000	-0,888
SHO	TMET141	-0,059	0,031	0,010
SHO	TMET142	-0,028	0,298	0,001
SHO	TMET143	-0,064	0,019	-0,022
SHO	TMET144	0,120	0,000	0,085
SHO	TMET145	-0,023	0,404	0,063
SHO	TMET147	-0,037	0,177	0,021
SHO	TMET149	-0,077	0,005	-0,039
SHO	TMET150	-0,120	0,000	-0,489
SHO	TMET154	0,025	0,367	0,007
SHO	TMET155	-0,071	0,009	-0,922
SHO	TMET156	0,034	0,210	-0,022
SHO	TMET157	0,012	0,663	-0,285
SHO	TMET158	-0,163	0,000	-0,088
SHO	TMET159	0,035	0,195	1,089
TGW	TMET1	0,012	0,660	-0,005
TGW	TMET2	-0,015	0,592	0,036
TGW	TMET3	-0,110	0,000	-0,354
TGW	TMET4	0,021	0,447	0,110
TGW	TMET5	-0,056	0,039	0,035
TGW	TMET6	-0,097	0,000	-0,088
TGW	TMET7	-0,020	0,467	-0,040
TGW	TMET8	-0,063	0,022	-0,022
TGW	TMET9	0,033	0,225	0,085
TGW	TMET10	-0,018	0,504	0,244
TGW	TMET11	0,056	0,040	0,030
TGW	TMET12	-0,053	0,053	-0,007
TGW	TMET13	-0,079	0,004	-0,068

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
TGW	TMET14	0,015	0,591	-0,002
TGW	TMET15	0,028	0,301	0,059
TGW	TMET17	0,017	0,526	0,039
TGW	TMET23	0,032	0,245	0,044
TGW	TMET24	-0,025	0,364	0,050
TGW	TMET25	-0,031	0,258	0,049
TGW	TMET26	0,008	0,770	0,015
TGW	TMET27	-0,014	0,614	0,022
TGW	TMET30	-0,008	0,773	0,008
TGW	TMET32	0,011	0,677	0,110
TGW	TMET33	0,005	0,859	-0,071
TGW	TMET35	-0,067	0,014	-0,068
TGW	TMET36	-0,071	0,009	-0,049
TGW	TMET38	-0,019	0,485	0,076
TGW	TMET39	0,025	0,352	-0,004
TGW	TMET41	0,039	0,149	0,107
TGW	TMET42	-0,031	0,256	-0,039
TGW	TMET43	-0,054	0,046	-0,075
TGW	TMET44	0,035	0,203	0,026
TGW	TMET45	-0,036	0,191	0,019
TGW	TMET47	-0,024	0,378	0,034
TGW	TMET48	-0,024	0,376	-0,008
TGW	TMET50	0,010	0,706	-0,015
TGW	TMET51	-0,050	0,069	-0,067
TGW	TMET52	-0,044	0,109	-0,022
TGW	TMET53	-0,105	0,000	-0,040
TGW	TMET54	0,035	0,201	0,044
TGW	TMET57	-0,043	0,112	-0,006
TGW	TMET58	-0,039	0,153	-0,079
TGW	TMET62	0,011	0,689	0,054
TGW	TMET63	-0,036	0,189	-0,001
TGW	TMET64	-0,044	0,105	0,004
TGW	TMET65	0,017	0,537	-0,003
TGW	TMET68	-0,010	0,717	0,293
TGW	TMET69	-0,008	0,757	-0,013
TGW	TMET70	-0,017	0,529	-0,009
TGW	TMET72	-0,037	0,177	-0,136
TGW	TMET73	0,007	0,799	0,006
TGW	TMET74	-0,105	0,000	-0,214
TGW	TMET75	-0,054	0,048	-0,010
TGW	TMET76	-0,035	0,199	-0,065
TGW	TMET77	0,054	0,047	0,067
TGW	TMET79	-0,055	0,045	-0,015
TGW	TMET80	0,021	0,443	0,021
TGW	TMET82	-0,019	0,497	-0,046
TGW	TMET83	0,081	0,003	0,440
TGW	TMET84	-0,001	0,981	0,025
TGW	TMET85	-0,085	0,002	-0,108
TGW	TMET86	-0,011	0,684	-0,019
TGW	TMET87	-0,018	0,520	-0,019
TGW	TMET88	-0,038	0,164	0,040
TGW	TMET89	-0,017	0,529	-0,035
TGW	TMET90	-0,043	0,119	-0,014
TGW	TMET91	-0,036	0,183	-0,068
TGW	TMET92	0,071	0,009	0,156
TGW	TMET93	0,015	0,589	-0,008
TGW	TMET94	0,001	0,957	-0,005
TGW	TMET95	0,009	0,736	-0,017
TGW	TMET96	0,026	0,350	-0,098
TGW	TMET99	-0,038	0,164	-0,003
TGW	TMET100	-0,047	0,084	-0,004
TGW	TMET101	-0,069	0,012	-0,052
TGW	TMET102	-0,069	0,012	-0,074
TGW	TMET103	-0,082	0,003	-0,047
TGW	TMET104	-0,055	0,045	0,029
TGW	TMET105	0,037	0,177	0,000
TGW	TMET106	-0,044	0,107	-0,029
TGW	TMET107	-0,052	0,055	-0,012
TGW	TMET108	0,036	0,185	0,044
TGW	TMET109	0,069	0,011	0,169
TGW	TMET110	0,029	0,291	0,063
TGW	TMET111	0,043	0,118	0,090
TGW	TMET112	-0,010	0,709	0,011
TGW	TMET114	0,098	0,000	0,059
TGW	TMET115	0,034	0,215	0,026

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
TGW	TMET116	0,009	0,747	-0,004
TGW	TMET117	0,023	0,401	-0,007
TGW	TMET118	-0,021	0,436	-0,015
TGW	TMET119	-0,002	0,952	-0,002
TGW	TMET120	0,065	0,017	0,071
TGW	TMET121	-0,012	0,671	-0,018
TGW	TMET122	-0,046	0,094	-0,017
TGW	TMET123	0,011	0,699	0,068
TGW	TMET124	0,025	0,358	0,174
TGW	TMET126	0,027	0,325	0,042
TGW	TMET128	-0,007	0,791	0,024
TGW	TMET129	-0,023	0,393	0,000
TGW	TMET132	-0,033	0,228	0,001
TGW	TMET133	0,004	0,870	-0,063
TGW	TMET135	0,022	0,427	-0,016
TGW	TMET136	-0,026	0,333	-0,018
TGW	TMET137	0,014	0,599	0,010
TGW	TMET138	0,022	0,429	-0,003
TGW	TMET139	-0,008	0,756	0,045
TGW	TMET140	0,007	0,803	-0,033
TGW	TMET141	-0,031	0,257	0,004
TGW	TMET142	-0,020	0,455	0,025
TGW	TMET143	-0,008	0,765	-0,036
TGW	TMET144	-0,094	0,001	-0,163
TGW	TMET145	-0,023	0,401	-0,078
TGW	TMET147	0,026	0,347	0,001
TGW	TMET149	-0,037	0,179	-0,026
TGW	TMET150	0,008	0,769	0,000
TGW	TMET154	-0,029	0,287	0,016
TGW	TMET155	-0,041	0,130	-0,049
TGW	TMET156	-0,045	0,103	-0,076
TGW	TMET157	-0,026	0,339	0,071
TGW	TMET158	0,036	0,183	-0,015
TGW	TMET159	-0,126	0,000	-1,493
YLD	TMET1	-0,053	0,051	-0,079
YLD	TMET2	-0,018	0,512	-0,009
YLD	TMET3	-0,194	0,000	-3,692
YLD	TMET4	-0,031	0,259	0,610
YLD	TMET5	-0,057	0,038	0,035
YLD	TMET6	-0,057	0,036	-0,030
YLD	TMET7	-0,018	0,513	-0,104
YLD	TMET8	-0,053	0,052	-0,113
YLD	TMET9	0,019	0,496	0,158
YLD	TMET10	0,026	0,340	8,372
YLD	TMET11	-0,041	0,133	-0,012
YLD	TMET12	-0,066	0,016	-0,531
YLD	TMET13	-0,074	0,007	-0,060
YLD	TMET14	0,014	0,622	-0,030
YLD	TMET15	0,009	0,745	0,055
YLD	TMET17	-0,032	0,242	0,063
YLD	TMET23	-0,022	0,418	0,050
YLD	TMET24	-0,091	0,001	-0,020
YLD	TMET25	-0,101	0,000	-0,191
YLD	TMET26	0,028	0,300	0,174
YLD	TMET27	-0,063	0,021	0,035
YLD	TMET30	-0,031	0,251	-0,042
YLD	TMET32	0,048	0,077	0,938
YLD	TMET33	-0,033	0,231	-0,200
YLD	TMET35	-0,081	0,003	-0,010
YLD	TMET36	-0,107	0,000	-2,722
YLD	TMET38	-0,015	0,572	2,317
YLD	TMET39	0,009	0,751	0,201
YLD	TMET41	-0,007	0,801	-0,010
YLD	TMET42	-0,033	0,222	0,048
YLD	TMET43	-0,091	0,001	-0,017
YLD	TMET44	-0,024	0,388	0,042
YLD	TMET45	0,026	0,349	0,087
YLD	TMET47	-0,064	0,019	-0,145
YLD	TMET48	0,057	0,038	0,356
YLD	TMET50	-0,020	0,466	0,014
YLD	TMET51	-0,056	0,041	0,336
YLD	TMET52	0,018	0,500	-0,008
YLD	TMET53	-0,064	0,019	0,025
YLD	TMET54	-0,009	0,756	-0,012
YLD	TMET57	-0,050	0,069	0,131

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>	û <sup>e</sup>
YLD	TMET58	-0,040	0,145	0,185
YLD	TMET62	-0,019	0,491	0,083
YLD	TMET63	-0,024	0,376	0,006
YLD	TMET64	-0,077	0,005	-0,182
YLD	TMET65	0,003	0,908	0,063
YLD	TMET68	-0,074	0,007	0,254
YLD	TMET69	0,022	0,428	0,219
YLD	TMET70	-0,068	0,012	-0,166
YLD	TMET72	-0,030	0,267	-0,111
YLD	TMET73	-0,021	0,447	0,007
YLD	TMET74	-0,148	0,000	-0,878
YLD	TMET75	-0,084	0,002	0,117
YLD	TMET76	-0,010	0,719	0,008
YLD	TMET77	-0,017	0,546	-0,207
YLD	TMET79	-0,057	0,038	0,014
YLD	TMET80	-0,005	0,848	-0,081
YLD	TMET82	-0,015	0,589	0,099
YLD	TMET83	0,045	0,097	1,606
YLD	TMET84	-0,063	0,022	0,011
YLD	TMET85	-0,003	0,904	0,075
YLD	TMET86	-0,025	0,365	-0,047
YLD	TMET87	-0,005	0,863	0,100
YLD	TMET88	-0,074	0,006	0,369
YLD	TMET89	-0,025	0,367	0,027
YLD	TMET90	-0,163	0,000	-0,863
YLD	TMET91	0,009	0,740	0,184
YLD	TMET92	0,029	0,290	-0,140
YLD	TMET93	0,009	0,752	-0,197
YLD	TMET94	-0,021	0,451	0,097
YLD	TMET95	-0,060	0,028	-0,059
YLD	TMET96	0,004	0,885	-0,148
YLD	TMET99	-0,035	0,197	0,009
YLD	TMET100	-0,082	0,003	-0,023
YLD	TMET101	-0,035	0,198	0,228
YLD	TMET102	-0,078	0,005	0,105
YLD	TMET103	-0,052	0,059	-0,149
YLD	TMET104	-0,032	0,239	0,213
YLD	TMET105	0,021	0,435	0,037
YLD	TMET106	-0,074	0,007	-0,670
YLD	TMET107	-0,070	0,011	0,030
YLD	TMET108	0,010	0,719	-0,172
YLD	TMET109	0,020	0,465	0,156
YLD	TMET110	0,001	0,984	0,114
YLD	TMET111	0,005	0,860	0,132
YLD	TMET112	-0,038	0,169	0,066
YLD	TMET114	0,084	0,002	-0,067
YLD	TMET115	0,034	0,219	0,787
YLD	TMET116	-0,010	0,721	-0,136
YLD	TMET117	0,003	0,918	0,142
YLD	TMET118	0,032	0,239	0,010
YLD	TMET119	-0,018	0,511	-0,102
YLD	TMET120	0,041	0,136	-0,042
YLD	TMET121	0,002	0,939	-0,055
YLD	TMET122	-0,043	0,112	-0,067
YLD	TMET123	-0,012	0,648	0,056
YLD	TMET124	-0,006	0,832	-0,051
YLD	TMET126	0,013	0,626	0,068
YLD	TMET128	-0,046	0,091	0,035
YLD	TMET129	0,044	0,105	0,454
YLD	TMET132	-0,015	0,596	-0,044
YLD	TMET133	-0,021	0,451	-0,121
YLD	TMET135	-0,016	0,552	0,019
YLD	TMET136	-0,050	0,067	-0,027
YLD	TMET137	-0,037	0,179	0,004
YLD	TMET138	0,050	0,067	0,109
YLD	TMET139	-0,023	0,392	-0,094
YLD	TMET140	-0,062	0,024	-1,226
YLD	TMET141	-0,064	0,020	-0,011
YLD	TMET142	-0,032	0,245	-0,137
YLD	TMET143	-0,063	0,021	-0,807
YLD	TMET144	-0,058	0,033	-0,053
YLD	TMET145	-0,044	0,106	-0,005
YLD	TMET147	0,024	0,371	0,129
YLD	TMET149	-0,042	0,120	-0,052
YLD	TMET150	-0,011	0,689	-0,014

<b>Merkmal<sup>a</sup></b>	<b>Metabolit<sup>b</sup></b>	<b>r<sup>c</sup></b>	<b>p-Wert<sup>d</sup></b>	<b><math>\hat{u}</math><sup>e</sup></b>
YLD	TMET154	-0,044	0,105	0,105
YLD	TMET155	-0,057	0,038	-0,081
YLD	TMET156	-0,031	0,252	0,062
YLD	TMET157	0,005	0,847	0,048
YLD	TMET158	-0,004	0,893	-0,038
YLD	TMET159	-0,162	0,000	-7,493

<sup>a</sup>Merkmale, siehe Tab. 1, <sup>b</sup>Metaboliten, siehe Tab. A3, <sup>c</sup>Pearson'scher Korrelationskoeffizient, <sup>d</sup>P-Wert des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten, <sup>e</sup>Geschätzter Effekt des Metaboliten im BayesB-Modell.



**Tab. A9.** Pearson'scher Korrelationskoeffizient zwischen Merkmalen (phänotypische Daten von 2017) und Metaboliten der ersten Probennahme (modifiziert nach Gemmer et al. (2020)).

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>
EAR	TMET1	-0,034	0,216
EAR	TMET2	0,101	0,000
EAR	TMET3	0,062	0,025
EAR	TMET4	0,043	0,126
EAR	TMET5	0,099	0,000
EAR	TMET6	0,085	0,002
EAR	TMET7	0,006	0,836
EAR	TMET8	0,013	0,640
EAR	TMET9	0,002	0,930
EAR	TMET10	0,066	0,018
EAR	TMET12	0,085	0,002
EAR	TMET13	0,029	0,294
EAR	TMET14	0,038	0,170
EAR	TMET15	0,022	0,437
EAR	TMET18	0,037	0,181
EAR	TMET20	0,033	0,238
EAR	TMET23	0,059	0,033
EAR	TMET24	-0,003	0,902
EAR	TMET25	-0,002	0,933
EAR	TMET26	0,088	0,002
EAR	TMET27	-0,042	0,128
EAR	TMET30	0,016	0,569
EAR	TMET32	0,080	0,004
EAR	TMET33	0,010	0,709
EAR	TMET34	0,021	0,455
EAR	TMET35	-0,026	0,343
EAR	TMET36	-0,035	0,209
EAR	TMET38	0,021	0,449
EAR	TMET39	-0,068	0,014
EAR	TMET41	0,089	0,001
EAR	TMET43	0,035	0,203
EAR	TMET44	0,044	0,114
EAR	TMET45	0,085	0,002
EAR	TMET46	-0,010	0,731
EAR	TMET48	0,085	0,002
EAR	TMET50	-0,019	0,502
EAR	TMET51	0,014	0,615
EAR	TMET52	0,027	0,329
EAR	TMET53	0,071	0,011
EAR	TMET54	-0,004	0,899
EAR	TMET55	-0,021	0,445
EAR	TMET57	0,035	0,207
EAR	TMET58	0,031	0,265
EAR	TMET62	0,044	0,116
EAR	TMET63	0,052	0,063
EAR	TMET64	0,046	0,096
EAR	TMET65	0,082	0,003
EAR	TMET68	-0,020	0,467
EAR	TMET69	0,072	0,010
EAR	TMET70	0,034	0,222
EAR	TMET72	-0,058	0,036
EAR	TMET74	0,091	0,001
EAR	TMET75	0,073	0,009
EAR	TMET76	0,129	0,000
EAR	TMET77	0,086	0,002
EAR	TMET78	0,195	0,000
EAR	TMET79	0,080	0,004
EAR	TMET80	0,046	0,095
EAR	TMET81	0,045	0,102
EAR	TMET82	0,018	0,513
EAR	TMET83	0,064	0,021
EAR	TMET84	0,043	0,125
EAR	TMET85	0,149	0,000
EAR	TMET86	0,051	0,065
EAR	TMET87	0,034	0,222
EAR	TMET88	0,060	0,031
EAR	TMET90	-0,090	0,001
EAR	TMET91	0,056	0,046
EAR	TMET92	0,087	0,002
EAR	TMET93	0,094	0,001

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>
EAR	TMET94	0,068	0,015
EAR	TMET95	0,039	0,164
EAR	TMET96	0,052	0,061
EAR	TMET98	0,008	0,771
EAR	TMET99	0,110	0,000
EAR	TMET100	-0,007	0,796
EAR	TMET101	0,142	0,000
EAR	TMET102	0,005	0,845
EAR	TMET103	0,134	0,000
EAR	TMET104	0,114	0,000
EAR	TMET105	0,064	0,021
EAR	TMET106	0,118	0,000
EAR	TMET107	0,032	0,245
EAR	TMET108	0,131	0,000
EAR	TMET109	0,101	0,000
EAR	TMET110	0,073	0,009
EAR	TMET111	0,082	0,003
EAR	TMET112	-0,002	0,946
EAR	TMET113	0,040	0,152
EAR	TMET114	0,022	0,424
EAR	TMET115	0,094	0,001
EAR	TMET116	0,083	0,003
EAR	TMET117	0,087	0,002
EAR	TMET118	0,070	0,012
EAR	TMET119	0,181	0,000
EAR	TMET120	0,163	0,000
EAR	TMET121	0,133	0,000
EAR	TMET122	0,185	0,000
EAR	TMET123	0,023	0,406
EAR	TMET124	0,011	0,686
EAR	TMET126	0,039	0,161
EAR	TMET127	0,076	0,006
EAR	TMET128	0,151	0,000
EAR	TMET129	0,065	0,019
EAR	TMET130	0,102	0,000
EAR	TMET132	0,051	0,069
EAR	TMET133	0,069	0,013
EAR	TMET135	0,012	0,657
EAR	TMET136	0,028	0,316
EAR	TMET137	0,071	0,010
EAR	TMET139	0,040	0,154
EAR	TMET140	0,054	0,052
EAR	TMET141	-0,044	0,110
EAR	TMET142	0,127	0,000
EAR	TMET143	-0,005	0,868
EAR	TMET144	0,088	0,002
EAR	TMET145	0,027	0,323
EAR	TMET146	0,063	0,024
EAR	TMET147	0,109	0,000
EAR	TMET150	0,057	0,041
EAR	TMET151	0,021	0,448
EAR	TMET152	0,062	0,025
EAR	TMET153	-0,079	0,005
EAR	TMET154	0,010	0,712
EAR	TMET155	0,078	0,005
EAR	TMET156	0,061	0,027
EAR	TMET157	0,056	0,043
EAR	TMET158	0,077	0,006
GNE	TMET1	-0,008	0,765
GNE	TMET2	-0,080	0,004
GNE	TMET3	-0,037	0,189
GNE	TMET4	-0,062	0,025
GNE	TMET5	-0,076	0,006
GNE	TMET6	-0,062	0,026
GNE	TMET7	-0,038	0,173
GNE	TMET8	-0,090	0,001
GNE	TMET9	-0,039	0,165
GNE	TMET10	-0,034	0,227
GNE	TMET12	-0,088	0,001
GNE	TMET13	-0,070	0,012
GNE	TMET14	0,014	0,625
GNE	TMET15	-0,039	0,161
GNE	TMET18	-0,012	0,656
GNE	TMET20	-0,017	0,537
GNE	TMET23	-0,087	0,002

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>
GNE	TMET24	-0,045	0,105
GNE	TMET25	-0,037	0,187
GNE	TMET26	-0,084	0,003
GNE	TMET27	-0,015	0,593
GNE	TMET30	-0,019	0,494
GNE	TMET32	-0,058	0,036
GNE	TMET33	-0,018	0,522
GNE	TMET34	-0,018	0,518
GNE	TMET35	-0,036	0,197
GNE	TMET36	-0,003	0,927
GNE	TMET38	-0,054	0,052
GNE	TMET39	-0,050	0,071
GNE	TMET41	-0,054	0,053
GNE	TMET43	-0,043	0,121
GNE	TMET44	0,026	0,354
GNE	TMET45	-0,093	0,001
GNE	TMET46	-0,014	0,624
GNE	TMET48	-0,085	0,002
GNE	TMET50	-0,043	0,118
GNE	TMET51	0,007	0,797
GNE	TMET52	0,019	0,503
GNE	TMET53	-0,096	0,001
GNE	TMET54	0,021	0,455
GNE	TMET55	-0,082	0,003
GNE	TMET57	-0,065	0,019
GNE	TMET58	-0,008	0,764
GNE	TMET62	-0,082	0,003
GNE	TMET63	-0,059	0,034
GNE	TMET64	-0,149	0,000
GNE	TMET65	-0,047	0,092
GNE	TMET68	0,061	0,027
GNE	TMET69	0,003	0,916
GNE	TMET70	-0,110	0,000
GNE	TMET72	-0,048	0,084
GNE	TMET74	-0,018	0,529
GNE	TMET75	-0,062	0,026
GNE	TMET76	-0,103	0,000
GNE	TMET77	-0,100	0,000
GNE	TMET78	-0,122	0,000
GNE	TMET79	-0,010	0,721
GNE	TMET80	-0,057	0,039
GNE	TMET81	-0,024	0,391
GNE	TMET82	-0,042	0,126
GNE	TMET83	-0,093	0,001
GNE	TMET84	-0,102	0,000
GNE	TMET85	-0,164	0,000
GNE	TMET86	-0,056	0,043
GNE	TMET87	-0,064	0,021
GNE	TMET88	-0,115	0,000
GNE	TMET90	-0,047	0,092
GNE	TMET91	-0,096	0,001
GNE	TMET92	-0,116	0,000
GNE	TMET93	-0,022	0,439
GNE	TMET94	-0,071	0,011
GNE	TMET95	-0,133	0,000
GNE	TMET96	-0,111	0,000
GNE	TMET98	-0,004	0,886
GNE	TMET99	-0,151	0,000
GNE	TMET100	-0,009	0,734
GNE	TMET101	-0,088	0,001
GNE	TMET102	0,008	0,776
GNE	TMET103	-0,065	0,020
GNE	TMET104	-0,080	0,004
GNE	TMET105	-0,114	0,000
GNE	TMET106	-0,070	0,012
GNE	TMET107	-0,087	0,002
GNE	TMET108	-0,028	0,319
GNE	TMET109	-0,041	0,143
GNE	TMET110	0,000	0,997
GNE	TMET111	-0,044	0,113
GNE	TMET112	0,008	0,785
GNE	TMET113	-0,004	0,893
GNE	TMET114	-0,092	0,001
GNE	TMET115	-0,012	0,655
GNE	TMET116	-0,004	0,896

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>
GNE	TMET117	-0,146	0,000
GNE	TMET118	-0,104	0,000
GNE	TMET119	-0,113	0,000
GNE	TMET120	-0,058	0,037
GNE	TMET121	-0,098	0,000
GNE	TMET122	-0,079	0,005
GNE	TMET123	-0,018	0,528
GNE	TMET124	-0,053	0,056
GNE	TMET126	0,055	0,050
GNE	TMET127	-0,020	0,482
GNE	TMET128	-0,114	0,000
GNE	TMET129	-0,057	0,040
GNE	TMET130	-0,105	0,000
GNE	TMET132	-0,016	0,562
GNE	TMET133	-0,103	0,000
GNE	TMET135	-0,093	0,001
GNE	TMET136	-0,080	0,004
GNE	TMET137	-0,120	0,000
GNE	TMET139	-0,065	0,019
GNE	TMET140	-0,096	0,001
GNE	TMET141	0,011	0,680
GNE	TMET142	-0,074	0,007
GNE	TMET143	-0,048	0,084
GNE	TMET144	-0,037	0,183
GNE	TMET145	0,022	0,439
GNE	TMET146	-0,062	0,025
GNE	TMET147	-0,010	0,732
GNE	TMET150	-0,100	0,000
GNE	TMET151	0,005	0,849
GNE	TMET152	0,004	0,899
GNE	TMET153	0,037	0,188
GNE	TMET154	-0,073	0,009
GNE	TMET155	-0,001	0,970
GNE	TMET156	-0,114	0,000
GNE	TMET157	-0,098	0,000
GNE	TMET158	-0,087	0,002
HEA	TMET1	0,065	0,019
HEA	TMET2	-0,199	0,000
HEA	TMET3	-0,031	0,261
HEA	TMET4	-0,121	0,000
HEA	TMET5	-0,179	0,000
HEA	TMET6	-0,183	0,000
HEA	TMET7	-0,045	0,105
HEA	TMET8	-0,106	0,000
HEA	TMET9	-0,006	0,826
HEA	TMET10	-0,098	0,000
HEA	TMET12	-0,216	0,000
HEA	TMET13	-0,166	0,000
HEA	TMET14	-0,071	0,010
HEA	TMET15	-0,023	0,409
HEA	TMET18	-0,100	0,000
HEA	TMET20	0,005	0,857
HEA	TMET23	-0,139	0,000
HEA	TMET24	-0,121	0,000
HEA	TMET25	-0,114	0,000
HEA	TMET26	-0,077	0,006
HEA	TMET27	0,056	0,043
HEA	TMET30	-0,114	0,000
HEA	TMET32	-0,213	0,000
HEA	TMET33	-0,066	0,017
HEA	TMET34	-0,094	0,001
HEA	TMET35	-0,017	0,530
HEA	TMET36	-0,042	0,132
HEA	TMET38	-0,134	0,000
HEA	TMET39	0,050	0,071
HEA	TMET41	-0,034	0,226
HEA	TMET43	-0,037	0,178
HEA	TMET44	0,107	0,000
HEA	TMET45	-0,147	0,000
HEA	TMET46	0,018	0,515
HEA	TMET48	-0,092	0,001
HEA	TMET50	-0,033	0,229
HEA	TMET51	0,010	0,733
HEA	TMET52	-0,056	0,042
HEA	TMET53	-0,166	0,000

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>
HEA	TMET54	0,042	0,134
HEA	TMET55	-0,035	0,210
HEA	TMET57	-0,173	0,000
HEA	TMET58	-0,009	0,743
HEA	TMET62	-0,065	0,020
HEA	TMET63	-0,161	0,000
HEA	TMET64	-0,229	0,000
HEA	TMET65	-0,083	0,003
HEA	TMET68	0,081	0,004
HEA	TMET69	-0,093	0,001
HEA	TMET70	-0,085	0,002
HEA	TMET72	0,011	0,680
HEA	TMET74	-0,095	0,001
HEA	TMET75	-0,159	0,000
HEA	TMET76	-0,208	0,000
HEA	TMET77	-0,187	0,000
HEA	TMET78	-0,318	0,000
HEA	TMET79	-0,079	0,005
HEA	TMET80	-0,058	0,037
HEA	TMET81	-0,025	0,378
HEA	TMET82	-0,039	0,166
HEA	TMET83	-0,252	0,000
HEA	TMET84	-0,183	0,000
HEA	TMET85	-0,305	0,000
HEA	TMET86	-0,035	0,213
HEA	TMET87	-0,043	0,125
HEA	TMET88	-0,240	0,000
HEA	TMET90	0,090	0,001
HEA	TMET91	-0,103	0,000
HEA	TMET92	-0,263	0,000
HEA	TMET93	-0,170	0,000
HEA	TMET94	-0,132	0,000
HEA	TMET95	-0,086	0,002
HEA	TMET96	-0,193	0,000
HEA	TMET98	-0,107	0,000
HEA	TMET99	-0,264	0,000
HEA	TMET100	-0,131	0,000
HEA	TMET101	-0,339	0,000
HEA	TMET102	-0,084	0,002
HEA	TMET103	-0,233	0,000
HEA	TMET104	-0,237	0,000
HEA	TMET105	-0,245	0,000
HEA	TMET106	-0,217	0,000
HEA	TMET107	-0,166	0,000
HEA	TMET108	-0,225	0,000
HEA	TMET109	-0,215	0,000
HEA	TMET110	-0,128	0,000
HEA	TMET111	-0,176	0,000
HEA	TMET112	0,003	0,919
HEA	TMET113	-0,027	0,340
HEA	TMET114	-0,122	0,000
HEA	TMET115	-0,125	0,000
HEA	TMET116	-0,152	0,000
HEA	TMET117	-0,279	0,000
HEA	TMET118	-0,175	0,000
HEA	TMET119	-0,309	0,000
HEA	TMET120	-0,232	0,000
HEA	TMET121	-0,309	0,000
HEA	TMET122	-0,306	0,000
HEA	TMET123	0,007	0,812
HEA	TMET124	-0,024	0,389
HEA	TMET126	-0,002	0,930
HEA	TMET127	-0,176	0,000
HEA	TMET128	-0,349	0,000
HEA	TMET129	-0,220	0,000
HEA	TMET130	-0,286	0,000
HEA	TMET132	-0,093	0,001
HEA	TMET133	-0,209	0,000
HEA	TMET135	-0,090	0,001
HEA	TMET136	-0,096	0,001
HEA	TMET137	-0,154	0,000
HEA	TMET139	-0,175	0,000
HEA	TMET140	-0,262	0,000
HEA	TMET141	-0,062	0,026
HEA	TMET142	-0,307	0,000

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>
HEA	TMET143	-0,039	0,165
HEA	TMET144	-0,164	0,000
HEA	TMET145	-0,097	0,000
HEA	TMET146	-0,155	0,000
HEA	TMET147	-0,163	0,000
HEA	TMET150	-0,211	0,000
HEA	TMET151	-0,080	0,004
HEA	TMET152	-0,026	0,348
HEA	TMET153	0,086	0,002
HEA	TMET154	-0,110	0,000
HEA	TMET155	-0,218	0,000
HEA	TMET156	-0,179	0,000
HEA	TMET157	-0,055	0,046
HEA	TMET158	-0,183	0,000
HEI	TMET1	0,134	0,000
HEI	TMET2	-0,086	0,002
HEI	TMET3	0,040	0,145
HEI	TMET4	-0,037	0,183
HEI	TMET5	-0,150	0,000
HEI	TMET6	-0,134	0,000
HEI	TMET7	-0,003	0,901
HEI	TMET8	-0,059	0,034
HEI	TMET9	0,009	0,734
HEI	TMET10	-0,014	0,620
HEI	TMET12	-0,199	0,000
HEI	TMET13	-0,070	0,012
HEI	TMET14	-0,031	0,261
HEI	TMET15	-0,037	0,179
HEI	TMET18	-0,069	0,014
HEI	TMET20	-0,018	0,513
HEI	TMET23	-0,031	0,258
HEI	TMET24	-0,039	0,159
HEI	TMET25	-0,045	0,108
HEI	TMET26	-0,085	0,002
HEI	TMET27	0,018	0,511
HEI	TMET30	-0,069	0,013
HEI	TMET32	0,038	0,166
HEI	TMET33	-0,093	0,001
HEI	TMET34	0,049	0,076
HEI	TMET35	0,049	0,078
HEI	TMET36	0,126	0,000
HEI	TMET38	-0,090	0,001
HEI	TMET39	0,023	0,416
HEI	TMET41	-0,033	0,242
HEI	TMET43	0,004	0,885
HEI	TMET44	-0,047	0,090
HEI	TMET45	-0,122	0,000
HEI	TMET46	0,022	0,425
HEI	TMET48	-0,088	0,002
HEI	TMET50	-0,025	0,371
HEI	TMET51	0,075	0,007
HEI	TMET52	-0,027	0,337
HEI	TMET53	-0,091	0,001
HEI	TMET54	-0,004	0,880
HEI	TMET55	-0,020	0,470
HEI	TMET57	-0,069	0,013
HEI	TMET58	0,005	0,860
HEI	TMET62	-0,047	0,088
HEI	TMET63	-0,091	0,001
HEI	TMET64	-0,096	0,001
HEI	TMET65	-0,054	0,050
HEI	TMET68	0,010	0,707
HEI	TMET69	-0,077	0,006
HEI	TMET70	0,011	0,689
HEI	TMET72	0,002	0,950
HEI	TMET74	0,018	0,517
HEI	TMET75	-0,086	0,002
HEI	TMET76	-0,065	0,019
HEI	TMET77	-0,128	0,000
HEI	TMET78	-0,193	0,000
HEI	TMET79	-0,009	0,741
HEI	TMET80	-0,062	0,026
HEI	TMET81	-0,016	0,555
HEI	TMET82	-0,027	0,336
HEI	TMET83	-0,185	0,000

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>
HEI	TMET84	-0,054	0,053
HEI	TMET85	-0,178	0,000
HEI	TMET86	-0,084	0,002
HEI	TMET87	-0,093	0,001
HEI	TMET88	-0,074	0,008
HEI	TMET90	-0,034	0,227
HEI	TMET91	-0,101	0,000
HEI	TMET92	-0,199	0,000
HEI	TMET93	-0,074	0,008
HEI	TMET94	-0,098	0,000
HEI	TMET95	-0,082	0,003
HEI	TMET96	-0,153	0,000
HEI	TMET98	0,033	0,240
HEI	TMET99	-0,221	0,000
HEI	TMET100	0,051	0,065
HEI	TMET101	-0,132	0,000
HEI	TMET102	0,052	0,063
HEI	TMET103	-0,141	0,000
HEI	TMET104	-0,135	0,000
HEI	TMET105	-0,132	0,000
HEI	TMET106	-0,121	0,000
HEI	TMET107	-0,056	0,042
HEI	TMET108	-0,117	0,000
HEI	TMET109	-0,111	0,000
HEI	TMET110	-0,049	0,077
HEI	TMET111	-0,077	0,005
HEI	TMET112	0,020	0,473
HEI	TMET113	-0,055	0,046
HEI	TMET114	-0,086	0,002
HEI	TMET115	-0,088	0,002
HEI	TMET116	-0,053	0,056
HEI	TMET117	-0,112	0,000
HEI	TMET118	-0,038	0,167
HEI	TMET119	-0,148	0,000
HEI	TMET120	-0,099	0,000
HEI	TMET121	-0,168	0,000
HEI	TMET122	-0,154	0,000
HEI	TMET123	-0,076	0,006
HEI	TMET124	-0,078	0,005
HEI	TMET126	0,122	0,000
HEI	TMET127	-0,007	0,806
HEI	TMET128	-0,103	0,000
HEI	TMET129	-0,016	0,570
HEI	TMET130	-0,137	0,000
HEI	TMET132	-0,033	0,238
HEI	TMET133	-0,101	0,000
HEI	TMET135	-0,045	0,105
HEI	TMET136	-0,045	0,108
HEI	TMET137	-0,115	0,000
HEI	TMET139	-0,059	0,033
HEI	TMET140	-0,105	0,000
HEI	TMET141	0,066	0,018
HEI	TMET142	-0,157	0,000
HEI	TMET143	0,010	0,729
HEI	TMET144	-0,112	0,000
HEI	TMET145	-0,054	0,050
HEI	TMET146	-0,058	0,036
HEI	TMET147	-0,088	0,001
HEI	TMET150	-0,104	0,000
HEI	TMET151	-0,001	0,966
HEI	TMET152	-0,006	0,841
HEI	TMET153	0,050	0,071
HEI	TMET154	-0,019	0,485
HEI	TMET155	0,040	0,152
HEI	TMET156	-0,097	0,000
HEI	TMET157	-0,043	0,122
HEI	TMET158	-0,066	0,018
MAT	TMET1	0,043	0,118
MAT	TMET2	-0,168	0,000
MAT	TMET3	-0,047	0,092
MAT	TMET4	-0,083	0,003
MAT	TMET5	-0,161	0,000
MAT	TMET6	-0,163	0,000
MAT	TMET7	-0,058	0,036
MAT	TMET8	-0,066	0,017

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>
MAT	TMET9	0,003	0,906
MAT	TMET10	-0,124	0,000
MAT	TMET12	-0,165	0,000
MAT	TMET13	-0,104	0,000
MAT	TMET14	-0,047	0,090
MAT	TMET15	-0,056	0,044
MAT	TMET18	-0,065	0,019
MAT	TMET20	-0,026	0,358
MAT	TMET23	-0,137	0,000
MAT	TMET24	-0,058	0,036
MAT	TMET25	-0,062	0,025
MAT	TMET26	-0,078	0,005
MAT	TMET27	0,037	0,178
MAT	TMET30	-0,079	0,004
MAT	TMET32	-0,135	0,000
MAT	TMET33	-0,003	0,912
MAT	TMET34	-0,072	0,009
MAT	TMET35	0,011	0,693
MAT	TMET36	0,009	0,750
MAT	TMET38	-0,101	0,000
MAT	TMET39	0,069	0,012
MAT	TMET41	-0,073	0,009
MAT	TMET43	-0,056	0,044
MAT	TMET44	-0,015	0,580
MAT	TMET45	-0,138	0,000
MAT	TMET46	0,024	0,382
MAT	TMET48	-0,099	0,000
MAT	TMET50	-0,010	0,709
MAT	TMET51	-0,042	0,129
MAT	TMET52	-0,028	0,313
MAT	TMET53	-0,122	0,000
MAT	TMET54	0,057	0,042
MAT	TMET55	-0,010	0,729
MAT	TMET57	-0,099	0,000
MAT	TMET58	-0,026	0,359
MAT	TMET62	-0,046	0,096
MAT	TMET63	-0,139	0,000
MAT	TMET64	-0,124	0,000
MAT	TMET65	-0,104	0,000
MAT	TMET68	0,043	0,118
MAT	TMET69	-0,105	0,000
MAT	TMET70	-0,076	0,006
MAT	TMET72	0,068	0,015
MAT	TMET74	-0,133	0,000
MAT	TMET75	-0,116	0,000
MAT	TMET76	-0,200	0,000
MAT	TMET77	-0,147	0,000
MAT	TMET78	-0,287	0,000
MAT	TMET79	-0,121	0,000
MAT	TMET80	-0,054	0,052
MAT	TMET81	-0,048	0,085
MAT	TMET82	-0,016	0,572
MAT	TMET83	-0,154	0,000
MAT	TMET84	-0,116	0,000
MAT	TMET85	-0,250	0,000
MAT	TMET86	-0,023	0,411
MAT	TMET87	-0,041	0,143
MAT	TMET88	-0,148	0,000
MAT	TMET90	0,084	0,002
MAT	TMET91	-0,126	0,000
MAT	TMET92	-0,189	0,000
MAT	TMET93	-0,164	0,000
MAT	TMET94	-0,125	0,000
MAT	TMET95	-0,073	0,008
MAT	TMET96	-0,121	0,000
MAT	TMET98	-0,064	0,021
MAT	TMET99	-0,183	0,000
MAT	TMET100	-0,079	0,004
MAT	TMET101	-0,275	0,000
MAT	TMET102	-0,063	0,024
MAT	TMET103	-0,214	0,000
MAT	TMET104	-0,188	0,000
MAT	TMET105	-0,149	0,000
MAT	TMET106	-0,175	0,000
MAT	TMET107	-0,082	0,003



<b>Merkmal<sup>a</sup></b>	<b>Metabolit<sup>b</sup></b>	<b>r<sup>c</sup></b>	<b>p-Wert<sup>d</sup></b>
MAT	TMET108	-0,136	0,000
MAT	TMET109	-0,129	0,000
MAT	TMET110	-0,074	0,008
MAT	TMET111	-0,153	0,000
MAT	TMET112	-0,036	0,200
MAT	TMET113	-0,036	0,190
MAT	TMET114	-0,051	0,065
MAT	TMET115	-0,073	0,009
MAT	TMET116	-0,084	0,002
MAT	TMET117	-0,202	0,000
MAT	TMET118	-0,139	0,000
MAT	TMET119	-0,292	0,000
MAT	TMET120	-0,233	0,000
MAT	TMET121	-0,248	0,000
MAT	TMET122	-0,276	0,000
MAT	TMET123	0,024	0,388
MAT	TMET124	0,012	0,662
MAT	TMET126	-0,010	0,722
MAT	TMET127	-0,156	0,000
MAT	TMET128	-0,285	0,000
MAT	TMET129	-0,157	0,000
MAT	TMET130	-0,202	0,000
MAT	TMET132	-0,039	0,160
MAT	TMET133	-0,156	0,000
MAT	TMET135	-0,060	0,031
MAT	TMET136	-0,068	0,014
MAT	TMET137	-0,102	0,000
MAT	TMET139	-0,132	0,000
MAT	TMET140	-0,179	0,000
MAT	TMET141	-0,025	0,369
MAT	TMET142	-0,235	0,000
MAT	TMET143	-0,031	0,259
MAT	TMET144	-0,109	0,000
MAT	TMET145	-0,055	0,047
MAT	TMET146	-0,136	0,000
MAT	TMET147	-0,121	0,000
MAT	TMET150	-0,116	0,000
MAT	TMET151	-0,021	0,449
MAT	TMET152	-0,036	0,196
MAT	TMET153	0,097	0,000
MAT	TMET154	-0,054	0,051
MAT	TMET155	-0,141	0,000
MAT	TMET156	-0,150	0,000
MAT	TMET157	-0,069	0,013
MAT	TMET158	-0,160	0,000
SHO	TMET1	0,011	0,699
SHO	TMET2	-0,184	0,000
SHO	TMET3	-0,033	0,239
SHO	TMET4	-0,116	0,000
SHO	TMET5	-0,144	0,000
SHO	TMET6	-0,167	0,000
SHO	TMET7	-0,035	0,209
SHO	TMET8	-0,090	0,001
SHO	TMET9	-0,020	0,472
SHO	TMET10	-0,091	0,001
SHO	TMET12	-0,199	0,000
SHO	TMET13	-0,154	0,000
SHO	TMET14	-0,107	0,000
SHO	TMET15	-0,018	0,515
SHO	TMET18	-0,100	0,000
SHO	TMET20	0,005	0,856
SHO	TMET23	-0,128	0,000
SHO	TMET24	-0,155	0,000
SHO	TMET25	-0,148	0,000
SHO	TMET26	-0,065	0,020
SHO	TMET27	0,040	0,151
SHO	TMET30	-0,124	0,000
SHO	TMET32	-0,224	0,000
SHO	TMET33	-0,084	0,002
SHO	TMET34	-0,103	0,000
SHO	TMET35	-0,043	0,118
SHO	TMET36	-0,090	0,001
SHO	TMET38	-0,118	0,000
SHO	TMET39	0,032	0,246
SHO	TMET41	-0,016	0,564

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>
SHO	TMET43	0,007	0,809
SHO	TMET44	0,138	0,000
SHO	TMET45	-0,095	0,001
SHO	TMET46	0,031	0,263
SHO	TMET48	-0,055	0,046
SHO	TMET50	-0,057	0,041
SHO	TMET51	0,007	0,802
SHO	TMET52	-0,075	0,007
SHO	TMET53	-0,181	0,000
SHO	TMET54	0,048	0,082
SHO	TMET55	-0,026	0,350
SHO	TMET57	-0,190	0,000
SHO	TMET58	-0,003	0,926
SHO	TMET62	-0,056	0,043
SHO	TMET63	-0,137	0,000
SHO	TMET64	-0,185	0,000
SHO	TMET65	-0,094	0,001
SHO	TMET68	0,067	0,016
SHO	TMET69	-0,097	0,000
SHO	TMET70	-0,073	0,008
SHO	TMET72	-0,005	0,848
SHO	TMET74	-0,100	0,000
SHO	TMET75	-0,169	0,000
SHO	TMET76	-0,195	0,000
SHO	TMET77	-0,181	0,000
SHO	TMET78	-0,262	0,000
SHO	TMET79	-0,076	0,006
SHO	TMET80	-0,063	0,024
SHO	TMET81	-0,045	0,107
SHO	TMET82	-0,029	0,294
SHO	TMET83	-0,260	0,000
SHO	TMET84	-0,181	0,000
SHO	TMET85	-0,246	0,000
SHO	TMET86	-0,030	0,278
SHO	TMET87	-0,035	0,211
SHO	TMET88	-0,215	0,000
SHO	TMET90	0,084	0,002
SHO	TMET91	-0,087	0,002
SHO	TMET92	-0,247	0,000
SHO	TMET93	-0,162	0,000
SHO	TMET94	-0,120	0,000
SHO	TMET95	-0,073	0,008
SHO	TMET96	-0,169	0,000
SHO	TMET98	-0,148	0,000
SHO	TMET99	-0,206	0,000
SHO	TMET100	-0,168	0,000
SHO	TMET101	-0,310	0,000
SHO	TMET102	-0,122	0,000
SHO	TMET103	-0,202	0,000
SHO	TMET104	-0,214	0,000
SHO	TMET105	-0,245	0,000
SHO	TMET106	-0,189	0,000
SHO	TMET107	-0,192	0,000
SHO	TMET108	-0,192	0,000
SHO	TMET109	-0,186	0,000
SHO	TMET110	-0,118	0,000
SHO	TMET111	-0,151	0,000
SHO	TMET112	0,017	0,541
SHO	TMET113	-0,026	0,345
SHO	TMET114	-0,137	0,000
SHO	TMET115	-0,124	0,000
SHO	TMET116	-0,134	0,000
SHO	TMET117	-0,239	0,000
SHO	TMET118	-0,161	0,000
SHO	TMET119	-0,264	0,000
SHO	TMET120	-0,216	0,000
SHO	TMET121	-0,267	0,000
SHO	TMET122	-0,266	0,000
SHO	TMET123	0,005	0,848
SHO	TMET124	-0,016	0,558
SHO	TMET126	-0,012	0,657
SHO	TMET127	-0,155	0,000
SHO	TMET128	-0,346	0,000
SHO	TMET129	-0,254	0,000
SHO	TMET130	-0,299	0,000

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>
SHO	TMET132	-0,084	0,002
SHO	TMET133	-0,207	0,000
SHO	TMET135	-0,069	0,014
SHO	TMET136	-0,106	0,000
SHO	TMET137	-0,129	0,000
SHO	TMET139	-0,175	0,000
SHO	TMET140	-0,280	0,000
SHO	TMET141	-0,113	0,000
SHO	TMET142	-0,299	0,000
SHO	TMET143	-0,028	0,311
SHO	TMET144	-0,145	0,000
SHO	TMET145	-0,092	0,001
SHO	TMET146	-0,118	0,000
SHO	TMET147	-0,139	0,000
SHO	TMET150	-0,218	0,000
SHO	TMET151	-0,077	0,005
SHO	TMET152	-0,032	0,249
SHO	TMET153	0,075	0,007
SHO	TMET154	-0,137	0,000
SHO	TMET155	-0,218	0,000
SHO	TMET156	-0,124	0,000
SHO	TMET157	-0,059	0,034
SHO	TMET158	-0,191	0,000
TGW	TMET1	-0,014	0,607
TGW	TMET2	0,030	0,274
TGW	TMET3	-0,037	0,178
TGW	TMET4	0,021	0,440
TGW	TMET5	0,034	0,224
TGW	TMET6	0,025	0,365
TGW	TMET7	0,000	0,990
TGW	TMET8	-0,045	0,107
TGW	TMET9	-0,017	0,543
TGW	TMET10	0,003	0,916
TGW	TMET12	0,056	0,045
TGW	TMET13	-0,016	0,577
TGW	TMET14	0,038	0,175
TGW	TMET15	0,016	0,573
TGW	TMET18	0,077	0,005
TGW	TMET20	-0,015	0,586
TGW	TMET23	0,002	0,940
TGW	TMET24	0,091	0,001
TGW	TMET25	0,095	0,001
TGW	TMET26	-0,027	0,333
TGW	TMET27	-0,057	0,041
TGW	TMET30	-0,002	0,957
TGW	TMET32	0,040	0,148
TGW	TMET33	0,040	0,152
TGW	TMET34	0,006	0,833
TGW	TMET35	0,041	0,136
TGW	TMET36	0,044	0,110
TGW	TMET38	0,031	0,272
TGW	TMET39	-0,022	0,433
TGW	TMET41	-0,057	0,039
TGW	TMET43	-0,039	0,157
TGW	TMET44	-0,020	0,472
TGW	TMET45	-0,035	0,203
TGW	TMET46	-0,026	0,348
TGW	TMET48	-0,076	0,006
TGW	TMET50	0,008	0,765
TGW	TMET51	-0,012	0,672
TGW	TMET52	0,057	0,039
TGW	TMET53	0,008	0,786
TGW	TMET54	0,016	0,562
TGW	TMET55	-0,042	0,127
TGW	TMET57	0,048	0,082
TGW	TMET58	-0,012	0,673
TGW	TMET62	-0,004	0,888
TGW	TMET63	-0,037	0,180
TGW	TMET64	-0,036	0,190
TGW	TMET65	0,017	0,546
TGW	TMET68	-0,001	0,959
TGW	TMET69	0,008	0,765
TGW	TMET70	-0,019	0,490
TGW	TMET72	-0,037	0,187
TGW	TMET74	0,004	0,878

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>
TGW	TMET75	0,075	0,007
TGW	TMET76	0,062	0,025
TGW	TMET77	0,040	0,152
TGW	TMET78	0,030	0,277
TGW	TMET79	-0,006	0,824
TGW	TMET80	0,014	0,613
TGW	TMET81	-0,024	0,391
TGW	TMET82	0,012	0,670
TGW	TMET83	0,060	0,032
TGW	TMET84	0,002	0,931
TGW	TMET85	0,038	0,170
TGW	TMET86	-0,027	0,325
TGW	TMET87	-0,012	0,655
TGW	TMET88	0,003	0,921
TGW	TMET90	-0,001	0,961
TGW	TMET91	-0,007	0,795
TGW	TMET92	0,043	0,125
TGW	TMET93	0,025	0,359
TGW	TMET94	-0,001	0,958
TGW	TMET95	-0,017	0,542
TGW	TMET96	-0,019	0,494
TGW	TMET98	0,061	0,029
TGW	TMET99	0,010	0,732
TGW	TMET100	0,043	0,123
TGW	TMET101	0,047	0,093
TGW	TMET102	0,067	0,016
TGW	TMET103	0,044	0,114
TGW	TMET104	0,048	0,082
TGW	TMET105	0,052	0,060
TGW	TMET106	0,051	0,067
TGW	TMET107	0,087	0,002
TGW	TMET108	0,007	0,799
TGW	TMET109	0,009	0,737
TGW	TMET110	0,023	0,412
TGW	TMET111	-0,011	0,695
TGW	TMET112	0,030	0,288
TGW	TMET113	0,003	0,914
TGW	TMET114	0,036	0,199
TGW	TMET115	-0,003	0,916
TGW	TMET116	0,004	0,887
TGW	TMET117	0,039	0,164
TGW	TMET118	0,044	0,113
TGW	TMET119	0,044	0,110
TGW	TMET120	0,046	0,100
TGW	TMET121	0,077	0,005
TGW	TMET122	0,052	0,062
TGW	TMET123	-0,010	0,709
TGW	TMET124	-0,022	0,425
TGW	TMET126	0,071	0,011
TGW	TMET127	0,017	0,540
TGW	TMET128	0,043	0,121
TGW	TMET129	0,048	0,087
TGW	TMET130	0,046	0,095
TGW	TMET132	-0,062	0,025
TGW	TMET133	0,085	0,002
TGW	TMET135	-0,033	0,230
TGW	TMET136	0,001	0,977
TGW	TMET137	0,022	0,427
TGW	TMET139	-0,002	0,943
TGW	TMET140	0,027	0,339
TGW	TMET141	0,017	0,551
TGW	TMET142	0,062	0,025
TGW	TMET143	0,036	0,197
TGW	TMET144	0,066	0,017
TGW	TMET145	0,093	0,001
TGW	TMET146	0,011	0,685
TGW	TMET147	0,004	0,890
TGW	TMET150	-0,015	0,578
TGW	TMET151	0,041	0,142
TGW	TMET152	-0,006	0,823
TGW	TMET153	-0,009	0,756
TGW	TMET154	0,050	0,071
TGW	TMET155	0,074	0,008
TGW	TMET156	-0,025	0,362
TGW	TMET157	-0,004	0,894

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>
TGW	TMET158	0,004	0,879
YLD	TMET1	-0,031	0,263
YLD	TMET2	0,029	0,301
YLD	TMET3	0,020	0,482
YLD	TMET4	0,006	0,819
YLD	TMET5	0,045	0,104
YLD	TMET6	0,038	0,170
YLD	TMET7	-0,023	0,403
YLD	TMET8	-0,064	0,021
YLD	TMET9	-0,025	0,368
YLD	TMET10	0,028	0,310
YLD	TMET12	0,029	0,304
YLD	TMET13	-0,031	0,263
YLD	TMET14	0,047	0,090
YLD	TMET15	-0,002	0,946
YLD	TMET18	0,021	0,444
YLD	TMET20	0,017	0,538
YLD	TMET23	-0,008	0,773
YLD	TMET24	-0,021	0,442
YLD	TMET25	-0,014	0,617
YLD	TMET26	0,012	0,666
YLD	TMET27	-0,058	0,036
YLD	TMET30	-0,010	0,732
YLD	TMET32	0,028	0,320
YLD	TMET33	-0,001	0,976
YLD	TMET34	0,002	0,943
YLD	TMET35	-0,045	0,106
YLD	TMET36	-0,033	0,230
YLD	TMET38	-0,022	0,425
YLD	TMET39	-0,092	0,001
YLD	TMET41	0,017	0,530
YLD	TMET43	-0,013	0,644
YLD	TMET44	0,053	0,057
YLD	TMET45	-0,002	0,948
YLD	TMET46	-0,014	0,615
YLD	TMET48	-0,006	0,833
YLD	TMET50	-0,050	0,071
YLD	TMET51	0,011	0,703
YLD	TMET52	0,039	0,164
YLD	TMET53	-0,005	0,856
YLD	TMET54	0,023	0,403
YLD	TMET55	-0,088	0,002
YLD	TMET57	-0,012	0,657
YLD	TMET58	0,016	0,567
YLD	TMET62	-0,024	0,391
YLD	TMET63	-0,015	0,599
YLD	TMET64	-0,062	0,025
YLD	TMET65	0,045	0,104
YLD	TMET68	0,023	0,416
YLD	TMET69	0,056	0,046
YLD	TMET70	-0,033	0,240
YLD	TMET72	-0,085	0,002
YLD	TMET74	0,070	0,012
YLD	TMET75	0,029	0,303
YLD	TMET76	0,055	0,046
YLD	TMET77	0,008	0,767
YLD	TMET78	0,079	0,005
YLD	TMET79	0,054	0,054
YLD	TMET80	0,010	0,716
YLD	TMET81	0,018	0,523
YLD	TMET82	-0,009	0,756
YLD	TMET83	-0,002	0,935
YLD	TMET84	-0,035	0,206
YLD	TMET85	0,021	0,456
YLD	TMET86	0,013	0,639
YLD	TMET87	-0,018	0,506
YLD	TMET88	-0,015	0,601
YLD	TMET90	-0,107	0,000
YLD	TMET91	-0,019	0,491
YLD	TMET92	-0,004	0,896
YLD	TMET93	0,057	0,041
YLD	TMET94	0,006	0,841
YLD	TMET95	-0,054	0,052
YLD	TMET96	-0,040	0,150
YLD	TMET98	0,012	0,662

Merkmal <sup>a</sup>	Metabolit <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>
YLD	TMET99	-0,003	0,907
YLD	TMET100	-0,015	0,578
YLD	TMET101	0,048	0,086
YLD	TMET102	0,020	0,466
YLD	TMET103	0,071	0,011
YLD	TMET104	0,046	0,100
YLD	TMET105	-0,020	0,463
YLD	TMET106	0,059	0,034
YLD	TMET107	-0,014	0,625
YLD	TMET108	0,087	0,002
YLD	TMET109	0,057	0,039
YLD	TMET110	0,068	0,015
YLD	TMET111	0,033	0,232
YLD	TMET112	0,007	0,800
YLD	TMET113	0,025	0,368
YLD	TMET114	-0,035	0,214
YLD	TMET115	0,069	0,013
YLD	TMET116	0,068	0,014
YLD	TMET117	-0,030	0,286
YLD	TMET118	0,003	0,908
YLD	TMET119	0,082	0,003
YLD	TMET120	0,098	0,000
YLD	TMET121	0,047	0,094
YLD	TMET122	0,103	0,000
YLD	TMET123	0,014	0,616
YLD	TMET124	-0,016	0,573
YLD	TMET126	0,096	0,001
YLD	TMET127	0,049	0,079
YLD	TMET128	0,053	0,056
YLD	TMET129	0,025	0,365
YLD	TMET130	0,024	0,387
YLD	TMET132	0,020	0,472
YLD	TMET133	0,004	0,896
YLD	TMET135	-0,062	0,026
YLD	TMET136	-0,024	0,380
YLD	TMET137	-0,008	0,774
YLD	TMET139	-0,009	0,751
YLD	TMET140	-0,018	0,508
YLD	TMET141	-0,029	0,302
YLD	TMET142	0,055	0,046
YLD	TMET143	-0,016	0,576
YLD	TMET144	0,049	0,075
YLD	TMET145	0,045	0,107
YLD	TMET146	0,008	0,781
YLD	TMET147	0,083	0,003
YLD	TMET150	-0,030	0,280
YLD	TMET151	0,039	0,164
YLD	TMET152	0,057	0,041
YLD	TMET153	-0,031	0,272
YLD	TMET154	-0,040	0,155
YLD	TMET155	0,075	0,007
YLD	TMET156	-0,026	0,356
YLD	TMET157	-0,013	0,651
YLD	TMET158	0,010	0,714

<sup>a</sup>Merkmal, siehe Tab. 1, <sup>b</sup>Metaboliten, siehe Tab. A2, <sup>c</sup>Pearson'scher Korrelationskoeffizient, <sup>d</sup> P-Wert des Pearson'schen Korrelationskoeffizienten, <sup>e</sup>Geschätzter Effekt des Metaboliten im BayesB-Modell.

**Tab. A10.** Detaillierte mQTL-Liste der ersten Probennahme (modifiziert nach Gemmer et al. 2021).

Metabolit <sup>a</sup>	Chromosom <sup>b</sup>	Position RefSeq 1.0 (bp) <sup>b</sup>	cM <sup>c</sup>	mQTL <sup>d</sup>	KG <sup>e</sup>	Beschreibung	Start pos KG <sup>f</sup>	Assoziierte Blühgene <sup>g</sup>
109; 110; 116; 147	1H	14.371.313 – 20.291.169	27 - 28,4 (32,2)	mQTL1H-1_1	HORVU1Hr1G006860 HORVU1Hr1G008350	Glucose-6-phosphate isomerase UDP-galactose transporter 5	13.574.504 18.408.378	
116	1H	36.457.092	42,2	mQTL1H-2_1	HORVU1Hr1G013480	Sugar transporter 1	35.679.610	
109; 110; 116	1H	551.858.464	128,3	mQTL1H-3_1	HORVU1Hr1G093030 HORVU1Hr1G092920	Serine/threonine-protein kinase SMG1 Disease resistance protein	552.234.515 551.778.566	<i>HvELF3</i> (128,0-133,1 cM)
147	2H	8.172.965	4,0 - 8,0	mQTL2H-1_1	HORVU2Hr1G003540	Disease resistance protein (CC-NBS-LRR class) family	8.298.399	
109; 110	2H	26.199.715; 29.126.332	17,6; 18,9	mQTL2H-2_1	HORVU2Hr1G012010 HORVU2Hr1G013440	Disease resistance protein Protein kinase superfamily protein	25.563.354 29.192.896	<i>Ppd-H1</i> (22,2-23,8 cM)
116	2H	694.692.374	106,8	mQTL2H-3_1	HORVU2Hr1G101770	Growth-regulating factor 3	694.688.469	
110	3H	24.223.023	23	mQTL3H-1_1	HORVU3Hr1G010990	Disease resistance protein RPP13	24.027.539	
109; 116; 147	3H	458.582.777	51,8	mQTL3H-2_1	HORVU3Hr1G060310	Receptor kinase 1	458.663.290	
109; 116	4H	640.634.524; 646.104.291	113,4	mQTL4H-1_1	HORVU4Hr1G088570	Leucine-rich repeat receptor-like protein kinase family protein	640.630.452	<i>Vrn-H2</i> (110,2-114,3 cM)
109	5H	4.172.687	3,0 - 8,0	mQTL5H-1_1	HORVU5Hr1G001080	Disease resistance RPP13-like protein 4	3.739.554	
147	5H	32.864.141	41	mQTL5H-2_1	HORVU5Hr1G011940	Protein kinase family protein	32.860.671	
147	5H	597.441.316 – 599.122.952	125,5 - 125,8	mQTL5H-3_1	HORVU5Hr1G095010 HORVU5Hr1G095200	UDP-Glycosyltransferase superfamily protein Protein kinase superfamily protein	597.479.390 597.828.242	<i>Vrn-H1</i> (122,4-128,5 cM)
116	6H	567.912.412	80	mQTL6H-1_1	HORVU6Hr1G088730	Protein kinase family protein	567.249.343	
109	7H	20.407.011	18	mQTL7H-1_1	HORVU7Hr1G013890	UDP-Glycosyltransferase superfamily protein	19.748.818	
109; 110; 116	7H	39.678.950 – 42.408.475	34,3 - 37,6	mQTL7H-2_1	HORVU7Hr1G024610 HORVU7Hr1G024730	FLOWERING LOCUS T 1 Disease resistance protein RPM1	39.679.905 40.332.583	<i>Vrn-H3</i> (29,8-34,3 cM)
109	7H	537.914.633	77	mQTL7H-3_1	HORVU7Hr1G088710	Protein kinase superfamily protein	538.825.658	
110	7H	611.732.972	104	mQTL7H-4_1	HORVU7Hr1G102660	Undescribed protein	611.723.180	
147	7H	647.913.791	134,2	mQTL7H-5_1	HORVU7Hr1G118610	Protein kinase superfamily protein	648.032.565	
110			2H 56,2	mQTL0H-1_1				

<sup>a</sup>Metabolit, siehe Tab. A2, <sup>b</sup>Chromosom und physikalische Position auf der Gersten Referenzsequenz (RefSeq) 1.0 (Mascher et al. 2017), <sup>c</sup>Genetische Position von Maurer et al. (Maurer et al. 2015), <sup>d</sup>mQTL Bezeichnung, <sup>e</sup>Kandidatengen in der mQTL Region, <sup>f</sup>Physikalische Position des Kandidatengens, <sup>g</sup>Assoziiertes Blühen innerhalb der genetischen Position von Maurer et al. (Maurer et al. 2015).

**Tab. A11.** Detaillierte mQTL-Liste der zweiten Probennahme (modifiziert nach Gemmer et al. 2021).

Metabolit <sup>a</sup>	Chromosom <sup>b</sup>	Position RefSeq 1.0 (bp) <sup>b</sup>	cM <sup>c</sup>	mQTL <sup>d</sup>	KG <sup>e</sup>	Beschreibung	Start pos. KG <sup>f</sup>	Assoziiertes Blüten <sup>g</sup>
83; 110; 116	1H	4.228.359 – 6.332.167	5,0 - 8,0	mQTL1H-1_2	HORVU1Hr1G002000	Serine/threonine-protein kinase	4.226.240	
					HORVU1Hr1G002440	Powdery mildew resistance protein PM	4.945.262	
					HORVU1Hr1G002450	Disease resistance-responsive (dirigent-like protein) family protein	4.960.525	
					HORVU1Hr1G002620	Disease resistance protein RPM1	5.157.568	
108; 110; 111; 115;116	1H	13.579.164 – 20.291.169	27 - 28,4	mQTL1H-2_2	HORVU1Hr1G006860	Glucose-6-phosphate isomerase	13.574.504	
					HORVU1Hr1G008350	UDP-galactose transporter 5	18.408.378	
					HORVU1Hr1G011890	Nucleotide-sugar transporter family protein	29.080.209	
					HORVU1Hr1G011720	Disease resistance protein	28.250.787	
108	1H	28.823.904	38	mQTL1H-3_2	HORVU1Hr1G061580	Trehalose-6-phosphate phosphatase	445.264.920	
					HORVU1Hr1G061270	Disease resistance RPP13-like protein 4	444.035.533	
83; 115	2H	1.214.700 – 8.042.503	0 - 5	mQTL2H-1_2	HORVU2Hr1G000510	Disease resistance protein	1.307.951	
					HORVU2Hr1G020680	Protein kinase superfamily protein	57.273.752	
83; 110; 116	2H	691.870.056	107,2	mQTL2H-3_2	HORVU2Hr1G100890	Serine/threonine protein kinase 1	692.326.968	
83; 110; 116	2H	753.019.634 – 758.585.058	141,9 - 145,6	mQTL2H-4_2	HORVU2Hr1G122140	Disease resistance protein RGA2	752.356.887	
					HORVU2Hr1G122810	Disease resistance protein RPP13	753.830.955	
					HORVU2Hr1G124190	Serine/threonine-protein kinase	758.123.834	
110; 116	3H	498.960.269	55,2	mQTL3H-1_2	HORVU3Hr1G065620	Protein kinase superfamily protein	499.457.724	
83	3H	574.923.766	73,9	mQTL3H-2_2	HORVU3Hr1G077670	Disease resistance protein	574.276.620	
83; 110; 111	3H	639.794.973; 651.111.684	117; 122,6	mQTL3H-3_2	HORVU3Hr1G095790	Serine/threonine-protein kinase	650.800.498	
					HORVU3Hr1G095710	Disease resistance protein	650.674.834	
108; 110; 111; 115; 116	4H	6.003.451; 7.744.453; 8.678.208	3,5 - 14,9	mQTL4H-1_2	HORVU4Hr1G003440	Growth-regulating factor 9	7.582.838	
83	4H	626.955.122	104	mQTL4H-2_2	HORVU4Hr1G083940	Cytochrome P450 superfamily protein	626.980.036	
116	4H	640.729.453	113,4	mQTL4H-3_2	HORVU4Hr1G088650	Protein kinase family protein	640.685.328	Vrn-H2 (110,2-114,3 cM)
110; 111; 116	5H	10.631.653	18	mQTL5H-1_2	HORVU5Hr1G006280	Leucine-rich repeat receptor-like protein kinase family protein	10.638.212	
115	5H	503.110.566	60	mQTL5H-2_2	HORVU5Hr1G065660	Sugar transporter protein 7	502.113.165	
110; 116	5H	598.090.007	125,6	mQTL5H-3_2	HORVU5Hr1G095200	Protein kinase superfamily protein	597.828.242	Vrn-H1 (122,4-128,5 cM)
110; 115; 116	5H	612.201.018; 627.366.902	134; 143	mQTL5H-4_2	HORVU5Hr1G107540	Protein kinase superfamily protein	627.202.473	
110; 111; 116	5H	667.955.513	167,9	mQTL5H-5_2	HORVU5Hr1G125270	Protein kinase superfamily protein	668.388.567	
83	6H	461.432.495	65,9	mQTL6H-1_2	HORVU6Hr1G066510	Nucleotide-diphospho-sugar transferase family protein	460.417.387	
111	6H	481.836.327	64,3	mQTL6H-2_2	HORVU6Hr1G069390	Histidinol phosphate aminotransferase 1	481.011.324	
83; 108	6H	570.020.515 – 580.178.325	113,2 - 123	mQTL6H-3_2	HORVU6Hr1G089540	Sugar transporter SWEET	570.019.107	
					HORVU6Hr1G089570	Germin-like protein 5	570.083.099	
					HORVU6Hr1G091380	Protein kinase superfamily protein	575.548.851	
					HORVU6Hr1G091550	Serine/threonine protein phosphatase 2A	575.769.878	
					HORVU6Hr1G094170	Disease resistance protein RPM1	580.614.638	
111; 115	7H	47.788.650; 52.114.669	41; 46	mQTL7H-1_2	HORVU7Hr1G027310	Leucine-rich repeat protein kinase family protein	48.232.956	
					HORVU7Hr1G028470	Mannose-6-phosphate isomerase	52.294.484	
					HORVU7Hr1G028530	GDP-mannose transporter 1	52.392.763	
108	7H	176.885.969	69,3	mQTL7H-2_2	HORVU7Hr1G049870	Alanine:glyoxylate aminotransferase	176.151.817	
110; 111; 116	7H	628.366.691	120	mQTL7H-3_2	HORVU7Hr1G109590	Protein kinase superfamily protein	628.369.567	
					HORVU7Hr1G109850	Mannose-binding lectin superfamily protein	629.167.675	

<sup>a</sup>Metabolit, siehe Tab. A3, <sup>b</sup>Chromosom und physikalische Position auf der Gersten Referenzsequenz (RefSeq) 1.0 (Mascher et al. 2017), <sup>c</sup>Genetische Position von Maurer et al. (Maurer et al. 2015), <sup>d</sup>mQTL Bezeichnung, <sup>e</sup>Kandidatengen in der mQTL Region, <sup>f</sup>Physikalische Position des Kandidatengens, <sup>g</sup>Assoziiertes Blüten innerhalb der genetischen Position von Maurer et al. (Maurer et al. 2015).



**Tab. A12.** Erklärte phänotypische Varianz ( $r^2$ ) definierter mQTL Regionen für untersuchte Metaboliten (modifiziert nach Gemmer et al. 2021).

Metabolit <sup>a</sup>	Probennahme <sup>b</sup>	mQTL <sup>c</sup>	pos <sup>d</sup>	$r^2$ <sup>e</sup>
TMET109	1	mQTL1H-3_1	128,3	0,025413
TMET110	1	mQTL1H-3_1	128,3	0,037986
TMET116	1	mQTL1H-3_1	128,3	0,025579
TMET115	2	mQTL1H-2_2	27,25	0,364873
TMET116	2	mQTL1H-2_2	27,25	0,530117
TMET110	1	mQTL1H-1_1	27,4	0,647649
TMET109	1	mQTL1H-1_1	28,25	0,382247
TMET116	1	mQTL1H-1_1	28,25	0,529802
TMET147	1	mQTL1H-1_1	28,25	0,363321
TMET110	2	mQTL1H-2_2	28,25	0,639651
TMET111	2	mQTL1H-2_2	28,25	0,145691
TMET108	2	mQTL1H-2_2	30,3	0,315034
TMET116	1	mQTL1H-2_1	42,45	0,427054
TMET108	2	mQTL1H-3_2	44,2	0,20367
TMET116	2	mQTL1H-4_2	58,4	0,171269
TMET110	2	mQTL1H-1_2	5	0,092565
TMET116	2	mQTL1H-1_2	5	0,068677
TMET83	2	mQTL1H-1_2	5	0,004525
TMET83	2	mQTL2H-1_2	1,15	0,016618
TMET110	2	mQTL2H-3_2	107	0,060241
TMET116	2	mQTL2H-3_2	107	0,059053
TMET83	2	mQTL2H-3_2	107	0,02612
TMET116	1	mQTL2H-3_1	110,3	0,048802
TMET110	2	mQTL2H-4_2	142,15	0,017453
TMET116	2	mQTL2H-4_2	142,15	0,013635
TMET83	2	mQTL2H-4_2	142,15	0,002235
TMET109	1	mQTL2H-2_1	18,25	0,044534
TMET110	1	mQTL2H-2_1	20,95	0,053495
TMET110	2	mQTL2H-2_2	41,35	0,027286
TMET147	1	mQTL2H-1_1	5,475	0,051098
TMET115	2	mQTL2H-1_2	5,475	0,046755
TMET83	2	mQTL3H-3_2	113,4	0,007077
TMET110	2	mQTL3H-3_2	122,3	0,01553
TMET111	2	mQTL3H-3_2	122,3	0,008997
TMET116	2	mQTL3H-3_2	122,3	0,013642
TMET110	1	mQTL3H-1_1	23,5	0,056233
TMET110	2	mQTL3H-1_2	51,25	0,092148
TMET116	2	mQTL3H-1_2	51,25	0,092404
TMET109	1	mQTL3H-2_1	51,575	0,082692
TMET116	1	mQTL3H-2_1	51,575	0,095549
TMET147	1	mQTL3H-2_1	51,575	0,097639
TMET83	2	mQTL3H-2_2	74,2	0,009256
TMET83	2	mQTL4H-2_2	104	0,002818
TMET116	1	mQTL4H-1_1	113,4	0,021792
TMET116	2	mQTL4H-3_2	114,3	0,008614
TMET109	1	mQTL4H-1_1	115,2	0,023009
TMET110	2	mQTL4H-1_2	14,9	0,006386
TMET115	2	mQTL4H-1_2	14,9	0,005371
TMET116	2	mQTL4H-1_2	14,9	0,004007
TMET108	2	mQTL4H-1_2	3,5	0,02612
TMET110	2	mQTL5H-3_2	125,6	0,035333
TMET116	2	mQTL5H-3_2	125,6	0,036654
TMET147	1	mQTL5H-3_1	125,8	0,044555
TMET115	2	mQTL5H-4_2	134,3	0,042083
TMET110	2	mQTL5H-4_2	142,9	0,041869
TMET116	2	mQTL5H-4_2	142,9	0,038423
TMET110	2	mQTL5H-5_2	168,4	0,013783
TMET111	2	mQTL5H-5_2	168,4	0,00482
TMET116	2	mQTL5H-5_2	168,4	0,011596
TMET110	2	mQTL5H-1_2	20,6	0,09937
TMET111	2	mQTL5H-1_2	20,6	0,015056
TMET116	2	mQTL5H-1_2	20,6	0,068481
TMET109	1	mQTL5H-1_1	4,75	0,032031
TMET147	1	mQTL5H-2_1	41	0,072401
TMET115	2	mQTL5H-2_2	60,65	0,002897
TMET83	2	mQTL6H-3_2	113,2	0,051081
TMET108	2	mQTL6H-3_2	118,3	0,035062
TMET83	2	mQTL6H-3_2	126,5	0,049692
TMET111	2	mQTL6H-1_2	65,8	0,021132
TMET83	2	mQTL6H-1_2	65,9	0,020734
TMET110	1	mQTL7H-4_1	105,6	0,002001
TMET110	2	mQTL7H-3_2	122,65	0,018113

<b>Metabolit<sup>a</sup></b>	<b>Probennahme<sup>b</sup></b>	<b>mQTL<sup>c</sup></b>	<b>pos<sup>d</sup></b>	<b>r<sup>2</sup> <sup>e</sup></b>
TMET111	2	mQTL7H-3_2	122,65	0,014118
TMET116	2	mQTL7H-3_2	122,65	0,015691
TMET147	1	mQTL7H-5_1	134,2	0,016245
TMET109	1	mQTL7H-1_1	17,8	0,021096
TMET109	1	mQTL7H-2_1	32,15	0,047872
TMET116	1	mQTL7H-2_1	34,25	0,049303
TMET110	1	mQTL7H-2_1	38,2	0,026443
TMET115	2	mQTL7H-1_2	41,05	0,010896
TMET111	2	mQTL7H-1_2	45,2	0,012455
TMET108	2	mQTL7H-2_2	69,3	0,01093
TMET109	1	mQTL7H-3_1	77,4	0,030751

<sup>a</sup>Metabolit, siehe Tab. A2 und A3, <sup>b</sup>Probennahme, 1: 22,05,2017, 2: 22,06,2017, <sup>c</sup>Definierte mQTL Region, <sup>d</sup>Genetische Position des mQTL Peak Markers, abgeleitet von Maurer et al. (Maurer et al. 2015), <sup>e</sup>Erklärte phänotypische Varianz (r<sup>2</sup>, unvalidiert).

**Tab. A 13.** Person'sche Korrelationskoeffizienten zwischen Blühzeitpunkt und Metaboliten, beide Probenahmen (modifiziert nach Gemmer et al. 2021).

Metabolit <sup>a</sup>	Probenahme <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>
TMET1	1	0,04	0,11
TMET2	1	-0,18	0,00
TMET3	1	-0,02	0,59
TMET4	1	-0,13	0,00
TMET5	1	-0,18	0,00
TMET6	1	-0,19	0,00
TMET7	1	-0,05	0,10
TMET8	1	-0,10	0,00
TMET9	1	-0,02	0,54
TMET10	1	-0,10	0,00
TMET12	1	-0,21	0,00
TMET13	1	-0,15	0,00
TMET14	1	-0,07	0,01
TMET15	1	-0,03	0,25
TMET18	1	-0,10	0,00
TMET20	1	-0,01	0,77
TMET23	1	-0,15	0,00
TMET24	1	-0,09	0,00
TMET25	1	-0,08	0,00
TMET26	1	-0,09	0,00
TMET27	1	0,05	0,07
TMET30	1	-0,12	0,00
TMET32	1	-0,19	0,00
TMET33	1	-0,05	0,05
TMET34	1	-0,07	0,01
TMET35	1	-0,01	0,70
TMET36	1	-0,03	0,27
TMET38	1	-0,14	0,00
TMET39	1	0,02	0,57
TMET41	1	-0,03	0,21
TMET43	1	-0,02	0,39
TMET44	1	0,11	0,00
TMET45	1	-0,14	0,00
TMET46	1	0,02	0,42
TMET48	1	-0,10	0,00
TMET50	1	-0,04	0,17
TMET51	1	0,01	0,61
TMET52	1	-0,03	0,26
TMET53	1	-0,17	0,00
TMET54	1	0,02	0,56
TMET55	1	-0,06	0,05
TMET57	1	-0,18	0,00
TMET58	1	-0,01	0,83
TMET62	1	-0,07	0,02
TMET63	1	-0,16	0,00
TMET64	1	-0,23	0,00
TMET65	1	-0,08	0,00
TMET68	1	0,06	0,02
TMET69	1	-0,10	0,00
TMET70	1	-0,10	0,00
TMET72	1	-0,01	0,63
TMET74	1	-0,11	0,00
TMET75	1	-0,13	0,00
TMET76	1	-0,21	0,00
TMET77	1	-0,19	0,00
TMET78	1	-0,30	0,00
TMET79	1	-0,08	0,00
TMET80	1	-0,08	0,01
TMET81	1	-0,04	0,13
TMET82	1	-0,03	0,30
TMET83	1	-0,24	0,00
TMET84	1	-0,17	0,00
TMET85	1	-0,30	0,00
TMET86	1	-0,06	0,04
TMET87	1	-0,04	0,13
TMET88	1	-0,24	0,00
TMET90	1	0,07	0,02
TMET91	1	-0,11	0,00
TMET92	1	-0,26	0,00
TMET93	1	-0,15	0,00
TMET94	1	-0,15	0,00
TMET95	1	-0,10	0,00

Metabolit <sup>a</sup>	Probennahme <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>
TMET96	1	-0,19	0,00
TMET98	1	-0,09	0,00
TMET99	1	-0,26	0,00
TMET100	1	-0,11	0,00
TMET101	1	-0,30	0,00
TMET102	1	-0,07	0,01
TMET103	1	-0,22	0,00
TMET104	1	-0,23	0,00
TMET105	1	-0,24	0,00
TMET106	1	-0,21	0,00
TMET107	1	-0,16	0,00
TMET108	1	-0,20	0,00
TMET109	1	-0,21	0,00
TMET110	1	-0,12	0,00
TMET111	1	-0,17	0,00
TMET112	1	0,00	0,86
TMET113	1	-0,02	0,43
TMET114	1	-0,13	0,00
TMET115	1	-0,13	0,00
TMET116	1	-0,14	0,00
TMET117	1	-0,28	0,00
TMET118	1	-0,17	0,00
TMET119	1	-0,30	0,00
TMET120	1	-0,23	0,00
TMET121	1	-0,30	0,00
TMET122	1	-0,28	0,00
TMET123	1	-0,01	0,59
TMET124	1	-0,05	0,09
TMET126	1	0,01	0,68
TMET127	1	-0,16	0,00
TMET128	1	-0,33	0,00
TMET129	1	-0,20	0,00
TMET130	1	-0,28	0,00
TMET132	1	-0,08	0,00
TMET133	1	-0,21	0,00
TMET135	1	-0,10	0,00
TMET136	1	-0,09	0,00
TMET137	1	-0,15	0,00
TMET139	1	-0,18	0,00
TMET140	1	-0,25	0,00
TMET141	1	-0,06	0,05
TMET142	1	-0,29	0,00
TMET143	1	-0,05	0,07
TMET144	1	-0,15	0,00
TMET145	1	-0,09	0,00
TMET146	1	-0,15	0,00
TMET147	1	-0,15	0,00
TMET150	1	-0,20	0,00
TMET151	1	-0,07	0,01
TMET152	1	-0,02	0,40
TMET153	1	0,06	0,03
TMET154	1	-0,11	0,00
TMET155	1	-0,19	0,00
TMET156	1	-0,19	0,00
TMET157	1	-0,07	0,01
TMET158	1	-0,17	0,00
TMET1	2	-0,07	0,01
TMET2	2	-0,02	0,46
TMET3	2	0,08	0,00
TMET4	2	-0,23	0,00
TMET5	2	0,14	0,00
TMET6	2	0,21	0,00
TMET7	2	-0,09	0,00
TMET8	2	0,10	0,00
TMET9	2	-0,07	0,01
TMET10	2	-0,08	0,01
TMET11	2	-0,16	0,00
TMET12	2	0,07	0,01
TMET13	2	0,03	0,34
TMET14	2	-0,12	0,00
TMET15	2	-0,09	0,00
TMET17	2	-0,08	0,00
TMET23	2	-0,09	0,00
TMET24	2	-0,06	0,04
TMET25	2	-0,05	0,08

Metabolit <sup>a</sup>	Probennahme <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>
TMET26	2	-0,06	0,02
TMET27	2	-0,02	0,38
TMET30	2	-0,18	0,00
TMET32	2	-0,14	0,00
TMET33	2	-0,14	0,00
TMET35	2	-0,05	0,10
TMET36	2	-0,03	0,30
TMET38	2	0,11	0,00
TMET39	2	0,06	0,02
TMET41	2	-0,11	0,00
TMET42	2	-0,08	0,01
TMET43	2	0,05	0,05
TMET44	2	-0,09	0,00
TMET45	2	0,10	0,00
TMET47	2	-0,06	0,05
TMET48	2	-0,02	0,48
TMET50	2	-0,03	0,24
TMET51	2	0,05	0,06
TMET52	2	-0,03	0,23
TMET53	2	0,09	0,00
TMET54	2	-0,05	0,08
TMET57	2	0,03	0,36
TMET58	2	-0,05	0,05
TMET62	2	-0,14	0,00
TMET63	2	0,10	0,00
TMET64	2	0,02	0,43
TMET65	2	-0,18	0,00
TMET68	2	-0,10	0,00
TMET69	2	-0,04	0,11
TMET70	2	0,01	0,60
TMET72	2	-0,05	0,06
TMET73	2	-0,07	0,01
TMET74	2	0,04	0,20
TMET75	2	-0,07	0,02
TMET76	2	-0,01	0,77
TMET77	2	-0,17	0,00
TMET79	2	-0,03	0,31
TMET80	2	-0,18	0,00
TMET82	2	-0,08	0,00
TMET83	2	-0,07	0,01
TMET84	2	-0,11	0,00
TMET85	2	0,08	0,01
TMET86	2	0,14	0,00
TMET87	2	-0,11	0,00
TMET88	2	0,06	0,04
TMET89	2	-0,07	0,02
TMET90	2	-0,20	0,00
TMET91	2	-0,05	0,09
TMET92	2	-0,15	0,00
TMET93	2	-0,10	0,00
TMET94	2	-0,12	0,00
TMET95	2	-0,18	0,00
TMET96	2	-0,26	0,00
TMET99	2	0,23	0,00
TMET100	2	-0,06	0,03
TMET101	2	0,01	0,75
TMET102	2	-0,10	0,00
TMET103	2	0,17	0,00
TMET104	2	0,18	0,00
TMET105	2	-0,09	0,00
TMET106	2	0,02	0,49
TMET107	2	0,05	0,07
TMET108	2	-0,10	0,00
TMET109	2	-0,20	0,00
TMET110	2	-0,06	0,04
TMET111	2	-0,04	0,19
TMET112	2	0,00	0,87
TMET114	2	-0,15	0,00
TMET115	2	-0,02	0,49
TMET116	2	-0,04	0,14
TMET117	2	-0,11	0,00
TMET118	2	-0,09	0,00
TMET119	2	0,10	0,00
TMET120	2	-0,11	0,00
TMET121	2	0,03	0,24

Metabolit <sup>a</sup>	Probennahme <sup>b</sup>	r <sup>c</sup>	p-Wert <sup>d</sup>
TMET122	2	0,04	0,16
TMET123	2	0,12	0,00
TMET124	2	0,09	0,00
TMET126	2	0,05	0,05
TMET128	2	0,04	0,12
TMET129	2	0,04	0,11
TMET132	2	0,03	0,24
TMET133	2	-0,05	0,10
TMET135	2	-0,09	0,00
TMET136	2	0,06	0,02
TMET137	2	-0,13	0,00
TMET138	2	-0,29	0,00
TMET139	2	-0,10	0,00
TMET140	2	-0,24	0,00
TMET141	2	-0,14	0,00
TMET142	2	-0,03	0,26
TMET143	2	-0,07	0,02
TMET144	2	0,08	0,00
TMET145	2	-0,07	0,01
TMET147	2	-0,03	0,37
TMET149	2	-0,06	0,04
TMET150	2	-0,10	0,00
TMET154	2	-0,01	0,77
TMET155	2	-0,10	0,00
TMET156	2	0,03	0,30
TMET157	2	0,02	0,54
TMET158	2	-0,18	0,00
TMET159	2	-0,06	0,02

<sup>a</sup>Metaboliten, siehe Tab. A2 und A3, <sup>b</sup>Probennahme, 1: 22,05,2017; 2: 22,06,2017, <sup>d</sup> p-Wert des Pearson'schen Korrelationskoeffiziente.

**Tab. A14.** Geschätze familienspezifische Effekte für detektierte mQTL, erste Probennahme (modifiziert nach Gemmer et al. 2021).

Metabolit	mQTL	DR	Chr <sup>a</sup>	Pos <sup>a</sup>	F01 <sup>b</sup>	F02	F03	F04	F05	F06	F07	F08	F09	F10	F11	F12	F13	F14	F15	F16	F17	F18	F19	F20	F21	F22	F23	F24	F25
TMET109	mQTL1H-1_1	50	1H	28,25	0,59	-2,73	-2,18	-2,89	0,27	-1,71	-1,04	-2,11	-0,45	-0,32	-2,21	-0,06	-2,03	-1,69	-0,09	-0,90	-0,81	-1,99	-2,77	1,12	-0,03	-0,09	-2,20	-0,86	-2,43
TMET109	mQTL1H-3_1	41	1H	128,3	-0,01	0,08	0,08	0,57	0,05	0,04	0,47	0,04	0,05	0,61	0,09	0,04	0,05	0,65	0,05	0,06	0,01	0,03	0,82	0,01	0,03	0,03	0,08	0,02	0,63
TMET109	mQTL2H-2_1	30	2H	18,25	0,59	0,56	0,54	0,54	0,57	0,50	0,46	0,56	0,54	0,56	0,58	0,58	0,10	0,57	0,59	0,52	0,59	0,55	0,58	0,55	0,55	0,55	0,57	0,56	0,41
TMET109	mQTL3H-2_1	37	3H	51,575	0,07	-0,18	-0,13	-0,28	-0,17	-0,46	-0,24	0,06	-0,13	-0,18	-0,19	0,09	-0,17	-0,36	0,19	-0,32	-0,43	0,09	0,48	0,10	0,00	0,12	-0,21	-0,31	-0,17
TMET109	mQTL4H-1_1	26	4H	115,2	-0,03	-0,62	-0,06	-0,82	0,00	-0,03	-0,04	-0,04	-0,05	0,00	0,00	0,00	-0,17	0,00	-0,03	-0,03	-0,62	-0,03	-0,03	-0,61	-0,03	-0,06	-0,59	-0,78	
TMET109	mQTL5H-1_1	26	5H	4,75	0,01	0,04	0,00	0,04	0,01	0,02	0,04	0,10	0,02	0,01	0,01	0,01	0,01	2,38	0,01	0,00	0,02	0,03	0,01	0,04	0,01	0,00	0,01	0,00	
TMET109	mQTL7H-1_1	29	7H	17,8	0,14	0,11	0,07	0,01	0,09	0,04	0,07	0,23	0,04	0,07	0,11	0,04	0,05	0,58	0,04	-1,94	0,06	0,04	0,08	0,08	0,04	0,04	0,04	0,02	0,03
TMET109	mQTL7H-2_1	26	7H	32,15	-0,22	-0,12	-0,19	-0,48	-0,25	-0,31	-0,44	-0,27	-0,38	-0,37	-0,22	-0,63	-0,27	0,26	-0,09	0,00	-0,16	-0,16	-0,34	-0,34	-0,01	-0,01	-0,11	-0,16	-0,25
TMET109	mQTL7H-3_1	31	7H	77,4	0,33	0,20	0,09	-0,01	0,43	0,42	0,11	0,42	0,10	0,11	0,13	0,03	0,37	0,43	0,07	0,40	0,39	0,22	0,42	0,19	0,10	0,09	0,08	0,02	0,07
TMET110	mQTL1H-1_1	77	1H	27,4	0,57	-5,14	-5,05	-5,13	0,21	-4,33	-2,41	-4,82	-0,82	-0,58	-4,94	-0,08	-4,73	-3,10	-0,02	-1,66	-1,65	-3,43	-5,41	1,42	-0,12	-0,02	-4,92	-0,98	-5,00
TMET110	mQTL1H-3_1	33	1H	128,3	0,02	0,17	0,19	0,63	0,12	0,05	0,20	0,05	0,16	0,73	0,15	0,15	0,11	0,72	0,17	0,08	0,12	0,01	0,84	0,11	0,04	0,04	0,14	-0,01	0,60
TMET110	mQTL2H-2_1	45	2H	20,95	0,63	0,59	0,58	0,57	0,58	0,55	0,53	0,56	0,59	0,61	0,62	0,66	-0,03	0,58	0,61	0,56	0,60	0,60	0,59	0,58	0,62	0,62	0,58	0,61	0,47
TMET110	mQTL3H-1_1	42	3H	23,5	-0,12	-0,10	-0,11	-0,60	-0,11	-0,07	-0,15	-0,01	-0,03	-0,76	-0,16	-0,72	-0,64	-0,73	-0,07	-0,19	-0,10	-0,13	0,03	-0,47	-0,03	-0,40	-0,02	-0,07	-0,64
TMET110	mQTL7H-2_1	37	7H	38,2	-0,15	-0,32	-0,35	-0,62	-0,37	-0,35	-0,63	-0,46	-0,36	-0,64	-0,53	-0,61	-0,32	-0,07	-0,10	-0,05	-0,22	-0,36	-0,57	-0,54	-0,04	-0,04	-0,28	-0,31	-0,54
TMET110	mQTL7H-4_1	33	7H	105,6	0,00	0,00	2,30	0,00	0,00	4,60	0,03	0,06	0,00	0,03	0,03	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
TMET116	mQTL1H-1_1	96	1H	28,25	1,26	-4,57	-3,61	-2,99	0,47	-1,68	-2,12	-3,38	-0,75	-1,03	-3,58	-0,06	-3,51	-3,13	0,00	-1,14	-1,15	-3,05	-4,76	1,64	0,16	0,15	-3,60	-1,11	-4,04
TMET116	mQTL1H-2_1	34	1H	42,45	0,86	0,75	-0,34	-0,20	0,85	-0,45	0,54	-0,29	0,87	0,56	0,03	0,03	0,02	-0,41	0,05	1,17	0,26	-0,46	0,73	0,59	0,47	0,47	-0,12	0,04	-0,06
TMET116	mQTL1H-3_1	64	1H	128,3	0,00	0,04	0,06	0,95	0,03	0,02	0,07	0,01	0,04	0,96	0,05	0,03	0,02	0,95	0,05	0,03	0,03	0,01	1,03	0,03	0,01	0,01	0,05	0,01	0,92
TMET116	mQTL2H-3_1	38	2H	110,3	-0,01	0,10	0,06	0,13	0,10	0,74	0,20	0,09	0,69	0,79	0,08	0,18	0,07	0,73	0,14	0,17	0,10	0,13	0,10	0,10	0,09	0,00	0,09	0,14	0,16
TMET116	mQTL3H-2_1	76	3H	51,575	0,13	0,01	-0,39	-0,41	-0,40	-0,56	-0,57	-0,04	-0,46	-0,47	-0,37	0,08	-0,36	-0,41	0,14	-0,55	-0,55	0,06	0,52	0,10	0,00	0,07	-0,34	-0,36	-0,37
TMET116	mQTL4H-1_1	29	4H	113,4	-0,01	-0,05	-1,40	-0,06	-0,02	-0,04	-0,03	-0,03	-0,03	-0,02	-0,02	-0,01	-0,05	0,00	-0,01	-0,03	-0,04	-0,06	-0,03	-0,06	-0,06	-0,04	-1,30	-0,15	-0,05
TMET116	mQTL7H-2_1	30	7H	34,25	-0,21	-0,17	-0,34	-0,56	-0,43	-0,54	-0,66	-0,35	-0,50	-0,57	-0,28	-0,77	-0,32	-0,14	-0,13	-0,06	0,00	-0,22	-0,50	-0,47	-0,01	-0,02	-0,18	-0,29	-0,48
TMET147	mQTL1H-1_1	58	1H	28,25	0,38	-2,98	-3,09	-2,81	0,48	-1,38	-1,59	-2,54	-0,78	-0,75	-2,86	-0,25	-2,44	-2,42	-0,08	-1,54	-1,30	-3,39	-3,50	1,20	-0,19	-0,21	-2,91	-1,09	-2,99
TMET147	mQTL2H-1_1	39	2H	5,475	0,67	0,60	0,36	0,06	-0,14	-0,47	0,08	0,07	0,23	0,15	0,17	0,22	-0,01	0,39	0,67	0,07	0,59	0,41	0,11	0,14	0,14	0,14	0,07	0,14	0,52
TMET147	mQTL3H-2_1	82	3H	51,575	0,09	-0,01	-0,51	-0,56	-0,55	-0,75	-0,56	0,04	-0,50	-0,57	-0,48	0,05	-0,52	-0,53	0,14	-0,62	-0,62	-0,02	0,25	0,04	-0,02	0,06	-0,49	-0,53	-0,55
TMET147	mQTL5H-2_1	26	5H	41	-0,60	-0,37	-0,25	-0,55	0,00	-0,04	-0,44	-0,41	-0,31	-0,05	-0,07	0,00	-0,67	-0,66	-0,36	-1,07	-0,40	-0,24	-0,18	-0,32	-0,18	-0,70	-0,25	-0,75	-0,33
TMET147	mQTL5H-3_1	36	5H	125,8	-0,27	-0,53	-0,03	-0,02	0,00	-0,08	-1,16	-0,55	-1,54	-1,29	-0,02	-0,14	-0,03	-0,67	-0,14	-1,09	-0,79	0,05	0,08	-0,59	0,00	0,01	-0,05	-0,08	-0,04
TMET147	mQTL7H-5_1	28	7H	134,2	0,02	0,01	0,00	0,00	0,03	0,01	0,22	0,71	0,85	0,28	0,26	0,02	0,83	0,01	0,71	0,05	0,01	0,02	0,01	0,02	0,01	0,01	0,02	0,04	0,04

<sup>a</sup>Genetische Position des mQTL Peak Markers, abgeleitet von Maurer et al. (Maurer et al. 2015), <sup>b</sup>Effektschätzungen für jede der 25 HEB-Familien.

**Tab. A15.** Geschätze familienspezifische Effekte für detektierte mQTL, zweite Probennahme (modifiziert nach Gemmer et al. 2021).

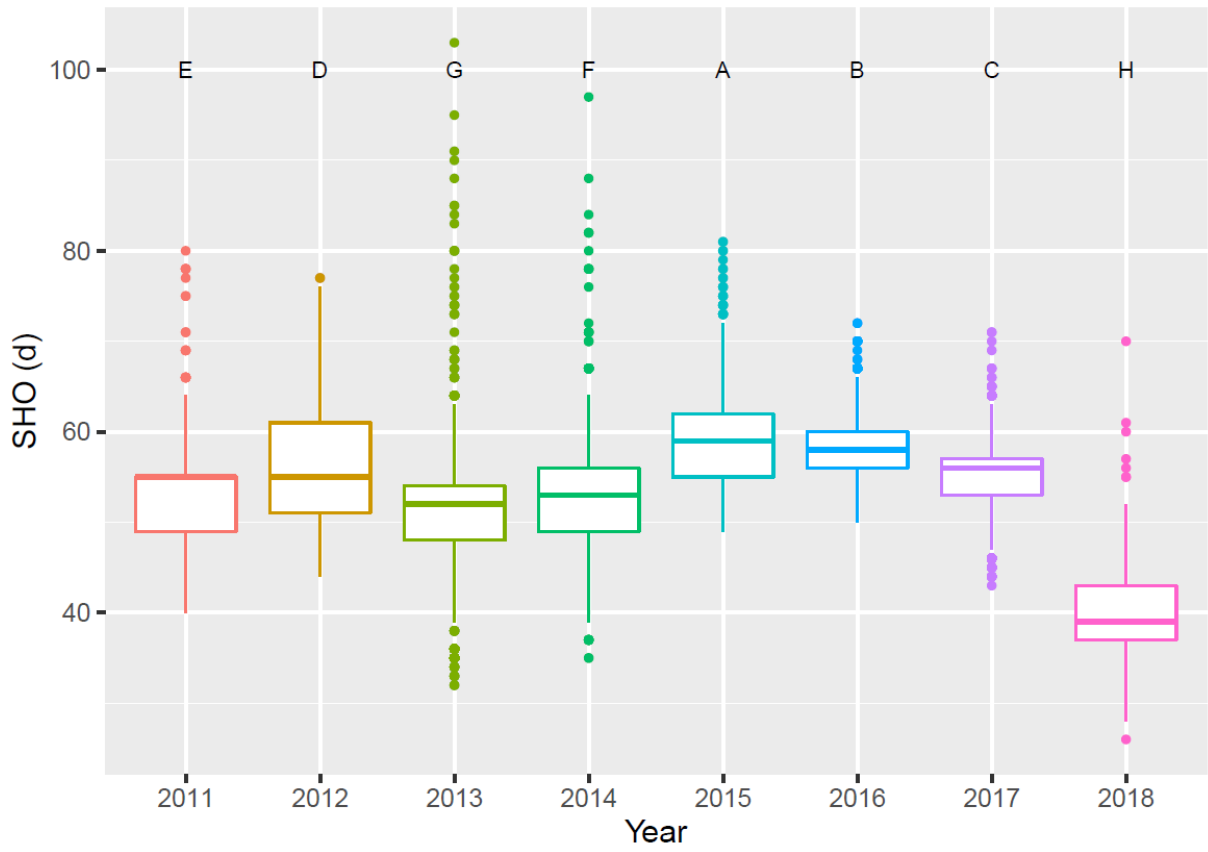
Metabolite	mQTL	DR	chr <sup>a</sup>	pos <sup>a</sup>	F01 <sup>b</sup>	F02	F03	F04	F05	F06	F07	F08	F09	F10	F11	F12	F13	F14	F15	F16	F17	F18	F19	F20	F21	F22	F23	F24	F25
TMET108	mQTL1H-2_2	57	1H	30,3	0,35	-2,19	-2,26	-2,23	0,17	-2,12	-1,27	-2,05	-0,31	0,25	-2,22	0,27	-1,79	-1,60	-0,01	-0,04	-0,86	-1,76	-2,25	0,11	-0,02	-0,02	-1,49	0,32	-2,08
TMET108	mQTL1H-3_2	48	1H	44,2	0,02	-0,02	0,03	-0,51	0,02	-0,56	0,07	0,03	0,07	0,16	0,07	-0,01	-0,02	-0,59	0,04	0,00	0,02	-0,57	-0,50	0,08	0,03	0,03	-0,52	0,01	-0,06
TMET108	mQTL4H-1_2	38	4H	3,5	0,01	0,85	0,02	0,01	0,43	1,37	0,00	0,03	0,01	0,01	0,00	-0,15	0,02	0,01	0,01	0,44	-0,23	0,00	0,02	0,00	0,01	0,01	-0,01	0,01	0,00
TMET108	mQTL6H-3_2	48	6H	118,3	0,00	-0,01	0,01	-0,01	-0,01	0,00	0,00	-0,01	0,00	-0,01	-0,12	-0,03	-0,01	0,01	0,00	-0,01	-0,01	-0,01	0,00	-0,01	-1,29	-0,03	0,01	-0,03	-0,01
TMET108	mQTL7H-2_2	35	7H	69,3	0,41	0,20	0,17	0,16	0,06	0,05	0,23	0,13	0,24	0,03	0,42	0,02	0,10	0,39	0,19	0,27	0,23	0,02	0,05	0,19	0,19	0,19	0,06	0,19	-0,02
TMET110	mQTL1H-1_2	65	1H	5	0,04	-0,07	-0,08	-0,08	-0,06	-0,45	-0,08	-0,05	0,03	0,01	-0,31	-0,02	-0,06	-0,19	-0,24	-0,08	-0,02	-0,32	-0,33	0,18	-0,02	0,13	-0,10	-0,37	-0,03
TMET110	mQTL1H-2_2	84	1H	28,25	0,32	-1,46	-1,31	-1,86	-0,01	-1,65	-0,90	-1,29	-0,20	0,12	-1,39	0,09	-1,21	-0,91	0,02	-0,08	-0,56	-1,21	-1,46	0,06	-0,02	-0,03	-1,07	0,53	-1,46
TMET110	mQTL1H-3_2	25	1H	44,2	0,16	-0,02	-0,01	-0,15	0,05	-0,23	0,15	0,07	0,05	0,24	0,09	-0,03	0,08	-0,14	0,06	0,07	0,06	-0,21	-0,13	0,07	-0,02	-0,02	-0,21	0,06	-0,01
TMET110	mQTL2H-2_2	31	2H	41,35	-0,05	-0,17	0,03	0,01	0,40	-0,24	0,00	0,01	-0,02	0,01	-0,01	-0,02	-0,01	-0,06	0,01	-0,15	0,01	-0,04	0,00	-0,13	-0,03	-0,02	-0,14	-0,06	0,00
TMET110	mQTL2H-3_2	46	2H	107	0,03	0,01	-0,01	0,03	-0,01	2,27	0,03	0,03	-0,02	0,06	0,10	0,04	-0,02	0,03	0,02	0,04	0,02	0,03	0,02	0,05	0,03	-0,07	0,03	0,03	0,00
TMET110	mQTL2H-4_2	43	2H	142,15	0,10	0,04	0,00	0,03	0,05	0,97	0,08	0,10	0,10	0,06	0,12	0,00	0,00	0,14	0,01	0,11	0,11	0,01	0,01	0,06	0,03	-0,02	0,00	0,00	0,00
TMET110	mQTL3H-1_2	56	3H	51,25	-0,02	-0,09	-0,10	-0,18	-0,06	-1,21	-0,06	-0,03	-0,11	-0,17	-0,13	-0,05	0,01	-0,14	-0,06	-0,06	-0,22	-0,10	-0,03	-0,05	-0,06	-0,09	-0,10	-0,03	-0,04
TMET110	mQTL3H-3_2	37	3H	122,3	0,00	-0,01	0,00	0,00	0,00	-0,21	0,00	0,00	0,00	0,01	0,00	0,00	0,01	-0,01	0,01	-1,75	0,01	-0,01	0,00	0,00	-0,01	-0,01	-0,01	0,00	0,00
TMET110	mQTL4H-1_2	27	4H	14,9	0,01	0,27	0,01	0,05	0,26	0,84	0,03	0,04	0,00	0,00	-0,05	-0,23	0,00	0,11	0,02	0,29	-0,29	0,08	0,01	0,00	0,01	0,01	0,01	0,01	0,00
TMET110	mQTL5H-1_2	43	5H	20,6	0,00	0,01	-0,01	-0,01	0,00	1,92	0,01	0,00	0,01	-0,02	-0,04	-0,02	-0,02	0,01	0,00	0,00	0,01	0,00	0,00	0,01	-0,02	-0,01	-0,01	0,00	0,00
TMET110	mQTL5H-3_2	69	5H	125,6	-0,05	-0,08	-0,02	-0,02	-0,04	0,22	-0,02	0,06	-0,07	-0,09	0,00	0,02	-0,02	-0,06	-0,01	-0,06	-0,06	-0,01	-0,05	-0,07	-0,01	0,03	-0,05	-0,02	-0,04
TMET110	mQTL5H-4_2	53	5H	142,9	-0,02	-0,01	0,00	-0,05	-0,01	3,67	-0,01	0,04	-0,05	-0,01	-0,07	0,05	-0,03	0,02	0,01	-0,06	-0,03	-0,01	-0,03	0,01	0,06	0,06	-0,02	-0,01	-0,01
TMET110	mQTL5H-5_2	62	5H	168,4	-0,02	0,00	0,01	0,00	-0,01	-1,88	0,00	0,01	-0,05	0,00	-0,02	0,00	-0,04	0,01	0,01	-0,02	-0,02	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-0,02	0,00	0,00
TMET110	mQTL6H-2_2	36	6H	77,1	-0,05	-0,04	-0,03	0,00	0,00	-0,20	0,00	-0,26	-0,05	-0,20	0,00	0,00	0,07	0,01	0,00	-0,04	-0,05	0,00	0,00	-0,02	0,00	0,00	0,01	-0,24	0,00
TMET110	mQTL7H-3_2	26	7H	122,65	0,01	-0,01	-0,01	-0,01	0,17	-0,84	-0,01	-0,01	-0,01	0,00	0,01	0,00	0,00	0,00	0,00	-0,02	0,00	0,00	-0,01	-0,95	-0,01	-0,01	0,00	0,02	0,00
TMET111	mQTL1H-2_2	84	1H	28,25	0,23	-2,60	-2,62	-3,22	-0,06	-2,78	-1,46	-2,29	-0,43	-0,28	-2,50	-0,24	-2,53	-1,53	-0,01	-0,34	-1,27	-1,68	-2,16	-0,03	-0,34	-0,31	-2,40	0,28	-2,39
TMET111	mQTL3H-3_2	34	3H	122,3	0,00	-0,09	0,00	-0,10	0,02	-0,07	0,01	0,00	-0,03	-0,04	-0,02	0,00	-0,01	-0,14	0,00	-3,04	-0,51	0,04	-0,03	-0,04	-0,07	-0,07	0,00	0,00	-0,02
TMET111	mQTL4H-1_2	29	4H	18,05	0,06	0,32	0,06	0,00	0,50	0,53	-0,05	0,09	0,07	-0,01	-0,17	0,05	-0,01	0,44	-0,01	0,06	0,07	0,43	0,09	0,06	0,06	0,06	0,04	0,07	-0,02
TMET111	mQTL5H-1_2	35	5H	20,6	0,00	0,02	0,02	-0,03	0,04	1,55	-0,10	0,07	0,01	-0,04	-0,18	0,02	-0,23	0,07	-0,02	0,07	0,05	-0,02	0,00	0,05	-0,01	-0,15	0,02	0,00	0,00
TMET111	mQTL5H-5_2	33	5H	168,4	-0,02	0,01	0,01	0,01	0,00	-1,68	0,01	0,01	-0,06	-0,02	-0,01	-0,02	-0,09	-0,03	0,00	-0,03	-0,02	0,01	0,00	0,02	0,00	-0,01	-0,08	0,01	0,03
TMET111	mQTL6H-1_2	45	6H	65,8	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	-0,24	0,00	-0,20	0,00	-0,18	-0,01	0,01	1,01	0,02	0,00	0,00	-0,02	-0,01	0,00	0,00	0,00	0,00	-0,19	0,02	
TMET111	mQTL7H-1_2	33	7H	45,2	0,03	-0,20	-0,32	-0,30	-0,31	-0,30	-0,31	-0,26	-0,17	-0,28	-0,32	-0,32	-0,28	-0,27	-0,14	-0,22	-0,32	-0,32	-0,22	-0,29	-0,27	-0,27	-0,28	-0,12	-0,29
TMET111	mQTL7H-3_2	32	7H	122,65	0,01	0,01	0,02	-0,02	-0,02	-1,77	-0,01	0,01	-0,02	0,00	0,02	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01	0,01	-0,02	-0,02	-1,73	-0,02	0,00	0,02	0,01	0,01
TMET115	mQTL1H-2_2	40	1H	27,25	0,37	-1,35	-1,04	-1,49	-0,07	-1,59	-0,87	-1,25	-0,20	0,11	-1,41	0,16	-0,78	-1,13	-0,20	-0,09	-0,67	-1,06	-1,88	0,33	-0,16	-0,19	-1,11	0,33	-1,17
TMET115	mQTL2H-1_2	35	2H	5,475	0,15	0,36	0,14	0,19	0,05	0,15	0,25	0,13	0,11	0,13	0,06	0,13	0,34	0,13	0,12	0,15	0,01	0,00	0,20	0,35	0,14	0,14	0,01	0,12	0,17
TMET115	mQTL4H-1_2	47	4H	14,9	0,09	0,17	0,06	0,03	0,71	0,76	0,01	0,10	-0,01	0,00	-0,01	-0,01	0,01	0,06	0,01	0,60	0,03	0,11	0,01	0,00	0,10	0,10	0,01	0,03	0,09
TMET115	mQTL5H-2_2	27	5H	60,65	-0,12	-0,02	-0,32	-0,09	-0,08	0,00	-0,28	-0,12	-0,20	-0,18	-0,09	-0,01	-0,02	0,00	-0,09	-0,06	-0,06	-0,25	-0,09	-0,07	-0,07	-0,01	-0,38	-0,06	-0,10
TMET115	mQTL5H-4_2	32	5H	134,3	-0,02	0,01	0,06	0,03	0,11	0,73	0,03	0,09	-0,01	0,02	0,01	0,08	-0,07	0,12	0,11	-0,02	0,06	0,02	0,01	0,15	0,17	0,20	-0,04	0,04	0,05
TMET115	mQTL7H-1_2	46	7H	41,05	-0,01	-0,13	-0,33	-0,13	-0,26	-0,33	-0,26	-0,11	-0,32	-0,11	-0,09	-0,34	-0,16	-0,34	-0,07	-0,12	-0,18	-0,26	-0,36	-0,26	-0,31	-0,31	-0,35	-0,06	-0,11
TMET116	mQTL1H-1_2	61	1H	5	0,00	-0,10	-0,06	-0,09	-0,05	-0,48	-0,11	-0,06	0,00	-0,03	-0,31	-0,06	-0,06	-0,19	-0,30	-0,15	-0,07	-0,35	-0,35	0,47	-0,03	0,38	-0,05	-0,38	-0,06
TMET116	mQTL1H-2_2	71	1H	27,25	0,40	-1,41	-1,24	-1,62	-0,11	-1,49	-0,53	-1,20	-0,25	0,21	-1,26	0,26	-1,14	-0,95	0,02	0,29	-0,28	-1,29	-1,37	0,12	-0,05	0,03	-1,15	0,58	-1,32
TMET116	mQTL1H-4_2	32	1H	58,4	0,00	-0,01	0,03	0,01	0,47	0,01	0,03	0,00	0,01	0,01	0,01	0,02	0,41	0,00	0,00	-0,02	-0,01	0,00	-0,01	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01	0,01
TMET116	mQTL2H-3_2	25	2H	90	0,03	0,00	0,01	0,00	0,03	-2,62	0,02	0,01	0,00	0,02	0,02	0,00	0,02	0,01	-0,01	0,01	0,01	-0,01	0,01	0,00	0,00	-0,01	0,01	0,03	0,01
TMET116	mQTL2H-3_2	54	2H	107	0,01	0,01	0,00	0,01	0,00	2,68	0,00	0,01	-0,10	0,02	0,04	0,02	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	-0,03	0,02	0,02	0,02	-0,13	0,01	0,02	0,01
TMET116	mQTL2H-4_2	50	2H	142,15	0,02	0,00	0,00	0,02	0,01	0,99	0,03	0,02	0,00	0,01	0,02	0,00	-0,01	0,07	0,00	0,02	0,02	0,02	0,00	0,05	0,01	0,00	0,00	0,03	0,00
TMET116	mQTL3H-1_2	51	3H	51,25	-0,02	-0,07	-0,05	-0,08	-0,03	-1,12	-0,03	-0,03	-0,07	-0,17	-0,18	-0,04	0,01	-0,12	-0,02	-0,03	-0,11	-0,04	-0,01	-0,03	-0,03	-0,05	-0,06	-0,01	-0,03



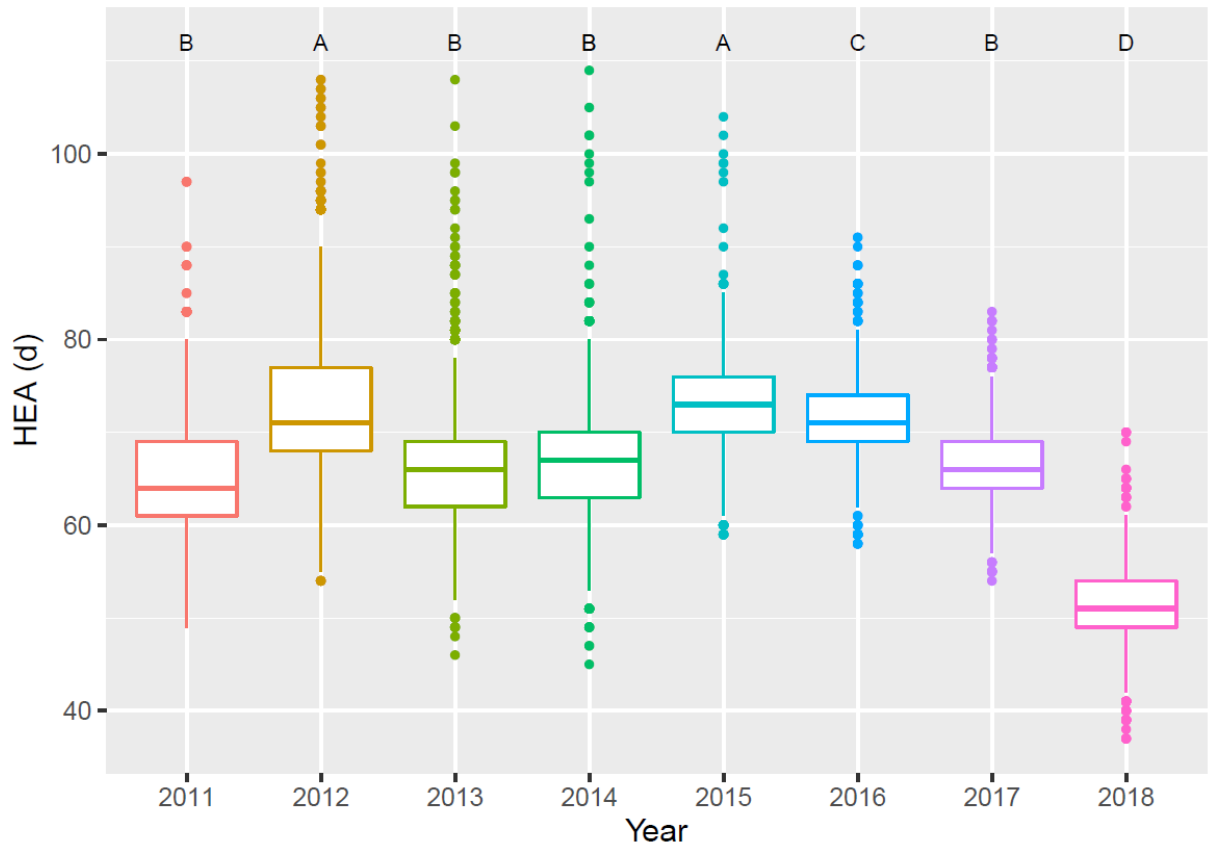
Metabolite	mQTL	DR	chr <sup>a</sup>	pos <sup>a</sup>	F01 <sup>b</sup>	F02	F03	F04	F05	F06	F07	F08	F09	F10	F11	F12	F13	F14	F15	F16	F17	F18	F19	F20	F21	F22	F23	F24	F25
TMET116	mQTL3H-3_2	27	3H	122,3	0,00	-0,01	0,08	-0,01	0,00	-0,27	0,00	0,00	0,00	0,02	0,00	-0,01	0,02	-0,01	0,02	-1,41	-0,05	-0,01	0,00	0,00	-0,01	-0,01	-0,01	0,00	0,00
TMET116	mQTL4H-1_2	29	4H	14,9	0,06	0,22	0,00	0,05	0,34	0,88	-0,02	0,07	0,03	0,01	-0,06	-0,19	0,02	0,08	0,05	0,30	-0,19	0,06	0,03	0,02	0,03	0,03	0,02	0,04	0,02
TMET116	mQTL4H-3_2	26	4H	114,3	0,00	0,22	-0,01	0,00	0,01	0,60	0,17	0,05	0,05	-0,01	0,00	-0,01	0,00	0,04	0,26	0,01	0,15	0,55	0,08	0,03	0,02	-0,03	0,00	-0,03	-0,03
TMET116	mQTL5H-1_2	48	5H	20,6	0,00	0,00	-0,01	-0,01	0,00	1,88	-0,01	0,00	0,00	-0,02	-0,02	-0,01	-0,05	0,00	0,00	0,00	0,01	0,00	0,00	0,01	-0,01	-0,04	-0,01	0,00	0,00
TMET116	mQTL5H-3_2	71	5H	125,6	-0,04	-0,05	-0,03	-0,04	-0,04	0,17	0,00	0,04	-0,05	-0,12	-0,04	0,00	-0,01	-0,04	0,00	-0,04	-0,02	-0,01	-0,03	-0,03	0,00	0,02	-0,05	-0,02	-0,04
TMET116	mQTL5H-4_2	55	5H	142,9	-0,02	-0,02	-0,01	-0,04	-0,01	3,52	-0,03	0,01	-0,05	-0,04	-0,05	0,00	-0,02	0,00	0,00	-0,06	-0,01	-0,01	-0,01	0,00	0,02	0,01	-0,02	0,00	-0,02
TMET116	mQTL5H-5_2	67	5H	168,4	-0,06	-0,01	-0,02	-0,01	-0,02	-1,70	-0,02	0,00	-0,06	-0,03	-0,06	-0,03	-0,02	-0,03	-0,01	-0,06	-0,01	-0,01	-0,01	-0,01	-0,01	-0,01	-0,03	-0,02	-0,01
TMET116	mQTL6H-2_2	32	6H	77,1	0,01	0,01	0,02	0,00	0,00	-0,24	-0,01	-0,26	0,00	-0,22	0,00	0,00	0,05	0,00	0,02	0,00	-0,01	0,01	0,01	0,01	0,00	0,00	0,03	-0,24	0,01
TMET116	mQTL7H-3_2	33	7H	122,65	-0,01	-0,01	0,00	-0,03	0,05	-1,15	-0,03	-0,02	-0,01	-0,01	-0,02	-0,01	0,00	-0,01	-0,02	-0,01	-0,02	-0,03	0,00	-1,19	-0,01	-0,01	0,00	0,00	-0,01
TMET83	mQTL1H-1_2	34	1H	5	0,00	-0,01	-0,45	-0,01	-0,01	-0,08	0,00	0,00	-0,07	0,00	-0,02	-0,01	0,02	0,00	-0,01	0,00	-0,48	0,00	-0,01	0,00	-0,97	0,00	-0,01	-0,07	0,00
TMET83	mQTL2H-1_2	40	2H	1,15	0,01	0,03	0,00	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	0,72	0,00	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01	1,06	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
TMET83	mQTL2H-3_2	63	2H	107	-0,01	-0,09	-0,01	-0,03	-0,03	1,42	-0,04	-0,04	-0,03	-0,01	-0,01	-0,02	-0,08	-0,20	-0,02	-0,15	-0,06	-0,04	-0,03	-0,03	-0,08	-0,05	-0,02	0,00	-0,32
TMET83	mQTL2H-4_2	30	2H	142,15	0,02	0,03	0,00	0,03	0,01	0,22	0,02	0,00	0,00	0,02	0,00	0,00	0,01	0,06	0,02	0,02	0,01	0,02	-0,45	0,01	-0,05	-0,05	-0,03	-0,05	0,01
TMET83	mQTL3H-2_2	32	3H	74,2	-0,05	-0,16	0,01	-0,12	-0,12	-0,55	0,00	-0,15	-0,01	-0,12	-0,08	-0,04	-0,09	-0,14	-0,01	-0,02	-0,06	-0,06	-0,07	-0,02	0,01	-0,05	0,01	-0,40	0,01
TMET83	mQTL3H-3_2	28	3H	113,4	0,15	0,15	0,14	0,14	0,14	0,15	0,14	0,15	0,15	0,03	0,15	0,13	0,15	0,17	0,15	-0,14	0,15	0,13	0,16	0,13	0,15	0,15	0,15	0,11	0,05
TMET83	mQTL4H-2_2	73	4H	104	-0,01	-0,03	-0,05	-0,04	0,00	-0,02	-0,64	0,00	-0,03	-0,03	0,01	-0,03	-0,29	-0,03	0,00	-0,03	-0,02	-0,03	-0,04	-0,03	0,00	-0,03	-0,01	-0,03	-0,98
TMET83	mQTL6H-1_2	32	6H	65,9	-0,01	-0,07	-0,01	-0,01	-0,02	-0,26	-0,02	0,00	-0,18	-0,01	-0,01	-0,02	-0,02	-0,06	-0,01	-0,02	-0,01	-0,28	-0,09	-0,10	-0,42	-0,42	0,00	-0,19	-0,01
TMET83	mQTL6H-3_2	74	6H	113,2	-0,04	0,00	-0,05	0,04	0,00	-0,01	0,29	-0,09	-0,04	0,02	0,01	0,02	-0,12	-0,04	-0,09	0,02	0,00	-0,01	-0,08	0,47	0,03	0,06	-0,05	0,54	0,06
TMET83	mQTL6H-3_2	100	6H	126,5	-1,80	-1,76	-1,81	-1,73	-1,75	-1,75	-1,73	-1,83	-1,80	-1,75	-1,76	-1,74	-1,87	-1,81	-1,85	-1,70	-1,76	-1,76	-1,83	-1,83	-1,69	-1,69	-1,81	-1,76	-1,68

<sup>a</sup>Genetische Position des mQTL Peak Markers, abgeleitet von Maurer et al. (Maurer et al. 2015), <sup>b</sup>Effektschätzungen für jede der 25 HEB-Familien.

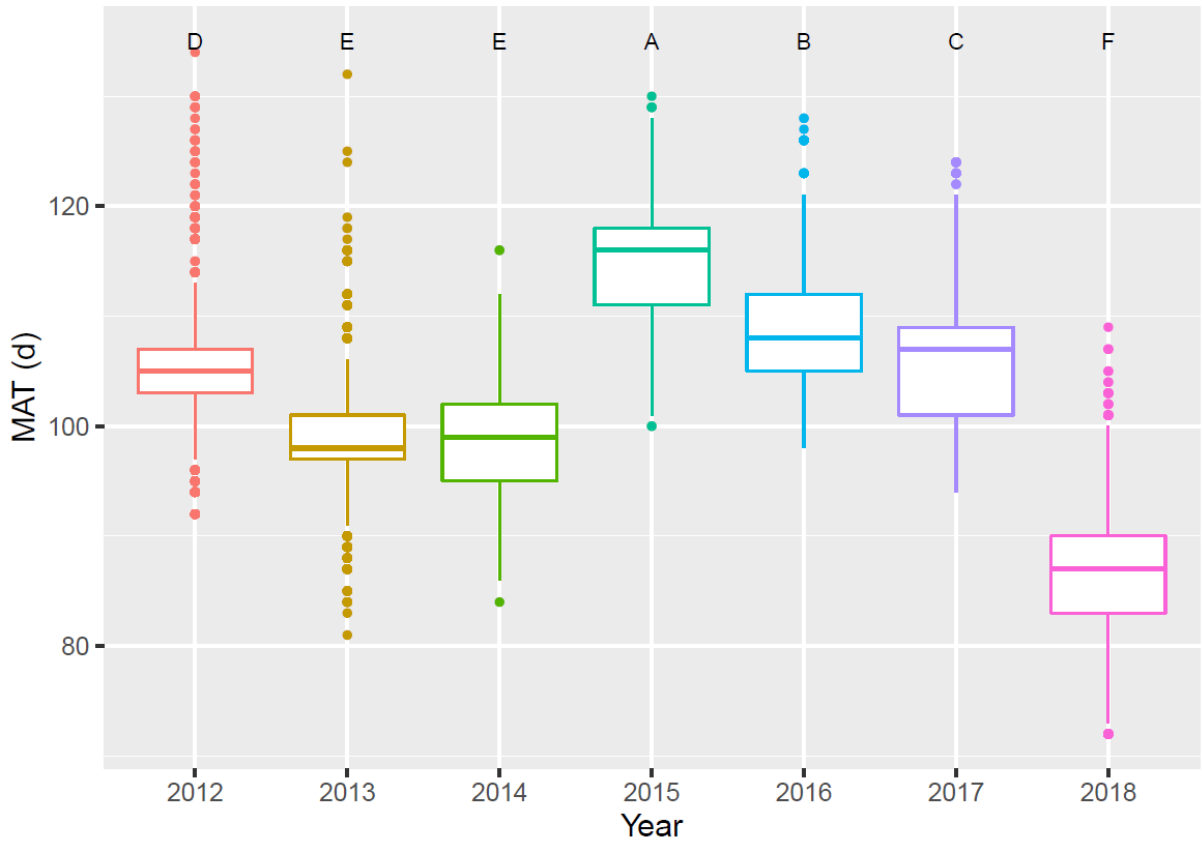
Boxplot SHO over years



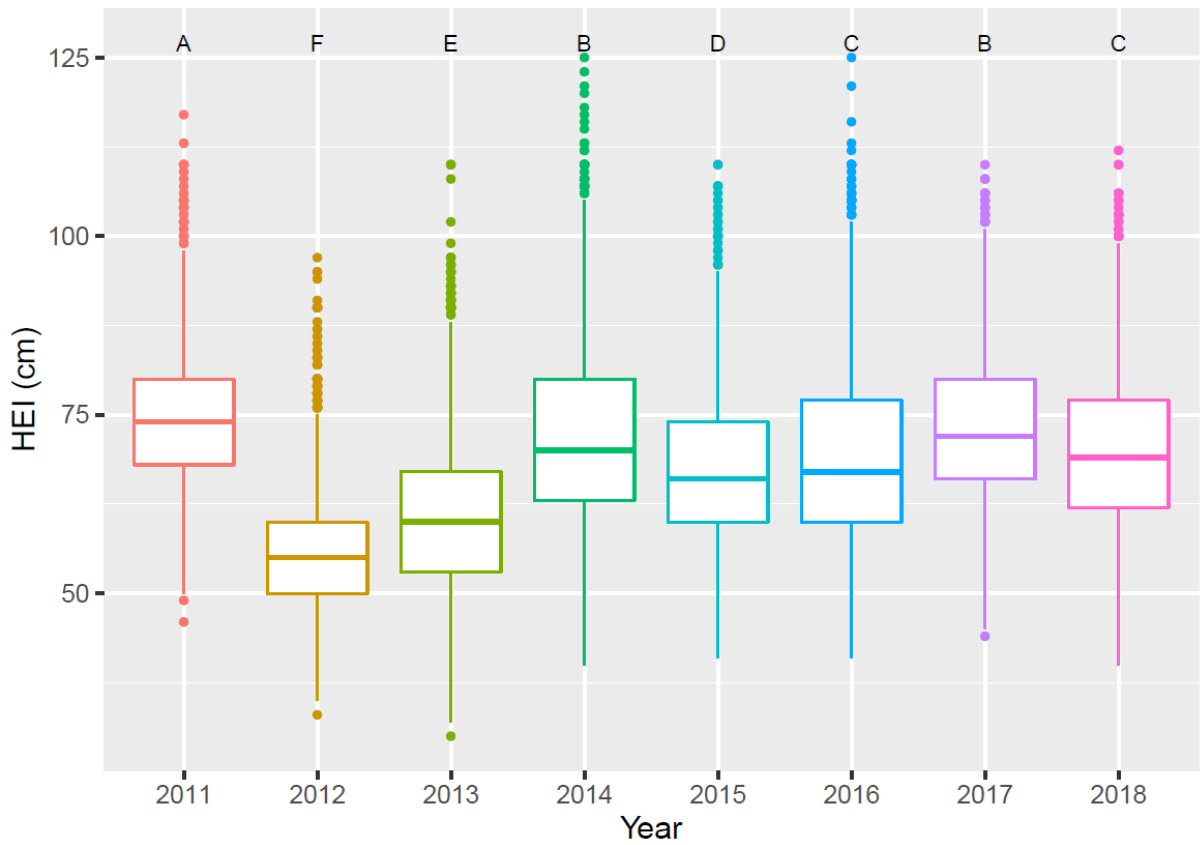
Boxplot HEA over years



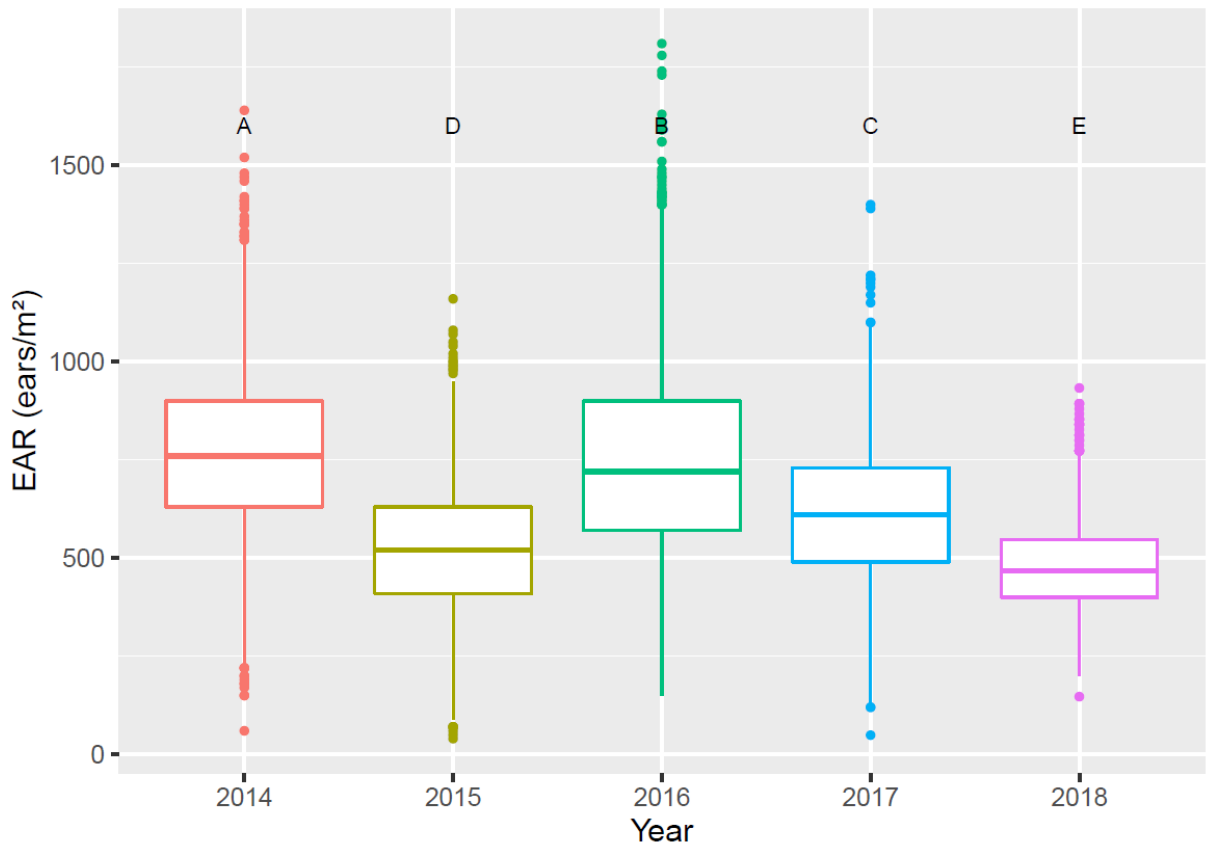
Boxplot MAT over years



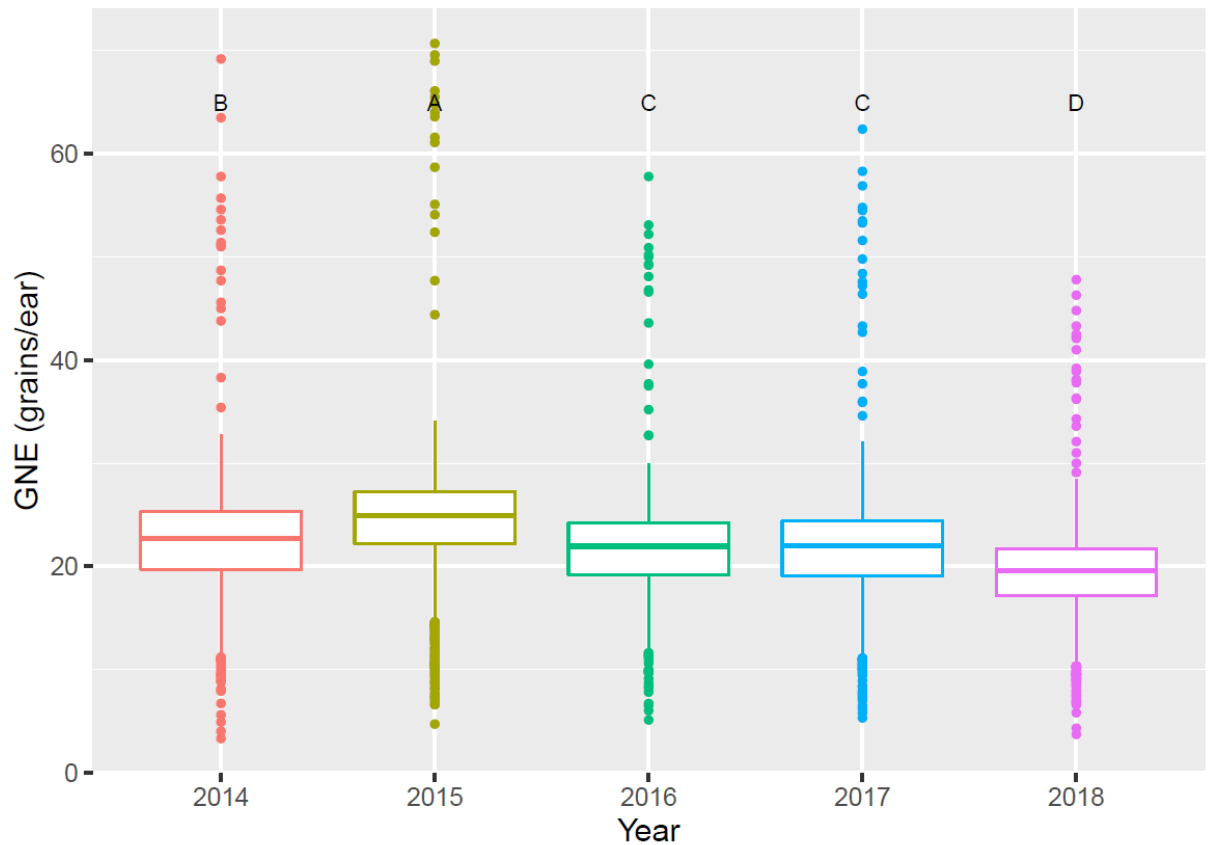
Boxplot HEI over years



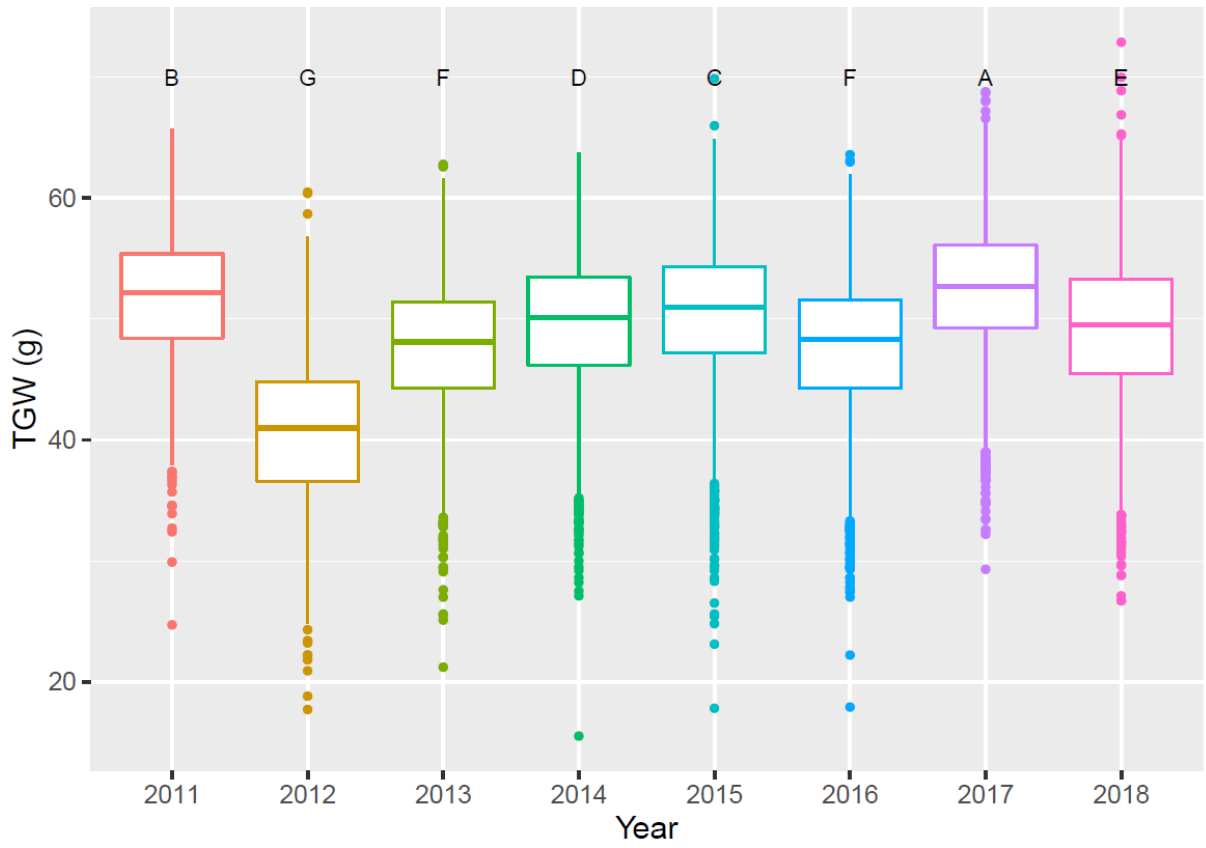
Boxplot EAR over years



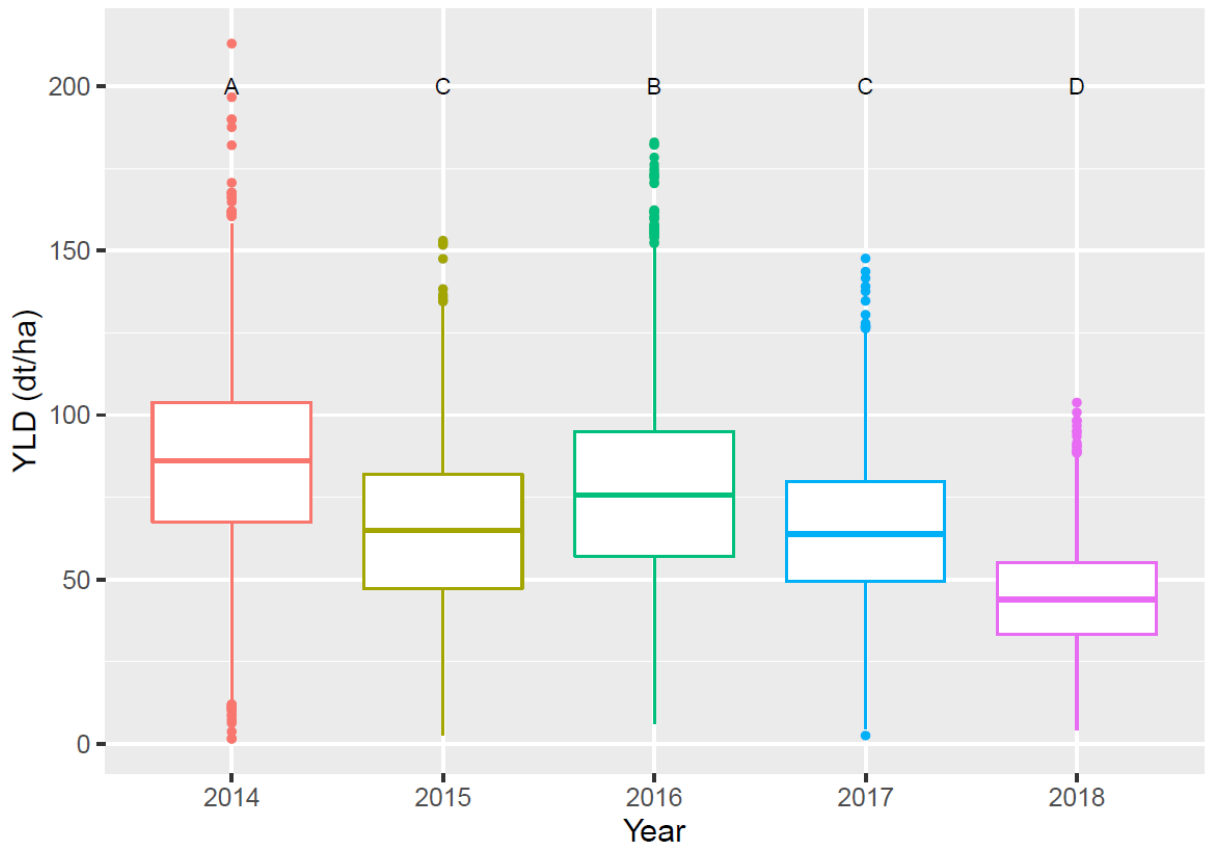
Boxplot GNE over years



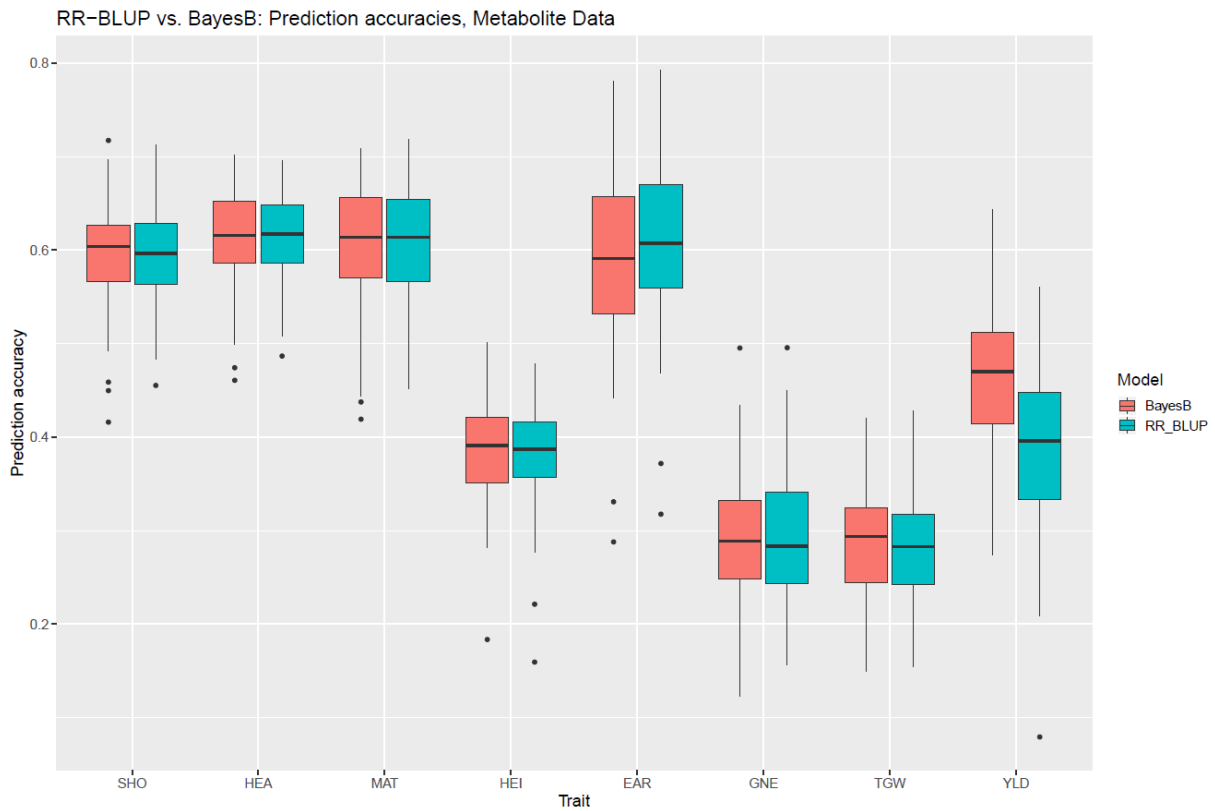
Boxplot TGW over years



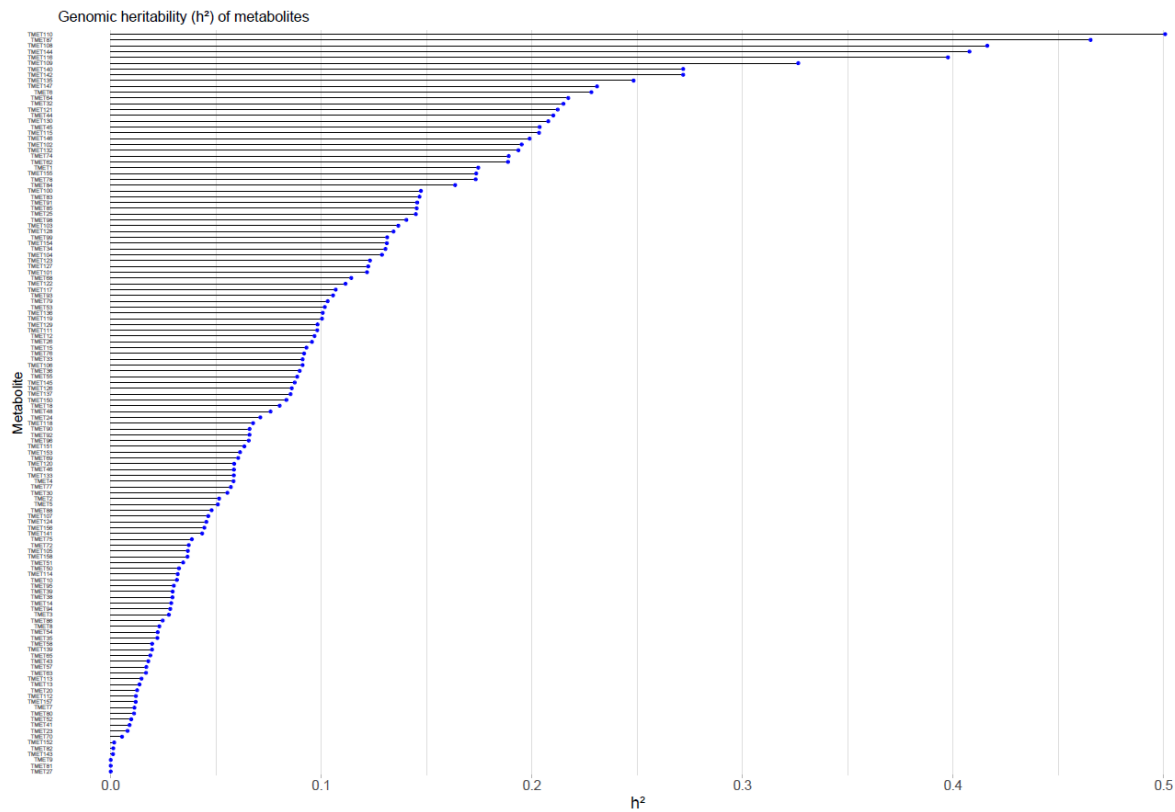
Boxplot YLD over years



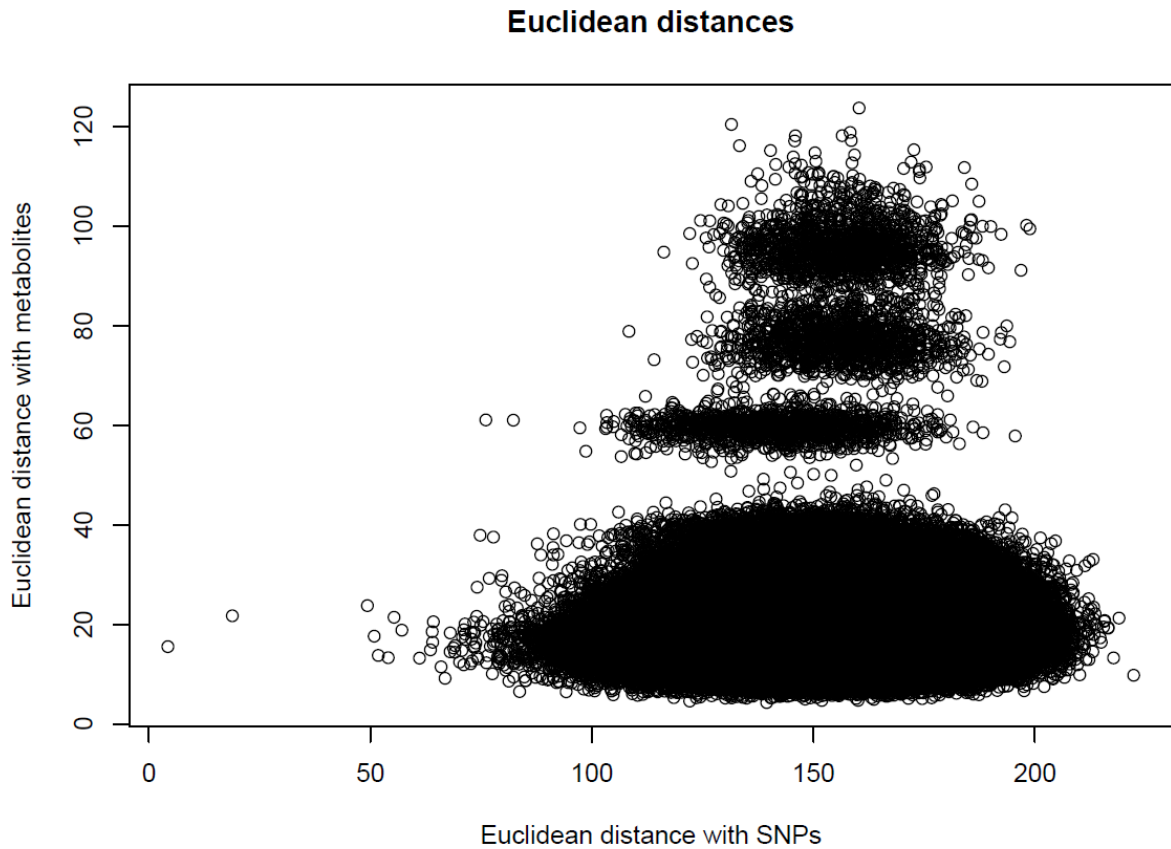
**Abb. A 1.** Boxplots aller Merkmale für die einzelnen Jahre, über die Behandlungsstufen hinweg (Gemmer et al. 2020).



**Abb. A2.** Kreuzvalidierte Vorhersagegenauigkeiten der Merkmale unter Verwendung der Metabolitdaten (erste Probennahme) von RR-BLUP und BayesB (Gemmer et al. 2020).

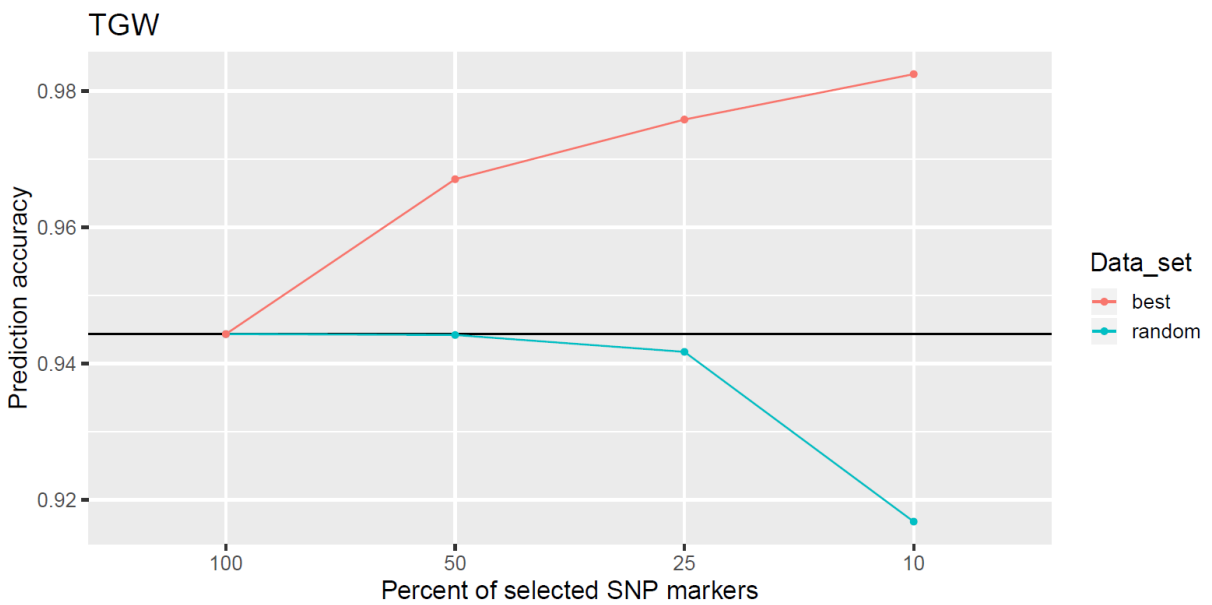
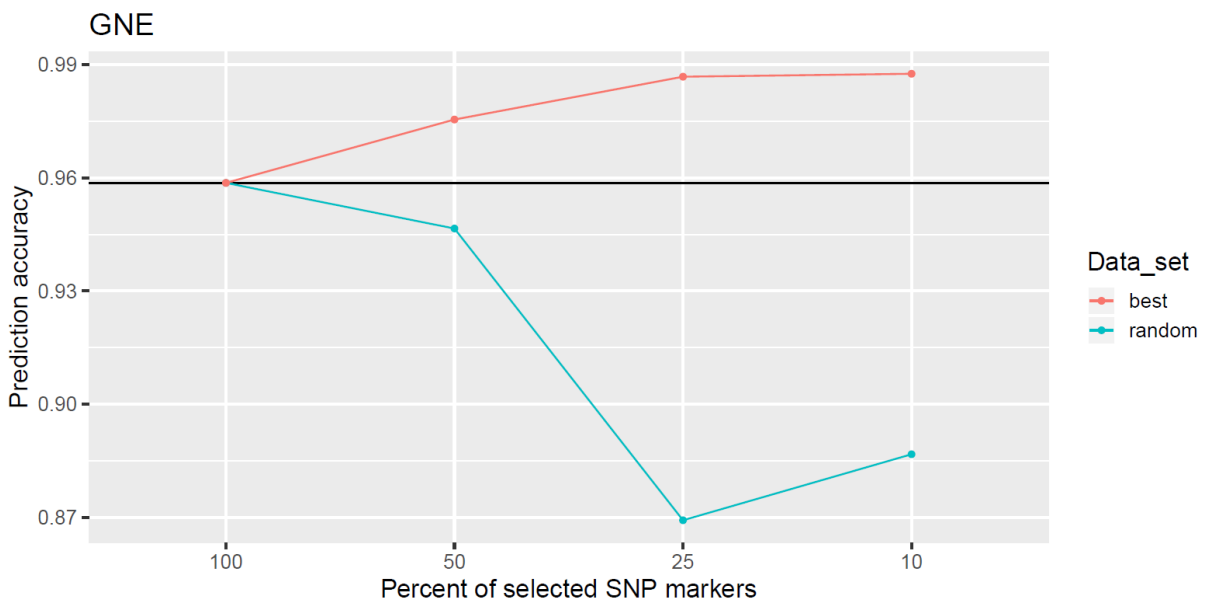
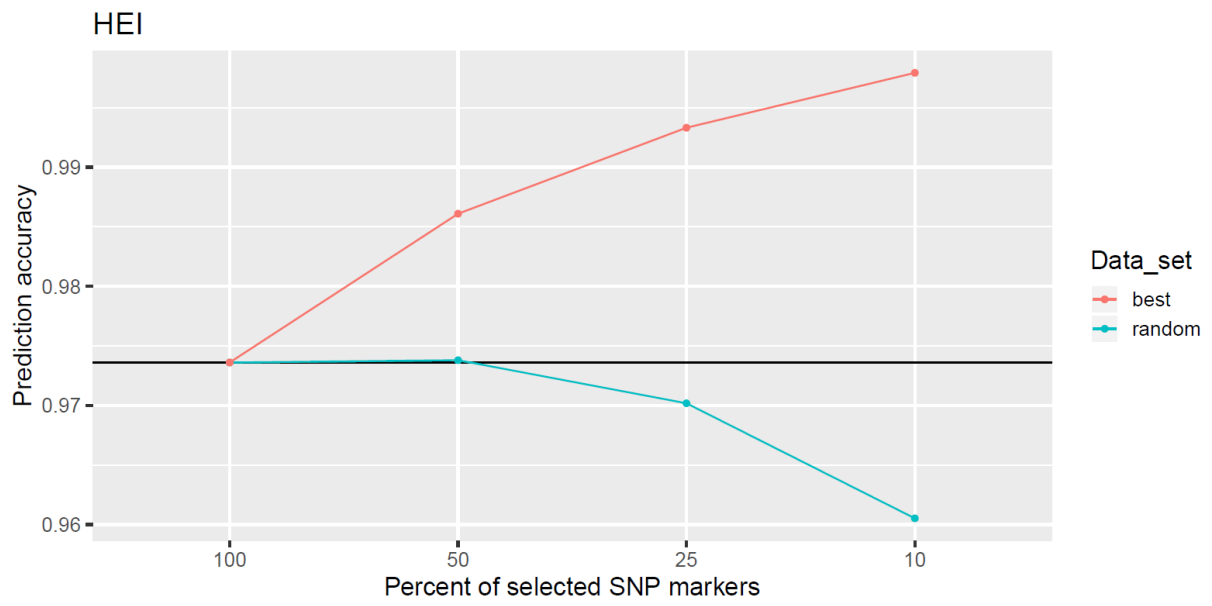


**Abb. A3.** Genomische Heritabilitäten aller Metaboliten. Blaue Punkte markieren das  $h^2$  des jeweiligen Metaboliten (Gemmer et al. 2020).

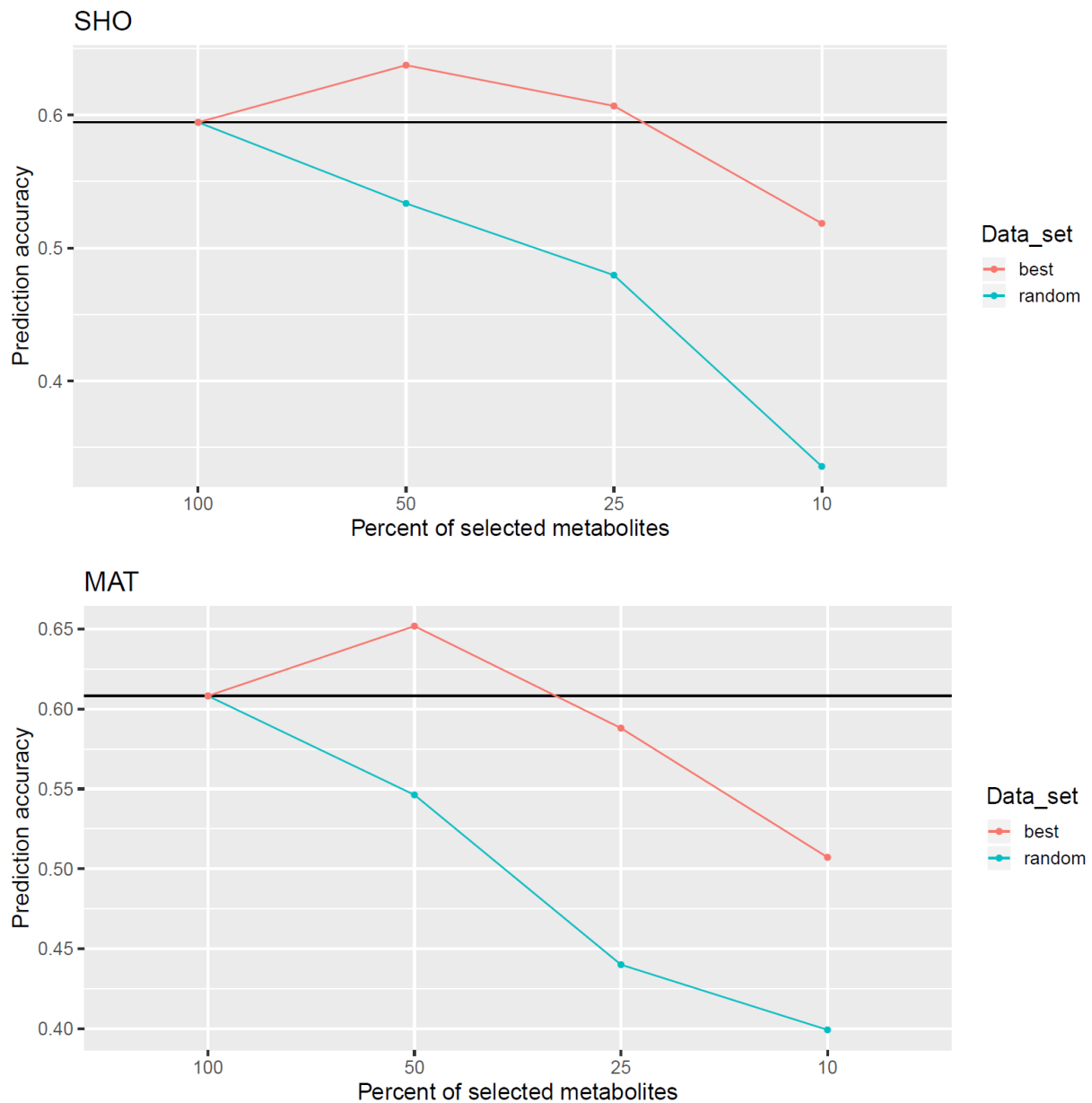


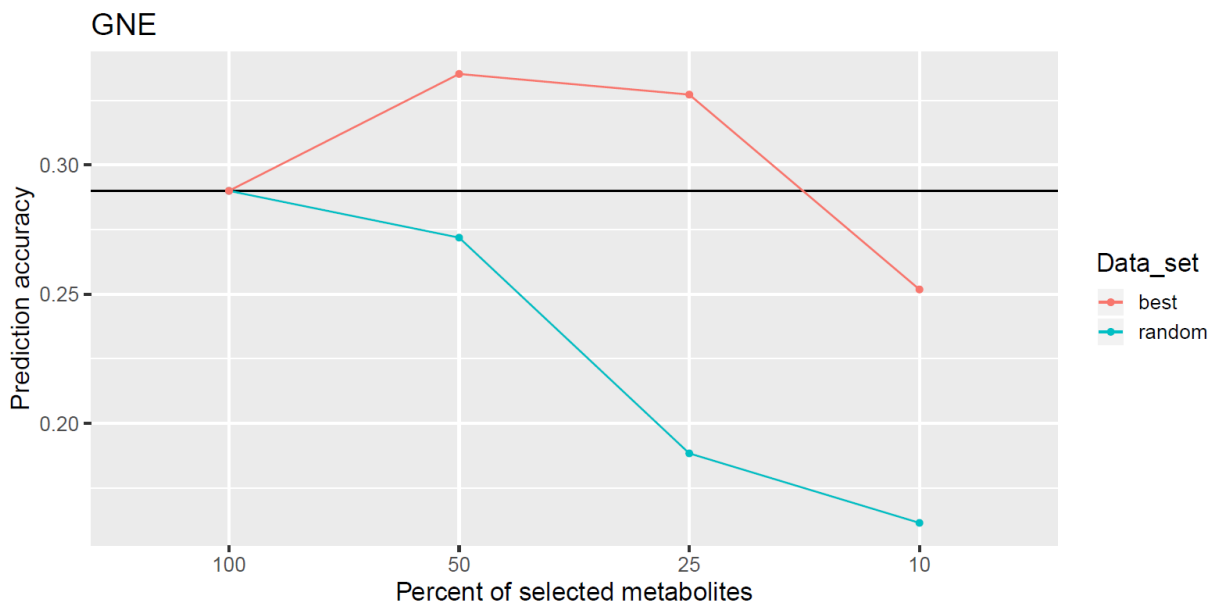
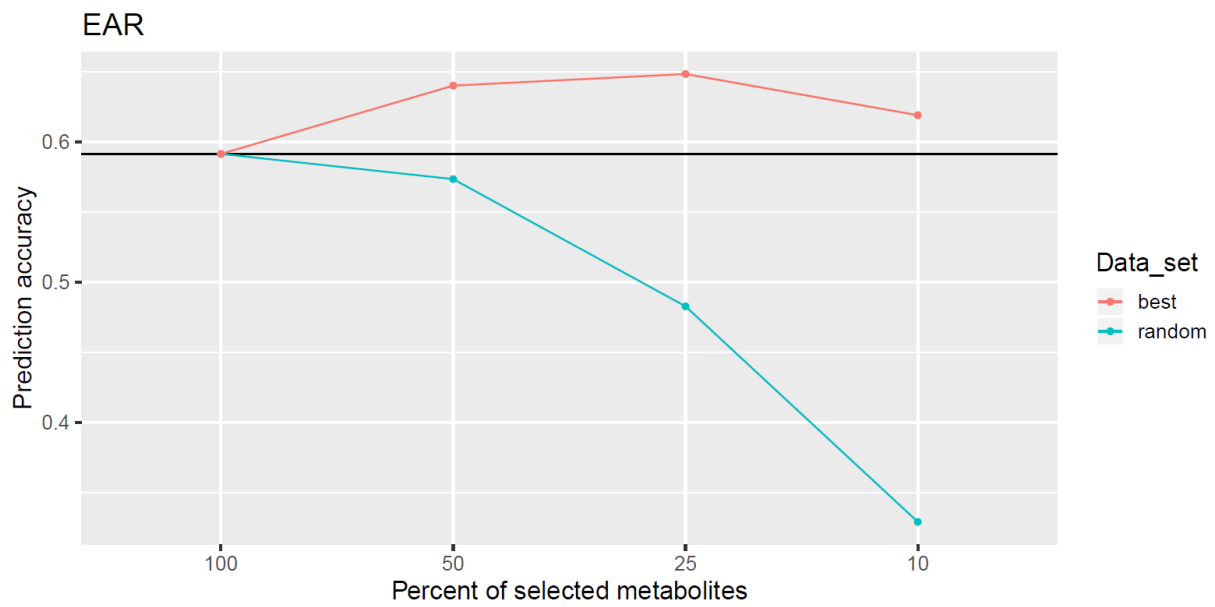
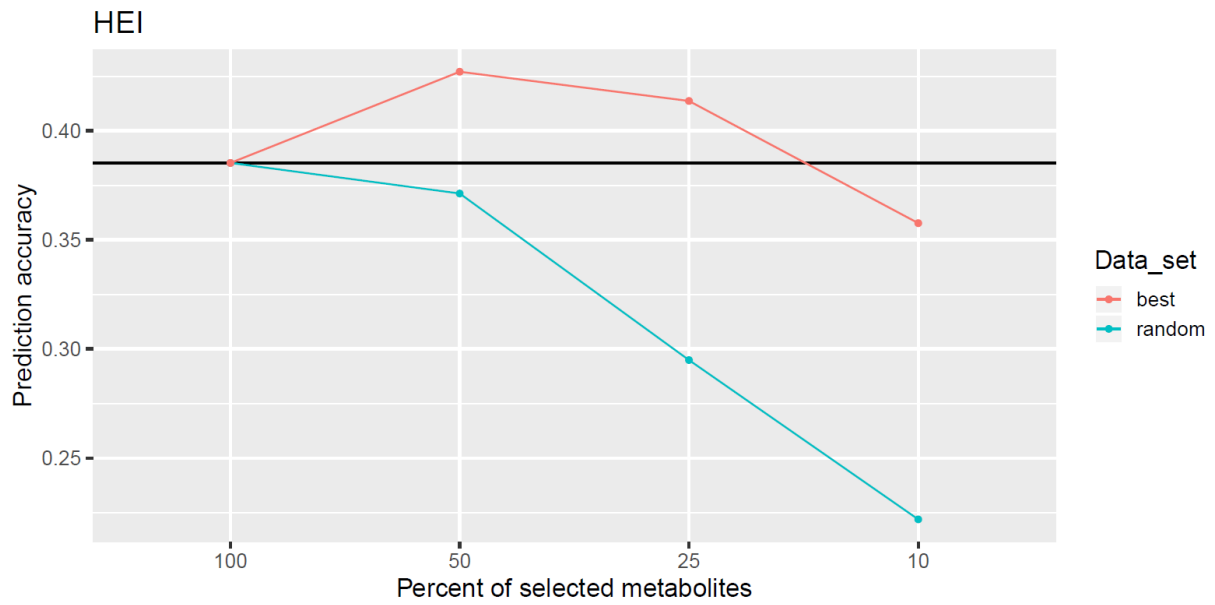
**Abb. A4.** Euklidische Distanzen, geschätzt mit SNPs bzw. Metaboliten. Gegeneinander aufgetragen.  $R = 0,04$ ,  $p$ -Wert  $< 0,0001$  (Gemmer et al. 2020).

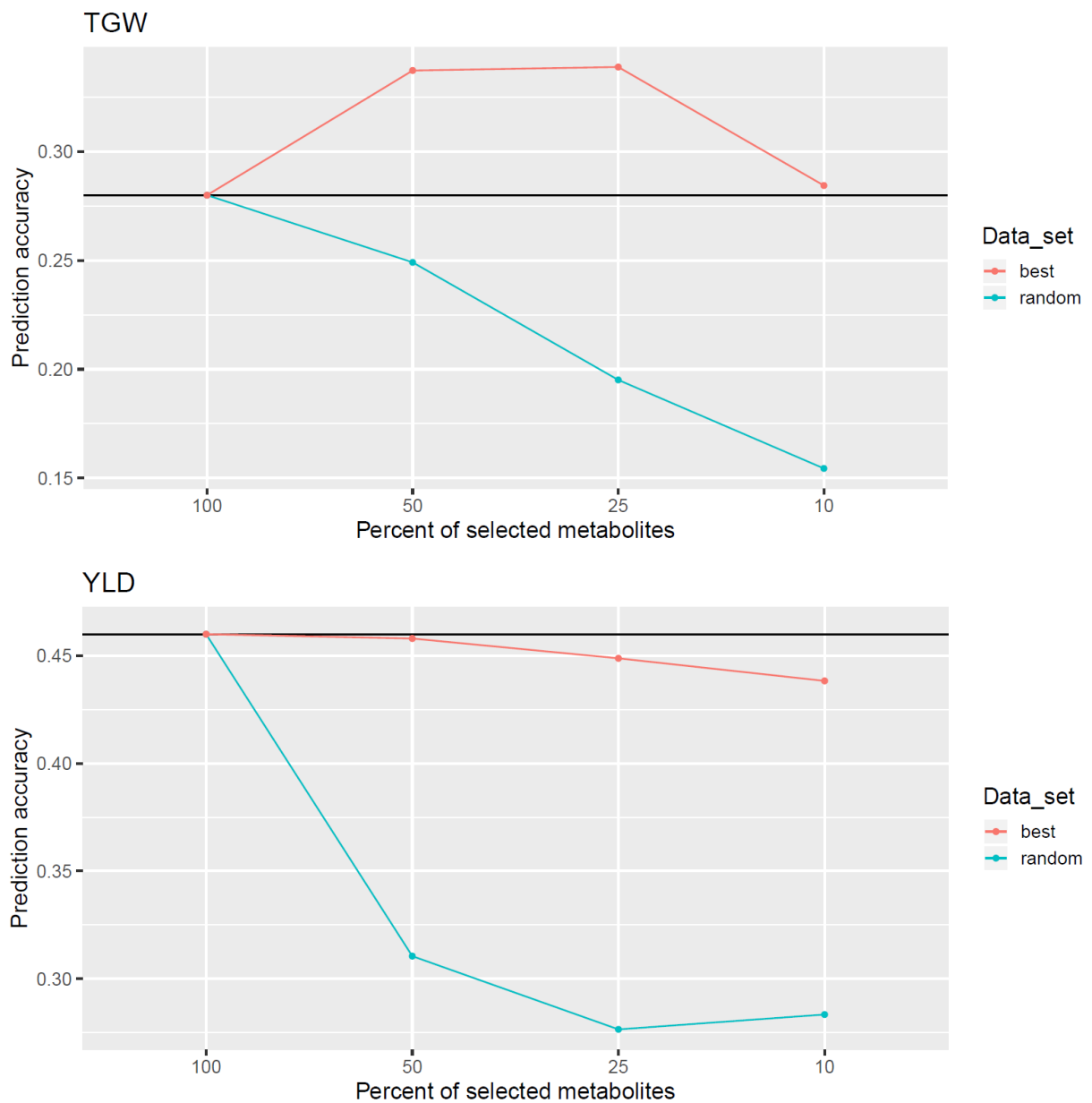




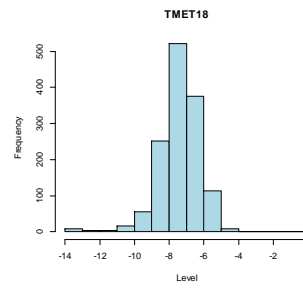
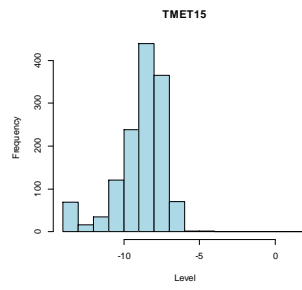
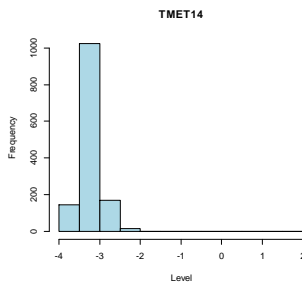
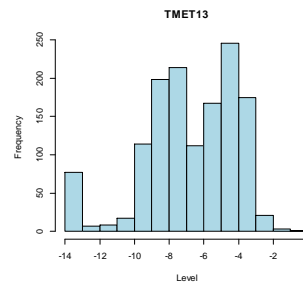
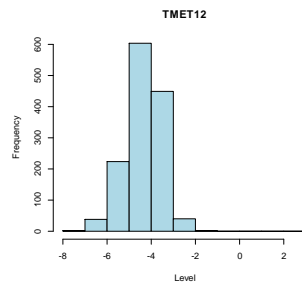
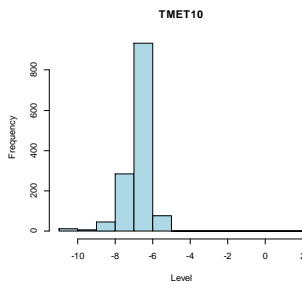
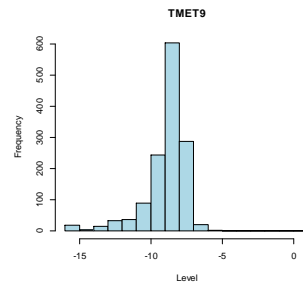
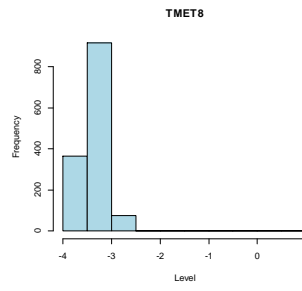
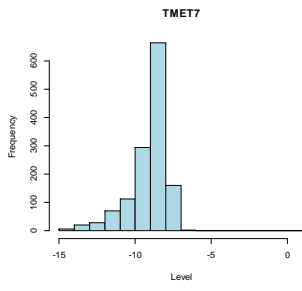
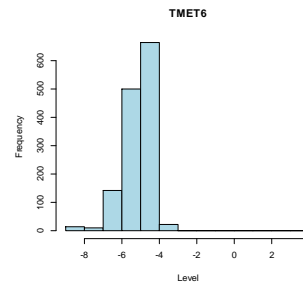
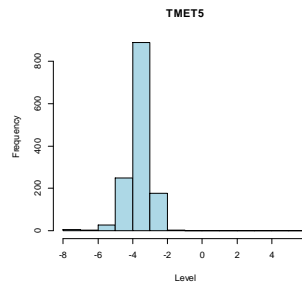
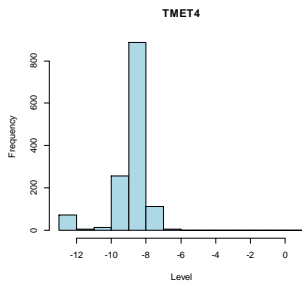
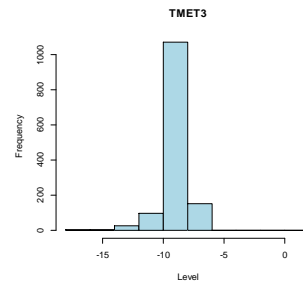
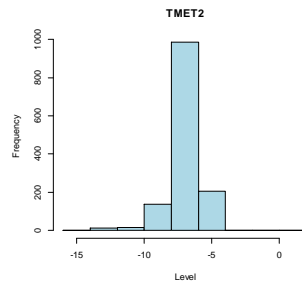
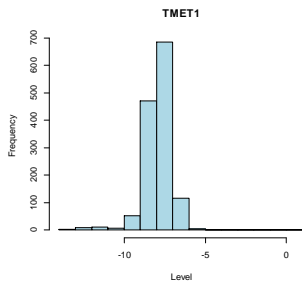
**Abb. A5.** Variation der Vorhersagegenauigkeit für ausgewählte Merkmale in BayesB durch Reduzierung der verwendeten SNPs. Die schwarze Linie zeigt die Vorhersagegenauigkeit unter Verwendung aller SNP-Marker im Modell an (Gemmer et al. 2020).

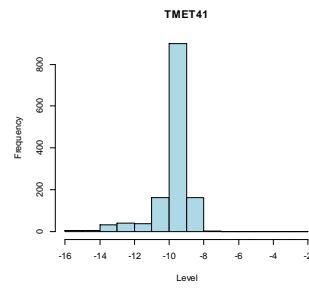
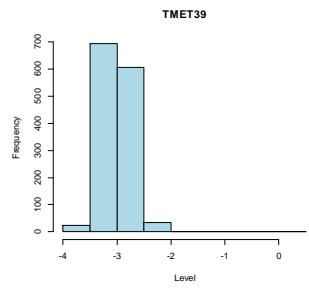
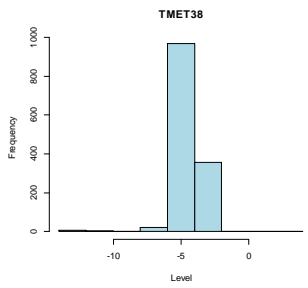
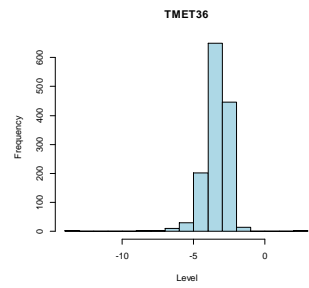
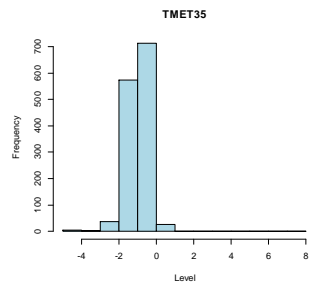
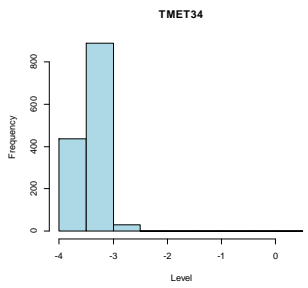
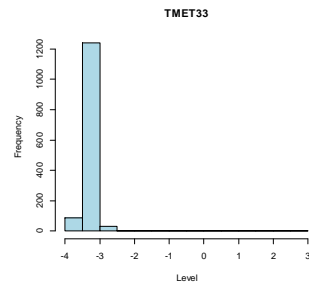
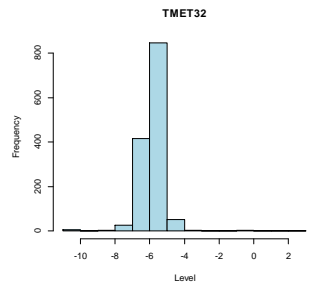
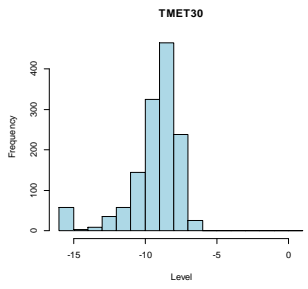
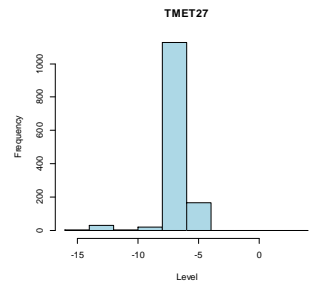
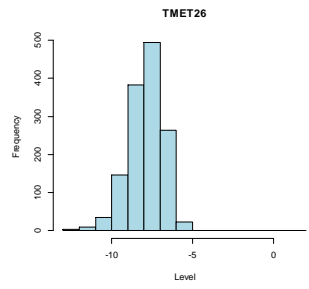
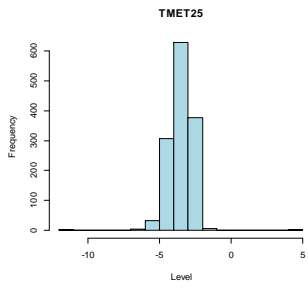
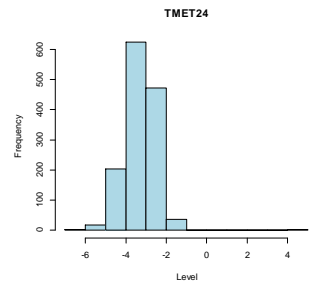
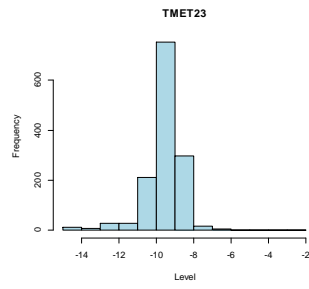
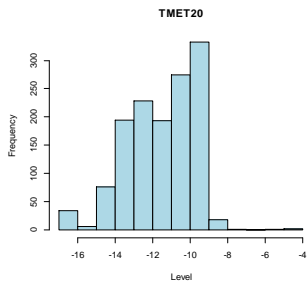


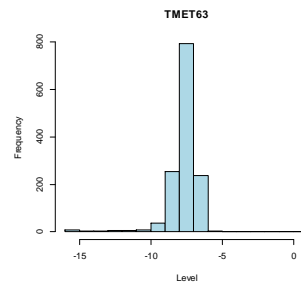
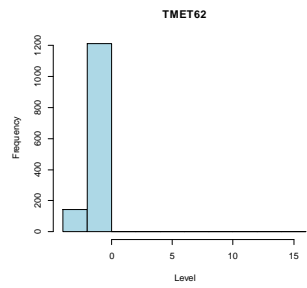
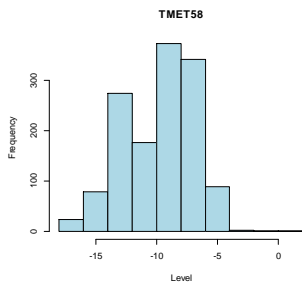
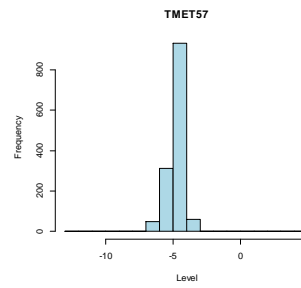
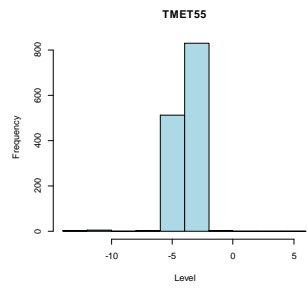
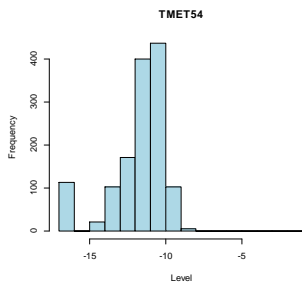
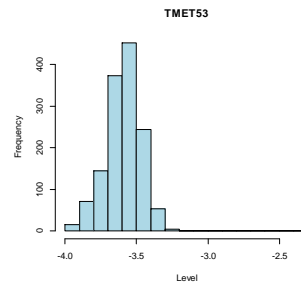
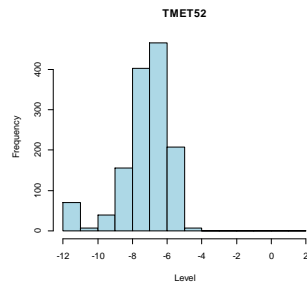
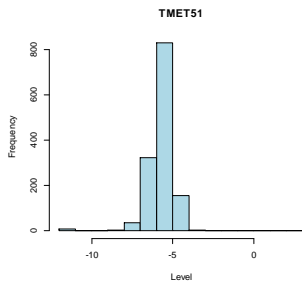
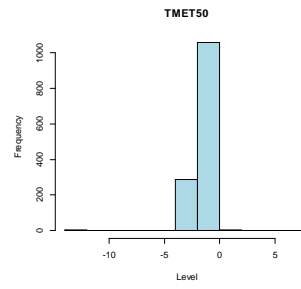
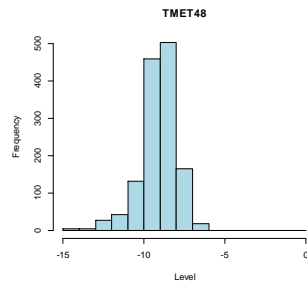
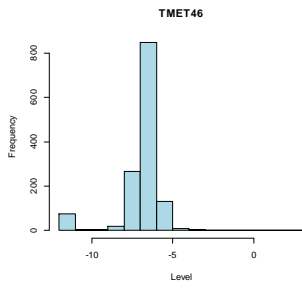
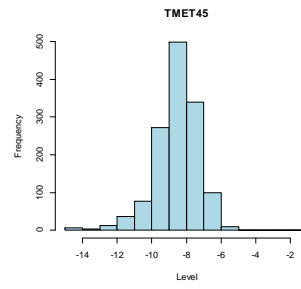
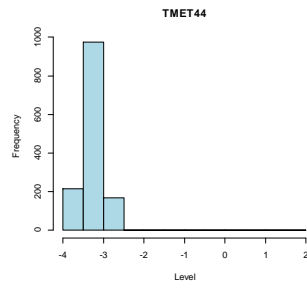
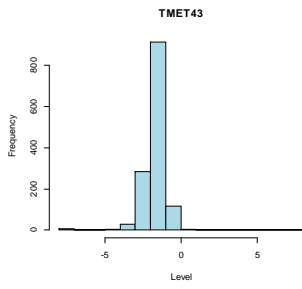


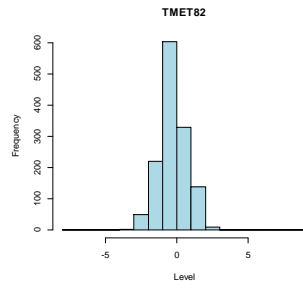
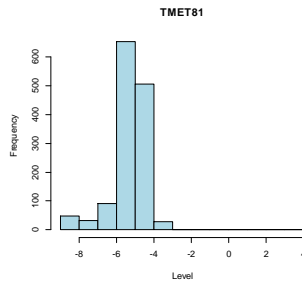
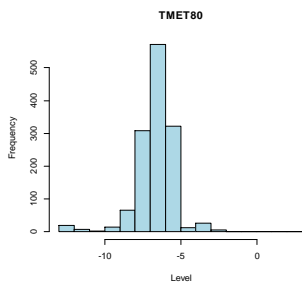
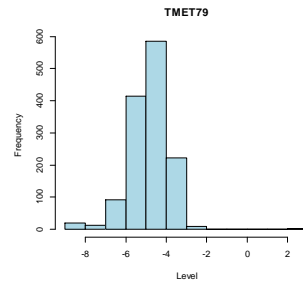
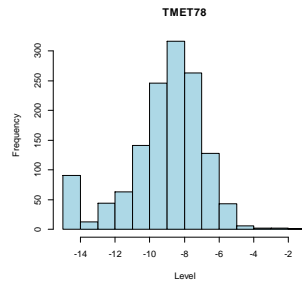
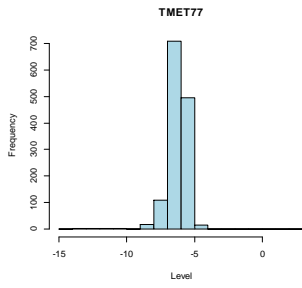
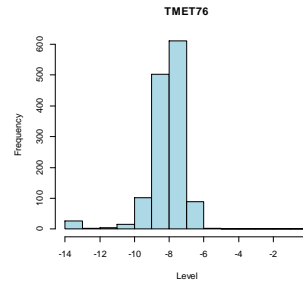
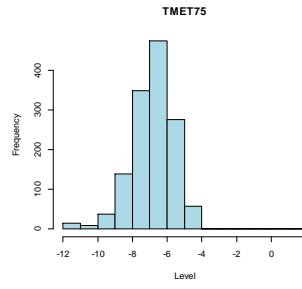
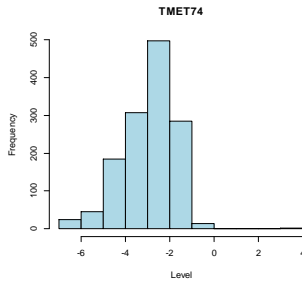
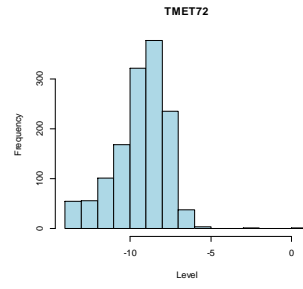
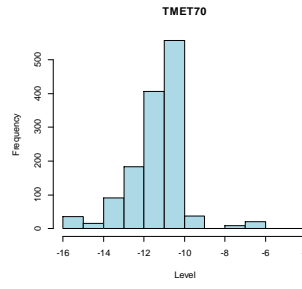
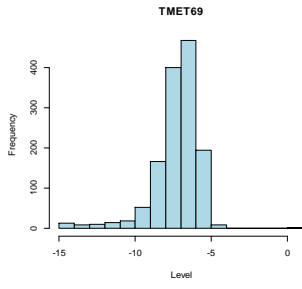
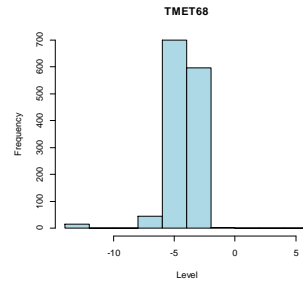
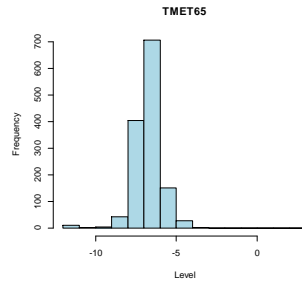
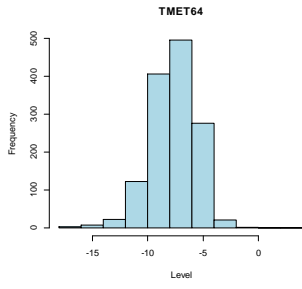


**Abb. A6.** Variation der Vorhersagegenauigkeit für ausgewählte Merkmale in BayesB durch Reduzierung der verwendeten Metaboliten. Die schwarze Linie zeigt die Vorhersagegenauigkeit unter Verwendung aller Metaboliten im Modell an (Gemmer et al. 2020).

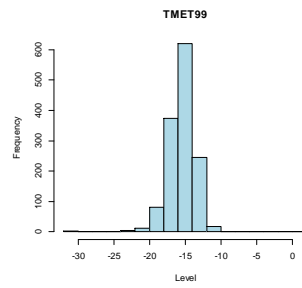
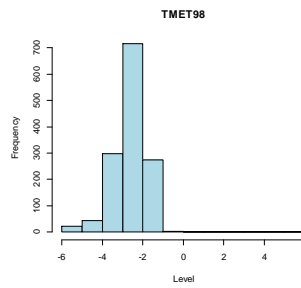
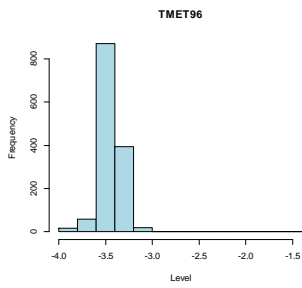
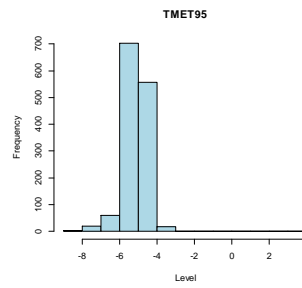
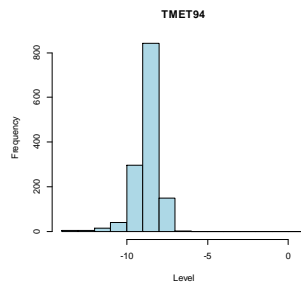
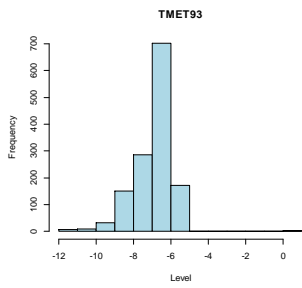
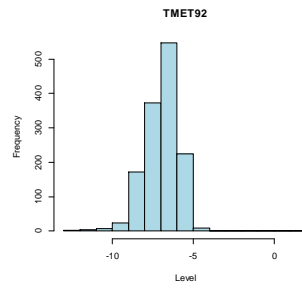
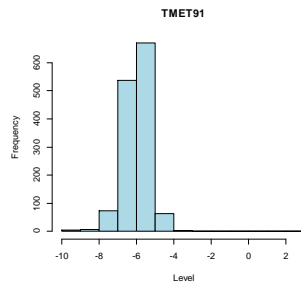
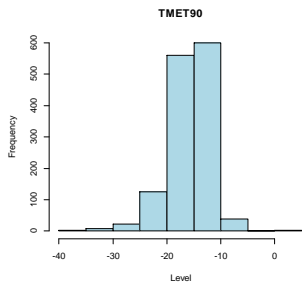
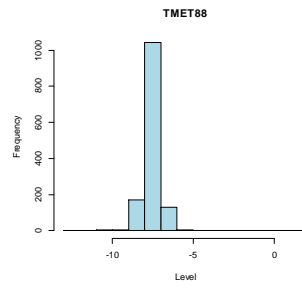
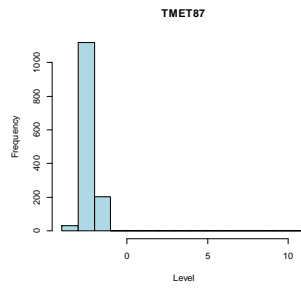
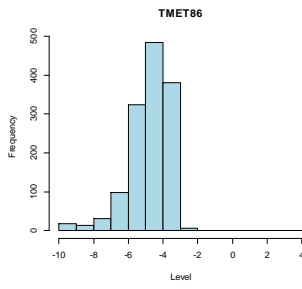
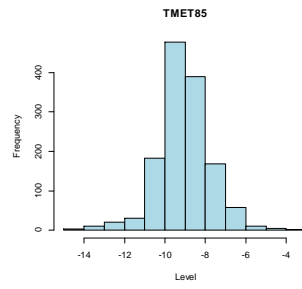
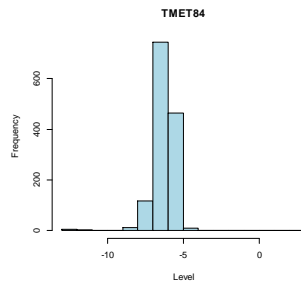
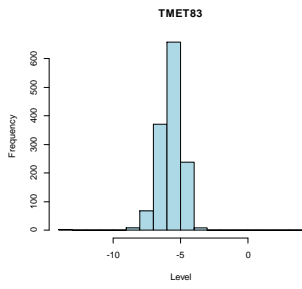


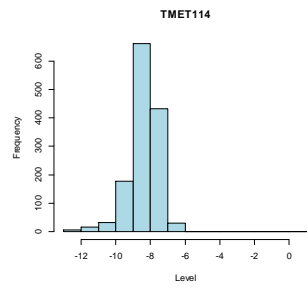
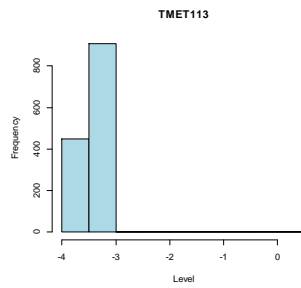
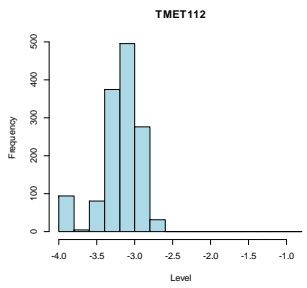
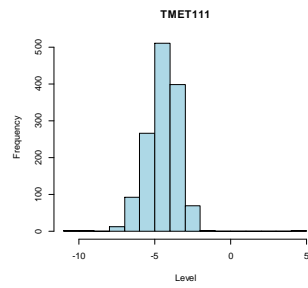
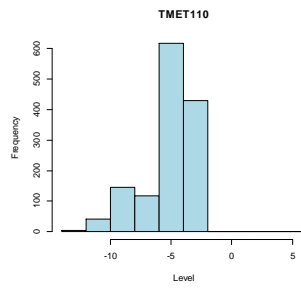
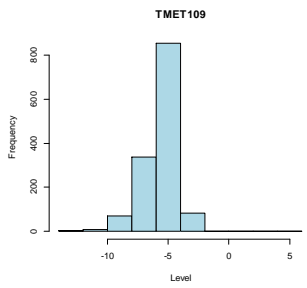
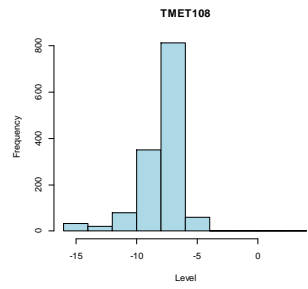
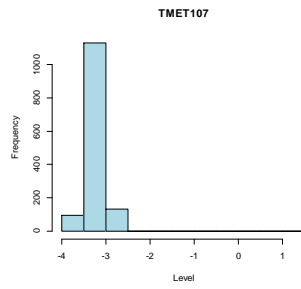
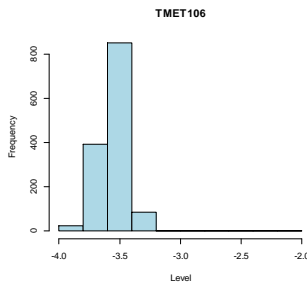
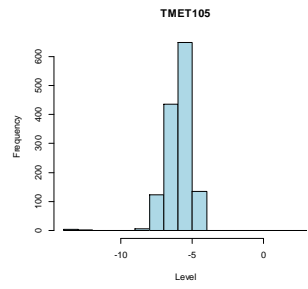
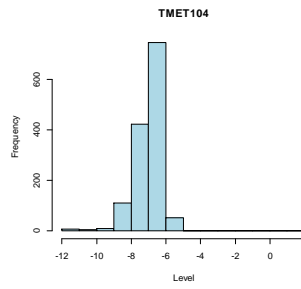
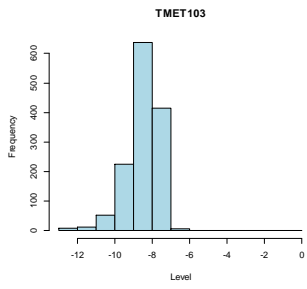
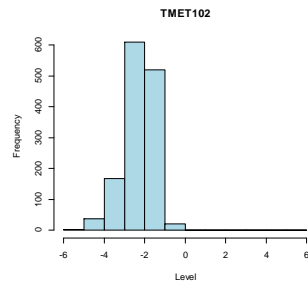
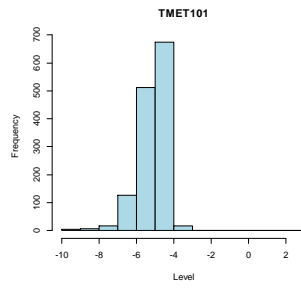
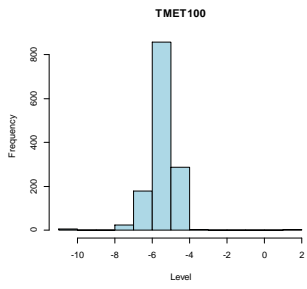


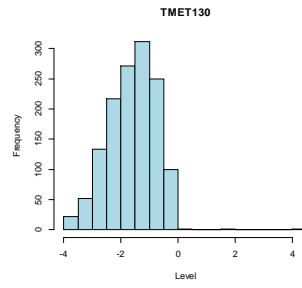
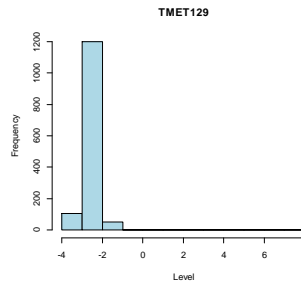
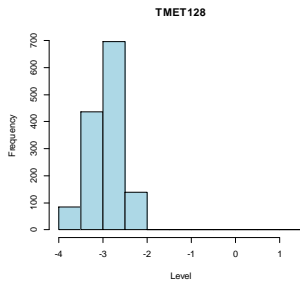
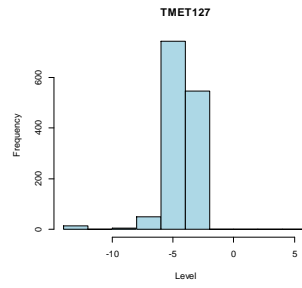
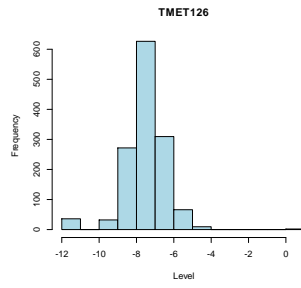
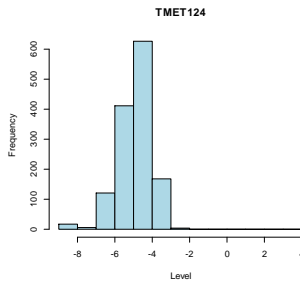
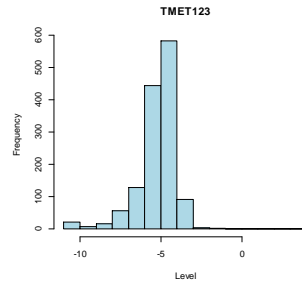
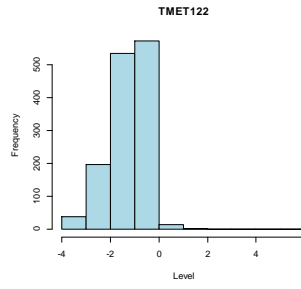
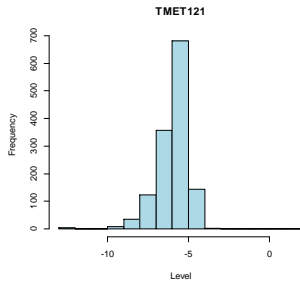
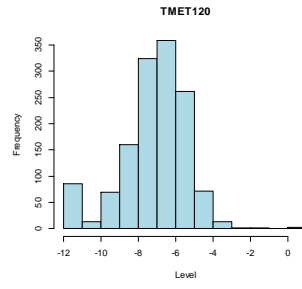
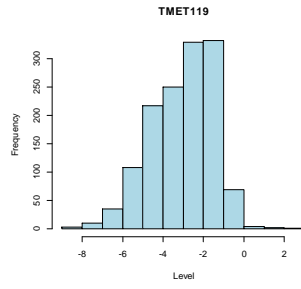
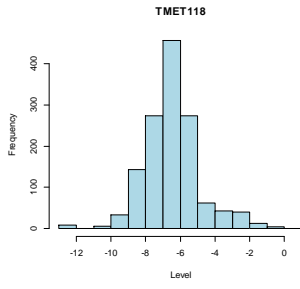
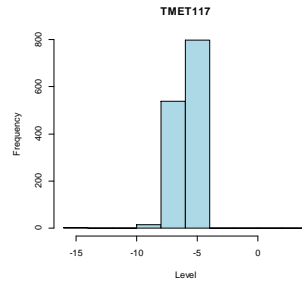
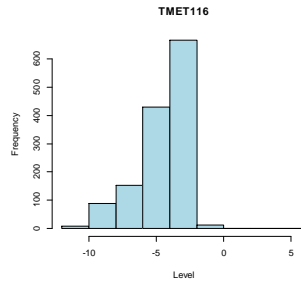
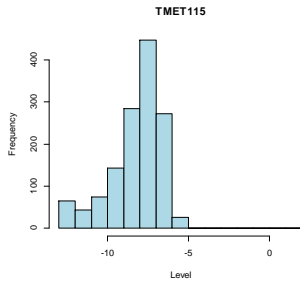


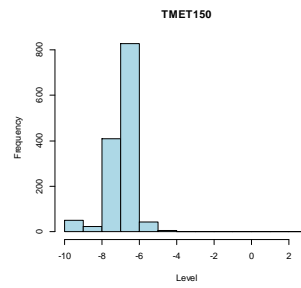
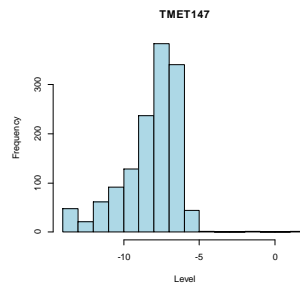
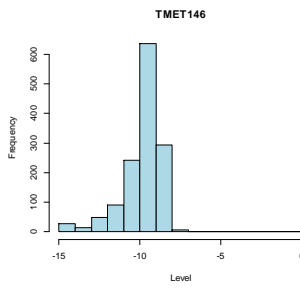
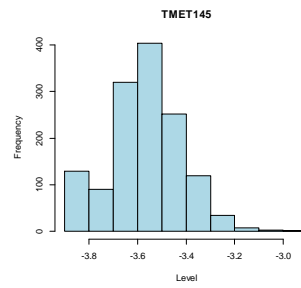
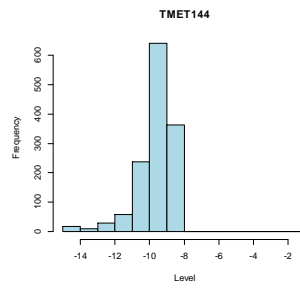
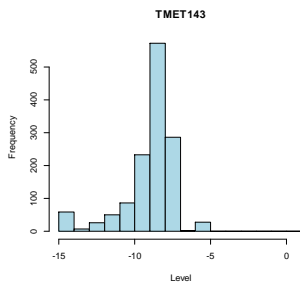
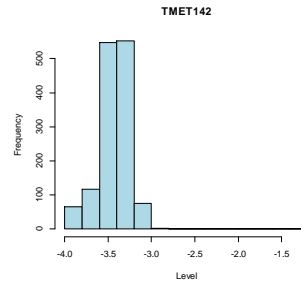
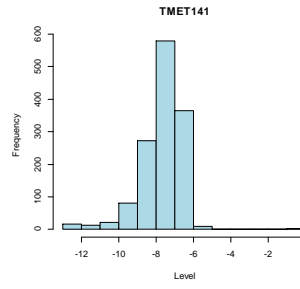
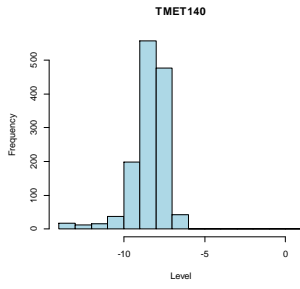
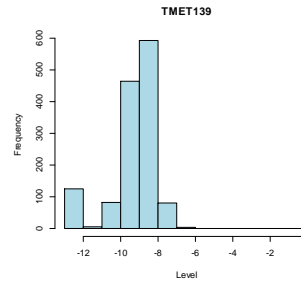
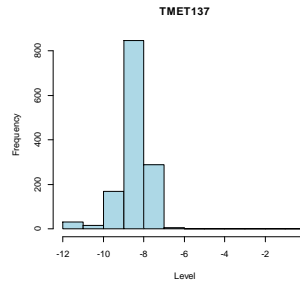
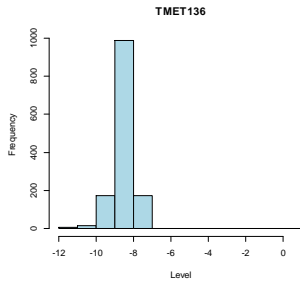
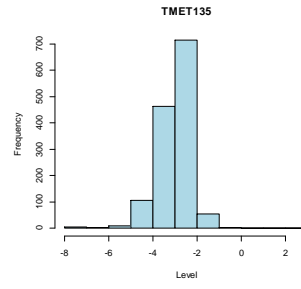
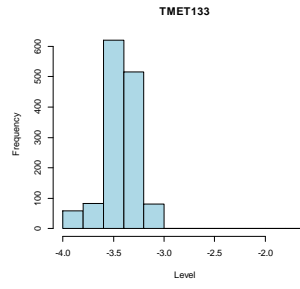
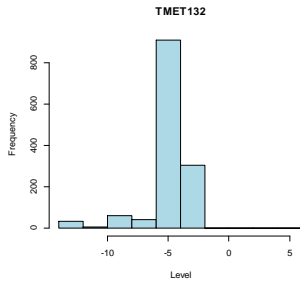


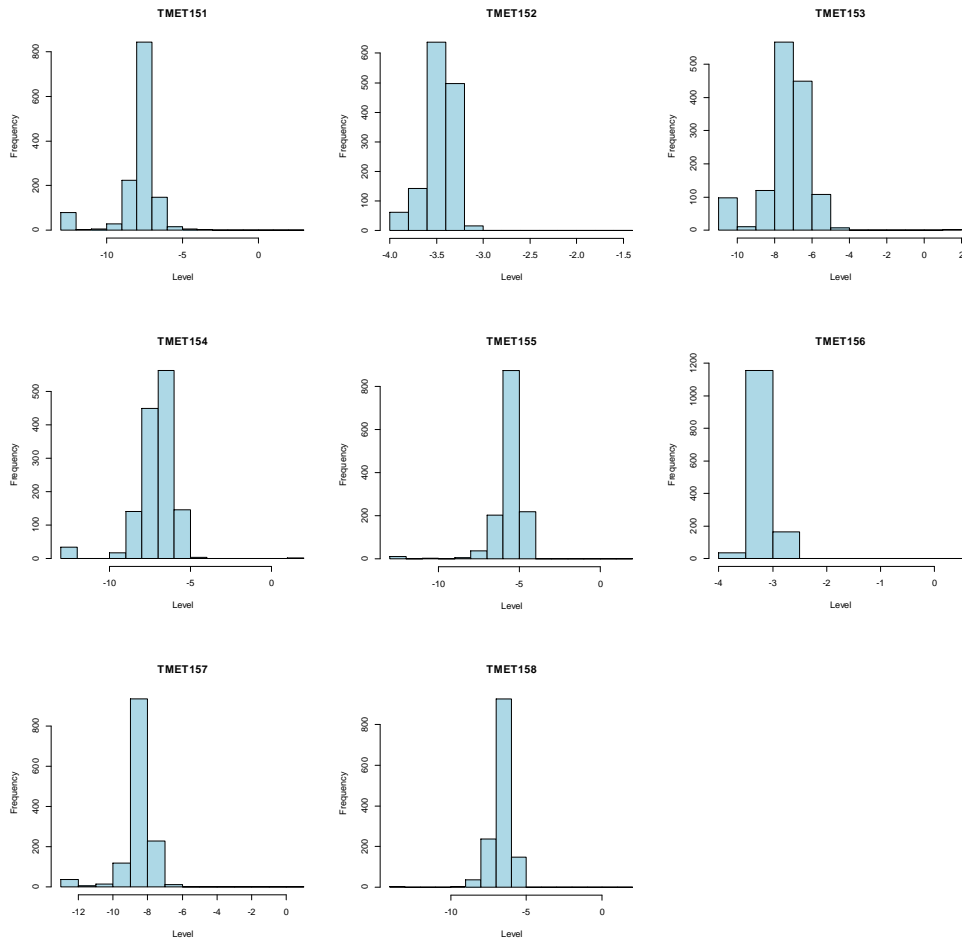




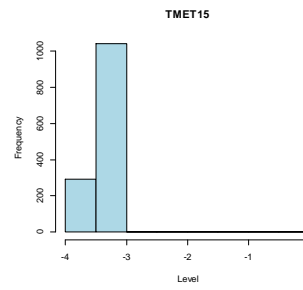
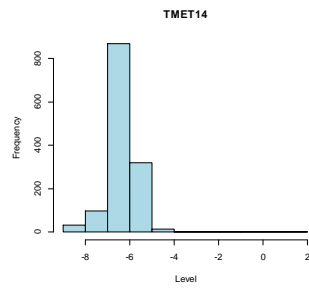
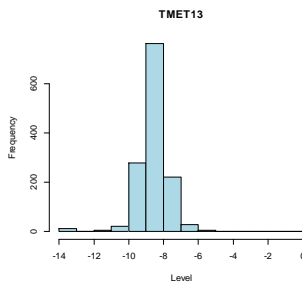
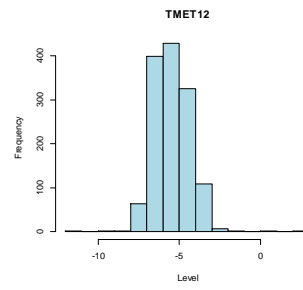
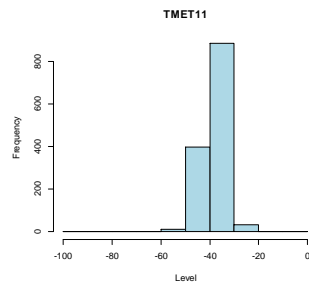
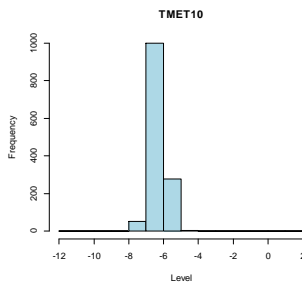
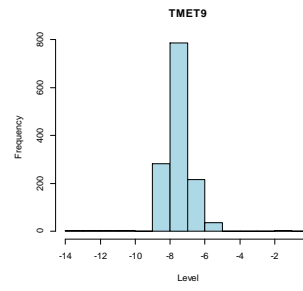
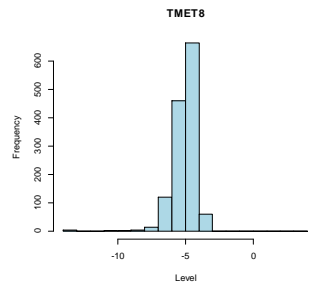
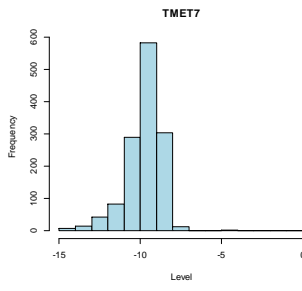
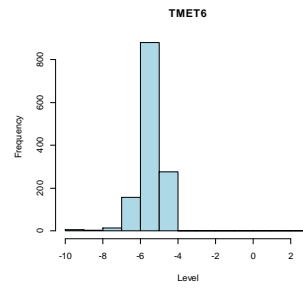
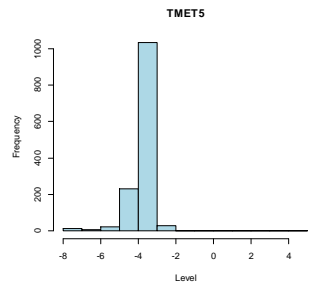
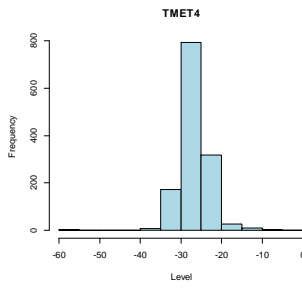
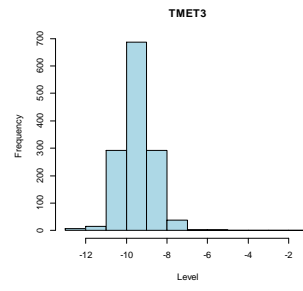
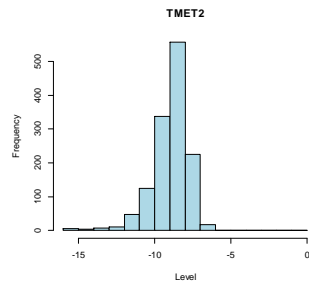
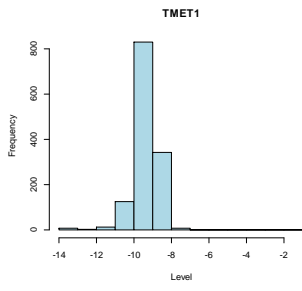


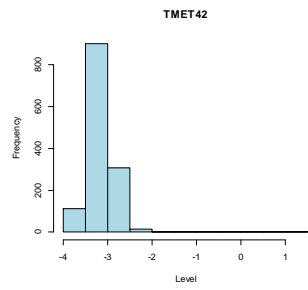
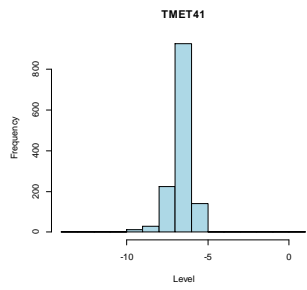
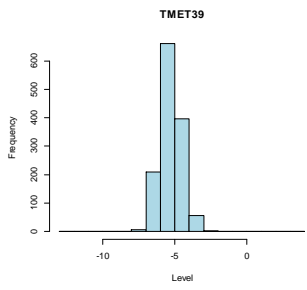
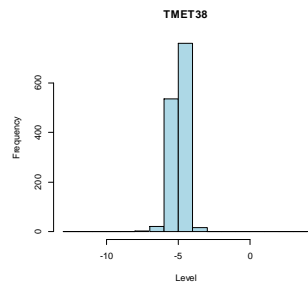
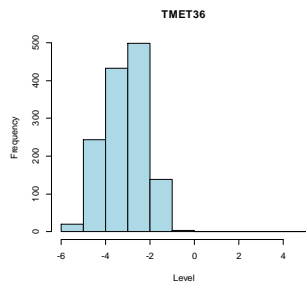
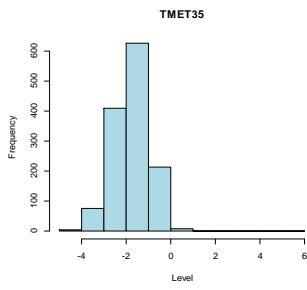
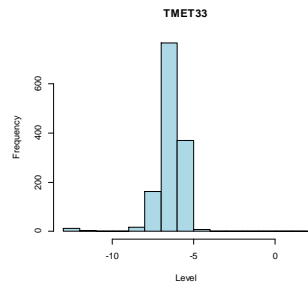
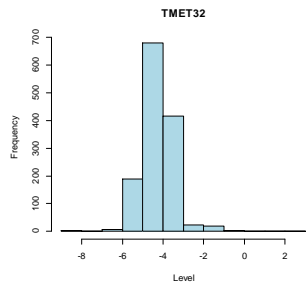
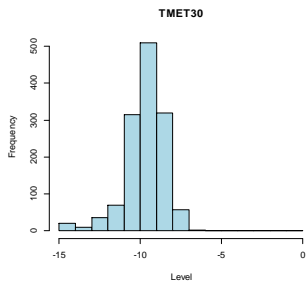
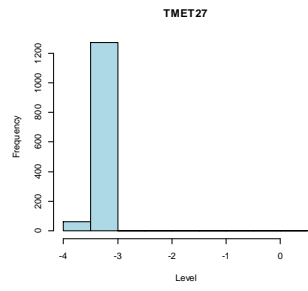
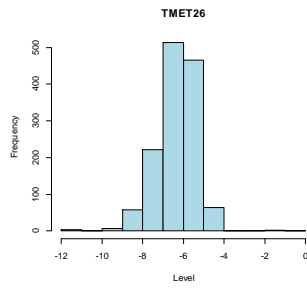
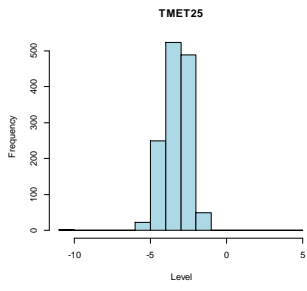
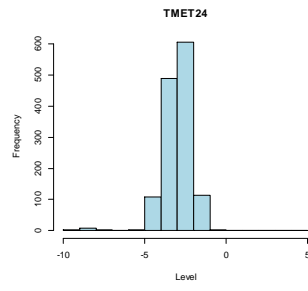
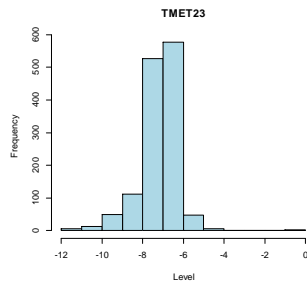
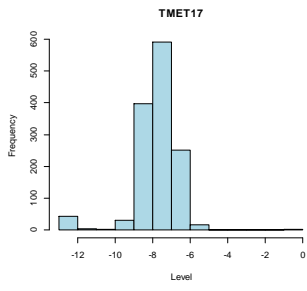


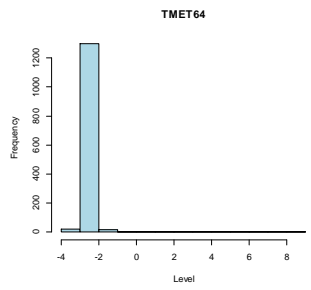
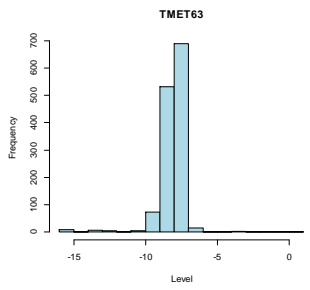
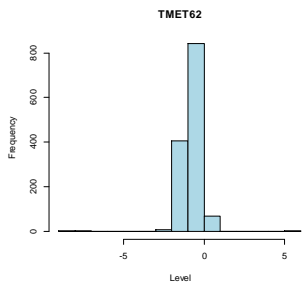
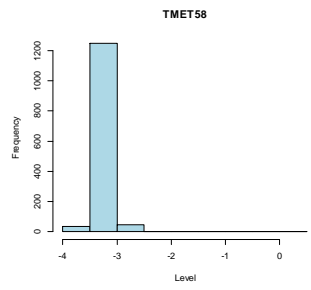
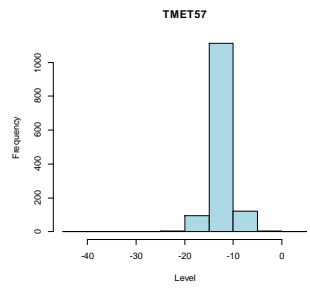
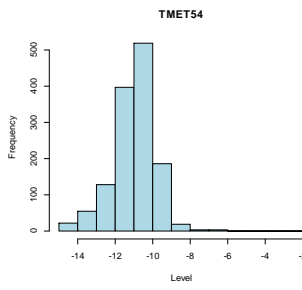
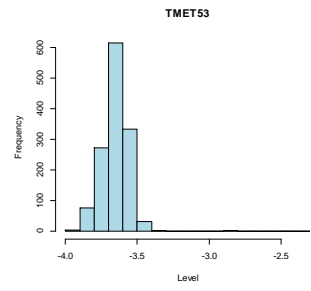
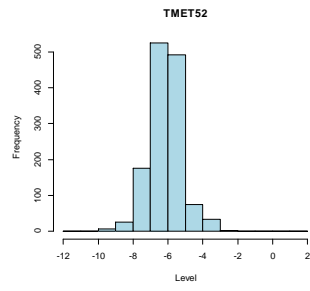
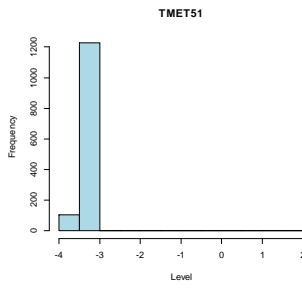
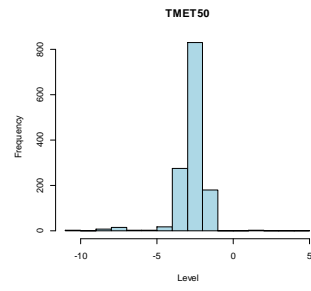
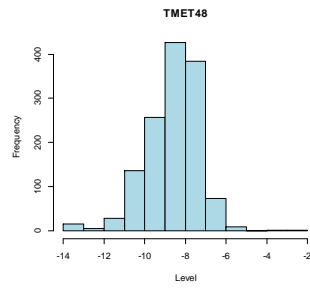
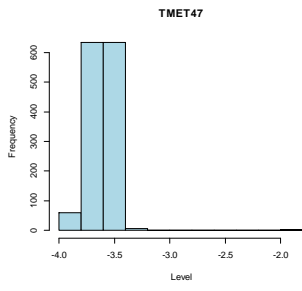
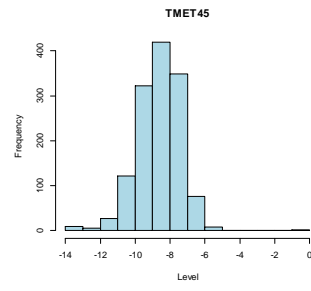
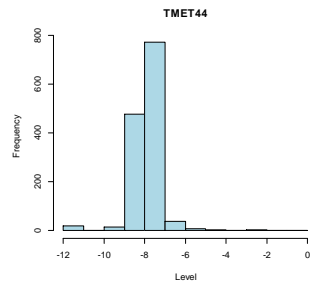
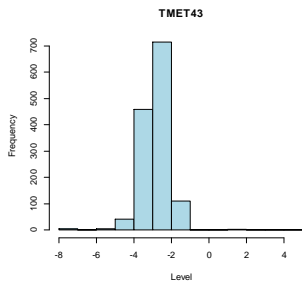




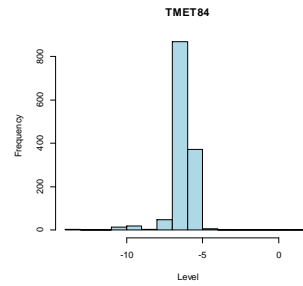
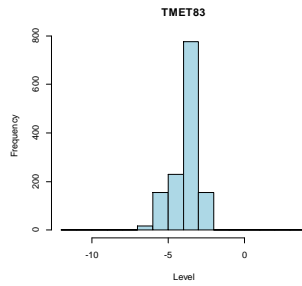
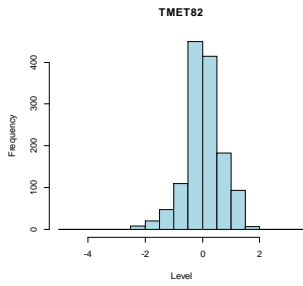
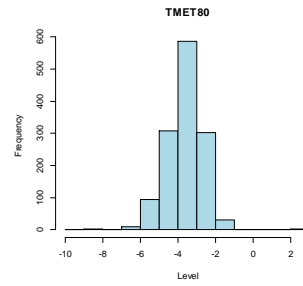
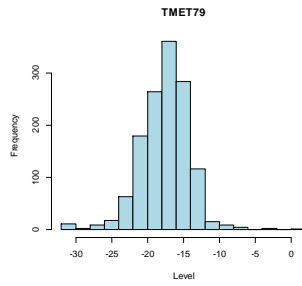
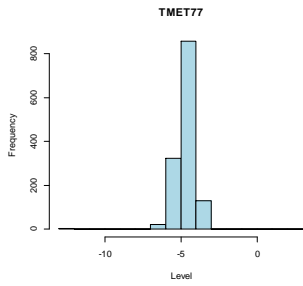
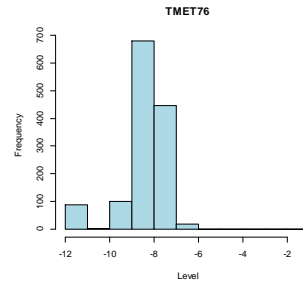
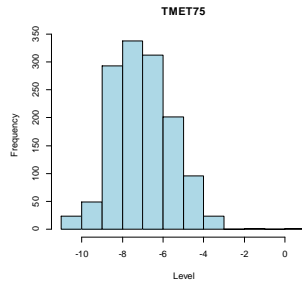
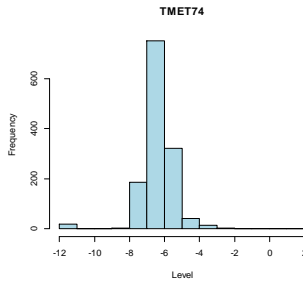
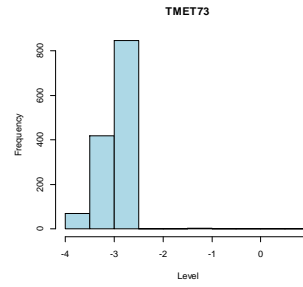
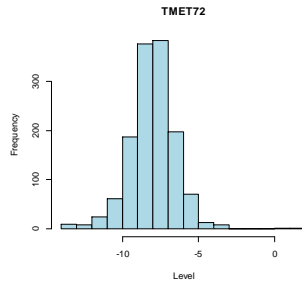
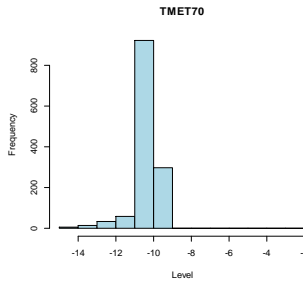
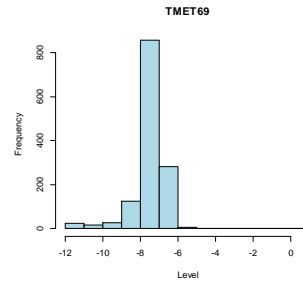
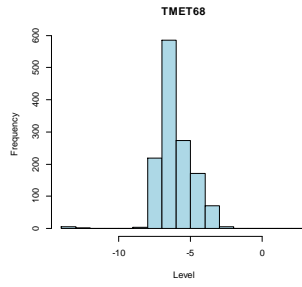
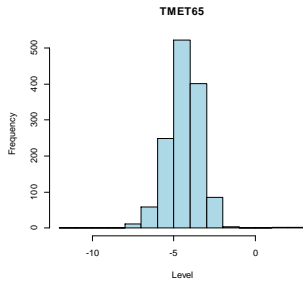
**Abb. A7.** Histogramme aller Metaboliten (nach Box-Cox Transformierung) der ersten Probenahme (Gemmer et al. 2021).

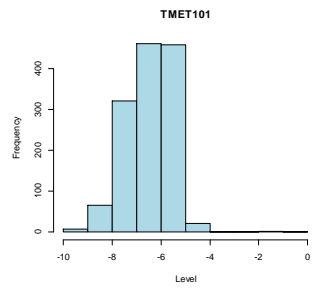
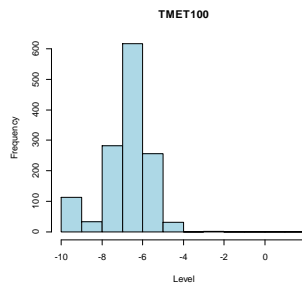
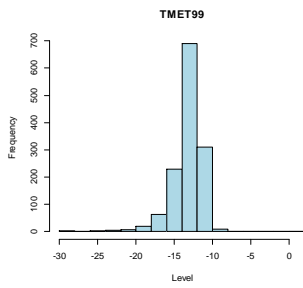
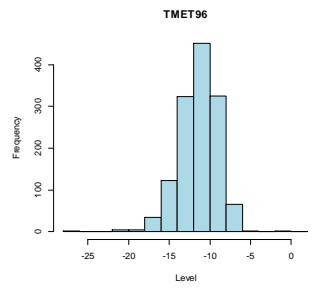
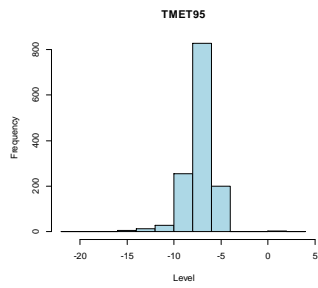
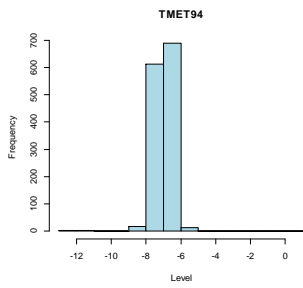
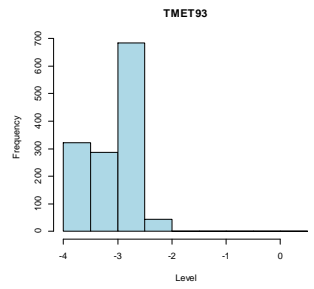
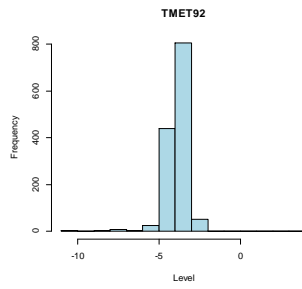
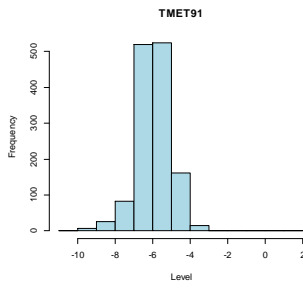
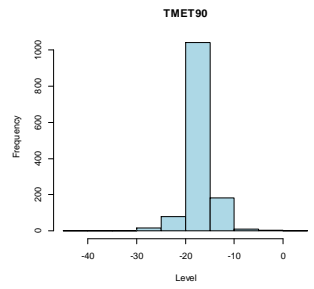
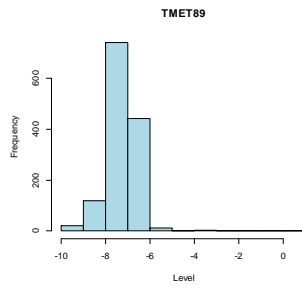
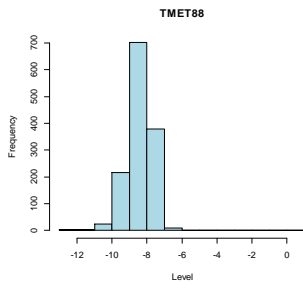
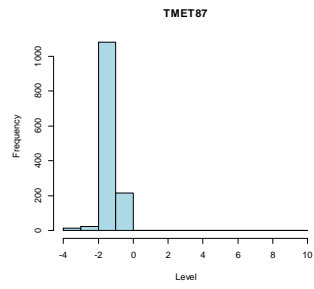
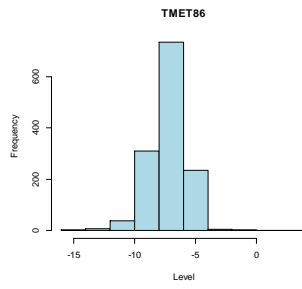
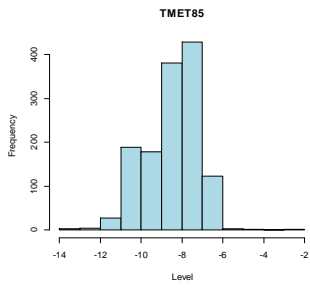


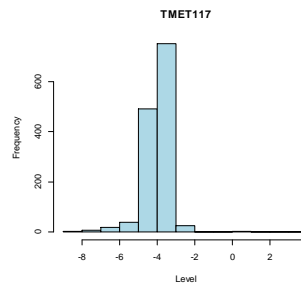
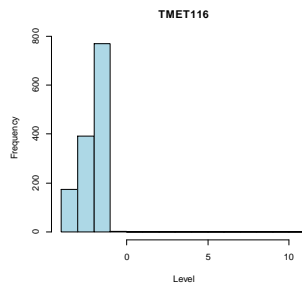
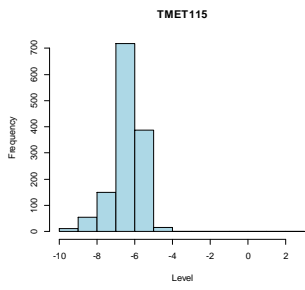
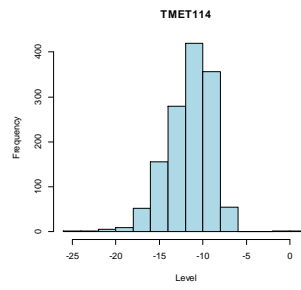
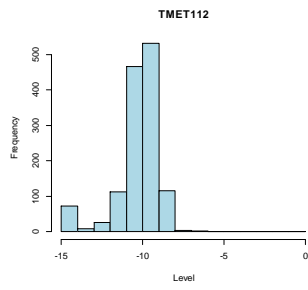
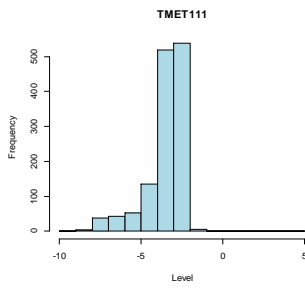
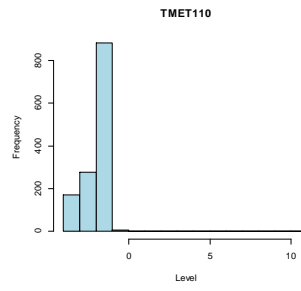
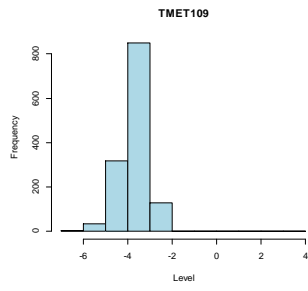
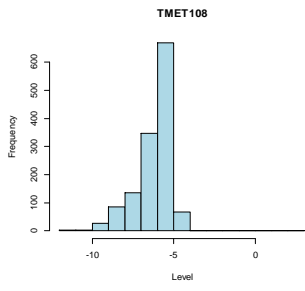
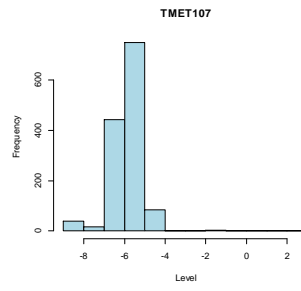
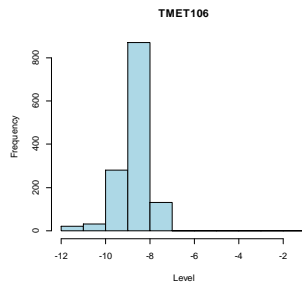
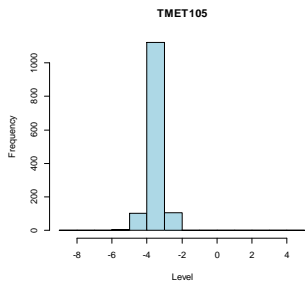
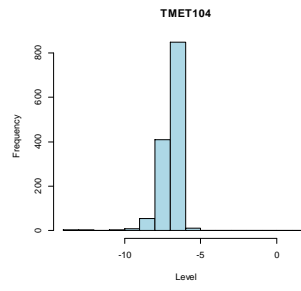
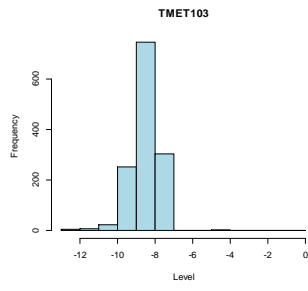
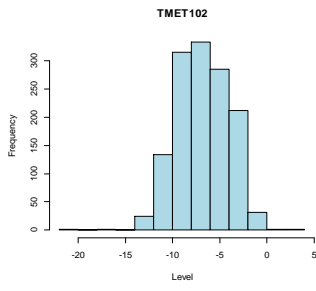


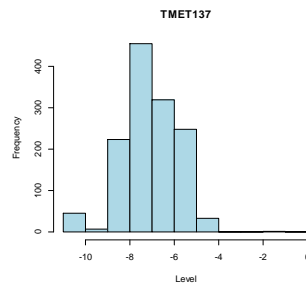
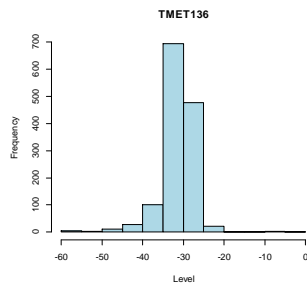
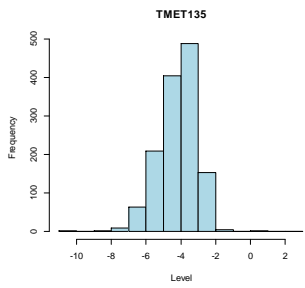
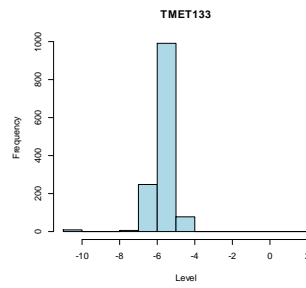
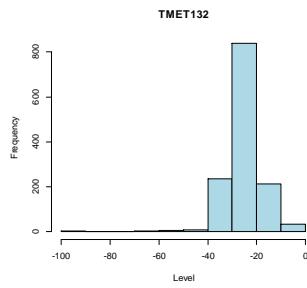
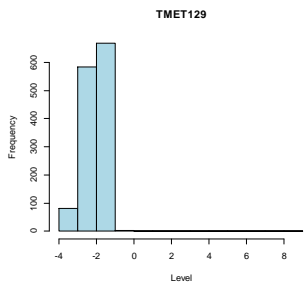
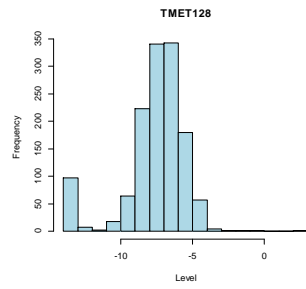
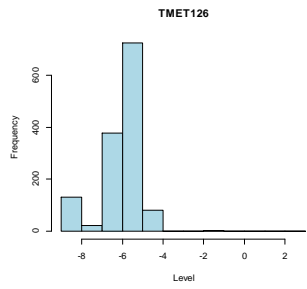
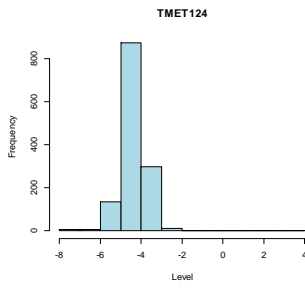
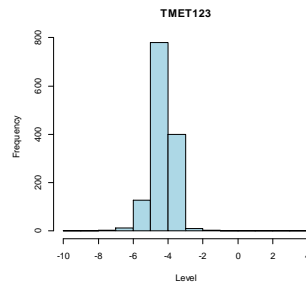
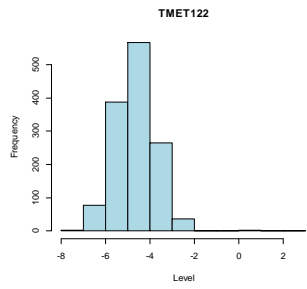
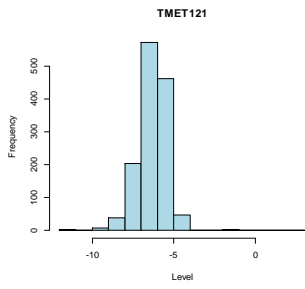
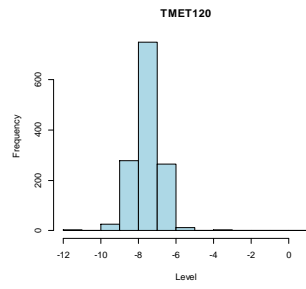
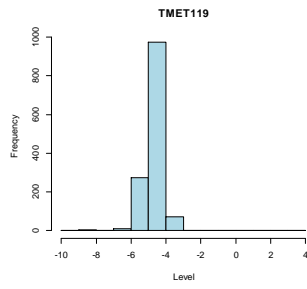
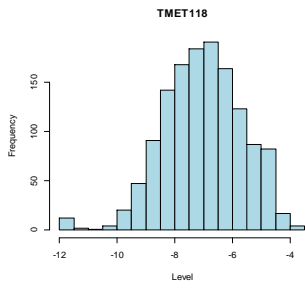


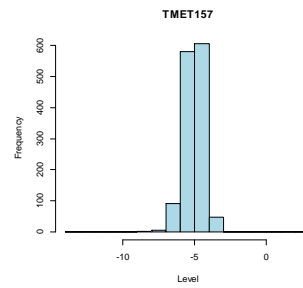
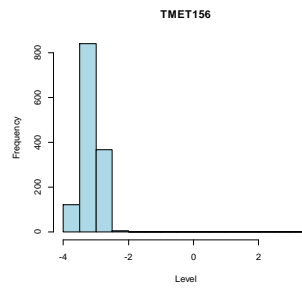
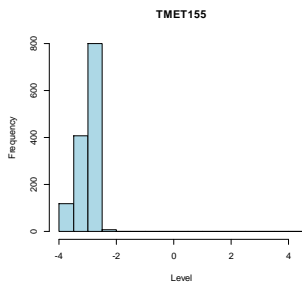
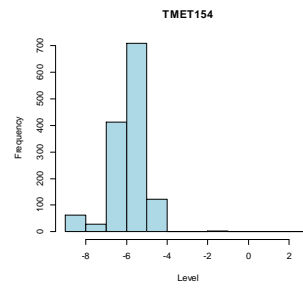
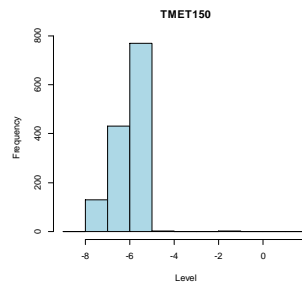
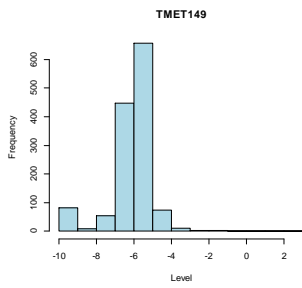
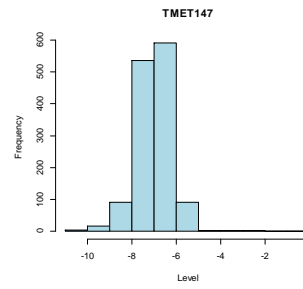
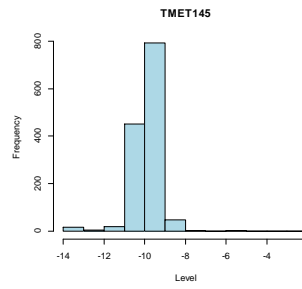
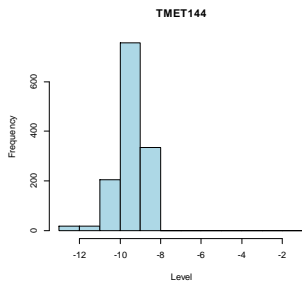
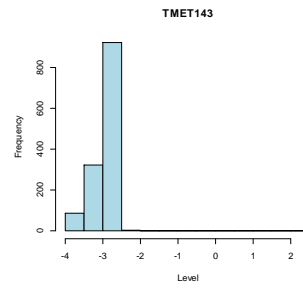
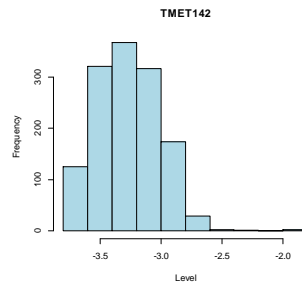
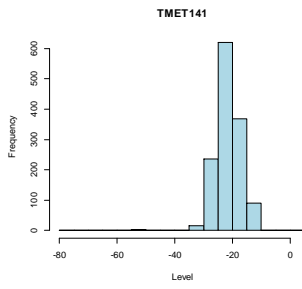
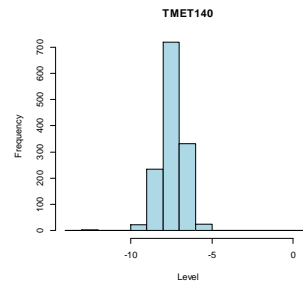
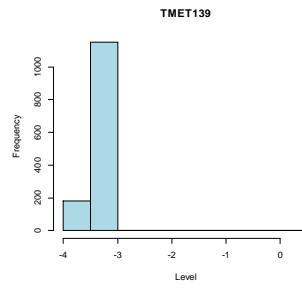
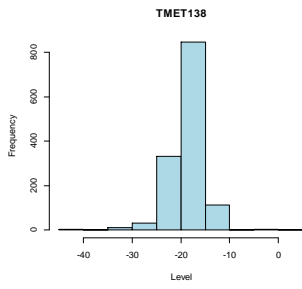


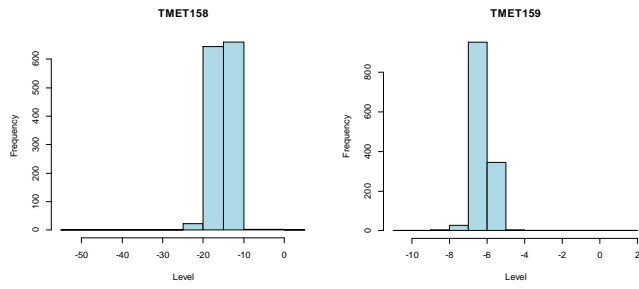












**Abb. A8.** Histogramme aller Metaboliten (nach Box-Cox Transformierung) der zweiten Probennahme (Gemmer et al. 2021).

# Curriculum Vitae | Mathias Ruben Gemmer

Kontakt: Parkstraße 2, 06108 Halle (Saale)  
mathias.gemmer@gmx.net

Geburtsdatum / -ort: 19.11.1991 / Limburg an der Lahn

Familienstand: ledig

Staatsangehörigkeit: Deutsch

## AUSBILDUNG

---

- 04/2017 – 12/2020 **Promotion**  
Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, 06108 Halle (Saale)  
Professur für Pflanzenzüchtung
- Thesis: Die Vorhersage der phänotypischen Leistung von Gerstenlinien mittels Modellierung von Metaboliten und Single Nucleotide Polymorphismen (SNPs) und die Aufklärung der zugrundeliegenden Genetik mittels Genomweiter Assoziationsstudie (GWAS)  
**Angestrebter Abschluss: Dr. agr.**
- 10/2014 – 11/2016 **Studium der Nutzpflanzenwissenschaften**  
Justus-Liebig-Universität, 35390 Gießen  
Studienschwerpunkt: Pflanzenzüchtung
- Thesis: Untersuchung zur biotischen Stresstoleranz von genetisch diversen Winterweizensorten unter besonderer Berücksichtigung des Gelbrostes (*Puccinia striiformis*)  
**Abschluss: Master of Science**, Note: 1,9
- 10/2011 – 10/2014 **Studium der Agrarwissenschaften**  
Justus-Liebig-Universität, 35390 Gießen
- Thesis: Wirkung unterschiedlicher N-Düngungsstrategien bei Hybridgerste – Auswertung des Feldversuches Gießen 2013  
**Abschluss: Bachelor of Science**, Note: 1,9
- 08/2004 – 03/2011 Sophie-Hedwig-Gymnasium, 65582 Diez  
**Abschluss: Abitur**, Note: 2,6

## PUBLIKATIONEN

---

**Gemmer MR**, Richter C, Jiang Y, Schmutzer T, Raorane ML, Junker B, Pillen K, Maurer A (2020). Can metabolic prediction be an alternative to genomic prediction in barley? PLOS ONE. 2020;15(6): e0234052

**Gemmer MR**, Richter C, Schmutzer T, Raorane ML, Junker B, Pillen K, Maurer A (2021). Genome-wide association study on metabolite accumulation in a wild barley NAM population reveals natural variation in sugar metabolism. PLOS ONE. 2021;16(2): e0246510

Halle (Saale), 29.06.2021