

Supplementary Data S1 – Calibration sample set compositions

Sample	Class	Sample mixture composition (% v/v)
1		PN1
2		PN2
3		PN3
4		PSP
5		PN4
6		PN5
7		0.25 PBS + 0.75 PN3
8		0.50 PN1 + 0.50 PN2
9		0.50 PN2 + 0.50 PN3
10	1	0.90 PN2 + 0.10 PN1
11		0.90 PN2 + 0.10 PN3
12		0.90 PN3 + 0.10 PN2
13		0.75 PN2 + 0.25 PN3
14		0.75 PN3 + 0.25 PN2
15		0.34 PBS + 0.66 PN3
16		0.15 PBS + 0.85 PN3
17		0.90 PN3 + 0.10 PN5
18		0.50 PN4 + 0.50 PN5
19		0.33 PN1 + 0.33 PN2 + 0.33 PN3
20	0.15 PN2 + 0.55 PN3 + 0.30 PBS	
21	2	0.90 PN4 + 0.10 NH
22		0.90 PN1 + 0.10 NH
23		0.90 PN2 + 0.10 NH
24		0.90 PN3 + 0.10 NH
25		0.90 (0.25 PBS + 0.75 PN3) + 0.10 NH
26		0.90 PN5 + 0.10 NH
27		0.90 PSP + 0.10 NH
28		0.85 PN4 + 0.15 NH
29		0.85 PN1 + 0.15 NH
30		0.85 PN2 + 0.15 NH
31		0.85 PN3 + 0.15 NH
32		0.85 PN5 + 0.15 NH
33		0.85 PSP + 0.15 NH
34		0.85 (0.25 PBS + 0.75 PN3) + 0.15 NH
35		0.85 (0.50 PN1 + 0.50 PN2) + 0.15 NH
36		0.85 (0.50 PN2 + 0.50 PN3) + 0.15 NH
37		0.85 (0.75 PN2 + 0.25 PN3) + 0.15 NH
38		0.85 (0.75 PN3 + 0.25 PN2) + 0.15 NH
39		0.85 (0.15 PN2 + 0.55 PN3 + 0.30 PBS) + 0.15 NH
40		0.85 (0.33 PN1 + 0.33 PN2 + 0.33 PN3) + 0.15 NH
41	3	0.85 PN4 + 0.10 NH + 0.05 VEG
42		0.85 PN1 + 0.10 NH + 0.05 VEG
43		0.85 PN2 + 0.10 NH + 0.05 VEG
44		0.85 PN3 + 0.10 NH + 0.05 VEG
45		0.85 (0.25 PBS + 0.75 PN3) + 0.10 NH + 0.05 VEG
46		0.80 PN4 + 0.15 NH + 0.05 VEG
47		0.80 PN1 + 0.15 NH + 0.05 VEG
48		0.80 PN2 + 0.15 NH + 0.05 VEG
49		0.80 PN3 + 0.15 NH + 0.05 VEG
50		0.80 (0.25 PBS + 0.75 PN3) + 0.15 NH + 0.05 VEG
51		0.80 (0.5 PN1 + 0.50 PN2) + 0.15 NH + 0.05 VEG
52		0.80 (0.5 PN2 + 0.50 PN3) + 0.15 NH + 0.05 VEG
53		0.80 (0.75 PN2 + 0.25 PN3) + 0.15 NH + 0.05 VEG
54		0.80 (0.75 PN3 + 0.25 PN2) + 0.15 NH + 0.05 VEG
55		0.80 (0.15 PN2 + 0.55 PN3 + 0.30 PBS) + 0.15 NH + 0.05 VEG
56		0.80 (0.33 PN1 + 0.33 PN2 + 0.33 PN3) + 0.15 NH + 0.05 VEG
57	4	0.95 PN4 + 0.05 VEG
58		0.95 PN1 + 0.05 VEG
59		0.95 PN2 + 0.05 VEG
60		0.95 PN3 + 0.05 VEG
61		0.95 (0.25 PBS + 0.75 PN3) + 0.05 VEG
62		0.95 (0.50 PN1 + 0.50 PN2) + 0.05 VEG
63		0.95 (0.50 PN2 + 0.50 PN3) + 0.05 VEG
64		0.95 (0.75 PN2 + 0.25 PN3) + 0.05 VEG
65		0.95 (0.75 PN3 + 0.25 PN2) + 0.05 VEG
66		0.95 (0.15 PN2 + 0.55 PN3 + 0.30 PBS) + 0.05 VEG
67		0.95 (0.33 PN1 + 0.33 PN2 + 0.33 PN3) + 0.05 VEG