

Table S1 The Absolute Peak Areas of The 38 Compounds in 25 Batches of *Usnea* Samples

N	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12	S13	S14	S15	S16	S17	S18	S19	S20	S21	S22	S23	S24	S25
1	35680	39172	40035	38037	36082	36367	38424	23189	23378	24724	27317	26491	24765	25180	28306	27825	38232	38506	43601	25648	25960	24918	26880	27447	24682
2	19040	22620	22317	21920	20460	20477	22409	11899	12283	13031	15213	14428	13158	13856	16886	16035	20361	18639	21103	12278	11592	11617	13024	12814	12433
3	1257	1739	1717	2175	1427	1537	1382	1038	1234	988	1022	1010	1062	805	890	923	1644	1006	1093	1206	1143	1034	1039	1007	737
4	30981	28687	28680	23105	28528	31719	37536	21486	19984	26501	25482	29795	31263	31523	38705	40194	34758	30887	33314	18843	19029	19239	29606	29733	31801
5	12126	12507	12802	11687	12217	12503	12580	10715	10738	11002	11118	11008	11202	11118	11343	10543	14458	14361	13369	12033	11850	12168	12843	13148	13063
6	13	99	00	11	32	04	36	80	90	25	61	64	01	38	09	50	42	04	05	17	12	84	48	29	84
7	19744	23901	24283	22095	21499	22064	22197	17939	19542	20045	20190	21174	20814	20983	22143	19578	25440	22510	26209	20298	22058	21730	22735	20176	26175
8	57805	60316	64470	64733	60459	60892	62054	52647	52937	53406	53037	52809	55540	53298	55147	53312	67180	67162	70653	55879	55618	57160	57481	62255	57550
9	33046	35463	37682	37186	36375	38340	38762	34488	35322	40067	38437	37322	29282	30010	30788	32896	38797	39638	39084	38326	37541	38366	27294	32562	31087
10	1990	2089	2001	2013	1876	2306	2047	1440	1489	1583	1535	1588	1702	1760	2022	1995	2060	2044	2468	1316	1216	1202	1929	1624	2142
10	541	629	576	531	502	542	496	90	107	114	127	105	674	667	527	589	451	475	470	95	97	111	736	736	636

11	448	634	506	469	355	475	672	302	284	414	416	485	392	439	656	615	674	610	595	359	377	387	490	432	474
12	491	630	521	530	437	426	420	287	282	193	182	239	348	288	323	258	393	434	382	230	276	313	342	363	378
13	4601	1328	2151	2466	4001	4695	6722	4750	5045	3780	3825	3685	4906	4386	5025	5262	6754	6184	7232	4698	4533	4277	4476	4869	4451
14	54837	53961	53789	53970	52900	54864	56587	6870	6777	6845	7007	6611	55055	54426	56599	59332	55872	55994	55630	6083	6560	7044	57524	57367	61588
15	234	140	129	143	178	170	151	-	-	-	-	-	207	214	161	202	246	177	289	-	-	-	225	239	328
16	10593 1	95757	99023	97704	97908	99852	10241 8	7037	7049	6916	6885	6908	14810 8	15043 7	15355 0	14955 4	11059 5	10409 7	10505 4	7329	7268	6795	16213 4	18157 2	15603 5
17	356	310	392	365	321	293	393	-	-	-	-	-	502	445	491	553	358	330	399	23	23	-	463	679	376
18	76613	83145	87247	81568	81553	82282	84816	71113	70980	71581	70653	70307	73202	71441	70447	74062	94489	93904	96067	75895	75252	82903	82392	80894	78488
19	2796	2415	2294	2464	2613	2592	2868	24575	24903	25336	25498	26187	1847	1706	1876	1989	2502	2403	2381	24349	23624	23513	1777	1556	1554
20	516	455	482	454	465	489	492	-	-	-	-	-	-	-	-	-	497	462	539	-	-	-	-	-	-
21	539	440	447	485	519	464	510	701	532	609	491	441	589	584	461	700	522	515	612	539	527	512	506	377	405
22	473	428	416	430	499	461	464	681	504	585	489	441	499	494	446	695	504	474	470	501	467	506	457	374	390
23	1916	2001	2222	1908	1855	2200	2267	377	509	570	510	550	1745	1978	1892	2015	1964	1890	1955	549	580	549	1914	1664	2192

24	1953	3268	3435	3203	1719	2120	2032	1152	1414	1314	1364	1313	1355	1493	1463	1684	1713	1873	2203	1149	1266	1221	1391	1487	1561
25	1817	610	1268	1871	2115	1730	1459	433	258	439	611	531	704	653	594	642	1129	1052	965	478	431	435	699	747	638
26	13013	12083	12523	12455	12383	12600	13633	5363	5394	5958	7960	8102	13395	13746	12224	11478	11996	12922	13696	6280	5732	5747	13012	12976	14127
27	252	253	250	270	243	291	318	-	-	-	-	-	-	-	-	-	327	278	313	-	-	-	-	-	-
28	118	143	118	131	114	110	124	-	-	-	-	-	141	131	117	129	119	128	115	-	-	-	168	121	154
29	978	1020	1049	1007	938	940	939	1006	963	917	864	868	835	875	814	904	960	959	1034	1208	1203	1107	1040	956	1041
30	978	1020	1049	1007	938	940	941	1761	846	2180	2212	2198	837	879	816	904	962	963	1034	1389	2227	2425	1037	965	1043
31	157	244	253	256	159	225	145	323	298	415	384	419	166	162	156	163	181	190	222	278	287	301	135	110	111
32	586	439	465	482	567	729	767	-	-	-	-	-	344	347	194	218	715	798	866	-	-	-	273	178	288
33	11438	11586	11415	11263	10923	11356	12118	7843	7780	7724	7773	8274	10492	11085	11364	11372	12485	12544	12312	7405	6722	8414	12680	11974	13994
	1	7	9	0	5	2	6						5	0	9	4	4	5	7				5	7	5
34	1009	1002	1017	1020	957	1105	1061	423	515	483	447	432	791	843	709	672	987	985	1031	463	466	434	678	657	706
35	12815	12762	13008	12939	12615	13193	13272	20554	20800	21572	21421	21462	8753	8745	8924	8977	13374	13232	13220	22056	21650	21004	9591	9180	9800
								9	6	4	4	9								0	2	5			
36	94654	89370	92577	93948	90535	93521	97430	96958	98875	10178	99102	97698	96349	98218	97258	98355	10566	10791	10698	93526	91473	11089	11050	10568	11324
	9	7	9	2	3	8	7			8			9	7	5	5	04	52	95			7	16	28	89

37	25424	22781	24047	23910	23996	24152	24805	1458	1452	1440	1449	1430	37229	37650	38660	37890	26895	25309	25621	1434	1443	1424	41500	46530	39497
38	4975	4727	4509	4694	4853	4897	5150	1275	1239	1882	1269	1848	9699	9977	9998	9976	4783	4957	5055	2848	1299	1312	9981	10857	10419

Note: not detected.

Table S2 The Relative Peak Areas (RPAs) of The 38 Compounds in the 25 Batches of *Usnea* Samples

No.	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10	S11	S12	S13	S14	S15	S16	S17	S18	S19	S20	S21	S22	S23	S24	S25
1	1.00	1.10	1.12	1.07	1.01	1.02	1.08	0.65	0.66	0.69	0.77	0.74	0.69	0.71	0.79	0.78	1.07	1.08	1.22	0.72	0.73	0.70	0.75	0.77	0.69
2	1.00	1.19	1.17	1.15	1.07	1.08	1.18	0.62	0.65	0.68	0.80	0.76	0.69	0.73	0.89	0.84	1.07	0.98	1.11	0.64	0.61	0.61	0.68	0.67	0.65
3	1.00	1.38	1.37	1.73	1.14	1.22	1.10	0.83	0.98	0.79	0.81	0.80	0.84	0.64	0.71	0.73	1.31	0.80	0.87	0.96	0.91	0.82	0.83	0.80	0.59
4	1.00	0.93	0.93	0.75	0.92	1.02	1.21	0.69	0.65	0.86	0.82	0.96	1.01	1.02	1.25	1.30	1.12	1.00	1.08	0.61	0.61	0.62	0.96	0.96	1.03
5	1.00	1.03	1.06	0.96	1.01	1.03	1.04	0.88	0.89	0.91	0.92	0.91	0.92	0.92	0.94	0.87	1.19	1.18	1.10	0.99	0.98	1.00	1.06	1.08	1.08
6	1.00	1.21	1.23	1.12	1.09	1.12	1.12	0.91	0.99	1.02	1.02	1.07	1.05	1.06	1.12	0.99	1.29	1.14	1.33	1.03	1.12	1.10	1.15	1.02	1.33
7	1.00	1.04	1.12	1.12	1.05	1.05	1.07	0.91	0.92	0.92	0.92	0.91	0.96	0.92	0.95	0.92	1.16	1.16	1.22	0.97	0.96	0.99	0.99	1.08	1.00
8	1.00	1.07	1.14	1.13	1.10	1.16	1.17	1.04	1.07	1.21	1.16	1.13	0.89	0.91	0.93	1.00	1.17	1.20	1.18	1.16	1.14	1.16	0.83	0.99	0.94
9	1.00	1.05	1.01	1.01	0.94	1.16	1.03	0.72	0.75	0.80	0.77	0.80	0.86	0.88	1.02	1.00	1.04	1.03	1.24	0.66	0.61	0.60	0.97	0.82	1.08
10	1.00	1.16	1.06	0.98	0.93	1.00	0.92	0.17	0.20	0.21	0.23	0.19	1.25	1.23	0.97	1.09	0.83	0.88	0.87	0.18	0.18	0.21	1.36	1.36	1.18
11	1.00	1.42	1.13	1.05	0.79	1.06	1.50	0.67	0.63	0.92	0.93	1.08	0.88	0.98	1.46	1.37	1.50	1.36	1.33	0.80	0.84	0.86	1.09	0.96	1.06
12	1.00	1.28	1.06	1.08	0.89	0.87	0.86	0.58	0.57	0.39	0.37	0.49	0.71	0.59	0.66	0.53	0.80	0.88	0.78	0.47	0.56	0.64	0.70	0.74	0.77
13	1.00	0.29	0.47	0.54	0.87	1.02	1.46	1.03	1.10	0.82	0.83	0.80	1.07	0.95	1.09	1.14	1.47	1.34	1.57	1.02	0.99	0.93	0.97	1.06	0.97
14	1.00	0.98	0.98	0.98	0.96	1.00	1.03	0.13	0.12	0.12	0.13	0.12	1.00	0.99	1.03	1.08	1.02	1.02	1.01	0.11	0.12	0.13	1.05	1.05	1.12
15	1.00	0.60	0.55	0.61	0.76	0.73	0.65	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.88	0.91	0.69	0.86	1.05	0.76	1.24	0.00	0.00	0.00	0.96	1.02	1.40
16	1.00	0.90	0.93	0.92	0.92	0.94	0.97	0.07	0.07	0.07	0.06	0.07	1.40	1.42	1.45	1.41	1.04	0.98	0.99	0.07	0.07	0.06	1.53	1.71	1.47
17	1.00	0.87	1.10	1.03	0.90	0.82	1.10	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.41	1.25	1.38	1.55	1.01	0.93	1.12	0.06	0.06	0.00	1.30	1.91	1.06
18	1.00	1.09	1.14	1.06	1.06	1.07	1.11	0.93	0.93	0.93	0.92	0.92	0.96	0.93	0.92	0.97	1.23	1.23	1.25	0.99	0.98	1.08	1.08	1.06	1.02
19	1.00	0.86	0.82	0.88	0.93	0.93	1.03	8.79	8.91	9.06	9.12	9.37	0.66	0.61	0.67	0.71	0.89	0.86	0.85	8.71	8.45	8.41	0.64	0.56	0.56
20	1.00	0.88	0.93	0.88	0.90	0.95	0.95	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.96	0.90	1.04	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
21	1.00	0.82	0.83	0.90	0.96	0.86	0.95	1.30	0.99	1.13	0.91	0.82	1.09	1.08	0.86	1.30	0.97	0.96	1.14	1.00	0.98	0.95	0.94	0.70	0.75
22	1.00	0.90	0.88	0.91	1.05	0.97	0.98	1.44	1.07	1.24	1.03	0.93	1.05	1.04	0.94	1.47	1.07	1.00	0.99	1.06	0.99	1.07	0.97	0.79	0.82
23	1.00	1.04	1.16	1.00	0.97	1.15	1.18	0.20	0.27	0.30	0.27	0.29	0.91	1.03	0.99	1.05	1.03	0.99	1.02	0.29	0.30	0.29	1.00	0.87	1.14
24	1.00	1.67	1.76	1.64	0.88	1.09	1.04	0.59	0.72	0.67	0.70	0.67	0.69	0.76	0.75	0.86	0.88	0.96	1.13	0.59	0.65	0.63	0.71	0.76	0.80

Table S3 The Component Matrix of the First Two Principal Components

Compound	Principal component	
	PC1	PC2
c33	0.982	-0.171
c23	0.976	-0.100
c35	-0.975	0.191
c14	0.973	-0.214
c19	-0.973	0.196
c36	0.973	-0.215
c26	0.953	-0.199
c28	0.947	-0.255
c34	0.906	0.320
c10	0.890	-0.371
c15	0.889	-0.311
c9	0.880	0.102
c32	0.862	0.347
c17	0.858	-0.431
c16	0.847	-0.515
c37	0.830	-0.538
c30	-0.803	0.231
c31	-0.783	0.434
c12	0.745	0.411

c1	0.725	0.649
c2	0.718	0.577
c7	0.713	0.536
c4	0.706	-0.343
c27	0.684	0.688
c20	0.681	0.685
c11	0.670	0.091
c38	0.645	-0.740
c18	0.642	0.524
c25	0.632	0.402
5	0.620	0.351
24	0.604	0.526
6	0.594	0.286
8	-0.218	0.858
3	0.339	0.703
29	-0.203	0.398
22	-0.410	0.154
13	0.160	0.146
21	-0.266	0.143
