

Supplementary Materials

Data-Driven Modeling and Bayesian Optimization for the Formaldehyde-Acetylene Reaction in a Slurry Bed Reactor

Xiao-Qi Liu¹, Zuo-Qian Jihou¹, Hui-Long Wei^{1,*} and Zheng-Hong Luo^{1,2,*}

¹ State Key Laboratory of High-Efficiency Utilization of Coal and Green Chemical Engineering, College of Chemistry and Chemical Engineering, Ningxia University, Yinchuan 750014, China

² Department of Chemical Engineering, School of Chemistry and Chemical Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China

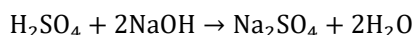
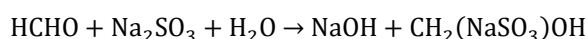
* Correspondence: weihl@nxu.edu.cn (H.-L.W.); luzh@sjtu.edu.cn (Z.-H.L.)

How To Cite: Liu, X.-Q.; Jihou, Z.-Q.; Wei, H.-L.; et al. Data-Driven Modeling and Bayesian Optimization for the Formaldehyde-Acetylene Reaction in a Slurry Bed Reactor. *Smart Chemical Engineering* **2025**, *1*(1), 7. <https://doi.org/10.53941/sce.2025.100007>

Numerical Data Associated with Figures

Analysis Method

Titration methods and steps for formaldehyde, the chemical reaction principle of anhydrous sodium sulfite is as follows:



The specific experimental steps of the anhydrous sodium sulfite titration method are as follows:

- (1) Weigh an excess amount of anhydrous sodium sulfite solid into a beaker, add deionized water to dissolve it, place a magnetic stir bar, stir on a magnetic stirrer until completely dissolved, then add two drops of thymolphthalein indicator. The solution will turn blue. Add 2–5 drops of 0.1 mol/L dilute sulfuric acid standard solution, and the blue color will fade.
- (2) Add 2.5 mL of the clarified sample liquid after pretreatment and filtration (if the sample does not contain alkynol, the sample is colorless; if the sample contains alkynol, the sample is pale yellow). The solution will change color again (if the sample does not contain alkynol, the titrated mixed solution will be blue; if the sample contains alkynol, the titrated mixed solution will be blue-black).
- (3) Titrate the above discolored solution with the dilute sulfuric acid standard solution. At the titration endpoint, the original color fades (if the sample does not contain alkynol, the solution becomes colorless at the titration endpoint; if the sample contains alkynol, the solution turns bright yellow at the titration endpoint).
- (4) After the titration operation is completed, calculate the formaldehyde content in the sample liquid based on the consumption of the dilute sulfuric acid standard solution, and finally multiply it by 50 times.



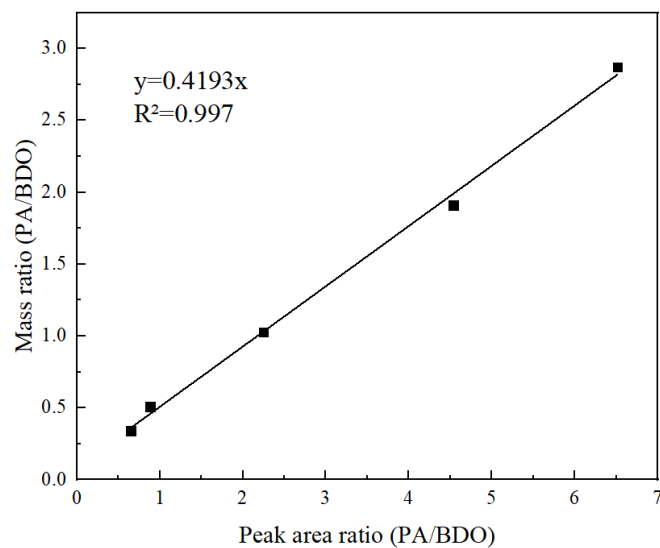


Figure S1. Standard curve of propynol concentration.

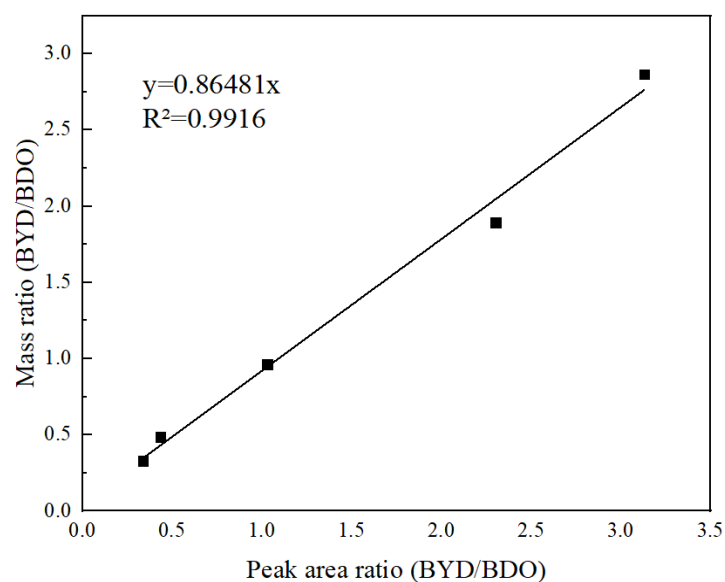


Figure S2. Standard curve of 1,4-butyndiol concentration.

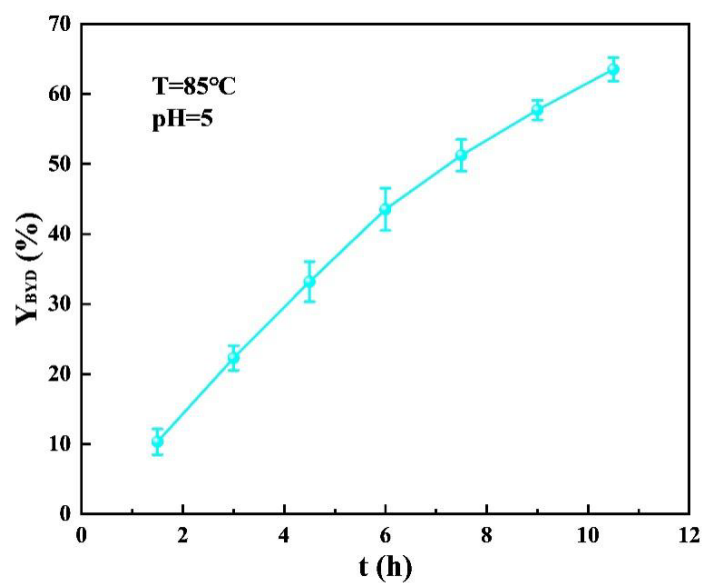


Figure S3. Parallel experiment error graph.

Table S1. Raw Data of Figure 3A to 3C.

Fig. 3A			Fig. 3B			Fig. 3C		
T (°C)	t (h)	X _{HCHO}	T (°C)	t (h)	X _{HCHO}	T (°C)	t (h)	X _{HCHO}
55	1.5	0.703333	55	1.5	0.625	55	1.5	0.8
55	3	0.786667	55	3	0.723077	55	3	0.908752
55	4.5	0.831418	55	4.5	0.826667	55	4.5	0.913965
55	6	0.861105	55	6	0.863784	55	6	0.928798
55	7.5	0.883581	55	7.5	0.881967	55	7.5	0.944741
55	9	0.902701	55	9	0.900242	55	9	0.954337
55	10.5	0.919922	55	10.5	0.921984	55	10.5	0.957726
65	1.5	0.410256	65	1.5	0.528205	65	1.5	0.746199
65	3	0.744589	65	3	0.7	65	3	0.857471
65	4.5	0.802001	65	4.5	0.803704	65	4.5	0.887508
65	6	0.851111	65	6	0.855657	65	6	0.90947
65	7.5	0.888696	65	7.5	0.883333	65	7.5	0.92685
65	9	0.911735	65	9	0.898799	65	9	0.939563
65	10.5	0.923564	65	10.5	0.907371	65	10.5	0.948673
75	1.5	0.560829	75	1.5	0.346246	75	1.5	0.692569
75	3	0.737118	75	3	0.696296	75	3	0.815094
75	4.5	0.811077	75	4.5	0.80432	75	4.5	0.87931
75	6	0.858993	75	6	0.853609	75	6	0.901527
75	7.5	0.890885	75	7.5	0.878046	75	7.5	0.9122
75	9	0.911984	75	9	0.892838	75	9	0.922697
75	10.5	0.925703	75	10.5	0.904018	75	10.5	0.936508
85	1.5	0.38565	85	1.5	0.508551	85	1.5	0.625
85	3	0.707317	85	3	0.711177	85	3	0.791878
85	4.5	0.812323	85	4.5	0.79672	85	4.5	0.852129
85	6	0.863958	85	6	0.850258	85	6	0.882331
85	7.5	0.89465	85	7.5	0.879942	85	7.5	0.90207
85	9	0.91592	85	9	0.896651	85	9	0.917747
85	10.5	0.932259	85	10.5	0.905324	85	10.5	0.931827

Table S2. Raw Data of Figure 3D to 3F.

Fig. 3D			Fig. 3E			Fig. 3F		
T (°C)	t (h)	Y _{BYD}	T (°C)	t (h)	Y _{BYD}	T (°C)	t (h)	Y _{BYD}
55	1.5	0.013906	55	1.5	0.035156	55	1.5	0.014063
55	3	0.04	55	3	0.084375	55	3	0.038281
55	4.5	0.06875	55	4.5	0.121875	55	4.5	0.065938
55	6	0.095375	55	6	0.163906	55	6	0.092094
55	7.5	0.119375	55	7.5	0.210938	55	7.5	0.116563
55	9	0.141109	55	9	0.256406	55	9	0.140328
55	10.5	0.160938	55	10.5	0.29375	55	10.5	0.164375
65	1.5	0.035938	65	1.5	0.071875	65	1.5	0.033906
65	3	0.092188	65	3	0.154688	65	3	0.087188
65	4.5	0.146875	65	4.5	0.248438	65	4.5	0.14
65	6	0.190141	65	6	0.321625	65	6	0.189828
65	7.5	0.225	65	7.5	0.382813	65	7.5	0.233594
65	9	0.257125	65	9	0.453375	65	9	0.266938
65	10.5	0.292188	65	10.5	0.554688	65	10.5	0.285469
75	1.5	0.062031	75	1.5	0.086625	75	1.5	0.056563
75	3	0.141094	75	3	0.192188	75	3	0.137813
75	4.5	0.217188	75	4.5	0.29375	75	4.5	0.196875
75	6	0.275328	75	6	0.374703	75	6	0.264188
75	7.5	0.320313	75	7.5	0.44375	75	7.5	0.335938
75	9	0.360609	75	9	0.515531	75	9	0.394016
75	10.5	0.404688	75	10.5	0.604688	75	10.5	0.420313
85	1.5	0.097797	85	1.5	0.102266	85	1.5	0.084375
85	3	0.196875	85	3	0.228125	85	3	0.192188
85	4.5	0.284375	85	4.5	0.34375	85	4.5	0.278125
85	6	0.351	85	6	0.425109	85	6	0.359344
85	7.5	0.4	85	7.5	0.4875	85	7.5	0.434375
85	9	0.432203	85	9	0.556531	85	9	0.492609
85	10.5	0.448438	85	10.5	0.657813	85	10.5	0.523438

Figure 4: Use the t column and is augmented column in the Figure 5.

Table S3. Raw Data of Figure 4 and Figure 5A,B.

T (°C)	pH	t (h)	X _{CHO}	Y _{BYD}	is Augmented
55	5	0	0	0	FALSE
55	5	0.5	0.010362	0.003115	TRUE
55	5	1	0.020779	0.00775	TRUE
55	5	1.5	0.03125	0.013906	FALSE
55	5	2	0.041776	0.021583	TRUE
55	5	2.5	0.052301	0.030613	TRUE
55	5	3	0.0625	0.04	FALSE
55	5	3.5	0.072318	0.049576	TRUE
55	5	4	0.081733	0.059281	TRUE
55	5	4.5	0.090625	0.06875	FALSE
55	5	5	0.098972	0.077922	TRUE
55	5	5.5	0.10682	0.086797	TRUE
55	5	6	0.114445	0.095375	FALSE
55	5	6.5	0.121894	0.103655	TRUE
55	5	7	0.129217	0.111644	TRUE
55	5	7.5	0.136719	0.119375	FALSE
55	5	8	0.14445	0.126854	TRUE
55	5	8.5	0.152471	0.134088	TRUE
55	5	9	0.161141	0.141109	FALSE
55	5	9.5	0.17052	0.147925	TRUE
55	5	10	0.180608	0.154534	TRUE
55	5	10.5	0.191406	0.160938	FALSE
55	5	11	0.202913	0.167135	TRUE
55	5	11.5	0.21513	0.173126	TRUE
55	5	12	0.228055	0.178911	TRUE
55	5	12.5	0.24169	0.18449	TRUE
55	5	13	0.256034	0.189862	TRUE
55	5	13.5	0.271088	0.195029	TRUE
55	5	14	0.286851	0.19999	TRUE
55	5	14.5	0.303323	0.204744	TRUE
55	5	15	0.320504	0.209292	TRUE
55	5	15.5	0.338395	0.21051	TRUE
55	6	0	0	0	TRUE
55	6	0.5	0.002145	0.000795	TRUE
55	6	1	0.023194	0.014803	TRUE
55	6	1.5	0.038586	0.02805	TRUE
55	6	2	0.052709	0.037429	TRUE
55	6	2.5	0.07048	0.048624	TRUE
55	6	3	0.083755	0.059405	TRUE
55	6	3.5	0.09261	0.07124	TRUE
55	6	4	0.101633	0.080661	TRUE
55	6	4.5	0.11174	0.089989	TRUE
55	6	5	0.123044	0.1044	TRUE
55	6	5.5	0.149381	0.116906	TRUE
55	6	6	0.165901	0.129527	TRUE
55	6	6.5	0.17811	0.144888	TRUE
55	6	7	0.192832	0.152376	TRUE
55	6	7.5	0.196885	0.160974	TRUE
55	6	8	0.208457	0.171694	TRUE
55	6	8.5	0.223472	0.184257	TRUE
55	6	9	0.244017	0.191602	TRUE
55	6	9.5	0.263929	0.200696	TRUE
55	6	10	0.26765	0.204229	TRUE
55	6	10.5	0.287203	0.208176	TRUE
55	6	11	0.315185	0.212052	TRUE
55	6	11.5	0.334289	0.22154	TRUE
55	6	12	0.354876	0.233887	TRUE
55	6	12.5	0.392088	0.250939	TRUE

Table S3. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO}	Y _{BYD}	is Augmented
55	6	13	0.425173	0.270897	TRUE
55	6	13.5	0.470674	0.271232	TRUE
55	6	14	0.507731	0.281594	TRUE
55	6	14.5	0.512907	0.291633	TRUE
55	6	15	0.558938	0.325252	TRUE
55	6	15.5	0.574563	0.340877	TRUE
55	7	0	0	0	FALSE
55	7	0.5	0.024268	0.009612	TRUE
55	7	1	0.045101	0.021331	TRUE
55	7	1.5	0.0625	0.035156	FALSE
55	7	2	0.076464	0.051088	TRUE
55	7	2.5	0.087823	0.068582	TRUE
55	7	3	0.101563	0.084375	FALSE
55	7	3.5	0.118512	0.097924	TRUE
55	7	4	0.138028	0.109627	TRUE
55	7	4.5	0.15625	0.121875	FALSE
55	7	5	0.172535	0.135067	TRUE
55	7	5.5	0.187021	0.14916	TRUE
55	7	6	0.200547	0.163906	FALSE
55	7	6.5	0.21325	0.179263	TRUE
55	7	7	0.225364	0.195135	TRUE
55	7	7.5	0.238281	0.210938	FALSE
55	7	8	0.252234	0.226575	TRUE
55	7	8.5	0.267482	0.241942	TRUE
55	7	9	0.285586	0.256406	FALSE
55	7	9.5	0.306806	0.269862	TRUE
55	7	10	0.331142	0.28231	TRUE
55	7	10.5	0.358594	0.29375	FALSE
55	7	11	0.389162	0.304182	TRUE
55	7	11.5	0.422845	0.313605	TRUE
55	7	12	0.459645	0.322021	TRUE
55	7	12.5	0.499561	0.329428	TRUE
55	7	13	0.542593	0.335827	TRUE
55	7	13.5	0.58874	0.341218	TRUE
55	7	14	0.638004	0.345601	TRUE
55	7	14.5	0.690384	0.348976	TRUE
55	7	15	0.745879	0.351342	TRUE
55	7	15.5	0.804491	0.352701	TRUE
55	8	0	0	0	TRUE
55	8	0.5	0.015577	0.006061	TRUE
55	8	1	0.043952	0.019089	TRUE
55	8	1.5	0.06271	0.035058	TRUE
55	8	2	0.081006	0.045302	TRUE
55	8	2.5	0.106353	0.057334	TRUE
55	8	3	0.120482	0.067999	TRUE
55	8	3.5	0.134458	0.081384	TRUE
55	8	4	0.143618	0.091815	TRUE
55	8	4.5	0.162965	0.10047	TRUE
55	8	5	0.177412	0.112314	TRUE
55	8	5.5	0.199343	0.120713	TRUE
55	8	6	0.206578	0.133326	TRUE
55	8	6.5	0.217018	0.150433	TRUE
55	8	7	0.237468	0.160194	TRUE
55	8	7.5	0.250715	0.170408	TRUE
55	8	8	0.266996	0.183431	TRUE
55	8	8.5	0.279073	0.194965	TRUE
55	8	9	0.295988	0.203615	TRUE
55	8	9.5	0.315291	0.210916	TRUE
55	8	10	0.333171	0.2202	TRUE
55	8	10.5	0.358454	0.230716	TRUE

Table S3. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO}	Y _{BYD}	is Augmented
55	8	11	0.404195	0.240294	TRUE
55	8	11.5	0.417232	0.245276	TRUE
55	8	12	0.442104	0.255878	TRUE
55	8	12.5	0.472007	0.267068	TRUE
55	8	13	0.497719	0.273153	TRUE
55	8	13.5	0.539566	0.278609	TRUE
55	8	14	0.566679	0.304768	TRUE
55	8	14.5	0.601019	0.338108	TRUE
55	8	15	0.644755	0.366977	TRUE
55	8	15.5	0.67719	0.388521	TRUE
55	9	0	0	0	FALSE
55	9	0.5	0.008186	0.003447	TRUE
55	9	1	0.023811	0.008134	TRUE
55	9	1.5	0.046875	0.014063	FALSE
55	9	2	0.077379	0.021231	TRUE
55	9	2.5	0.113004	0.029528	TRUE
55	9	3	0.139844	0.038281	FALSE
55	9	3.5	0.155581	0.047378	TRUE
55	9	4	0.162056	0.056744	TRUE
55	9	4.5	0.170313	0.065938	FALSE
55	9	5	0.18219	0.074884	TRUE
55	9	5.5	0.197552	0.08359	TRUE
55	9	6	0.21557	0.092094	FALSE
55	9	6.5	0.236107	0.100402	TRUE
55	9	7	0.258775	0.108529	TRUE
55	9	7.5	0.28125	0.116563	FALSE
55	9	8	0.303145	0.124516	TRUE
55	9	8.5	0.324045	0.132407	TRUE
55	9	9	0.341461	0.140328	FALSE
55	9	9.5	0.354977	0.148297	TRUE
55	9	10	0.372407	0.156312	TRUE
55	9	10.5	0.385938	0.164375	FALSE
55	9	11	0.414507	0.172485	TRUE
55	9	11.5	0.43488	0.180642	TRUE
55	9	12	0.450008	0.188845	TRUE
55	9	12.5	0.463789	0.197096	TRUE
55	9	13	0.475395	0.205394	TRUE
55	9	13.5	0.478985	0.213739	TRUE
55	9	14	0.495956	0.222131	TRUE
55	9	14.5	0.510057	0.230571	TRUE
55	9	15	0.526193	0.239057	TRUE
55	9	15.5	0.552189	0.24759	TRUE
60	5	0	0	0	TRUE
60	5	0.5	0.009489	0.004688	TRUE
60	5	1	0.017394	0.010213	TRUE
60	5	1.5	0.03564	0.024967	TRUE
60	5	2	0.0496	0.033186	TRUE
60	5	2.5	0.068229	0.044003	TRUE
60	5	3	0.084788	0.060237	TRUE
60	5	3.5	0.095958	0.070534	TRUE
60	5	4	0.105876	0.09106	TRUE
60	5	4.5	0.114212	0.107797	TRUE
60	5	5	0.127526	0.118039	TRUE
60	5	5.5	0.123765	0.123016	TRUE
60	5	6	0.130823	0.128101	TRUE
60	5	6.5	0.147306	0.147305	TRUE
60	5	7	0.15801	0.154463	TRUE
60	5	7.5	0.173496	0.17273	TRUE
60	5	8	0.181173	0.180461	TRUE
60	5	8.5	0.196231	0.191843	TRUE

Table S3. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO}	Y _{BYD}	is Augmented
60	5	9	0.205595	0.200758	TRUE
60	5	9.5	0.221097	0.210379	TRUE
60	5	10	0.235586	0.228293	TRUE
60	5	10.5	0.243466	0.239401	TRUE
60	5	11	0.258931	0.241511	TRUE
60	5	11.5	0.262	0.240786	TRUE
60	5	12	0.261765	0.241652	TRUE
60	5	12.5	0.267794	0.23657	TRUE
60	5	13	0.282046	0.243421	TRUE
60	5	13.5	0.281656	0.243945	TRUE
60	5	14	0.29266	0.248014	TRUE
60	5	14.5	0.290056	0.25654	TRUE
60	5	15	0.300363	0.287016	TRUE
60	5	15.5	0.315988	0.302641	TRUE
60	6	0	0	0	TRUE
60	6	0.5	0.015966	0.009476	TRUE
60	6	1	0.033154	0.021325	TRUE
60	6	1.5	0.051563	0.035547	TRUE
60	6	2	0.071193	0.052143	TRUE
60	6	2.5	0.091691	0.070648	TRUE
60	6	3	0.110938	0.088281	TRUE
60	6	3.5	0.128578	0.104578	TRUE
60	6	4	0.14478	0.119674	TRUE
60	6	4.5	0.160547	0.134375	TRUE
60	6	5	0.176045	0.148817	TRUE
60	6	5.5	0.191326	0.16301	TRUE
60	6	6	0.206695	0.177023	TRUE
60	6	6.5	0.222203	0.190868	TRUE
60	6	7	0.237879	0.204534	TRUE
60	6	7.5	0.253906	0.217969	TRUE
60	6	8	0.270313	0.231162	TRUE
60	6	8.5	0.287142	0.244108	TRUE
60	6	9	0.304633	0.256766	TRUE
60	6	9.5	0.322828	0.269128	TRUE
60	6	10	0.341726	0.281196	TRUE
60	6	10.5	0.361328	0.292969	TRUE
60	6	11	0.381634	0.304447	TRUE
60	6	11.5	0.402643	0.315629	TRUE
60	6	12	0.424356	0.326517	TRUE
60	6	12.5	0.446772	0.33711	TRUE
60	6	13	0.469892	0.347409	TRUE
60	6	13.5	0.493716	0.357412	TRUE
60	6	14	0.518243	0.36712	TRUE
60	6	14.5	0.543473	0.376533	TRUE
60	6	15	0.569408	0.385651	TRUE
60	6	15.5	0.596046	0.394475	TRUE
60	7	0	0	0	TRUE
60	7	0.5	0.01453	0.010866	TRUE
60	7	1	0.051817	0.034681	TRUE
60	7	1.5	0.072957	0.052856	TRUE
60	7	2	0.09337	0.073794	TRUE
60	7	2.5	0.117348	0.098654	TRUE
60	7	3	0.133007	0.118142	TRUE
60	7	3.5	0.147653	0.135607	TRUE
60	7	4	0.160136	0.157096	TRUE
60	7	4.5	0.180193	0.176527	TRUE
60	7	5	0.202946	0.194884	TRUE
60	7	5.5	0.221834	0.21369	TRUE
60	7	6	0.234926	0.231154	TRUE
60	7	6.5	0.248931	0.242824	TRUE

Table S3. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO}	Y _{BYD}	is Augmented
60	7	7	0.262134	0.257534	TRUE
60	7	7.5	0.285496	0.280439	TRUE
60	7	8	0.303653	0.294368	TRUE
60	7	8.5	0.323922	0.309129	TRUE
60	7	9	0.341585	0.311263	TRUE
60	7	9.5	0.361721	0.326739	TRUE
60	7	10	0.39117	0.340824	TRUE
60	7	10.5	0.42136	0.35157	TRUE
60	7	11	0.462882	0.364265	TRUE
60	7	11.5	0.490145	0.376992	TRUE
60	7	12	0.518058	0.385824	TRUE
60	7	12.5	0.553258	0.394253	TRUE
60	7	13	0.584462	0.4169	TRUE
60	7	13.5	0.634595	0.421462	TRUE
60	7	14	0.672389	0.440871	TRUE
60	7	14.5	0.710802	0.48529	TRUE
60	7	15	0.745203	0.513342	TRUE
60	7	15.5	0.760828	0.528967	TRUE
60	8	0	0	0	TRUE
60	8	0.5	0.02483	0.009195	TRUE
60	8	1	0.05009	0.020706	TRUE
60	8	1.5	0.075781	0.034531	TRUE
60	8	2	0.101903	0.050672	TRUE
60	8	2.5	0.128155	0.068671	TRUE
60	8	3	0.152734	0.085781	TRUE
60	8	3.5	0.17534	0.101546	TRUE
60	8	4	0.19617	0.116176	TRUE
60	8	4.5	0.216406	0.130938	TRUE
60	8	5	0.236246	0.146043	TRUE
60	8	5.5	0.25572	0.161445	TRUE
60	8	6	0.275012	0.176867	TRUE
60	8	6.5	0.294152	0.192263	TRUE
60	8	7	0.313146	0.207553	TRUE
60	8	7.5	0.332031	0.222266	TRUE
60	8	8	0.350812	0.236322	TRUE
60	8	8.5	0.369502	0.249634	TRUE
60	8	9	0.388172	0.261672	TRUE
60	8	9.5	0.406835	0.272347	TRUE
60	8	10	0.425491	0.281659	TRUE
60	8	10.5	0.444141	0.289609	TRUE
60	8	11	0.462783	0.296197	TRUE
60	8	11.5	0.481418	0.301421	TRUE
60	8	12	0.500046	0.305283	TRUE
60	8	12.5	0.518668	0.307783	TRUE
60	8	13	0.537282	0.30892	TRUE
60	8	13.5	0.555889	0.324319	TRUE
60	8	14	0.574489	0.353981	TRUE
60	8	14.5	0.593083	0.366655	TRUE
60	8	15	0.611669	0.389037	TRUE
60	8	15.5	0.630248	0.40354	TRUE
60	9	0	0	0	TRUE
60	9	0.5	0.006232	0.000393	TRUE
60	9	1	0.045115	0.015318	TRUE
60	9	1.5	0.075102	0.02894	TRUE
60	9	2	0.105196	0.038675	TRUE
60	9	2.5	0.137713	0.04778	TRUE
60	9	3	0.171045	0.061685	TRUE
60	9	3.5	0.190686	0.070687	TRUE
60	9	4	0.201852	0.088794	TRUE
60	9	4.5	0.216838	0.10361	TRUE

Table S3. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO}	Y _{BYD}	is Augmented
60	9	5	0.231464	0.116701	TRUE
60	9	5.5	0.24514	0.130457	TRUE
60	9	6	0.265223	0.14021	TRUE
60	9	6.5	0.287159	0.148977	TRUE
60	9	7	0.291362	0.166353	TRUE
60	9	7.5	0.322351	0.181404	TRUE
60	9	8	0.34443	0.193115	TRUE
60	9	8.5	0.366408	0.208116	TRUE
60	9	9	0.379394	0.215114	TRUE
60	9	9.5	0.393989	0.223351	TRUE
60	9	10	0.406626	0.24011	TRUE
60	9	10.5	0.41476	0.250339	TRUE
60	9	11	0.40061	0.256609	TRUE
60	9	11.5	0.409755	0.270912	TRUE
60	9	12	0.42907	0.287631	TRUE
60	9	12.5	0.450693	0.302224	TRUE
60	9	13	0.466634	0.322441	TRUE
60	9	13.5	0.488123	0.354204	TRUE
60	9	14	0.499277	0.373516	TRUE
60	9	14.5	0.501588	0.397346	TRUE
60	9	15	0.515848	0.409569	TRUE
60	9	15.5	0.523661	0.429707	TRUE
65	5	0	0	0	FALSE
65	5	0.5	0.007664	0.007307	TRUE
65	5	1	0.021206	0.018193	TRUE
65	5	1.5	0.040625	0.035938	FALSE
65	5	2	0.065922	0.053198	TRUE
65	5	2.5	0.095559	0.072715	TRUE
65	5	3	0.120313	0.092188	FALSE
65	5	3.5	0.138644	0.111233	TRUE
65	5	4	0.151532	0.12972	TRUE
65	5	4.5	0.164844	0.146875	FALSE
65	5	5	0.179556	0.162567	TRUE
65	5	5.5	0.195631	0.17686	TRUE
65	5	6	0.212844	0.190141	FALSE
65	5	6.5	0.231155	0.202472	TRUE
65	5	7	0.250395	0.213934	TRUE
65	5	7.5	0.269531	0.225	FALSE
65	5	8	0.288393	0.235749	TRUE
65	5	8.5	0.306801	0.246274	TRUE
65	5	9	0.32368	0.257125	FALSE
65	5	9.5	0.338849	0.268394	TRUE
65	5	10	0.35231	0.280082	TRUE
65	5	10.5	0.364063	0.292188	FALSE
65	5	11	0.374106	0.304712	TRUE
65	5	11.5	0.38244	0.317654	TRUE
65	5	12	0.389066	0.331014	TRUE
65	5	12.5	0.393983	0.344793	TRUE
65	5	13	0.397191	0.35899	TRUE
65	5	13.5	0.398691	0.373605	TRUE
65	5	14	0.414106	0.388639	TRUE
65	5	14.5	0.434382	0.390907	TRUE
65	5	15	0.455436	0.407929	TRUE
65	5	15.5	0.473538	0.426553	TRUE
65	6	0	0	0	TRUE
65	6	0.5	0.005986	0.005516	TRUE
65	6	1	0.036553	0.031137	TRUE
65	6	1.5	0.061346	0.048584	TRUE
65	6	2	0.07955	0.063719	TRUE
65	6	2.5	0.10731	0.084617	TRUE

Table S3. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO}	Y _{BYD}	is Augmented
65	6	3	0.126806	0.111676	TRUE
65	6	3.5	0.151033	0.139203	TRUE
65	6	4	0.176684	0.161339	TRUE
65	6	4.5	0.197605	0.176636	TRUE
65	6	5	0.214485	0.199496	TRUE
65	6	5.5	0.228946	0.212937	TRUE
65	6	6	0.246242	0.225011	TRUE
65	6	6.5	0.264373	0.247772	TRUE
65	6	7	0.303829	0.267462	TRUE
65	6	7.5	0.325591	0.281835	TRUE
65	6	8	0.354323	0.300339	TRUE
65	6	8.5	0.37115	0.313618	TRUE
65	6	9	0.391434	0.337113	TRUE
65	6	9.5	0.408291	0.349185	TRUE
65	6	10	0.436075	0.360551	TRUE
65	6	10.5	0.469642	0.388635	TRUE
65	6	11	0.491549	0.417409	TRUE
65	6	11.5	0.502658	0.446687	TRUE
65	6	12	0.508622	0.480826	TRUE
65	6	12.5	0.510743	0.493023	TRUE
65	6	13	0.525807	0.503106	TRUE
65	6	13.5	0.559849	0.528919	TRUE
65	6	14	0.578003	0.545483	TRUE
65	6	14.5	0.585071	0.565545	TRUE
65	6	15	0.629296	0.60926	TRUE
65	6	15.5	0.652734	0.64051	TRUE
65	7	0	0	0	FALSE
65	7	0.5	0.038853	0.022849	TRUE
65	7	1	0.072708	0.046808	TRUE
65	7	1.5	0.101563	0.071875	FALSE
65	7	2	0.125418	0.098052	TRUE
65	7	2.5	0.145801	0.125444	TRUE
65	7	3	0.171875	0.154688	FALSE
65	7	3.5	0.205166	0.18589	TRUE
65	7	4	0.244324	0.218413	TRUE
65	7	4.5	0.28125	0.248438	FALSE
65	7	5	0.314594	0.275326	TRUE
65	7	5.5	0.344449	0.299294	TRUE
65	7	6	0.371367	0.321625	FALSE
65	7	6.5	0.39544	0.342535	TRUE
65	7	7	0.416941	0.362326	TRUE
65	7	7.5	0.4375	0.382813	FALSE
65	7	8	0.45739	0.404298	TRUE
65	7	8.5	0.4769	0.427128	TRUE
65	7	9	0.497773	0.453375	FALSE
65	7	9.5	0.5203	0.483384	TRUE
65	7	10	0.54448	0.517155	TRUE
65	7	10.5	0.570313	0.554688	FALSE
65	7	11	0.597799	0.595982	TRUE
65	7	11.5	0.626938	0.625415	TRUE
65	7	12	0.65773	0.642984	TRUE
65	7	12.5	0.690176	0.67994	TRUE
65	7	13	0.724274	0.694096	TRUE
65	7	13.5	0.760026	0.718264	TRUE
65	7	14	0.797432	0.732901	TRUE
65	7	14.5	0.83649	0.740385	TRUE
65	7	15	0.877201	0.749277	TRUE
65	7	15.5	0.919566	0.752556	TRUE
65	8	0	0	0	TRUE
65	8	0.5	0.013879	0.00701	TRUE

Table S3. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO}	Y _{BYD}	is Augmented
65	8	1	0.059022	0.029138	TRUE
65	8	1.5	0.093457	0.047155	TRUE
65	8	2	0.121277	0.066243	TRUE
65	8	2.5	0.154882	0.092302	TRUE
65	8	3	0.18763	0.120636	TRUE
65	8	3.5	0.223813	0.149472	TRUE
65	8	4	0.259933	0.174969	TRUE
65	8	4.5	0.284545	0.187576	TRUE
65	8	5	0.309445	0.207323	TRUE
65	8	5.5	0.336367	0.223867	TRUE
65	8	6	0.358837	0.238305	TRUE
65	8	6.5	0.38683	0.263631	TRUE
65	8	7	0.423983	0.283211	TRUE
65	8	7.5	0.442401	0.30942	TRUE
65	8	8	0.4685	0.33676	TRUE
65	8	8.5	0.48429	0.358793	TRUE
65	8	9	0.503483	0.375943	TRUE
65	8	9.5	0.523769	0.377863	TRUE
65	8	10	0.547571	0.392784	TRUE
65	8	10.5	0.567905	0.414868	TRUE
65	8	11	0.586185	0.436549	TRUE
65	8	11.5	0.604503	0.479372	TRUE
65	8	12	0.628634	0.513587	TRUE
65	8	12.5	0.643405	0.51971	TRUE
65	8	13	0.653035	0.554652	TRUE
65	8	13.5	0.687323	0.563301	TRUE
65	8	14	0.697171	0.606687	TRUE
65	8	14.5	0.736484	0.626979	TRUE
65	8	15	0.778209	0.647188	TRUE
65	8	15.5	0.801647	0.662813	TRUE
65	9	0	0	0	FALSE
65	9	0.5	0.025391	0.008778	TRUE
65	9	1	0.055079	0.02008	TRUE
65	9	1.5	0.089063	0.033906	FALSE
65	9	2	0.127342	0.050257	TRUE
65	9	2.5	0.168487	0.06876	TRUE
65	9	3	0.203906	0.087188	FALSE
65	9	3.5	0.232169	0.105168	TRUE
65	9	4	0.254312	0.122724	TRUE
65	9	4.5	0.276563	0.14	FALSE
65	9	5	0.299957	0.157019	TRUE
65	9	5.5	0.324418	0.17373	TRUE
65	9	6	0.349477	0.189828	FALSE
65	9	6.5	0.375053	0.205262	TRUE
65	9	7	0.400929	0.219971	TRUE
65	9	7.5	0.425781	0.233594	FALSE
65	9	8	0.449391	0.246069	TRUE
65	9	8.5	0.471521	0.257326	TRUE
65	9	9	0.490758	0.266938	FALSE
65	9	9.5	0.506864	0.274832	TRUE
65	9	10	0.519841	0.281009	TRUE
65	9	10.5	0.529688	0.285469	FALSE
65	9	11	0.536404	0.288212	TRUE
65	9	11.5	0.539991	0.289238	TRUE
65	9	12	0.54826	0.291713	TRUE
65	9	12.5	0.561212	0.301763	TRUE
65	9	13	0.571034	0.320126	TRUE
65	9	13.5	0.585116	0.340117	TRUE
65	9	14	0.59375	0.342355	TRUE
65	9	14.5	0.605157	0.368709	TRUE

Table S3. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO}	Y _{BYD}	is Augmented
65	9	15	0.618335	0.40459	TRUE
65	9	15.5	0.635693	0.422316	TRUE
70	5	0	0	0	TRUE
70	5	0.5	0.010429	0.01016	TRUE
70	5	1	0.04344	0.03823	TRUE
70	5	1.5	0.068747	0.059167	TRUE
70	5	2	0.091894	0.081154	TRUE
70	5	2.5	0.114254	0.103433	TRUE
70	5	3	0.149535	0.128173	TRUE
70	5	3.5	0.181733	0.151441	TRUE
70	5	4	0.213477	0.179426	TRUE
70	5	4.5	0.234139	0.20275	TRUE
70	5	5	0.252743	0.219913	TRUE
70	5	5.5	0.275092	0.232341	TRUE
70	5	6	0.302006	0.253864	TRUE
70	5	6.5	0.324467	0.26615	TRUE
70	5	7	0.339773	0.277117	TRUE
70	5	7.5	0.371708	0.28415	TRUE
70	5	8	0.399132	0.292481	TRUE
70	5	8.5	0.42401	0.29888	TRUE
70	5	9	0.441076	0.312106	TRUE
70	5	9.5	0.455564	0.341305	TRUE
70	5	10	0.475348	0.361747	TRUE
70	5	10.5	0.487557	0.377126	TRUE
70	5	11	0.504521	0.395045	TRUE
70	5	11.5	0.524277	0.41083	TRUE
70	5	12	0.554712	0.429633	TRUE
70	5	12.5	0.573557	0.433267	TRUE
70	5	13	0.595355	0.451758	TRUE
70	5	13.5	0.605681	0.477307	TRUE
70	5	14	0.624289	0.485519	TRUE
70	5	14.5	0.624857	0.504315	TRUE
70	5	15	0.657825	0.53176	TRUE
70	5	15.5	0.681262	0.547385	TRUE
70	6	0	0	0	TRUE
70	6	0.5	0.016371	0.01474	TRUE
70	6	1	0.037865	0.035167	TRUE
70	6	1.5	0.06448	0.061281	TRUE
70	6	2	0.096219	0.086832	TRUE
70	6	2.5	0.132031	0.114564	TRUE
70	6	3	0.165625	0.142188	TRUE
70	6	3.5	0.195953	0.169322	TRUE
70	6	4	0.223283	0.195766	TRUE
70	6	4.5	0.249219	0.220313	TRUE
70	6	5	0.274029	0.242759	TRUE
70	6	5.5	0.297653	0.263225	TRUE
70	6	6	0.319723	0.282422	TRUE
70	6	6.5	0.340178	0.300468	TRUE
70	6	7	0.359141	0.317504	TRUE
70	6	7.5	0.377344	0.334375	TRUE
70	6	8	0.394907	0.351223	TRUE
70	6	8.5	0.411942	0.368211	TRUE
70	6	9	0.429105	0.386328	TRUE
70	6	9.5	0.446508	0.405738	TRUE
70	6	10	0.46415	0.426441	TRUE
70	6	10.5	0.482031	0.448438	TRUE
70	6	11	0.500151	0.471727	TRUE
70	6	11.5	0.51851	0.496309	TRUE
70	6	12	0.537109	0.522185	TRUE
70	6	12.5	0.555946	0.549353	TRUE

Table S3. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO}	Y _{BYD}	is Augmented
70	6	13	0.575022	0.563752	TRUE
70	6	13.5	0.594338	0.579444	TRUE
70	6	14	0.613892	0.604918	TRUE
70	6	14.5	0.633686	0.615826	TRUE
70	6	15	0.653719	0.639664	TRUE
70	6	15.5	0.673991	0.645768	TRUE
70	7	0	0	0	TRUE
70	7	0.5	0.010235	0.00965	TRUE
70	7	1	0.052219	0.049388	TRUE
70	7	1.5	0.084031	0.075527	TRUE
70	7	2	0.10907	0.108133	TRUE
70	7	2.5	0.138577	0.136397	TRUE
70	7	3	0.176276	0.176153	TRUE
70	7	3.5	0.219708	0.211048	TRUE
70	7	4	0.265869	0.244757	TRUE
70	7	4.5	0.305119	0.278679	TRUE
70	7	5	0.342192	0.30809	TRUE
70	7	5.5	0.377202	0.333333	TRUE
70	7	6	0.408708	0.363542	TRUE
70	7	6.5	0.431572	0.381498	TRUE
70	7	7	0.454522	0.396277	TRUE
70	7	7.5	0.473841	0.411879	TRUE
70	7	8	0.487148	0.425299	TRUE
70	7	8.5	0.506494	0.444359	TRUE
70	7	9	0.528776	0.475312	TRUE
70	7	9.5	0.550352	0.517072	TRUE
70	7	10	0.569524	0.556991	TRUE
70	7	10.5	0.597817	0.593367	TRUE
70	7	11	0.619199	0.619164	TRUE
70	7	11.5	0.650946	0.648233	TRUE
70	7	12	0.679254	0.672797	TRUE
70	7	12.5	0.709435	0.705711	TRUE
70	7	13	0.746728	0.740027	TRUE
70	7	13.5	0.780185	0.779693	TRUE
70	7	14	0.831772	0.82106	TRUE
70	7	14.5	0.869336	0.840392	TRUE
70	7	15	0.925809	0.855081	TRUE
70	7	15.5	0.949246	0.886331	TRUE
70	8	0	0	0	TRUE
70	8	0.5	0.039585	0.018983	TRUE
70	8	1	0.076955	0.040389	TRUE
70	8	1.5	0.112109	0.064219	TRUE
70	8	2	0.145049	0.090471	TRUE
70	8	2.5	0.176426	0.118703	TRUE
70	8	3	0.210156	0.14625	TRUE
70	8	3.5	0.246892	0.17267	TRUE
70	8	4	0.285799	0.19802	TRUE
70	8	4.5	0.321875	0.222656	TRUE
70	8	5	0.354285	0.246637	TRUE
70	8	5.5	0.383156	0.269992	TRUE
70	8	6	0.409254	0.292906	TRUE
70	8	6.5	0.432706	0.315411	TRUE
70	8	7	0.453752	0.337526	TRUE
70	8	7.5	0.473828	0.359375	TRUE
70	8	8	0.493173	0.38098	TRUE
70	8	8.5	0.512052	0.402366	TRUE
70	8	9	0.532055	0.423695	TRUE
70	8	9.5	0.553445	0.444994	TRUE
70	8	10	0.576224	0.466262	TRUE
70	8	10.5	0.600391	0.4875	TRUE

Table S3. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO}	Y _{BYD}	is Augmented
70	8	11	0.625946	0.508707	TRUE
70	8	11.5	0.652889	0.529884	TRUE
70	8	12	0.68122	0.55103	TRUE
70	8	12.5	0.710939	0.572146	TRUE
70	8	13	0.742046	0.593231	TRUE
70	8	13.5	0.774542	0.614286	TRUE
70	8	14	0.808426	0.63531	TRUE
70	8	14.5	0.843698	0.656304	TRUE
70	8	15	0.880357	0.677267	TRUE
70	8	15.5	0.918406	0.6982	TRUE
70	9	0	0	0	TRUE
70	9	0.5	0.017638	0.005337	TRUE
70	9	1	0.071101	0.032305	TRUE
70	9	1.5	0.108722	0.051236	TRUE
70	9	2	0.147179	0.074013	TRUE
70	9	2.5	0.189788	0.092676	TRUE
70	9	3	0.226993	0.116285	TRUE
70	9	3.5	0.265833	0.134553	TRUE
70	9	4	0.304747	0.15899	TRUE
70	9	4.5	0.338746	0.180496	TRUE
70	9	5	0.362966	0.197548	TRUE
70	9	5.5	0.38719	0.221445	TRUE
70	9	6	0.414872	0.25096	TRUE
70	9	6.5	0.440688	0.26926	TRUE
70	9	7	0.464845	0.286713	TRUE
70	9	7.5	0.494581	0.297133	TRUE
70	9	8	0.511758	0.310143	TRUE
70	9	8.5	0.528129	0.322554	TRUE
70	9	9	0.54926	0.340921	TRUE
70	9	9.5	0.580662	0.369966	TRUE
70	9	10	0.613386	0.383189	TRUE
70	9	10.5	0.637278	0.39071	TRUE
70	9	11	0.665717	0.402939	TRUE
70	9	11.5	0.68263	0.421801	TRUE
70	9	12	0.701966	0.432081	TRUE
70	9	12.5	0.721273	0.448381	TRUE
70	9	13	0.743726	0.459451	TRUE
70	9	13.5	0.760047	0.473884	TRUE
70	9	14	0.778524	0.500757	TRUE
70	9	14.5	0.803332	0.520952	TRUE
70	9	15	0.831783	0.534018	TRUE
70	9	15.5	0.842553	0.549643	TRUE
75	5	0	0	0	FALSE
75	5	0.5	0.032455	0.018454	TRUE
75	5	1	0.063843	0.039132	TRUE
75	5	1.5	0.094164	0.062031	FALSE
75	5	2	0.123419	0.087154	TRUE
75	5	2.5	0.151626	0.114168	TRUE
75	5	3	0.178906	0.141094	FALSE
75	5	3.5	0.205278	0.1676	TRUE
75	5	4	0.230761	0.193446	TRUE
75	5	4.5	0.255469	0.217188	FALSE
75	5	5	0.27942	0.238584	TRUE
75	5	5.5	0.302657	0.257745	TRUE
75	5	6	0.32543	0.275328	FALSE
75	5	6.5	0.347779	0.291444	TRUE
75	5	7	0.369727	0.306207	TRUE
75	5	7.5	0.391406	0.320313	FALSE
75	5	8	0.412838	0.333875	TRUE
75	5	8.5	0.434054	0.347032	TRUE

Table S3. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO}	Y _{BYD}	is Augmented
75	5	9	0.455234	0.360609	FALSE
75	5	9.5	0.476411	0.374744	TRUE
75	5	10	0.497583	0.389437	TRUE
75	5	10.5	0.51875	0.404688	FALSE
75	5	11	0.539913	0.420496	TRUE
75	5	11.5	0.561072	0.436861	TRUE
75	5	12	0.582226	0.453785	TRUE
75	5	12.5	0.603376	0.471266	TRUE
75	5	13	0.624522	0.489305	TRUE
75	5	13.5	0.645663	0.507902	TRUE
75	5	14	0.666799	0.527056	TRUE
75	5	14.5	0.687932	0.546768	TRUE
75	5	15	0.70906	0.567038	TRUE
75	5	15.5	0.730183	0.587865	TRUE
75	6	0	0	0	TRUE
75	6	0.5	0.022033	0.008647	TRUE
75	6	1	0.071224	0.045094	TRUE
75	6	1.5	0.104266	0.074116	TRUE
75	6	2	0.139253	0.104957	TRUE
75	6	2.5	0.170356	0.131198	TRUE
75	6	3	0.203058	0.162305	TRUE
75	6	3.5	0.236063	0.191899	TRUE
75	6	4	0.271701	0.217811	TRUE
75	6	4.5	0.30995	0.249804	TRUE
75	6	5	0.340975	0.270324	TRUE
75	6	5.5	0.36979	0.29074	TRUE
75	6	6	0.398742	0.313798	TRUE
75	6	6.5	0.423518	0.335385	TRUE
75	6	7	0.447985	0.352255	TRUE
75	6	7.5	0.4654	0.372662	TRUE
75	6	8	0.480425	0.396923	TRUE
75	6	8.5	0.499573	0.420616	TRUE
75	6	9	0.519596	0.445297	TRUE
75	6	9.5	0.549116	0.466566	TRUE
75	6	10	0.568751	0.494138	TRUE
75	6	10.5	0.59544	0.526624	TRUE
75	6	11	0.615762	0.561973	TRUE
75	6	11.5	0.6286	0.563381	TRUE
75	6	12	0.64452	0.582856	TRUE
75	6	12.5	0.667428	0.608593	TRUE
75	6	13	0.689587	0.612958	TRUE
75	6	13.5	0.715979	0.636151	TRUE
75	6	14	0.738632	0.647678	TRUE
75	6	14.5	0.769307	0.666422	TRUE
75	6	15	0.812175	0.684201	TRUE
75	6	15.5	0.8278	0.701388	TRUE
75	7	0	0	0	FALSE
75	7	0.5	0.025078	0.021704	TRUE
75	7	1	0.054524	0.052142	TRUE
75	7	1.5	0.088336	0.086625	FALSE
75	7	2	0.126515	0.120467	TRUE
75	7	2.5	0.168502	0.156413	TRUE
75	7	3	0.210938	0.192188	FALSE
75	7	3.5	0.253262	0.227412	TRUE
75	7	4	0.295033	0.261812	TRUE
75	7	4.5	0.333594	0.29375	FALSE
75	7	5	0.368502	0.322952	TRUE
75	7	5.5	0.399674	0.34959	TRUE
75	7	6	0.426602	0.374703	FALSE
75	7	6.5	0.449201	0.398463	TRUE

Table S3. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO}	Y _{BYD}	is Augmented
75	7	7	0.467888	0.421073	TRUE
75	7	7.5	0.485156	0.44375	FALSE
75	7	8	0.501421	0.466696	TRUE
75	7	8.5	0.517082	0.490148	TRUE
75	7	9	0.534531	0.515531	FALSE
75	7	9.5	0.554167	0.543082	TRUE
75	7	10	0.57599	0.572801	TRUE
75	7	10.5	0.6	0.589063	FALSE
75	7	11	0.626197	0.608577	TRUE
75	7	11.5	0.654581	0.621443	TRUE
75	7	12	0.685151	0.682886	TRUE
75	7	12.5	0.717909	0.707038	TRUE
75	7	13	0.752854	0.732576	TRUE
75	7	13.5	0.789985	0.779033	TRUE
75	7	14	0.829304	0.794845	TRUE
75	7	14.5	0.870809	0.7972	TRUE
75	7	15	0.914501	0.801722	TRUE
75	7	15.5	0.960381	0.808413	TRUE
75	8	0	0	0	TRUE
75	8	0.5	0.02146	0.009661	TRUE
75	8	1	0.083383	0.044995	TRUE
75	8	1.5	0.121207	0.072362	TRUE
75	8	2	0.164727	0.106447	TRUE
75	8	2.5	0.205563	0.137314	TRUE
75	8	3	0.241445	0.170353	TRUE
75	8	3.5	0.280552	0.194251	TRUE
75	8	4	0.320094	0.215401	TRUE
75	8	4.5	0.361661	0.243802	TRUE
75	8	5	0.397417	0.260471	TRUE
75	8	5.5	0.424431	0.279741	TRUE
75	8	6	0.449656	0.302339	TRUE
75	8	6.5	0.476003	0.329955	TRUE
75	8	7	0.495649	0.352183	TRUE
75	8	7.5	0.517195	0.382585	TRUE
75	8	8	0.53427	0.41491	TRUE
75	8	8.5	0.546173	0.44087	TRUE
75	8	9	0.562694	0.464616	TRUE
75	8	9.5	0.584778	0.485237	TRUE
75	8	10	0.608989	0.506861	TRUE
75	8	10.5	0.632971	0.532632	TRUE
75	8	11	0.657583	0.558985	TRUE
75	8	11.5	0.684991	0.584006	TRUE
75	8	12	0.71086	0.620763	TRUE
75	8	12.5	0.741679	0.634401	TRUE
75	8	13	0.77367	0.649688	TRUE
75	8	13.5	0.801768	0.664133	TRUE
75	8	14	0.836403	0.698287	TRUE
75	8	14.5	0.87855	0.705012	TRUE
75	8	15	0.925391	0.74013	TRUE
75	8	15.5	0.948828	0.77138	TRUE
75	9	0	0	0	FALSE
75	9	0.5	0.040316	0.015117	TRUE
75	9	1	0.081202	0.033971	TRUE
75	9	1.5	0.122656	0.056563	FALSE
75	9	2	0.16468	0.08289	TRUE
75	9	2.5	0.207051	0.111962	TRUE
75	9	3	0.248438	0.137813	FALSE
75	9	3.5	0.288618	0.15945	TRUE
75	9	4	0.327275	0.177628	TRUE
75	9	4.5	0.3625	0.196875	FALSE

Table S3. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO}	Y _{BYD}	is Augmented
75	9	5	0.393975	0.217947	TRUE
75	9	5.5	0.421863	0.24069	TRUE
75	9	6	0.447141	0.264188	FALSE
75	9	6.5	0.469972	0.288286	TRUE
75	9	7	0.490564	0.312726	TRUE
75	9	7.5	0.510156	0.335938	FALSE
75	9	8	0.528957	0.357661	TRUE
75	9	8.5	0.547204	0.377604	TRUE
75	9	9	0.566336	0.394016	FALSE
75	9	9.5	0.58659	0.406604	TRUE
75	9	10	0.607968	0.41537	TRUE
75	9	10.5	0.630469	0.420313	FALSE
75	9	11	0.654093	0.421432	TRUE
75	9	11.5	0.678839	0.434353	TRUE
75	9	12	0.704709	0.443452	TRUE
75	9	12.5	0.731702	0.448727	TRUE
75	9	13	0.759818	0.465804	TRUE
75	9	13.5	0.789058	0.479058	TRUE
75	9	14	0.81942	0.504115	TRUE
75	9	14.5	0.850905	0.516597	TRUE
75	9	15	0.883514	0.544901	TRUE
75	9	15.5	0.917245	0.556344	TRUE
80	5	0	0	0	TRUE
80	5	0.5	0.017929	0.016146	TRUE
80	5	1	0.066233	0.031794	TRUE
80	5	1.5	0.098673	0.058099	TRUE
80	5	2	0.136777	0.092648	TRUE
80	5	2.5	0.17213	0.1358	TRUE
80	5	3	0.207213	0.160352	TRUE
80	5	3.5	0.229968	0.182214	TRUE
80	5	4	0.250332	0.208284	TRUE
80	5	4.5	0.263988	0.236526	TRUE
80	5	5	0.284218	0.264878	TRUE
80	5	5.5	0.302859	0.290265	TRUE
80	5	6	0.320143	0.306562	TRUE
80	5	6.5	0.341634	0.319965	TRUE
80	5	7	0.355574	0.33695	TRUE
80	5	7.5	0.385164	0.342609	TRUE
80	5	8	0.411654	0.344521	TRUE
80	5	8.5	0.434193	0.351482	TRUE
80	5	9	0.449935	0.355765	TRUE
80	5	9.5	0.466227	0.370509	TRUE
80	5	10	0.488942	0.381051	TRUE
80	5	10.5	0.505815	0.392517	TRUE
80	5	11	0.528634	0.397139	TRUE
80	5	11.5	0.554805	0.408951	TRUE
80	5	12	0.585833	0.437329	TRUE
80	5	12.5	0.609351	0.451035	TRUE
80	5	13	0.635426	0.470516	TRUE
80	5	13.5	0.646344	0.529109	TRUE
80	5	14	0.662537	0.556742	TRUE
80	5	14.5	0.668133	0.481464	TRUE
80	5	15	0.698427	0.498635	TRUE
80	5	15.5	0.721864	0.509876	TRUE
80	6	0	0	0	TRUE
80	6	0.5	0.040156	0.024681	TRUE
80	6	1	0.078971	0.052064	TRUE
80	6	1.5	0.116445	0.082148	TRUE
80	6	2	0.152578	0.114935	TRUE
80	6	2.5	0.1874	0.149979	TRUE

Table S3. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO}	Y _{BYD}	is Augmented
80	6	3	0.221094	0.184609	TRUE
80	6	3.5	0.25369	0.218382	TRUE
80	6	4	0.285193	0.250976	TRUE
80	6	4.5	0.315625	0.280469	TRUE
80	6	5	0.344989	0.30654	TRUE
80	6	5.5	0.37315	0.32939	TRUE
80	6	6	0.399293	0.350219	TRUE
80	6	6.5	0.423281	0.369227	TRUE
80	6	7	0.445294	0.38665	TRUE
80	6	7.5	0.466406	0.403906	TRUE
80	6	8	0.486797	0.421231	TRUE
80	6	8.5	0.506618	0.4389	TRUE
80	6	9	0.526781	0.45857	TRUE
80	6	9.5	0.547438	0.480519	TRUE
80	6	10	0.568589	0.504746	TRUE
80	6	10.5	0.590234	0.53125	TRUE
80	6	11	0.612373	0.560032	TRUE
80	6	11.5	0.635006	0.591093	TRUE
80	6	12	0.658133	0.624431	TRUE
80	6	12.5	0.681754	0.660047	TRUE
80	6	13	0.705869	0.697941	TRUE
80	6	13.5	0.722665	0.706863	TRUE
80	6	14	0.739955	0.712545	TRUE
80	6	14.5	0.781176	0.721657	TRUE
80	6	15	0.807267	0.738636	TRUE
80	6	15.5	0.833851	0.76533	TRUE
80	7	0	0	0	TRUE
80	7	0.5	0.021909	0.016983	TRUE
80	7	1	0.081309	0.064581	TRUE
80	7	1.5	0.120522	0.09525	TRUE
80	7	2	0.167521	0.137321	TRUE
80	7	2.5	0.206813	0.181705	TRUE
80	7	3	0.240679	0.215828	TRUE
80	7	3.5	0.273819	0.254427	TRUE
80	7	4	0.306723	0.288249	TRUE
80	7	4.5	0.346425	0.324637	TRUE
80	7	5	0.38238	0.362502	TRUE
80	7	5.5	0.414365	0.389948	TRUE
80	7	6	0.441732	0.415816	TRUE
80	7	6.5	0.456572	0.43468	TRUE
80	7	7	0.468896	0.455377	TRUE
80	7	7.5	0.488388	0.473848	TRUE
80	7	8	0.500734	0.486726	TRUE
80	7	8.5	0.516321	0.505261	TRUE
80	7	9	0.535454	0.529789	TRUE
80	7	9.5	0.551745	0.540632	TRUE
80	7	10	0.570857	0.558139	TRUE
80	7	10.5	0.599217	0.575351	TRUE
80	7	11	0.625979	0.602855	TRUE
80	7	11.5	0.657195	0.631223	TRUE
80	7	12	0.68623	0.666502	TRUE
80	7	12.5	0.717944	0.702917	TRUE
80	7	13	0.755215	0.707565	TRUE
80	7	13.5	0.787112	0.746293	TRUE
80	7	14	0.824649	0.756814	TRUE
80	7	14.5	0.859349	0.777297	TRUE
80	7	15	0.911876	0.836154	TRUE
80	7	15.5	0.922462	0.864648	TRUE
80	8	0	0	0	TRUE
80	8	0.5	0.044087	0.023012	TRUE

Table S3. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO}	Y _{BYD}	is Augmented
80	8	1	0.087651	0.049484	TRUE
80	8	1.5	0.130691	0.079414	TRUE
80	8	2	0.173209	0.112804	TRUE
80	8	2.5	0.215112	0.148875	TRUE
80	8	3	0.255859	0.182969	TRUE
80	8	3.5	0.29536	0.214307	TRUE
80	8	4	0.33345	0.243067	TRUE
80	8	4.5	0.369141	0.270313	TRUE
80	8	5	0.402267	0.296221	TRUE
80	8	5.5	0.432753	0.320862	TRUE
80	8	6	0.460148	0.344648	TRUE
80	8	6.5	0.484378	0.367648	TRUE
80	8	7	0.505712	0.38991	TRUE
80	8	7.5	0.525781	0.411719	TRUE
80	8	8	0.544856	0.433124	TRUE
80	8	8.5	0.563193	0.454185	TRUE
80	8	9	0.582332	0.475273	TRUE
80	8	9.5	0.602528	0.496449	TRUE
80	8	10	0.623782	0.517712	TRUE
80	8	10.5	0.646094	0.539063	TRUE
80	8	11	0.669463	0.560501	TRUE
80	8	11.5	0.69389	0.582026	TRUE
80	8	12	0.719375	0.603639	TRUE
80	8	12.5	0.745917	0.62534	TRUE
80	8	13	0.773517	0.647128	TRUE
80	8	13.5	0.802175	0.669004	TRUE
80	8	14	0.83189	0.690967	TRUE
80	8	14.5	0.862663	0.713018	TRUE
80	8	15	0.894494	0.735156	TRUE
80	8	15.5	0.927382	0.757382	TRUE
80	9	0	0	0	TRUE
80	9	0.5	0.012222	0.008168	TRUE
80	9	1	0.077624	0.041112	TRUE
80	9	1.5	0.121263	0.067781	TRUE
80	9	2	0.174299	0.10421	TRUE
80	9	2.5	0.226425	0.148499	TRUE
80	9	3	0.266989	0.178641	TRUE
80	9	3.5	0.304401	0.204617	TRUE
80	9	4	0.339673	0.230916	TRUE
80	9	4.5	0.374982	0.254096	TRUE
80	9	5	0.402101	0.274435	TRUE
80	9	5.5	0.426267	0.302604	TRUE
80	9	6	0.454685	0.324999	TRUE
80	9	6.5	0.478253	0.344651	TRUE
80	9	7	0.500826	0.368075	TRUE
80	9	7.5	0.525833	0.395119	TRUE
80	9	8	0.544447	0.424698	TRUE
80	9	8.5	0.557384	0.453416	TRUE
80	9	9	0.578291	0.472276	TRUE
80	9	9.5	0.606722	0.484031	TRUE
80	9	10	0.631614	0.503586	TRUE
80	9	10.5	0.655957	0.517746	TRUE
80	9	11	0.682458	0.525148	TRUE
80	9	11.5	0.703348	0.54647	TRUE
80	9	12	0.729218	0.573898	TRUE
80	9	12.5	0.759169	0.588948	TRUE
80	9	13	0.787855	0.601034	TRUE
80	9	13.5	0.803254	0.615753	TRUE
80	9	14	0.822075	0.623927	TRUE
80	9	14.5	0.852041	0.654035	TRUE

Table S3. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO}	Y _{BYD}	is Augmented
80	9	15	0.881571	0.6696	TRUE
80	9	15.5	0.897196	0.694182	TRUE
85	5	0	0	0	FALSE
85	5	0.5	0.033756	0.032244	TRUE
85	5	1	0.069131	0.064843	TRUE
85	5	1.5	0.106125	0.097797	FALSE
85	5	2	0.144739	0.131107	TRUE
85	5	2.5	0.184683	0.164559	TRUE
85	5	3	0.224219	0.196875	FALSE
85	5	3.5	0.263058	0.227843	TRUE
85	5	4	0.300986	0.257312	TRUE
85	5	4.5	0.336719	0.284375	FALSE
85	5	5	0.370042	0.308883	TRUE
85	5	5.5	0.401017	0.33092	TRUE
85	5	6	0.430016	0.351	FALSE
85	5	6.5	0.4571	0.369209	TRUE
85	5	7	0.482351	0.385546	TRUE
85	5	7.5	0.50625	0.4	FALSE
85	5	8	0.528878	0.412571	TRUE
85	5	8.5	0.550328	0.423274	TRUE
85	5	9	0.571156	0.432203	FALSE
85	5	9.5	0.591456	0.439373	TRUE
85	5	10	0.611227	0.444785	TRUE
85	5	10.5	0.630469	0.45625	FALSE
85	5	11	0.649182	0.465957	TRUE
85	5	11.5	0.667367	0.482547	TRUE
85	5	12	0.685023	0.498009	TRUE
85	5	12.5	0.70215	0.513296	TRUE
85	5	13	0.718748	0.528407	TRUE
85	5	13.5	0.734818	0.542796	TRUE
85	5	14	0.750359	0.558101	TRUE
85	5	14.5	0.765371	0.572685	TRUE
85	5	15	0.779854	0.5842	TRUE
85	5	15.5	0.793809	0.601106	TRUE
85	6	0	0	0	TRUE
85	6	0.5	0.021417	0.016549	TRUE
85	6	1	0.077203	0.062255	TRUE
85	6	1.5	0.116713	0.094128	TRUE
85	6	2	0.156282	0.128951	TRUE
85	6	2.5	0.191733	0.169884	TRUE
85	6	3	0.226329	0.202045	TRUE
85	6	3.5	0.262931	0.234236	TRUE
85	6	4	0.299833	0.261949	TRUE
85	6	4.5	0.336488	0.298831	TRUE
85	6	5	0.37029	0.323633	TRUE
85	6	5.5	0.397913	0.349585	TRUE
85	6	6	0.427611	0.368928	TRUE
85	6	6.5	0.451978	0.384967	TRUE
85	6	7	0.480453	0.401589	TRUE
85	6	7.5	0.497538	0.418675	TRUE
85	6	8	0.519398	0.434191	TRUE
85	6	8.5	0.547802	0.456885	TRUE
85	6	9	0.56899	0.470308	TRUE
85	6	9.5	0.586493	0.48795	TRUE
85	6	10	0.602232	0.509269	TRUE
85	6	10.5	0.622091	0.537619	TRUE
85	6	11	0.640888	0.574506	TRUE
85	6	11.5	0.661607	0.603856	TRUE
85	6	12	0.679327	0.633262	TRUE
85	6	12.5	0.700576	0.669287	TRUE

Table S3. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO}	Y _{BYD}	is Augmented
85	6	13	0.714311	0.702023	TRUE
85	6	13.5	0.737662	0.713043	TRUE
85	6	14	0.751768	0.729085	TRUE
85	6	14.5	0.777802	0.740254	TRUE
85	6	15	0.820989	0.756174	TRUE
85	6	15.5	0.836614	0.771799	TRUE
85	7	0	0	0	FALSE
85	7	0.5	0.047858	0.030907	TRUE
85	7	1	0.0941	0.064996	TRUE
85	7	1.5	0.138727	0.102266	FALSE
85	7	2	0.181737	0.142717	TRUE
85	7	2.5	0.223173	0.185789	TRUE
85	7	3	0.263281	0.228125	FALSE
85	7	3.5	0.302103	0.269164	TRUE
85	7	4	0.339625	0.308506	TRUE
85	7	4.5	0.375781	0.34375	FALSE
85	7	5	0.410558	0.374496	TRUE
85	7	5.5	0.443643	0.401035	TRUE
85	7	6	0.473156	0.425109	FALSE
85	7	6.5	0.498783	0.44701	TRUE
85	7	7	0.520861	0.467093	TRUE
85	7	7.5	0.541406	0.4875	FALSE
85	7	8	0.560756	0.508586	TRUE
85	7	8.5	0.579182	0.530767	TRUE
85	7	9	0.598328	0.556531	FALSE
85	7	9.5	0.618466	0.586294	TRUE
85	7	10	0.639596	0.620054	TRUE
85	7	10.5	0.661719	0.657813	FALSE
85	7	11	0.684834	0.683944	TRUE
85	7	11.5	0.708941	0.698449	TRUE
85	7	12	0.73404	0.732019	TRUE
85	7	12.5	0.760132	0.755078	TRUE
85	7	13	0.787216	0.77972	TRUE
85	7	13.5	0.815292	0.815029	TRUE
85	7	14	0.84436	0.8407	TRUE
85	7	14.5	0.874421	0.866261	TRUE
85	7	15	0.905474	0.899121	TRUE
85	7	15.5	0.929882	0.922222	TRUE
85	8	0	0	0	TRUE
85	8	0.5	0.021698	0.014305	TRUE
85	8	1	0.087637	0.0496	TRUE
85	8	1.5	0.132101	0.079833	TRUE
85	8	2	0.180945	0.116093	TRUE
85	8	2.5	0.227677	0.158695	TRUE
85	8	3	0.267594	0.192324	TRUE
85	8	3.5	0.309656	0.221047	TRUE
85	8	4	0.350251	0.24841	TRUE
85	8	4.5	0.393896	0.282355	TRUE
85	8	5	0.429135	0.306925	TRUE
85	8	5.5	0.456254	0.337503	TRUE
85	8	6	0.485897	0.357921	TRUE
85	8	6.5	0.510976	0.381298	TRUE
85	8	7	0.535467	0.404652	TRUE
85	8	7.5	0.554146	0.42998	TRUE
85	8	8	0.578837	0.458286	TRUE
85	8	8.5	0.604867	0.481122	TRUE
85	8	9	0.626696	0.500628	TRUE
85	8	9.5	0.643002	0.522488	TRUE
85	8	10	0.658491	0.54147	TRUE
85	8	10.5	0.675087	0.567722	TRUE

Table S3. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO}	Y _{BYD}	is Augmented
85	8	11	0.691693	0.590749	TRUE
85	8	11.5	0.711731	0.62005	TRUE
85	8	12	0.736564	0.658468	TRUE
85	8	12.5	0.761027	0.668522	TRUE
85	8	13	0.787555	0.68068	TRUE
85	8	13.5	0.812972	0.691436	TRUE
85	8	14	0.839689	0.734613	TRUE
85	8	14.5	0.874866	0.729784	TRUE
85	8	15	0.91875	0.751673	TRUE
85	8	15.5	0.922344	0.767298	TRUE
85	9	0	0	0	FALSE
85	9	0.5	0.047987	0.024601	TRUE
85	9	1	0.097987	0.052726	TRUE
85	9	1.5	0.15	0.084375	FALSE
85	9	2	0.204026	0.119548	TRUE
85	9	2.5	0.258919	0.157325	TRUE
85	9	3	0.307813	0.192188	FALSE
85	9	3.5	0.34956	0.223214	TRUE
85	9	4	0.384868	0.250891	TRUE
85	9	4.5	0.417969	0.278125	FALSE
85	9	5	0.449567	0.305402	TRUE
85	9	5.5	0.479743	0.332639	TRUE
85	9	6	0.508977	0.359344	FALSE
85	9	6.5	0.537348	0.385433	TRUE
85	9	7	0.564846	0.410752	TRUE
85	9	7.5	0.591406	0.434375	FALSE
85	9	8	0.617017	0.456149	TRUE
85	9	8.5	0.641684	0.475902	TRUE
85	9	9	0.665438	0.492609	FALSE
85	9	9.5	0.688283	0.506101	TRUE
85	9	10	0.710221	0.516377	TRUE
85	9	10.5	0.73125	0.523438	FALSE
85	9	11	0.751371	0.527282	TRUE
85	9	11.5	0.770585	0.543535	TRUE
85	9	12	0.78889	0.556573	TRUE
85	9	12.5	0.806287	0.566394	TRUE
85	9	13	0.822776	0.573749	TRUE
85	9	13.5	0.838357	0.592015	TRUE
85	9	14	0.853031	0.607814	TRUE
85	9	14.5	0.866796	0.620397	TRUE
85	9	15	0.879652	0.637976	TRUE
85	9	15.5	0.891601	0.65154	TRUE

Table S4. Raw Data of Figure 6A.

Model	R ²	R ² Standard Deviation	MAE	MAE Standard Deviation
XGboost	0.9847	0.0022	0.0204	0.001
RF	0.9843	0.0036	0.0213	0.0014
ET	0.9739	0.0055	0.0291	0.0018
LightGBM	0.9616	0.0056	0.0355	0.0016

Table S5. Raw Data of Figure 6B.

Model	R ²	R ² Standard Deviation	MAE	MAE Standard Deviation
XGboost	0.9773	0.0035	0.0207	0.0012
RF	0.9693	0.0047	0.0261	0.0012
ET	0.9479	0.0038	0.0337	0.0019
LightGBM	0.9303	0.0107	0.0393	0.0022

Table S6. Raw Data of Figure 7A.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO} Experiment	X _{HCHO} Prediction
65	6	12	0.508622	0.493087
85	7	6.5	0.498783	0.496027
70	8	4.5	0.321875	0.329519
70	9	5.5	0.38719	0.401208
55	5	2	0.041776	0.015108
65	6	9	0.391434	0.404764
65	6	8.5	0.37115	0.360179
60	8	15.5	0.630248	0.661695
75	6	8	0.480425	0.46848
70	9	9	0.54926	0.553841
80	6	6	0.399293	0.395324
80	9	3.5	0.304401	0.315163
80	8	14.5	0.862663	0.865932
75	6	5	0.340975	0.353326
55	6	7	0.192832	0.184266
55	6	4.5	0.11174	0.133244
75	6	6.5	0.423518	0.415081
75	8	7	0.495649	0.486772
80	5	1.5	0.098673	0.087237
80	7	5	0.38238	0.358727
75	6	4.5	0.30995	0.327153
85	8	13	0.787555	0.807253
75	6	11.5	0.6286	0.619134
75	6	3.5	0.236063	0.253161
65	5	8	0.288393	0.306937
60	8	10.5	0.444141	0.440281
55	7	14.5	0.690384	0.690668
70	7	9.5	0.550352	0.528759
70	5	6	0.302006	0.326545
65	5	10.5	0.364063	0.39876
55	5	3.5	0.072318	0.052149
70	9	13.5	0.760047	0.765121
80	5	5	0.284218	0.30268
75	8	1.5	0.121207	0.125602
80	8	3	0.255859	0.257833
70	7	15	0.925809	0.900887
85	8	9.5	0.643002	0.640151
85	7	8	0.560756	0.56155
85	7	0.5	0.047858	0.02413
75	7	8.5	0.517082	0.514855
70	8	7.5	0.473828	0.488995
55	5	15	0.320504	0.419218
55	6	1.5	0.038586	0.032386
60	6	9.5	0.322828	0.340374
55	5	5.5	0.10682	0.082745
70	6	8.5	0.411942	0.408754
85	9	5.5	0.479743	0.488611
70	7	15.5	0.949246	0.943462
80	8	12.5	0.745917	0.757452
70	8	3.5	0.246892	0.251652
60	9	4.5	0.216838	0.196338
60	7	7	0.262134	0.294814
85	8	11	0.691693	0.714785
75	9	7.5	0.510156	0.516214
65	7	9.5	0.5203	0.516486
55	7	5.5	0.187021	0.226482
70	6	11	0.500151	0.52661
85	7	13.5	0.815292	0.83717
60	9	7	0.291362	0.294497
80	9	7.5	0.525833	0.524711

Table S6. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO} Experiment	X _{HCHO} Prediction
85	7	3.5	0.302103	0.259931
60	8	11	0.462783	0.45342
65	9	14	0.59375	0.682225
85	7	7.5	0.541406	0.54342
70	9	9.5	0.580662	0.579612
65	6	11.5	0.502658	0.468019
65	6	4.5	0.197605	0.199961
70	8	2	0.145049	0.140519
65	9	11.5	0.539991	0.558442
75	8	5	0.397417	0.390144
85	9	3	0.307813	0.293626
75	9	7	0.490564	0.492948
80	7	11	0.625979	0.643112
85	8	3.5	0.309656	0.285242
70	6	15	0.653719	0.731775
55	5	14.5	0.303323	0.356004
85	9	10.5	0.73125	0.720813
55	8	14	0.566679	0.578313
70	9	15	0.831783	0.848292
65	8	11.5	0.604503	0.589743
65	6	10	0.436075	0.442151
65	7	12.5	0.690176	0.64047
65	7	1	0.072708	0.087045
65	5	11	0.374106	0.400323
55	6	9.5	0.263929	0.268566
55	6	15	0.558938	0.568624
55	6	0.5	0.002145	−0.00171
65	9	1	0.055079	0.024582
60	5	11	0.258931	0.274326
75	8	8	0.53427	0.530035
60	9	6.5	0.287159	0.267655
80	7	3.5	0.273819	0.245892
60	7	4	0.160136	0.173187
55	8	7.5	0.250715	0.266272
55	7	1	0.045101	0.070482
70	5	9	0.441076	0.441344
70	6	14.5	0.633686	0.70282
70	6	10.5	0.482031	0.499943
85	9	15	0.879652	0.92689
65	5	14.5	0.434382	0.438344
70	8	1	0.076955	0.080417
60	9	1	0.045115	0.017631
70	5	8	0.399132	0.409874
85	7	10.5	0.661719	0.663846
65	5	9	0.32368	0.341087
80	5	3	0.207213	0.207252
55	7	13.5	0.58874	0.57625
85	5	11.5	0.667367	0.614123
65	5	1	0.021206	−0.0241
75	8	2.5	0.205563	0.198889
80	8	7	0.505712	0.487669
80	5	11	0.528634	0.54019
80	6	3	0.221094	0.233283
80	6	11	0.612373	0.61304
85	7	15	0.905474	0.959915
85	6	6.5	0.451978	0.446511
80	6	8	0.486797	0.467247
70	5	3.5	0.181733	0.208382
75	8	9.5	0.584778	0.581428
60	5	8.5	0.196231	0.203896

Table S6. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO} Experiment	X _{HCHO} Prediction
80	6	8.5	0.506618	0.484806
85	9	2.5	0.258919	0.256765
80	7	9	0.535454	0.528098
60	7	5.5	0.221834	0.247891
70	7	12	0.679254	0.666888
75	6	1	0.071224	0.088382
85	9	14.5	0.866796	0.860504
80	5	1	0.066233	0.052649
60	5	12.5	0.267794	0.309683
60	7	12.5	0.553258	0.497408
60	6	15	0.569408	0.49547
85	8	4.5	0.393896	0.383128
65	9	1.5	0.089063	0.058559
75	9	2	0.16468	0.164149
85	6	3.5	0.262931	0.252608
75	6	4	0.271701	0.28906
70	7	11.5	0.650946	0.640543
75	6	14.5	0.769307	0.787627
80	7	9.5	0.551745	0.543528
80	8	9.5	0.602528	0.587968
60	7	12	0.518058	0.467976
60	7	3.5	0.147653	0.144699
85	7	4	0.339625	0.319228
60	7	14	0.672389	0.60331
70	6	9.5	0.446508	0.469702
85	6	14	0.751768	0.739125
70	5	3	0.149535	0.179354
60	8	11.5	0.481418	0.456787
60	8	6	0.275012	0.265813
55	7	12.5	0.499561	0.473941
75	8	9	0.562694	0.572673
75	7	3.5	0.253262	0.233753
70	7	2	0.10907	0.127853
70	5	7	0.339773	0.362293
70	9	12.5	0.721273	0.694281
85	5	10	0.611227	0.562794
70	8	8.5	0.512052	0.532872
65	7	15	0.877201	0.814093
85	6	10	0.602232	0.600231
85	9	9	0.665438	0.65799
85	5	12	0.685023	0.64181
75	9	15.5	0.917245	0.864051
70	9	0.5	0.017638	0.034733
75	8	3.5	0.280552	0.275019
70	5	7.5	0.371708	0.38247
70	9	6.5	0.440688	0.448873
65	9	15.5	0.635693	0.709342
65	7	2	0.125418	0.157014
70	5	15.5	0.681262	0.645732
85	6	1	0.077203	0.073161
60	7	11.5	0.490145	0.435384
85	5	0.5	0.033756	0.07463
80	9	5	0.402101	0.410857
75	7	6	0.426602	0.418934
55	5	12	0.228055	0.26447
55	8	8.5	0.279073	0.297522
85	6	7	0.480453	0.478393
75	8	14.5	0.87855	0.862228
85	6	10.5	0.622091	0.619361
55	7	3	0.101563	0.123104

Table S6. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO} Experiment	X _{HCHO} Prediction
80	8	7.5	0.525781	0.513843
55	6	12	0.354876	0.361701
65	6	1.5	0.061346	0.02778
75	7	5.5	0.399674	0.400779
85	5	15.5	0.793809	0.711825
75	9	3.5	0.288618	0.293234
70	8	0.5	0.039585	0.032669
80	5	14	0.662537	0.592151
75	9	6.5	0.469972	0.472796
55	7	9	0.285586	0.30286
55	7	8.5	0.267482	0.298816
85	7	2	0.181737	0.159921
70	9	12	0.701966	0.671671
60	5	9	0.205595	0.21936
75	8	1	0.083383	0.088832
60	6	7	0.237879	0.261556
55	5	0.5	0.010362	−0.02003
80	5	13.5	0.646344	0.590396
70	5	8.5	0.42401	0.416956
80	6	12	0.658133	0.653672
80	8	1	0.087651	0.092975
60	8	9	0.388172	0.380378
55	7	11.5	0.422845	0.41237
70	7	1	0.052219	0.074843
65	9	3	0.203906	0.193057

Table S7. Raw Data of Figure 7B.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO} Experiment	X _{HCHO} Prediction
65	6	12	0.480826	0.471495
85	7	6.5	0.44701	0.44847
70	8	4.5	0.222656	0.237408
70	9	5.5	0.221445	0.19845
55	5	2	0.021583	0.044014
65	6	9	0.337113	0.340978
65	6	8.5	0.313618	0.305252
60	8	15.5	0.40354	0.479087
75	6	8	0.396923	0.401077
70	9	9	0.340921	0.342857
80	6	6	0.350219	0.363673
80	9	3.5	0.204617	0.24156
80	8	14.5	0.713018	0.71119
75	6	5	0.270324	0.27463
55	6	7	0.152376	0.147003
55	6	4.5	0.089989	0.088758
75	6	6.5	0.335385	0.333125
75	8	7	0.352183	0.368462
80	5	1.5	0.058099	0.035083
80	7	5	0.362502	0.344061
75	6	4.5	0.249804	0.249488
85	8	13	0.68068	0.6767
75	6	11.5	0.563381	0.556122
75	6	3.5	0.191899	0.200581
65	5	8	0.235749	0.248255
60	8	10.5	0.289609	0.288019
55	7	14.5	0.348976	0.413456
70	7	9.5	0.517072	0.511867
70	5	6	0.253864	0.268458
65	5	10.5	0.292188	0.301473
55	5	3.5	0.049576	0.072164

Table S7. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO} Experiment	X _{HCHO} Prediction
70	9	13.5	0.376763	0.433713
80	5	5	0.264878	0.24735
75	8	1.5	0.072362	0.088933
80	8	3	0.182969	0.189086
70	7	15	0.855081	0.75145
85	8	9.5	0.522488	0.515729
85	7	8	0.508586	0.516694
85	7	0.5	0.030907	0.039422
75	7	8.5	0.490148	0.49123
70	8	7.5	0.359375	0.361172
55	5	15	0.209292	0.187888
55	6	1.5	0.02805	0.030581
60	6	9.5	0.269128	0.267939
55	5	5.5	0.086797	0.112244
70	6	8.5	0.368211	0.366331
85	9	5.5	0.332639	0.331317
70	7	15.5	0.886331	0.616943
80	8	12.5	0.62534	0.628422
70	8	3.5	0.17267	0.194068
60	9	4.5	0.10361	0.13376
60	7	7	0.257534	0.264405
85	8	11	0.590749	0.593128
75	9	7.5	0.335938	0.324657
65	7	9.5	0.483384	0.459944
55	7	5.5	0.14916	0.147718
70	6	11	0.471727	0.479868
85	7	13.5	0.815029	0.82139
60	9	7	0.166353	0.206041
80	9	7.5	0.395119	0.411767
85	7	3.5	0.269164	0.276051
60	8	11	0.296197	0.298771
65	9	14	0.342355	0.396805
85	7	7.5	0.4875	0.496272
70	9	9.5	0.369966	0.35321
65	6	11.5	0.446687	0.430777
65	6	4.5	0.176636	0.183925
70	8	2	0.090471	0.102896
65	9	11.5	0.289238	0.327765
75	8	5	0.260471	0.28087
85	9	3	0.192188	0.202064
75	9	7	0.312726	0.303975
80	7	11	0.602855	0.626099
85	8	3.5	0.221047	0.249491
70	6	15	0.639664	0.643753
55	5	14.5	0.204744	0.165847
85	9	10.5	0.523438	0.514752
55	8	14	0.304768	0.312116
70	9	15	0.319027	0.500126
65	8	11.5	0.479372	0.459017
65	6	10	0.360551	0.384171
65	7	12.5	0.67994	0.618047
65	7	1	0.046808	0.074605
65	5	11	0.304712	0.306219
55	6	9.5	0.200696	0.206827
55	6	15	0.325252	0.330848
55	6	0.5	0.000795	-0.00957
65	9	1	0.02008	-0.01514
60	5	11	0.241511	0.216008
75	8	8	0.41491	0.423801
60	9	6.5	0.148977	0.18835

Table S7. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO} Experiment	X _{HCHO} Prediction
80	7	3.5	0.254427	0.240441
60	7	4	0.157096	0.147565
55	8	7.5	0.170408	0.16238
55	7	1	0.021331	−0.00052
70	5	9	0.312106	0.341483
70	6	14.5	0.615826	0.595148
70	6	10.5	0.448438	0.446988
85	9	15	0.637976	0.649347
65	5	14.5	0.390907	0.387848
70	8	1	0.040389	0.061636
60	9	1	0.015318	0.033098
70	5	8	0.292481	0.32986
85	7	10.5	0.657813	0.619007
65	5	9	0.257125	0.267075
80	5	3	0.160352	0.138406
55	7	13.5	0.341218	0.372025
85	5	11.5	0.482547	0.502881
65	5	1	0.018193	−0.00038
75	8	2.5	0.137314	0.138714
80	8	7	0.38991	0.384073
80	5	11	0.397139	0.424364
80	6	3	0.184609	0.201401
80	6	11	0.560032	0.561067
85	7	15	0.899121	0.826772
85	6	6.5	0.384967	0.385922
80	6	8	0.421231	0.431471
70	5	3.5	0.151441	0.161877
75	8	9.5	0.485237	0.476537
60	5	8.5	0.191843	0.192207
80	6	8.5	0.4389	0.445913
85	9	2.5	0.157325	0.171967
80	7	9	0.529789	0.515286
60	7	5.5	0.21369	0.204798
70	7	12	0.672797	0.656372
75	6	1	0.045094	0.071317
85	9	14.5	0.620397	0.610879
80	5	1	0.031794	0.003105
60	5	12.5	0.23657	0.229065
60	7	12.5	0.394253	0.44401
60	6	15	0.385651	0.413976
85	8	4.5	0.282355	0.302666
65	9	1.5	0.033906	−0.00672
75	9	2	0.08289	0.064251
85	6	3.5	0.234236	0.245115
75	6	4	0.217811	0.220478
70	7	11.5	0.648233	0.606458
75	6	14.5	0.666422	0.677513
80	7	9.5	0.540632	0.539105
80	8	9.5	0.496449	0.481316
60	7	12	0.385824	0.432831
60	7	3.5	0.135607	0.124526
85	7	4	0.308506	0.310759
60	7	14	0.440871	0.478252
70	6	9.5	0.405738	0.411758
85	6	14	0.729085	0.71501
70	5	3	0.128173	0.140231
60	8	11.5	0.301421	0.318391
60	8	6	0.176867	0.15599
55	7	12.5	0.329428	0.347392
75	8	9	0.464616	0.468921

Table S7. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO} Experiment	X _{HCHO} Prediction
75	7	3.5	0.227412	0.229358
70	7	2	0.108133	0.139198
70	5	7	0.277117	0.294623
70	9	12.5	0.385881	0.425829
85	5	10	0.444785	0.453743
70	8	8.5	0.402366	0.411579
65	7	15	0.749277	0.722929
85	6	10	0.509269	0.526708
85	9	9	0.492609	0.484437
85	5	12	0.498009	0.521085
75	9	15.5	0.556344	0.584011
70	9	0.5	0.005337	−0.03845
75	8	3.5	0.194251	0.209946
70	5	7.5	0.28415	0.306532
70	9	6.5	0.26926	0.23757
65	9	15.5	0.422316	0.487374
65	7	2	0.098052	0.12664
70	5	15.5	0.547385	0.338056
85	6	1	0.062255	0.060999
60	7	11.5	0.376992	0.399427
85	5	0.5	0.032244	0.039076
80	9	5	0.274435	0.309764
75	7	6	0.374703	0.381209
55	5	12	0.178911	0.15691
55	8	8.5	0.194965	0.203783
85	6	7	0.401589	0.407484
75	8	14.5	0.705012	0.699903
85	6	10.5	0.537619	0.536248
55	7	3	0.084375	0.059588
80	8	7.5	0.411719	0.405202
55	6	12	0.233887	0.257315
65	6	1.5	0.048584	0.035412
75	7	5.5	0.34959	0.351848
85	5	15.5	0.601106	0.558847
75	9	3.5	0.15945	0.156853
70	8	0.5	0.018983	0.022684
80	5	14	0.556742	0.53732
75	9	6.5	0.288286	0.27518
55	7	9	0.256406	0.232693
55	7	8.5	0.241942	0.224443
85	7	2	0.142717	0.149641
70	9	12	0.385396	0.406272
60	5	9	0.200758	0.205413
75	8	1	0.044995	0.070188
60	6	7	0.204534	0.204811
55	5	0.5	0.003115	0.025641
80	5	13.5	0.529109	0.529109
70	5	8.5	0.29888	0.328684
80	6	12	0.624431	0.614471
80	8	1	0.049484	0.036464
60	8	9	0.261672	0.263175
55	7	11.5	0.313605	0.295705
70	7	1	0.049388	0.087744
65	9	3	0.087188	0.063219

Table S8. Raw Data of Figure 7C.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO} Experiment	X _{HCHO} Prediction
75	6	2.5	0.170356	0.182144
55	8	13	0.497719	0.509911

Table S8. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO} Experiment	X _{HCHO} Prediction
65	6	6	0.246242	0.270957
70	8	5	0.354285	0.352456
60	5	6.5	0.147306	0.135856
65	9	15	0.618335	0.701341
55	7	4.5	0.15625	0.1863
60	6	5	0.176045	0.185697
65	6	7	0.303829	0.323638
60	6	12	0.424356	0.400796
55	8	4	0.143618	0.149863
75	6	3	0.203058	0.220538
75	7	0.5	0.025078	0.007592
55	5	3	0.0625	0.046522
65	5	14	0.414106	0.437068
60	5	8	0.181173	0.199804
60	5	4	0.105876	0.076839
60	9	9.5	0.393989	0.374213
60	6	7.5	0.253906	0.259353
70	6	7	0.359141	0.363048
60	6	13.5	0.493716	0.459851
85	6	12	0.679327	0.670175
70	7	2.5	0.138577	0.158933
65	5	12	0.389066	0.411804
75	8	6	0.449656	0.440395
55	5	13	0.256034	0.320433
65	9	13.5	0.585116	0.661476
60	9	14	0.499277	0.54316
55	7	6	0.200547	0.234015
70	5	5.5	0.275092	0.297952
60	9	9	0.379394	0.351948
80	6	1	0.078971	0.088419
80	9	4.5	0.374982	0.377551
65	6	3.5	0.151033	0.151412
80	5	10	0.488942	0.468986
65	7	11	0.597799	0.593604
80	7	7.5	0.488388	0.473763
85	7	7	0.520861	0.516417
80	6	4.5	0.315625	0.327415
60	5	10.5	0.243466	0.275579
80	8	6	0.460148	0.442282
65	9	10	0.519841	0.531903
65	6	1	0.036553	0.009768
85	9	11.5	0.770585	0.744629
55	5	1.5	0.03125	-0.01037
65	8	13.5	0.687323	0.699084
70	8	14	0.808426	0.799099
75	9	8	0.528957	0.536815
85	9	3.5	0.34956	0.334452
65	7	5	0.314594	0.316666
80	6	1.5	0.116445	0.115951
85	6	15.5	0.836614	0.82125
60	7	13	0.584462	0.524687
60	6	2	0.071193	0.096033
55	7	10	0.331142	0.341857
70	6	6.5	0.340178	0.330194
65	5	6.5	0.231155	0.229671
55	5	15.5	0.338395	0.416375
60	7	15	0.745203	0.621052
85	7	14.5	0.874421	0.925691
65	5	7	0.250395	0.263422
60	7	6.5	0.248931	0.269797

Table S8. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO} Experiment	X _{HCHO} Prediction
75	8	13.5	0.801768	0.79789
65	5	4	0.151532	0.131764
85	5	9.5	0.591456	0.560956
80	7	13.5	0.787112	0.805895
85	6	11.5	0.661607	0.641553
65	7	7.5	0.4375	0.444154
55	8	2.5	0.106353	0.106271
65	5	10	0.35231	0.351797
55	7	2.5	0.087823	0.117953
75	7	12	0.685151	0.690778
85	7	15.5	0.929882	0.977335
65	9	9	0.490758	0.481197
60	6	11.5	0.402643	0.375524
85	9	4.5	0.417969	0.418119
85	8	1.5	0.132101	0.129882
55	5	4	0.081733	0.05029
65	8	3	0.18763	0.202845
65	5	1.5	0.040625	0.00097
80	5	4	0.250332	0.250786
80	6	3.5	0.25369	0.26376
75	6	15	0.812175	0.820065
85	9	13	0.822776	0.819926
80	9	4	0.339673	0.352028
85	5	13.5	0.734818	0.651303
60	6	5.5	0.191326	0.200193
60	5	5	0.127526	0.101457
75	9	12.5	0.731702	0.721405
85	8	0.5	0.021698	0.030777
70	6	9	0.429105	0.445561
60	9	1.5	0.075102	0.05051
70	8	11.5	0.652889	0.660791
60	6	10	0.341726	0.356931
60	8	14	0.574489	0.584956
85	9	8.5	0.641684	0.633641
55	7	10.5	0.358594	0.35408
70	8	8	0.493173	0.508276
60	5	1	0.017394	-0.02353
65	5	5.5	0.195631	0.185238
80	8	4	0.33345	0.330103
55	7	2	0.076464	0.096371
60	7	9.5	0.361721	0.355901
85	5	14	0.750359	0.644659
70	8	13	0.742046	0.747984
55	6	6.5	0.17811	0.161744
60	9	3.5	0.190686	0.167109
70	6	13	0.575022	0.617546
65	6	9.5	0.408291	0.429119
85	8	8	0.578837	0.584568
55	7	7.5	0.238281	0.269763
60	8	1	0.05009	0.059208
85	8	3	0.267594	0.249355
75	7	1	0.054524	0.071856
80	8	12	0.719375	0.729698
75	7	9.5	0.554167	0.539553
55	7	4	0.138028	0.155242
70	8	9	0.532055	0.548575
65	7	6	0.371367	0.386152
70	7	9	0.528776	0.512953
70	6	1.5	0.06448	0.040129
65	6	11	0.491549	0.471269

Table S8. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO} Experiment	X _{HCHO} Prediction
65	8	8.5	0.48429	0.482384
70	7	5.5	0.377202	0.380452
55	5	5	0.098972	0.06649
60	9	13.5	0.488123	0.511167
65	7	15.5	0.919566	0.878691
70	7	6	0.408708	0.402468
85	6	8	0.519398	0.512238
65	6	0.5	0.005986	−0.01301
85	7	3	0.263281	0.230052
85	6	2.5	0.191733	0.187238
85	9	1	0.097987	0.10063
75	6	1.5	0.104266	0.113111
80	7	6.5	0.456572	0.436533
85	8	4	0.350251	0.338899
85	8	5	0.429135	0.42025
60	9	6	0.265223	0.243122
70	8	11	0.625946	0.640431
75	9	3	0.248438	0.254257
65	7	8.5	0.4769	0.484298
65	5	6	0.212844	0.222458
60	9	15	0.515848	0.535917
60	5	7	0.15801	0.164638
65	9	4.5	0.276563	0.267883
65	8	4.5	0.284545	0.28695
60	8	7.5	0.332031	0.330361
60	7	13.5	0.634595	0.564176
55	6	14.5	0.512907	0.525909
70	8	3	0.210156	0.218556
55	7	8	0.252234	0.278257
60	8	2.5	0.128155	0.142644
55	8	4.5	0.162965	0.178371
70	7	13.5	0.780185	0.785589
70	6	15.5	0.673991	0.748615
70	8	15.5	0.918406	0.894008
65	8	5.5	0.336367	0.333777
85	7	12.5	0.760132	0.772483
85	9	12.5	0.806287	0.788282
65	7	5.5	0.344449	0.355509
65	8	5	0.309445	0.306793
75	8	3	0.241445	0.240982
60	6	0.5	0.015966	0.024734
60	8	9.5	0.406835	0.38753
65	6	5	0.214485	0.217797
60	6	9	0.304633	0.319739
85	5	14.5	0.765371	0.684485
80	7	8	0.500734	0.491367
70	5	14.5	0.624857	0.608323
80	8	2.5	0.215112	0.217679
70	7	14	0.831772	0.818609
85	5	8.5	0.550328	0.524255
75	9	13	0.759818	0.755531
75	6	12.5	0.667428	0.668392
65	7	3	0.171875	0.209211
65	9	10.5	0.529688	0.549099
85	6	12.5	0.700576	0.693499
85	6	2	0.156282	0.145932
70	7	10.5	0.597817	0.583192
75	8	15	0.925391	0.907843
65	9	13	0.571034	0.615068
55	8	9	0.295988	0.308877

Table S8. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO} Experiment	X _{HCHO} Prediction
60	5	6	0.130823	0.126042
65	7	10.5	0.570313	0.57186
70	6	7.5	0.377344	0.375612
85	6	8.5	0.547802	0.522596
60	8	5.5	0.25572	0.257539
85	9	13.5	0.838357	0.836273
65	6	2.5	0.10731	0.099439
55	6	12.5	0.392088	0.370364
80	6	7.5	0.466406	0.450448
65	5	13.5	0.398691	0.436242
65	7	11.5	0.626938	0.599719
65	5	15.5	0.473538	0.49319
70	5	4.5	0.234139	0.258009
65	6	12.5	0.510743	0.494412
75	8	8.5	0.546173	0.554565
60	8	2	0.101903	0.119078
55	8	2	0.081006	0.079433
75	6	7.5	0.4654	0.45328
70	5	10	0.475348	0.448488
85	9	5	0.449567	0.461832
65	9	11	0.536404	0.558405
80	8	5.5	0.432753	0.42318
85	5	7	0.482351	0.471094

Table S9. Raw Data of Figure 7D.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO} Experiment	X _{HCHO} Prediction
75	6	2.5	0.131198	0.141128
55	8	13	0.273153	0.276725
65	6	6	0.225011	0.230626
70	8	5	0.246637	0.263454
60	5	6.5	0.147305	0.170961
65	9	15	0.40459	0.463326
55	7	4.5	0.121875	0.106248
60	6	5	0.148817	0.141846
65	6	7	0.267462	0.270778
60	6	12	0.326517	0.337094
55	8	4	0.091815	0.084463
75	6	3	0.162305	0.171758
75	7	0.5	0.021704	0.03624
55	5	3	0.04	0.057595
65	5	14	0.388639	0.427035
60	5	8	0.180461	0.198008
60	5	4	0.09106	0.103117
60	9	9.5	0.223351	0.264184
60	6	7.5	0.217969	0.206693
70	6	7	0.317504	0.318065
60	6	13.5	0.357412	0.353504
85	6	12	0.633262	0.634954
70	7	2.5	0.136397	0.163155
65	5	12	0.331014	0.341299
75	8	6	0.302339	0.320614
55	5	13	0.189862	0.154497
65	9	13.5	0.340117	0.403514
60	9	14	0.373516	0.256354
55	7	6	0.163906	0.163258
70	5	5.5	0.232341	0.253684
60	9	9	0.215114	0.262489
80	6	1	0.052064	0.061365

Table S9. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO} Experiment	X _{HCHO} Prediction
80	9	4.5	0.254096	0.290883
65	6	3.5	0.139203	0.138539
80	5	10	0.381051	0.394099
65	7	11	0.595982	0.535398
80	7	7.5	0.473848	0.456631
85	7	7	0.467093	0.471281
80	6	4.5	0.280469	0.2916
60	5	10.5	0.239401	0.218553
80	8	6	0.344648	0.344502
65	9	10	0.281009	0.319871
65	6	1	0.031137	0.025555
85	9	11.5	0.543535	0.547973
55	5	1.5	0.013906	0.035791
65	8	13.5	0.563301	0.562486
70	8	14	0.63531	0.616069
75	9	8	0.357661	0.346119
85	9	3.5	0.223214	0.251699
65	7	5	0.275326	0.287177
80	6	1.5	0.082148	0.091986
85	6	15.5	0.771799	0.727096
60	7	13	0.4169	0.459349
60	6	2	0.052143	0.03716
55	7	10	0.28231	0.263251
70	6	6.5	0.300468	0.294038
65	5	6.5	0.202472	0.20898
55	5	15.5	0.21051	0.171627
60	7	15	0.513342	0.492404
85	7	14.5	0.866261	0.848621
65	5	7	0.213934	0.22178
60	7	6.5	0.242824	0.248368
75	8	13.5	0.664133	0.653639
65	5	4	0.12972	0.124871
85	5	9.5	0.439373	0.431791
80	7	13.5	0.746293	0.78742
85	6	11.5	0.603856	0.603601
65	7	7.5	0.382813	0.380607
55	8	2.5	0.057334	0.035408
65	5	10	0.280082	0.294881
55	7	2.5	0.068582	0.032944
75	7	12	0.682886	0.686721
85	7	15.5	0.922222	0.8219
65	9	9	0.266938	0.295457
60	6	11.5	0.315629	0.31859
85	9	4.5	0.278125	0.300731
85	8	1.5	0.079833	0.089413
55	5	4	0.059281	0.0752
65	8	3	0.120636	0.137922
65	5	1.5	0.035938	0.010831
80	5	4	0.208284	0.194478
80	6	3.5	0.218382	0.234477
75	6	15	0.684201	0.710375
85	9	13	0.573749	0.59194
80	9	4	0.230916	0.25833
85	5	13.5	0.542796	0.586754
60	6	5.5	0.16301	0.14715
60	5	5	0.118039	0.128664
75	9	12.5	0.448727	0.486009
85	8	0.5	0.014305	0.030584
70	6	9	0.386328	0.38983
60	9	1.5	0.02894	0.046547

Table S9. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO} Experiment	X _{HCHO} Prediction
70	8	11.5	0.529884	0.528976
60	6	10	0.281196	0.272774
60	8	14	0.353981	0.375334
85	9	8.5	0.475902	0.455563
55	7	10.5	0.29375	0.267044
70	8	8	0.38098	0.39041
60	5	1	0.010213	0.019163
65	5	5.5	0.17686	0.181289
80	8	4	0.243067	0.243306
55	7	2	0.051088	0.02912
60	7	9.5	0.326739	0.33878
85	5	14	0.558101	0.59747
70	8	13	0.593231	0.583264
55	6	6.5	0.144888	0.135293
60	9	3.5	0.070687	0.110336
70	6	13	0.563752	0.561405
65	6	9.5	0.349185	0.350106
85	8	8	0.458286	0.462772
55	7	7.5	0.210938	0.187625
60	8	1	0.020706	0.000845
85	8	3	0.192324	0.214435
75	7	1	0.052142	0.083414
80	8	12	0.603639	0.599963
75	7	9.5	0.543082	0.533367
55	7	4	0.109627	0.090098
70	8	9	0.423695	0.431157
65	7	6	0.321625	0.332775
70	7	9	0.475312	0.485768
70	6	1.5	0.061281	0.05827
65	6	11	0.417409	0.4106
65	8	8.5	0.358793	0.346117
70	7	5.5	0.333333	0.347066
55	5	5	0.077922	0.09729
60	9	13.5	0.354204	0.262069
65	7	15.5	0.752556	0.738901
70	7	6	0.363542	0.375362
85	6	8	0.434191	0.445037
65	6	0.5	0.005516	-0.00613
85	7	3	0.228125	0.237687
85	6	2.5	0.169884	0.167122
85	9	1	0.052726	0.067685
75	6	1.5	0.074116	0.086201
80	7	6.5	0.43468	0.412291
85	8	4	0.24841	0.27275
85	8	5	0.306925	0.328191
60	9	6	0.14021	0.169169
70	8	11	0.508707	0.515719
75	9	3	0.137813	0.115542
65	7	8.5	0.427128	0.418997
65	5	6	0.190141	0.190584
60	9	15	0.409569	0.32514
60	5	7	0.154463	0.180459
65	9	4.5	0.14	0.135327
65	8	4.5	0.187576	0.199595
60	8	7.5	0.222266	0.20192
60	7	13.5	0.421462	0.46815
55	6	14.5	0.291633	0.31633
70	8	3	0.14625	0.171147
55	7	8	0.226575	0.204599
60	8	2.5	0.068671	0.036514

Table S9. Cont.

T (°C)	pH	t (h)	X _{HCHO} Experiment	X _{HCHO} Prediction
55	8	4.5	0.10047	0.093243
70	7	13.5	0.779693	0.723854
70	6	15.5	0.645768	0.497074
70	8	15.5	0.6982	0.560061
65	8	5.5	0.223867	0.223243
85	7	12.5	0.755078	0.756351
85	9	12.5	0.566394	0.576375
65	7	5.5	0.299294	0.309957
65	8	5	0.207323	0.21705
75	8	3	0.170353	0.183214
60	6	0.5	0.009476	−0.01185
60	8	9.5	0.272347	0.265515
65	6	5	0.199496	0.20085
60	6	9	0.256766	0.254669
85	5	14.5	0.572685	0.558938
80	7	8	0.486726	0.478155
70	5	14.5	0.504315	0.440432
80	8	2.5	0.148875	0.141727
70	7	14	0.82106	0.715433
85	5	8.5	0.423274	0.409128
75	9	13	0.465804	0.496939
75	6	12.5	0.608593	0.612873
65	7	3	0.154688	0.18102
65	9	10.5	0.285469	0.320057
85	6	12.5	0.669287	0.652927
85	6	2	0.128951	0.125474
70	7	10.5	0.593367	0.554812
75	8	15	0.74013	0.727694
65	9	13	0.320126	0.391407
55	8	9	0.203615	0.216189
60	5	6	0.128101	0.154474
65	7	10.5	0.554688	0.50649
70	6	7.5	0.334375	0.333123
85	6	8.5	0.456885	0.456005
60	8	5.5	0.161445	0.128642
85	9	13.5	0.592015	0.605148
65	6	2.5	0.084617	0.094102
55	6	12.5	0.250939	0.272578
80	6	7.5	0.403906	0.415267
65	5	13.5	0.373605	0.416178
65	7	11.5	0.625415	0.550611
65	5	15.5	0.426553	0.424729
70	5	4.5	0.20275	0.20485
65	6	12.5	0.493023	0.47983
75	8	8.5	0.44087	0.445344
60	8	2	0.050672	0.017268
55	8	2	0.045302	0.030926
75	6	7.5	0.372662	0.378968
70	5	10	0.361747	0.372796
85	9	5	0.305402	0.318706
65	9	11	0.288212	0.32161
80	8	5.5	0.320862	0.313414
85	5	7	0.385546	0.374812

Table S10. Raw Data of Figure 8A.

t (h)	X_{HCHO}	X_{HCHO} prediction	Y_{BYD}	Y_{BYD} prediction
1.5	0.046875	0.068409	0.014063	0.028361
3	0.139844	0.14328	0.038281	0.063157
4.5	0.170313	0.172743	0.065938	0.095982
6	0.21557	0.222115	0.092094	0.130265
7.5	0.28125	0.27112	0.116563	0.184338
9	0.341461	0.317501	0.140328	0.205767
10.5	0.370313	0.353582	0.164375	0.205867

Table S11. Raw Data of Figure 8B.

t (h)	X_{HCHO}	X_{HCHO} prediction	Y_{BYD}	Y_{BYD} prediction
1.5	0.094164	0.087732	0.062031	0.061431
3	0.178906	0.189461	0.141094	0.133668
4.5	0.255469	0.283113	0.217188	0.213264
6	0.32543	0.347297	0.275328	0.267042
7.5	0.391406	0.412104	0.320313	0.330244
9	0.455234	0.45694	0.360609	0.366254
10.5	0.51875	0.508997	0.404688	0.410317