

Actualización base de datos Metabolómica en T2D

El siguiente código es para actualizar las bases de datos (BBDD) de metabolómica. A partir de las BBDD recibidas de Broad Institute:

- Una base de datos con todos los metabolitos al basal y a 1 año y las principales variables de interés para diabetes.
- Una base de datos con la codificación de los metabolitos que incluya: nombre del metabolito al basal y a 1 año, nombre real, HMDB, PubChem, KEGG, DrugBankID, Drug, plataforma donde se analizó, BiologicalFunction, MolecularFramework, Kingdom, super_class y class sub_class.

0. Paquetes:

1. Apertura de la BBDD nueva:

2. Manipulación de la BBDD:

Esta BBDD contiene filas y columnas identificadoras y con información extra útil para la realización de la técnica bioquímica pero no para el análisis bioestadístico. Identificamos estas filas y columnas, y las eliminamos.

```
head(T2D_new)
```

```
# A tibble: 6 x 2,149
  ...1 ...2 ...3 ...4 ...5 ...6 Date_extracted '42646...8' '42646...9'
  <chr> <chr> <chr> <chr> <chr> <chr> <chr>      <chr>      <chr>
1 <NA> <NA> <NA> <NA> <NA> <NA> Date_injected 42646      42646
2 <NA> <NA> <NA> <NA> <NA> <NA> Column_number 1          1
```

```

3 <NA> <NA> <NA> <NA> <NA> <NA> Injection_order      1          2
4 <NA> <NA> <NA> <NA> <NA> <NA> Injection_type      prefb      prefa
5 <NA> <NA> <NA> <NA> <NA> <NA> Sample_type          QC-pooled_~ QC-drift_c~
6 <NA> <NA> <NA> <NA> <NA> <NA> Original_broad_in~ NA          NA
# i 2,140 more variables: '42646...10' <chr>, '42646...11' <chr>,
# '42646...12' <chr>, '42646...13' <chr>, '42646...14' <chr>,
# '42646...15' <chr>, '42646...16' <chr>, '42646...17' <chr>,
# '42646...18' <chr>, '42646...19' <chr>, '42646...20' <chr>,
# '42646...21' <chr>, '42646...22' <chr>, '42646...23' <chr>,
# '42646...24' <chr>, '42646...25' <chr>, '42646...26' <chr>,
# '42646...27' <chr>, '42646...28' <chr>, '42646...29' <chr>, ...

```

```

# Eliminamos las filas:
T2D_new_1 = T2D_new[9:430,]

# Ponemos como nombre de las variables la primera fila:
colnames(T2D_new_1) = T2D_new_1[1,]

# Eliminamos la primera fila:
T2D_new_1 = T2D_new_1[-1,]

```

```

# Eliminamos las columnas no necesarias:
T2D_new_2 = T2D_new_1[, -c(1:6)]

```

A continuación transponemos la BBDD para tenerla en formato long:

```
T2D_new_2 = data.frame(t(T2D_new_2))
```

Renombramos las variables con los nombres de los metabolitos:

```

colnames(T2D_new_2) = T2D_new_2[1,]

# Eliminamos la primera fila:
T2D_new_2 = T2D_new_2[-1,]

```

Creamos una variable con los IDs y la colocamos como primera variable:

```

# Creamos la variable:
T2D_new_2$id_c8 = rownames(T2D_new_2)

# La colocamos al inicio de la BBDD:
T2D_new_2 = T2D_new_2[, c("id_c8", colnames(T2D_new_2)[colnames(T2D_new_2) != "id_c8"])]

```

Para evitar conflictos al cambiar de software, sustituyo los espacios y símbolos extraños por puntos en los nombres de las variables:

```
# Reemplazar espacios, ":" y "/" por puntos en los nombres de las variables
colnames(T2D_new_2) = gsub("[ :/]", ".", colnames(T2D_new_2))
```

Comenzamos a revisar los ids. Observamos que hay ids con valores extraños: - y a. Eliminamos las a de los valores y sustituimos los - por un 0.

```
# Eliminar todas las "a"
T2D_new_2$id_c8 = gsub("a", "", T2D_new_2$id_c8)

# Reemplazar "3bis" por "03"
T2D_new_2$id_c8 = gsub("3bis", "03", T2D_new_2$id_c8)

# Reemplazar "-" por "0"
T2D_new_2$id_c8 = gsub("-", "0", T2D_new_2$id_c8)

# Buscar un valor específico alterado
T2D_new_2$id_c8[T2D_new_2$id_c8 == "11021102003"] = "1102110203"
```

Eliminamos los controles de placa:

```
# Eliminar filas donde la columna A contiene letras
T2D_new_3 = T2D_new_2[!grepl("[a-zA-Z]", T2D_new_2$id_c8), ]
```

Creamos la variable visita:

```
# Inicializar la columna 'visita' con NA
T2D_new_3$visit = NA

# Bucle para recorrer la columna 'id_c8' y asignar valores a 'visit'
for (i in seq_along(T2D_new_3$id_c8)) {
  if (grepl("01$", T2D_new_3$id_c8[i])) {
    T2D_new_3$visit[i] <- 0
  } else if (grepl("03$", T2D_new_3$id_c8[i])) {
    T2D_new_3$visit[i] <- 1
  } else if (grepl("04$", T2D_new_3$id_c8[i])) {
    T2D_new_3$visit[i] <- 2
  }
}

table(T2D_new_3$visit)
```

0	1	2
1046	843	26

Recolocamos la variable visita:

```
# La colocamos al inicio de la BBDD:  
T2D_new_3 <- T2D_new_3 %>%  
  select(id_c8, visit, everything())
```

Asignamos a mano las visitas con valores missings:

```
# Buscar la posición de los valores NAs:  
missing_positions <- which(is.na(T2D_new_3$visit))  
  
# Asignamos valores a las visitas comprobando valor por valor:  
T2D_new_3$visit[1] = 0  
T2D_new_3$visit[7] = 0  
T2D_new_3$visit[8] = 1  
T2D_new_3$visit[17] = 0  
T2D_new_3$visit[18] = 1  
T2D_new_3$visit[110] = 0  
T2D_new_3$visit[249] = 0  
T2D_new_3$visit[435] = 0  
T2D_new_3$visit[467] = 0  
T2D_new_3$visit[613] = 0  
T2D_new_3$visit[623] = 0  
T2D_new_3$visit[718] = 0  
T2D_new_3$visit[732] = 0  
T2D_new_3$visit[735] = 0  
T2D_new_3$visit[739] = 0  
T2D_new_3$visit[769] = 0  
T2D_new_3$visit[776] = 0  
T2D_new_3$visit[856] = 0  
T2D_new_3$visit[868] = 0  
T2D_new_3$visit[906] = 0  
T2D_new_3$visit[913] = 0  
T2D_new_3$visit[947] = 0  
T2D_new_3$visit[995] = 0  
T2D_new_3$visit[1015] = 0  
T2D_new_3$visit[1021] = 0  
T2D_new_3$visit[1025] = 0
```

```

T2D_new_3$visit[1034] = 0
T2D_new_3$visit[1046] = 0
T2D_new_3$visit[1069] = 0
T2D_new_3$visit[1114] = 0
T2D_new_3$visit[1203] = 0
T2D_new_3$visit[1208] = 0
T2D_new_3$visit[1228] = 0
T2D_new_3$visit[1239] = 0
T2D_new_3$visit[1274] = 0
T2D_new_3$visit[1418] = 0
T2D_new_3$visit[1419] = 1
T2D_new_3$visit[1418] = 0
T2D_new_3$visit[1441] = 1
T2D_new_3$visit[1450] = 0
T2D_new_3$visit[1475] = 0
T2D_new_3$visit[1491] = 0
T2D_new_3$visit[1500] = 0
T2D_new_3$visit[1509] = 0
T2D_new_3$visit[1510] = 1
T2D_new_3$visit[1523] = 0
T2D_new_3$visit[1529] = 0
T2D_new_3$visit[1534] = 0
T2D_new_3$visit[1609] = 0

# Crear la nueva columna 'id' según:
T2D_new_3$id <- sapply(T2D_new_3$id_c8, function(x) {
  # Verificar si termina en 00, 01, 03 o 04
  if (grepl("(00|01|03|04)$", x)) {
    # Eliminar las dos últimas cifras
    substr(x, 1, nchar(x) - 2)
  } else {
    # Copiar el valor original
    x
  }
})

# La colocamos al inicio de la BBDD:
T2D_new_3 = T2D_new_3[, c("id", colnames(T2D_new_3)[colnames(T2D_new_3) != "id"])]

# Convertimos los ids en valores numéricos:
T2D_new_3[c("id", "id_c8")] <- lapply(T2D_new_3[c("id", "id_c8")], as.numeric)

```

3. Creación de las BBDD basal y anual:

Con la BBDD con los ids depurados, dividimos la base de datos en visita basal o anual:

```
T2D_basal = subset(T2D_new_3, visit == 0)
T2D_anual = subset(T2D_new_3, visit >= 1)
```

Añadimos un 1 a los nombres de las variables de T2D_anual:

```
# Añadir un 1 a todos los nombres de las variables
names(T2D_anual)[3:424] <- paste0(names(T2D_anual)[3:424], "1")
```

Exportamos las BBDD:

4. Creación de la BBDD con los nombres reales y en la BBDD de los metabolitos:

Creamos el archivo names y abrimos la BBDD antigua con los nombres de los metabolitos:

```
names1 = T2D_new_1[c("Metabolite", "HMDB_ID")]

names_old <- read_delim("data/names_vars_280218.csv",
  delim = ";", escape_double = FALSE, trim_ws = TRUE)
```

Rows: 400 Columns: 5

-- Column specification -----

Delimiter: ";"

chr (4): Metabolites, names, HMDB, KEGG

dbl (1): PubChem

i Use 'spec()' to retrieve the full column specification for this data.

i Specify the column types or set 'show_col_types = FALSE' to quiet this message.

Creamos la variable con los nombres anual en names_old:

```
names_old$Metabolites1 <- paste0(names_old$Metabolites, "1")
```

Comprobamos los nombres de las variables:

```
c(colnames(names1), colnames(names_old))
```

```
[1] "Metabolite"      "HMDB_ID"         "Metabolites"     "names"           "HMDB"
[6] "PubChem"         "KEGG"            "Metabolites1"
```

Renombramos variables en `names1` y completamos el archivo con los nombres al basal y al año:

```
colnames(names1) = c("names", "HMDB")

names1 = cbind(names1,
                # Añadir variable 1
                Metabolites = colnames(T2D_new_2)[2:422],
                # Añadir variable 2
                Metabolites1 = colnames(T2D_anual)[4:424])
```

Añadimos las variables PubChem y KEGG:

```
hmdb_ids = names1$HMDB

# Crear un dataframe para almacenar los resultados
results <- data.frame(HMDB = character(),
                      KEGG = character(),
                      PubChem = character(),
                      stringsAsFactors = FALSE)

error_count <- 0

# Bucle para iterar sobre los HMDB IDs y obtener el KEGG ID
for (id in hmdb_ids) {
  # Verificar si el ID comienza con "HMDB"
  if (!grepl("^HMDB", id)) {
    error_count <- error_count + 1 # Incrementar contador de errores
    next # Saltar al siguiente ID
  }
  # Generar la URL de la API
  url <- paste0("https://hmdb.ca/metabolites/", id, ".xml")

  # Realizar la solicitud
  response <- GET(url)
```

```

# Verificar el estado de la respuesta
if (status_code(response) == 200) {
  # Extraer contenido XML
  xml_content <- content(response, type = "text", encoding = "UTF-8")
  xml_data <- xmlParse(xml_content)

  # Extraer el KEGG ID
  kegg_id <- xpathSApply(xml_data, "//kegg_id", xmlValue)
  # Extraer Pubchem
  pubchem = xpathSApply(xml_data, "//pubchem_compound_id", xmlValue)

  # Si no hay KEGG ID, poner NA
  if (length(kegg_id) == 0) {kegg_id <- NA}
  if (length(pubchem) == 0) {pubchem <- NA}
  # Agregar resultado al dataframe
  results <- rbind(results, data.frame(HMDB = id, KEGG = kegg_id,
                                       PubChem = pubchem))
} else {
  # Manejar errores si la solicitud falla
  results <- rbind(results, data.frame(HMDB = id, KEGG = NA,
                                       PubChem_ID = NA))
}
}
print(paste("Errores encontrados:", error_count))

```

```
[1] "Errores encontrados: 69"
```

Fusionamos names1 y names_old:

```

# Completar names1:
names1 = merge(names1, results, by = "HMDB", all.x = T)

# Fusionar BBDD
names2 = rbind(names1, names_old)

```

Detectamos duplicados, buscamos que HMDB son los problemáticos y qué es lo que da problemas:

```

# Encontrar duplicados en la columna 'HMDB' y detectar posiciones:
dup_indices <- names2[which(duplicated(names2$HMDB) | duplicated(names2$HMDB, fromLast = TRUE))]
dup <- names2[duplicated(names2$HMDB) | duplicated(names2$HMDB, fromLast = TRUE), ]

```



```
# Analizar diferencias en las otras variables agrupando por HMDB:
dif <- lapply(unique(dup$HMDB), function(id) {
  rows <- names2[names2$HMDB == id, ]
  list(HMDB = id,
       dup_indices = which(names2$HMDB == id),
       Dif = rows)})

# Encuentra la longitud máxima
max_length <- max(sapply(dif, length))
# Aplanar las listas
dif2 <- lapply(dif, function(x) c(x, rep(NA, max_length - length(x))))
# Transformar en data frame
dif2 <- as.data.frame(do.call(rbind, dif2))
```

Observamos que hay algunos metabolitos que comparten HMDB pero tienen nombre diferente o que son duplicados entre las bases de datos. Eliminamos sus duplicados.

```
names2 = names2[-c(16, 18, 48, 50, 60, 62, 86, 88, 94, 96, 206, 208, 278, 280, 283, 285, 469,
                  477, 478, 479, 480, 481, 482, 486, 487, 488, 489, 490, 494, 496, 500, 502,
                  510, 512, 515, 517, 522, 523, 525, 527, 528, 629, 632, 642, 647, 653, 656,
                  675, 677, 696, 712, 793),)]
```

Reemplazamos los valores string “NA” por los valores especiales de R NA:

```
# Si el string es "NA", elimina el string
names2$HMDB = names2$HMDB %>% na_if("NA")
```

Modificamos los nombres para excluir ; y evitar errores en la exportación:

```
# Sustituir ; por / en names:
names2$names <- gsub(";", "/", names2$names)
# Sustituir ; por / en Metabolites:
names2$Metabolites <- gsub(";", "/", names2$Metabolites)
# Sustituir ; por / en Metabolites1:
names2$Metabolites1 <- gsub(";", "/", names2$Metabolites1)
# Exportar archivo en csv:
export(names2, "python.csv")
```

Preparamos el entorno de Python:

Cargamos los modulos necesarios de python:

```
import pandas as pd
import requests
import xml.etree.ElementTree as ET
import time
```

Ejecutamos la sintaxis en el entorno python:

```
# Cargar el DataFrame desde un archivo CSV
metabolites_data = pd.read_csv("python.csv", encoding="latin1", delimiter = ",")

# Crear la función:
def get_hmdb_data(hmdb_id):
    # URL donde se buscará la información:
    url = f"https://hmdb.ca/metabolites/{hmdb_id}.xml"
    # Iniciamos bucle para capturar errores:
    try:
        # Realizar la solicitud HTTP:
        response = requests.get(url)
        # Valoración del código de estado del HTTP:
        if response.status_code == 200: # Si es 200, todo OK
            # Guardar el XML en un archivo para inspección
            #xml_file = f"hmdb_{hmdb_id}.xml.txt"
            #with open(xml_file, "w", encoding="utf-8") as file:
            #    file.write(response.content.decode("utf-8"))
            #print(f"XML guardado en {xml_file}")

            # Parseo del texto XML:
            root = ET.fromstring(response.content)

            # Definición de la función de extracción datos específicos con verificación:
            def safe_findtext(element, path):
                # Búsqueda del subelemento específico:
                value = element.findtext(path)
                # Si no se encuentra, devuelve error:
                if value is None:
                    print(f"Etiqueta no encontrada: {path}")
                return value

            # Conjunto de elementos que se quieren extraer:
            name = safe_findtext(root, "./name")
            drugbank = safe_findtext(root, "./drugbank_id")
            biological_function = safe_findtext(root, "./taxonomy/direct_parent")
```

```

        molecular_framework = safe_findtext(root, "../taxonomy/molecular_framework")
        kingdom = safe_findtext(root, "../taxonomy/kingdom")
        super_class = safe_findtext(root, "../taxonomy/super_class")
        class_ = safe_findtext(root, "../taxonomy/class")
        sub_class = safe_findtext(root, "../taxonomy/sub_class")

        return name, drugbank, biological_function, molecular_framework, kingdom, super_class, class_, sub_class
    else:
        # Definición de posibles errores + código de estado de HTTP:
        print(f"Error al obtener datos para {hmdb_id}: {response.status_code}")
        return None, None, None, None, None, None, None, None
except Exception as e:
    print(f"Excepción para {hmdb_id}: {e}")
    return None, None, None, None, None, None, None, None

# Crear nuevas columnas en el DataFrame
for col in ["Name", "DrugbankID", "BiologicalFunction", "MolecularFramework", "Kingdom", "SuperClass", "Class", "SubClass"]:
    metabolites_data[col] = ""

# Iterar por cada fila y completar los datos
for index, row in metabolites_data.iterrows():
    hmdb_id = row["HMDB"]
    # Identificación de valores no nulos:
    if pd.notnull(hmdb_id):
        # Información sobre el progreso
        print(f"Procesando HMDB ID: {hmdb_id} ({index + 1}/{len(metabolites_data)})")

        # Obtener datos de HMDB
        name, drugbank, biological_function, molecular_framework, kingdom, super_class, class_, sub_class = get_hmdb_data(hmdb_id)

        # Agregar datos al DataFrame
        metabolites_data.at[index, "Name"] = name
        metabolites_data.at[index, "DrugbankID"] = drugbank
        metabolites_data.at[index, "BiologicalFunction"] = biological_function
        metabolites_data.at[index, "MolecularFramework"] = molecular_framework
        metabolites_data.at[index, "Kingdom"] = kingdom
        metabolites_data.at[index, "SuperClass"] = super_class
        metabolites_data.at[index, "Class"] = class_
        metabolites_data.at[index, "SubClass"] = sub_class

    # Pausa para respetar la tasa de solicitudes (1 segundo)
    time.sleep(1)

```

Procesando HMDB ID: HMDB0000067 (1/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000610 (2/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000658 (3/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000885 (4/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000918 (5/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000921 (6/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000950 (7/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0001348 (8/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0002100 (9/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0002815 (10/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0004872 (11/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0004949 (12/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0004950 (13/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0004951 (14/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0004952 (15/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0004953 (16/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0004953 (17/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0004955 (18/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0004956 (19/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0004957 (20/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0004971 (21/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0004974 (22/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005193 (23/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005356 (24/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005357 (25/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005359 (26/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005360 (27/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005363 (28/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005365 (29/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005367 (30/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005369 (31/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005370 (32/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005376 (33/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005377 (34/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005384 (35/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005391 (36/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005392 (37/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005395 (38/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005396 (39/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005398 (40/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005403 (41/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005404 (42/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005405 (43/776)

Procesando HMDB ID: HMDB0005406 (44/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005410 (45/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005413 (46/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005413 (47/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005432 (48/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005433 (49/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005436 (50/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005448 (51/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005456 (52/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005458 (53/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005462 (54/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005463 (55/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005471 (56/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005471 (57/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005476 (58/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005478 (59/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0006725 (60/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0006726 (61/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0006729 (62/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0006731 (63/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0006733 (64/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0006734 (65/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0006736 (66/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0006750 (67/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007011 (68/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007012 (69/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007041 (70/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007080 (71/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007098 (72/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007099 (73/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007100 (74/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007102 (75/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007103 (76/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007128 (77/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007132 (78/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007169 (79/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007170 (80/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007170 (81/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007199 (82/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007216 (83/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007218 (84/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007219 (85/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007248 (86/776)

Procesando HMDB ID: HMDB0007248 (87/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007257 (88/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007387 (89/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007505 (90/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007738 (91/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007820 (92/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007866 (93/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007869 (94/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007870 (95/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007871 (96/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007873 (97/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007874 (98/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007875 (99/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007883 (100/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007896 (101/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007903 (102/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007916 (103/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007932 (104/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007935 (105/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007936 (106/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007937 (107/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007938 (108/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007940 (109/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007946 (110/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007952 (111/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007955 (112/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007972 (113/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007973 (114/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007983 (115/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0007991 (116/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0008038 (117/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0008039 (118/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0008047 (119/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0008048 (120/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0008053 (121/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0008057 (122/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0008105 (123/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0008123 (124/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0008125 (125/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0008269 (126/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0008270 (127/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0008312 (128/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0008342 (129/776)

Procesando HMDB ID: HMDB0008428 (130/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0008511 (131/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0008621 (132/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0008798 (133/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0008928 (134/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0008937 (135/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0008952 (136/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0008993 (137/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0008994 (138/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0009003 (139/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0009012 (140/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0009060 (141/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0009102 (142/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0009354 (143/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0009610 (144/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010168 (145/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010169 (146/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010367 (147/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010368 (148/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010370 (149/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010375 (150/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010379 (151/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010381 (152/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010382 (153/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010383 (154/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010384 (155/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010386 (156/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010390 (157/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010391 (158/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010392 (159/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010393 (160/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010395 (161/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010398 (162/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010399 (163/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010401 (164/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010403 (165/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010404 (166/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010405 (167/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010406 (168/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010407 (169/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010408 (170/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010411 (171/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010412 (172/776)

Procesando HMDB ID: HMDB0010419 (173/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010471 (174/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010497 (175/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010498 (176/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010514 (177/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010517 (178/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010518 (179/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010531 (180/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011128 (181/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011129 (182/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011130 (183/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011131 (184/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011149 (185/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011151 (186/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011208 (187/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011210 (188/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011229 (189/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011238 (190/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011243 (191/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011244 (192/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011252 (193/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011261 (194/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011269 (195/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011294 (196/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011294 (197/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011319 (198/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011343 (199/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011382 (200/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011384 (201/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011387 (202/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011393 (203/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011394 (204/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011410 (205/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011420 (206/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011439 (207/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011441 (208/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011445 (209/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011460 (210/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011473 (211/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011477 (212/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011487 (213/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011503 (214/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011506 (215/776)

Procesando HMDB ID: HMDB0011507 (216/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011516 (217/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011517 (218/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011519 (219/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011526 (220/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011561 (221/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011563 (222/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011564 (223/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011567 (224/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011568 (225/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011572 (226/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011578 (227/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011697 (228/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011698 (229/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011699 (230/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011701 (231/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011705 (232/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011706 (233/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011707 (234/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011765 (235/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011767 (236/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011768 (237/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011775 (238/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0012085 (239/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0012087 (240/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0012096 (241/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0012097 (242/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0012101 (243/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0012102 (244/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0012103 (245/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0012105 (246/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0012107 (247/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0012108 (248/776)
Error al obtener datos para HMDB0012108: 502
Procesando HMDB ID: HMDB0013122 (249/776)
Error al obtener datos para HMDB0013122: 502
Procesando HMDB ID: HMDB0013405 (250/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013408 (251/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013409 (252/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013415 (253/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013417 (254/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013418 (255/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013420 (256/776)

Procesando HMDB ID: HMDB0013426 (257/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013429 (258/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013432 (259/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013435 (260/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013437 (261/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013438 (262/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013440 (263/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013444 (264/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013448 (265/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013450 (266/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013450 (267/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013451 (268/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013453 (269/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013453 (270/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013456 (271/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013459 (272/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013461 (273/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0029220 (274/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0029377 (275/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042062 (276/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042063 (277/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042068 (278/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042094 (279/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042095 (280/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042100 (281/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042103 (282/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042104 (283/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042278 (284/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042279 (285/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042301 (286/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042482 (287/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042548 (288/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042632 (289/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042645 (290/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042751 (291/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042752 (292/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042789 (293/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042811 (294/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042902 (295/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0043058 (296/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0043127 (297/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0043186 (298/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0043199 (299/776)

Procesando HMDB ID: HMDB0043373 (300/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0043375 (301/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0043380 (302/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0043518 (303/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0043782 (304/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0043925 (305/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0044121 (306/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0044261 (307/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0044711 (308/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0044719 (309/776)
Error al obtener datos para HMDB0044719: 502
Procesando HMDB ID: HMDB0044720 (310/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0045053 (311/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0047745 (312/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0047885 (313/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0047901 (314/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0047908 (315/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0048455 (316/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0048749 (317/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0049730 (318/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0049739 (319/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0050099 (320/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0050279 (321/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0050322 (322/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0052411 (323/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0052415 (324/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0054031 (325/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0056036 (326/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0060058 (327/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0060059 (328/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0060060 (329/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0061700 (330/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0061701 (331/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0062701 (332/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0072780 (333/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0072856 (334/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0099325 (335/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0240608 (336/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0240610 (337/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0240611 (338/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0240612 (339/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0240613 (340/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0240614 (341/776)

Procesando HMDB ID: HMDB0240622 (342/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0240629 (343/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0240644 (344/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0240674 (345/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0240676 (346/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0240677 (347/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0240680 (348/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0243890 (349/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0249814 (350/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0256160 (351/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0256163 (352/776)
 Procesando HMDB ID: Internal standard (353/776)
 Error al obtener datos para Internal standard: 404
 Procesando HMDB ID: HMDB0003681 (422/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0001859 (423/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0004400 (424/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000895 (425/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000072 (426/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000050 (427/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000448 (428/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0001539 (429/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0001341 (430/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000161 (431/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000462 (432/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000126 (433/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000086 (434/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000008 (435/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000510 (436/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0001906 (437/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000045 (438/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000194 (439/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000517 (440/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000168 (441/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0001924 (442/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000056 (443/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000357 (444/776)
 Excepción para HMDB0000357: undefined entity: line 28, column 5023
 Procesando HMDB ID: HMDB0000043 (445/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000054 (446/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0001008 (447/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0001161 (448/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0250913 (449/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000651 (450/776)

Procesando HMDB ID: HMDB0002250 (451/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0002250 (452/776)
Procesando HMDB ID: HMDB02014 (453/776)
Excepción para HMDB02014: undefined entity: line 26, column 11564
Procesando HMDB ID: HMDB0011562 (454/776)
Procesando HMDB ID: HMDB13331 (455/776)
Excepción para HMDB13331: undefined entity: line 26, column 9396
Procesando HMDB ID: HMDB0005066 (456/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011565 (457/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0029216 (458/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000222 (459/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005065 (460/776)
Procesando HMDB ID: HMDB00918 (461/776)
Excepción para HMDB00918: undefined entity: line 28, column 2946
Procesando HMDB ID: HMDB0010385 (462/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013339 (463/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0006469 (464/776)
Procesando HMDB ID: HMDB00610 (465/776)
Excepción para HMDB00610: undefined entity: line 28, column 3073
Procesando HMDB ID: HMDB0011507 (466/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000848 (468/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011511 (469/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010394 (470/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0006455 (471/776)
Procesando HMDB ID: HMDB11517 (472/776)
Excepción para HMDB11517: undefined entity: line 26, column 6734
Procesando HMDB ID: HMDB0010397 (473/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0006460 (474/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011520 (475/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0011582 (476/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0012092 (477/776)
Procesando HMDB ID: HMDB06729 (478/776)
Excepción para HMDB06729: undefined entity: line 26, column 7236
Procesando HMDB ID: HMDB0010374 (479/776)
Procesando HMDB ID: HMDB11526 (480/776)
Excepción para HMDB11526: undefined entity: line 26, column 6758
Procesando HMDB ID: HMDB0012095 (482/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0006347 (483/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000201 (484/776)
Procesando HMDB ID: HMDB07011 (485/776)
Excepción para HMDB07011: undefined entity: line 26, column 7468
Procesando HMDB ID: HMDB07869 (486/776)
Excepción para HMDB07869: undefined entity: line 26, column 7258

Procesando HMDB ID: HMDB07870 (487/776)
Excepción para HMDB07870: undefined entity: line 26, column 7272
Procesando HMDB ID: HMDB07098 (488/776)
Excepción para HMDB07098: undefined entity: line 26, column 7356
Procesando HMDB ID: HMDB07871 (489/776)
Excepción para HMDB07871: undefined entity: line 26, column 7253
Procesando HMDB ID: HMDB0008986 (490/776)
Procesando HMDB ID: HMDB07099 (491/776)
Excepción para HMDB07099: undefined entity: line 26, column 7487
Procesando HMDB ID: HMDB07873 (492/776)
Excepción para HMDB07873: undefined entity: line 26, column 7273
Procesando HMDB ID: HMDB07874 (493/776)
Error al obtener datos para HMDB07874: 502
Procesando HMDB ID: HMDB07100 (494/776)
Excepción para HMDB07100: undefined entity: line 26, column 7488
Procesando HMDB ID: CHEBI:66855 (495/776)
Error al obtener datos para CHEBI:66855: 404
Procesando HMDB ID: HMDB0008833 (496/776)
Procesando HMDB ID: CHEBI:74232 (497/776)
Error al obtener datos para CHEBI:74232: 404
Procesando HMDB ID: HMDB0112295 (498/776)
Procesando HMDB ID: HMDB07102 (499/776)
Excepción para HMDB07102: undefined entity: line 26, column 7508
Procesando HMDB ID: HMDB07972 (500/776)
Excepción para HMDB07972: undefined entity: line 26, column 7308
Procesando HMDB ID: HMDB11208 (501/776)
Excepción para HMDB11208: undefined entity: line 26, column 8462
Procesando HMDB ID: HMDB11239 (502/776)
Excepción para HMDB11239: undefined entity: line 26, column 8477
Procesando HMDB ID: HMDB07103 (503/776)
Excepción para HMDB07103: undefined entity: line 26, column 7468
Procesando HMDB ID: HMDB07973 (505/776)
Excepción para HMDB07973: undefined entity: line 26, column 7292
Procesando HMDB ID: HMDB11210 (506/776)
Excepción para HMDB11210: undefined entity: line 26, column 8478
Procesando HMDB ID: HMDB08928 (507/776)
Excepción para HMDB08928: undefined entity: line 28, column 3491
Procesando HMDB ID: HMDB08952 (508/776)
Excepción para HMDB08952: undefined entity: line 26, column 8427
Procesando HMDB ID: HMDB07132 (509/776)
Excepción para HMDB07132: undefined entity: line 26, column 7460
Procesando HMDB ID: CHEBI:64424 (510/776)
Error al obtener datos para CHEBI:64424: 404

Procesando HMDB ID: HMDB11211 (511/776)
Excepción para HMDB11211: undefined entity: line 26, column 8462
Procesando HMDB ID: HMDB11343 (512/776)
Excepción para HMDB11343: undefined entity: line 26, column 8396
Procesando HMDB ID: HMDB07883 (513/776)
Excepción para HMDB07883: undefined entity: line 26, column 7262
Procesando HMDB ID: HMDB11214 (514/776)
Excepción para HMDB11214: undefined entity: line 26, column 11618
Procesando HMDB ID: CHEBI:66858 (516/776)
Error al obtener datos para CHEBI:66858: 404
Procesando HMDB ID: HMDB07216 (517/776)
Excepción para HMDB07216: undefined entity: line 26, column 7493
Procesando HMDB ID: HMDB08038 (518/776)
Excepción para HMDB08038: undefined entity: line 26, column 7293
Procesando HMDB ID: HMDB08993 (520/776)
Excepción para HMDB08993: undefined entity: line 28, column 3496
Procesando HMDB ID: HMDB09016 (521/776)
Excepción para HMDB09016: undefined entity: line 26, column 8392
Procesando HMDB ID: HMDB07218 (523/776)
Excepción para HMDB07218: undefined entity: line 26, column 7385
Procesando HMDB ID: CHEBI:64433 (524/776)
Error al obtener datos para CHEBI:64433: 404
Procesando HMDB ID: HMDB11243 (525/776)
Excepción para HMDB11243: undefined entity: line 26, column 8478
Procesando HMDB ID: HMDB08994 (526/776)
Excepción para HMDB08994: undefined entity: line 28, column 3476
Procesando HMDB ID: HMDB09082 (527/776)
Excepción para HMDB09082: undefined entity: line 26, column 8412
Procesando HMDB ID: HMDB07219 (529/776)
Excepción para HMDB07219: undefined entity: line 26, column 7497
Procesando HMDB ID: CHEBI:64523 (530/776)
Error al obtener datos para CHEBI:64523: 404
Procesando HMDB ID: HMDB11244 (531/776)
Excepción para HMDB11244: undefined entity: line 26, column 8462
Procesando HMDB ID: HMDB09060 (532/776)
Excepción para HMDB09060: undefined entity: line 28, column 3492
Procesando HMDB ID: HMDB11441 (533/776)
Excepción para HMDB11441: undefined entity: line 26, column 8432
Procesando HMDB ID: HMDB07248 (535/776)
Excepción para HMDB07248: undefined entity: line 26, column 7345
Procesando HMDB ID: HMDB08138 (537/776)
Excepción para HMDB08138: undefined entity: line 26, column 7185
Procesando HMDB ID: HMDB11310 (538/776)

Excepción para HMDB11310: undefined entity: line 26, column 8482
Procesando HMDB ID: HMDB08937 (539/776)
Excepción para HMDB08937: undefined entity: line 28, column 3529
Procesando HMDB ID: HMDB11442 (540/776)
Excepción para HMDB11442: undefined entity: line 26, column 8416
Procesando HMDB ID: HMDB11221 (541/776)
Excepción para HMDB11221: undefined entity: line 26, column 8510
Procesando HMDB ID: HMDB11410 (543/776)
Excepción para HMDB11410: undefined entity: line 26, column 8440
Procesando HMDB ID: HMDB08942 (545/776)
Excepción para HMDB08942: undefined entity: line 26, column 7242
Procesando HMDB ID: HMDB08047 (546/776)
Excepción para HMDB08047: undefined entity: line 26, column 7327
Procesando HMDB ID: HMDB11384 (547/776)
Excepción para HMDB11384: undefined entity: line 26, column 8446
Procesando HMDB ID: CHEBI:85705 (548/776)
Error al obtener datos para CHEBI:85705: 404
Procesando HMDB ID: CHEBI:64526 (549/776)
Error al obtener datos para CHEBI:64526: 404
Procesando HMDB ID: HMDB11252 (550/776)
Excepción para HMDB11252: undefined entity: line 26, column 8512
Procesando HMDB ID: HMDB09003 (551/776)
Excepción para HMDB09003: undefined entity: line 28, column 3514
Procesando HMDB ID: HMDB09815 (552/776)
Excepción para HMDB09815: undefined entity: line 26, column 8751
Procesando HMDB ID: HMDB07199 (553/776)
Excepción para HMDB07199: undefined entity: line 26, column 7482
Procesando HMDB ID: HMDB09069 (554/776)
Excepción para HMDB09069: undefined entity: line 26, column 7276
Procesando HMDB ID: HMDB11386 (555/776)
Excepción para HMDB11386: undefined entity: line 26, column 8444
Procesando HMDB ID: HMDB07991 (556/776)
Excepción para HMDB07991: undefined entity: line 26, column 7310
Procesando HMDB ID: HMDB09102 (558/776)
Excepción para HMDB09102: undefined entity: line 26, column 7260
Procesando HMDB ID: HMDB11387 (559/776)
Error al obtener datos para HMDB11387: 502
Procesando HMDB ID: HMDB11229 (560/776)
Excepción para HMDB11229: undefined entity: line 26, column 8536
Procesando HMDB ID: HMDB11420 (561/776)
Excepción para HMDB11420: undefined entity: line 26, column 8062
Procesando HMDB ID: HMDB0000824 (562/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013133 (563/776)

Procesando HMDB ID: HMDB08511 (564/776)
Excepción para HMDB08511: undefined entity: line 26, column 7311
Procesando HMDB ID: HMDB08057 (565/776)
Excepción para HMDB08057: undefined entity: line 26, column 7295
Procesando HMDB ID: HMDB09012 (566/776)
Excepción para HMDB09012: undefined entity: line 28, column 3535
Procesando HMDB ID: HMDB10167 (567/776)
Excepción para HMDB10167: undefined entity: line 26, column 8611
Procesando HMDB ID: HMDB11394 (569/776)
Excepción para HMDB11394: undefined entity: line 26, column 8470
Procesando HMDB ID: HMDB08731 (570/776)
Error al obtener datos para HMDB08731: 502
Procesando HMDB ID: HMDB0042061 (571/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042121 (573/776)
Procesando HMDB ID: HMDB42099 (576/776)
Excepción para HMDB42099: undefined entity: line 26, column 9517
Procesando HMDB ID: HMDB0104463 (577/776)
Procesando HMDB ID: HMDB10412 (578/776)
Excepción para HMDB10412: undefined entity: line 26, column 9507
Procesando HMDB ID: HMDB0042281 (579/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042077 (580/776)
Procesando HMDB ID: HMDB42100 (581/776)
Excepción para HMDB42100: undefined entity: line 26, column 9515
Procesando HMDB ID: HMDB0042072 (582/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042078 (583/776)
Procesando HMDB ID: CHEBI:85825 (584/776)
Error al obtener datos para CHEBI:85825: 404
Procesando HMDB ID: HMDB11705 (585/776)
Excepción para HMDB11705: undefined entity: line 28, column 5562
Procesando HMDB ID: HMDB0011710 (586/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042109 (587/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0002013 (588/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013127 (589/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010427 (590/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005374 (591/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005362 (592/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005435 (593/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042083 (594/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0062989 (595/776)
Procesando HMDB ID: HMDB05367 (596/776)
Excepción para HMDB05367: undefined entity: line 26, column 9495
Procesando HMDB ID: HMDB0011704 (597/776)
Procesando HMDB ID: HMDB02366 (598/776)

Excepción para HMDB02366: undefined entity: line 26, column 10454
Procesando HMDB ID: HMDB0042067 (599/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005361 (600/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010438 (601/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005440 (602/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005446 (603/776)
Procesando HMDB ID: HMDB10517 (604/776)
Excepción para HMDB10517: undefined entity: line 26, column 9605
Procesando HMDB ID: HMDB42196 (605/776)
Excepción para HMDB42196: undefined entity: line 26, column 9524
Procesando HMDB ID: HMDB43058 (606/776)
Excepción para HMDB43058: undefined entity: line 26, column 9530
Procesando HMDB ID: HMDB55685 (607/776)
Excepción para HMDB55685: undefined entity: line 26, column 9664
Procesando HMDB ID: HMDB0042221 (608/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005397 (609/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005453 (610/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005411 (611/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005385 (612/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010481 (613/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005447 (614/776)
Procesando HMDB ID: HMDB42226 (615/776)
Excepción para HMDB42226: undefined entity: line 26, column 9520
Procesando HMDB ID: HMDB42466 (616/776)
Excepción para HMDB42466: undefined entity: line 26, column 9538
Procesando HMDB ID: HMDB0005428 (617/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005442 (618/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005473 (619/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010469 (620/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010483 (621/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010527 (622/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010496 (623/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010510 (624/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010467 (625/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0042688 (626/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010465 (627/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010488 (628/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013128 (629/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013130 (630/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0010530 (631/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000756 (632/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013238 (633/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000791 (634/776)

Procesando HMDB ID: HMDB0013288 (635/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0001847 (636/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000062 (637/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000097 (638/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000094 (639/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000904 (640/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000063 (641/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0002802 (642/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0001046 (643/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000064 (644/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000562 (645/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0031404 (646/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000630 (647/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000092 (649/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0240212 (650/776)
Procesando HMDB ID: METPA1302 (651/776)
Error al obtener datos para METPA1302: 404
Procesando HMDB ID: METPA0797 (652/776)
Error al obtener datos para METPA0797: 404
Procesando HMDB ID: HMDB0000897 (653/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000112 (656/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0005015 (657/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0001201 (658/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000152 (659/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000127 (660/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000148 (661/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000641 (662/776)
Error al obtener datos para HMDB0000641: 502
Procesando HMDB ID: HMDB0000123 (663/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000138 (664/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000631 (665/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000637 (666/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0001397 (667/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0003464 (668/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000128 (669/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000132 (670/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000124 (671/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000714 (672/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000177 (673/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000670 (674/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0032592 (675/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0001476 (676/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0001390 (677/776)

Procesando HMDB ID: HMDB0059655 (678/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013678 (679/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000725 (680/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000157 (681/776)
Procesando HMDB ID: HMDB00002302 (682/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000682 (683/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000195 (684/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000211 (686/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000193 (687/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000172 (688/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000715 (689/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000684 (690/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000190 (691/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0041627 (692/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000687 (693/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0012252 (694/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000182 (695/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000156 (696/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0001921 (697/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000696 (698/776)
Procesando HMDB ID: HMDB00002005 (699/776)
Procesando HMDB ID: HMDB00003331 (700/776)
Procesando HMDB ID: HMDB00003282 (702/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0001563 (703/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000898 (704/776)
Procesando HMDB ID: HMDB00000001 (705/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000699 (706/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0015052 (707/776)
Procesando HMDB ID: HMDB00002000 (708/776)
Procesando HMDB ID: HMDB00004193 (709/776)
Procesando HMDB ID: HMDB00005923 (710/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000206 (711/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000812 (712/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0247733 (713/776)
Procesando HMDB ID: HMDB00003357 (714/776)
Procesando HMDB ID: HMDB00002064 (715/776)
Procesando HMDB ID: HMDB00001276 (716/776)
Procesando HMDB ID: HMDB00004620 (717/776)
Procesando HMDB ID: HMDB00000026 (718/776)
Procesando HMDB ID: HMDB00001406 (719/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0094704 (720/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000202 (721/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0013631 (722/776)

Procesando HMDB ID: HMDB0000214 (723/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0002329 (724/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000210 (725/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0004231 (726/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0006344 (727/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000159 (728/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0001565 (729/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0001511 (730/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000362 (731/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000070 (732/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000162 (733/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0004827 (734/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000767 (735/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000017 (736/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000267 (737/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000243 (738/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0014611 (739/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000232 (740/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000884 (741/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000840 (742/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000271 (743/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0003334 (744/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0062263 (745/776)
 Excepción para HMDB0062263: undefined entity: line 30, column 5022
 Procesando HMDB ID: HMDB0000247 (746/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000269 (747/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000252 (748/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000893 (749/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000254 (750/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000258 (751/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0015150 (752/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000251 (753/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000235 (755/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000167 (756/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000248 (758/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000875 (759/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000925 (760/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0013733 (761/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0001325 (762/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000929 (763/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000158 (764/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000295 (765/776)
 Procesando HMDB ID: HMDB0000300 (766/776)

Procesando HMDB ID: HMDB0000289 (767/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000289 (768/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000296 (769/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000301 (770/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000883 (771/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0014323 (772/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0001850 (773/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0001935 (774/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000292 (775/776)
Procesando HMDB ID: HMDB0000299 (776/776)

```
# Guardar los resultados en un nuevo archivo
output_file = "20241212_names_VARS_extendido.csv"
metabolites_data.to_csv(output_file, index=False)
print(f"Datos enriquecidos guardados en {output_file}")
```

Datos enriquecidos guardados en 20241212_names_VARS_extendido.csv