

# Metabolomic Data Analysis with MetaboAnalyst 6.0

Name: guest11392853573243576150

April 16, 2024

## 1 Background

The Pathway Analysis module combines results from powerful pathway enrichment analysis with pathway topology analysis to help researchers identify the most relevant pathways involved in the conditions under study.

There are many commercial pathway analysis software tools such as Pathway Studio, MetaCore, or Ingenuity Pathway Analysis (IPA), etc. Compared to these commercial tools, the pathway analysis module was specifically developed for metabolomics studies. It uses high-quality KEGG metabolic pathways as the backend knowledgebase. This module integrates many well-established (i.e. univariate analysis, over-representation analysis) methods, as well as novel algorithms and concepts (i.e. Global Test, GlobalAncova, network topology analysis) into pathway analysis. Another feature is a Google-Map style interactive visualization system to deliver the analysis results in an intuitive manner.

## 2 Data Input

The Pathway Analysis module accepts either a list of compound labels (common names, HMDB IDs or KEGG IDs) with one compound per row, or a compound concentration table with samples in rows and compounds in columns. The second column must be phenotype labels (binary, multi-group, or continuous). The table is uploaded as comma separated values (.csv).

## 3 Compound Name Matching

The first step is to standardize the compound labels used in user uploaded data. This is a necessary step since these compounds will be subsequently compared with compounds contained in the pathway library. There are three outcomes from the step - exact match, approximate match (for common names only), and no match. Users should click the textbfView button from the approximate matched results to manually select the correct one. Compounds without match will be excluded from the subsequently pathway analysis.

**Table 1** shows the conversion results. Note: *1* indicates exact match, *2* indicates approximate match, and *0* indicates no match. A text file contain the result can be found the downloaded file *name\_map.csv*

	Query	Match	HMDB	Pub
1	C06145	NA	NA	NA
2	C14275	NA	NA	NA
3	HMDB0006853	3-Butyn-1-al	HMDB0006853	1429
4	HMDB0006945	NA	NA	NA
5	HMDB0013785	Furan	HMDB0013785	8029
6	CHEBI:28180	NA	NA	NA
7	CHEBI:35559	NA	NA	NA
8	CHEBI:48060	NA	NA	NA
9	C00511	NA	NA	NA

10	C00546	NA	NA	NA
11	C19246	NA	NA	NA
12	C19297	NA	NA	NA
13	C19440	NA	NA	NA
14	C19501	NA	NA	NA
15	HMDB0001167	Pyruvaldehyde	HMDB0001167	880
16	HMDB0006112	Malondialdehyde	HMDB0006112	1096
17	HMDB0031647	Acrylic acid	HMDB0031647	6581
18	CHEBI:17158	NA	NA	NA
19	CHEBI:18308	NA	NA	NA
20	CHEBI:49073	NA	NA	NA
21	CHEBI:566274	NA	NA	NA
22	C00048	NA	NA	NA
23	HMDB0000119	Glyoxylic acid	HMDB0000119	760
24	CHEBI:16891	NA	NA	NA
25	CHEBI:36657	NA	NA	NA
26	C00741	NA	NA	NA
27	C01770	NA	NA	NA
28	C01771	NA	NA	NA
29	C02497	NA	NA	NA
30	C16267	NA	NA	NA
31	C16835	NA	NA	NA
32	C19201	NA	NA	NA
33	C19309	NA	NA	NA
34	C19443	NA	NA	NA
35	HMDB0000549	gamma-Butyrolactone	HMDB0000549	7302
36	HMDB0002523	Oxolan-3-one	HMDB0002523	5293
37	HMDB0003407	Diacetyl	HMDB0003407	650
38	HMDB0010720	But-2-enoic acid	HMDB0010720	6370
39	HMDB0031209	Ethenyl acetate	HMDB0031209	7904
40	HMDB0033977	Methyl acrylate	HMDB0033977	7294
41	HMDB0034439	Isocrotonic acid	HMDB0034439	6437
42	CHEBI:16413	NA	NA	NA
43	CHEBI:16583	NA	NA	NA
44	CHEBI:17217	NA	NA	NA
45	CHEBI:23500	NA	NA	NA
46	CHEBI:23704	NA	NA	NA
47	CHEBI:25219	NA	NA	NA
48	CHEBI:35897	NA	NA	NA
49	CHEBI:36253	NA	NA	NA
50	CHEBI:41131	NA	NA	NA
51	CHEBI:42639	NA	NA	NA
52	CHEBI:46916	NA	NA	NA
53	CHEBI:51046	NA	NA	NA
54	CHEBI:51047	NA	NA	NA
55	CHEBI:51048	NA	NA	NA
56	C00022	NA	NA	NA
57	C00222	NA	NA	NA
58	C12069	NA	NA	NA
59	C20363	NA	NA	NA
60	HMDB0000243	Pyruvic acid	HMDB0000243	1060
61	HMDB0011111	Malonic semialdehyde	HMDB0011111	868
62	HMDB0011666	NA	NA	NA
63	HMDB0040261	Glucosereductone	HMDB0040261	4451
64	HMDB0062676	NA	NA	NA
65	CHEBI:17960	NA	NA	NA
66	CHEBI:32816	NA	NA	NA
67	CHEBI:46660	NA	NA	NA
68	CHEBI:86354	NA	NA	NA
69	C00246	NA	NA	NA
70	C00466	NA	NA	NA
71	C00810	NA	NA	NA
72	C00849	NA	NA	NA
73	C01769	NA	NA	NA
74	C02632	NA	NA	NA
75	C14440	NA	NA	NA
76	HMDB0000039	Butyric acid	HMDB0000039	264
77	HMDB0001873	Isobutyric acid	HMDB0001873	6590
78	HMDB0003151	NA	NA	NA
79	HMDB0003243	Acetoin	HMDB0003243	179
80	HMDB0030062	Methyl propionate	HMDB0030062	1112
81	HMDB0031217	Ethyl acetate	HMDB0031217	8857
82	HMDB0031507	1-Hydroxy-2-butanone	HMDB0031507	5213
83	HMDB0040253	Propyl formate	HMDB0040253	8073
84	HMDB0040579	Isopropyl formate	HMDB0040579	1225
85	CHEBI:15686	NA	NA	NA
86	CHEBI:15687	NA	NA	NA
87	CHEBI:15688	NA	NA	NA
88	CHEBI:16135	NA	NA	NA
89	CHEBI:19662	NA	NA	NA
90	CHEBI:27750	NA	NA	NA
91	CHEBI:30772	NA	NA	NA
92	CHEBI:41268	NA	NA	NA
93	CHEBI:46924	NA	NA	NA
94	CHEBI:47032	NA	NA	NA
95	CHEBI:48426	NA	NA	NA
96	C16364	NA	NA	NA

97	C19281	NA	NA	NA
98	C19779	NA	NA	NA
99	HMDB0029198	Dimethylurea	HMDB0029198	7293
100	CHEBI:21217	NA	NA	NA
101	CHEBI:55360	NA	NA	NA
102	CHEBI:80472	NA	NA	NA
103	C00184	NA	NA	NA
104	C00186	NA	NA	NA
105	C00256	NA	NA	NA
106	C00577	NA	NA	NA
107	C01013	NA	NA	NA
108	C01432	NA	NA	NA
109	C02154	NA	NA	NA
110	C02426	NA	NA	NA
111	HMDB0000171	NA	NA	NA
112	HMDB0000190	Lactic acid	HMDB0000190	1076
113	HMDB0000700	Hydroxypropionic acid	HMDB0000700	6815
114	HMDB0001051	Glyceraldehyde	HMDB0001051	751
115	HMDB0001311	D-Lactic acid	HMDB0001311	6150
116	HMDB0001882	Dihydroxyacetone	HMDB0001882	670
117	HMDB0003328	NA	NA	NA
118	HMDB0029580	Dimethyl carbonate	HMDB0029580	1202
119	HMDB0031232	Monoethyl carbonate	HMDB0031232	1053
120	HMDB0041929	NA	NA	NA
121	HMDB0062492	NA	NA	NA
122	HMDB0144295	NA	NA	NA
123	CHEBI:132098	NA	NA	NA
124	CHEBI:16016	NA	NA	NA
125	CHEBI:17378	NA	NA	NA
126	CHEBI:27975	NA	NA	NA
127	CHEBI:33404	NA	NA	NA
128	CHEBI:36596	NA	NA	NA
129	CHEBI:38043	NA	NA	NA
130	CHEBI:42111	NA	NA	NA
131	CHEBI:422	NA	NA	NA
132	CHEBI:50849	NA	NA	NA
133	CHEBI:5445	NA	NA	NA
134	CHEBI:78320	NA	NA	NA
135	C00059	NA	NA	NA
136	HMDB0001448	Sulfate	HMDB0001448	1117
137	CHEBI:26836	NA	NA	NA
138	C07273	NA	NA	NA
139	C11103	NA	NA	NA
140	HMDB0030276	(R)-Dihydromaleimide	HMDB0030276	3535
141	CHEBI:22663	NA	NA	NA
142	CHEBI:32464	NA	NA	NA
143	CHEBI:32468	NA	NA	NA
144	CHEBI:51928	NA	NA	NA
145	CHEBI:5827	NA	NA	NA
146	CHEBI:61888	NA	NA	NA
147	CHEBI:9307	NA	NA	NA
148	C00334	NA	NA	NA
149	C01026	NA	NA	NA
150	C01205	NA	NA	NA
151	C02261	NA	NA	NA
152	C02356	NA	NA	NA
153	C02721	NA	NA	NA
154	C03284	NA	NA	NA
155	C03665	NA	NA	NA
156	C05145	NA	NA	NA
157	C11109	NA	NA	NA
158	C11735	NA	NA	NA
159	C19514	NA	NA	NA
160	HMDB0000092	Dimethylglycine	HMDB0000092	673
161	HMDB0000112	gamma-Aminobutyric acid	HMDB0000112	119
162	HMDB0000452	L-alpha-Aminobutyric acid	HMDB0000452	8028
163	HMDB0000485	NA	NA	NA
164	HMDB0000581	NA	NA	NA
165	HMDB0000650	D-alpha-Aminobutyric acid	HMDB0000650	4396
166	HMDB0001906	2-Aminoisobutyric acid	HMDB0001906	6119
167	HMDB0002166	(S)-beta-Aminoisobutyric acid	HMDB0002166	4394
168	HMDB0002299	(R)-beta-Aminoisobutyric acid	HMDB0002299	5455
169	HMDB0003911	3-Aminoisobutanoic acid	HMDB0003911	6495
170	HMDB0005815	NA	NA	NA
171	HMDB0031329	Butyl nitrite	HMDB0031329	1093
172	HMDB0031654	3-Aminobutanoic acid	HMDB0031654	1093
173	HMDB0038394	O-Acetyethanolamine	HMDB0038394	1127
174	HMDB0041945	N-Ethylglycine	HMDB0041945	6992
175	HMDB0094692	N-Methylalanine	HMDB0094692	5288
176	HMDB0094693	NA	NA	NA
177	CHEBI:15620	NA	NA	NA
178	CHEBI:16320	NA	NA	NA
179	CHEBI:16865	NA	NA	NA
180	CHEBI:17519	NA	NA	NA
181	CHEBI:17724	NA	NA	NA
182	CHEBI:27389	NA	NA	NA
183	CHEBI:27971	NA	NA	NA

184	CHEBI:28797	NA	NA	NA
185	CHEBI:33094	NA	NA	NA
186	CHEBI:35619	NA	NA	NA
187	CHEBI:35621	NA	NA	NA
188	CHEBI:37081	NA	NA	NA
189	CHEBI:46643	NA	NA	NA
190	CHEBI:57440	NA	NA	NA
191	CHEBI:57731	NA	NA	NA
192	CHEBI:58175	NA	NA	NA
193	CHEBI:58251	NA	NA	NA
194	CHEBI:58655	NA	NA	NA
195	CHEBI:59888	NA	NA	NA
196	CHEBI:64739	NA	NA	NA
197	CHEBI:74359	NA	NA	NA
198	CHEBI:74687	NA	NA	NA
199	CHEBI:87997	NA	NA	NA
200	C00989	NA	NA	NA
201	C01089	NA	NA	NA
202	C01188	NA	NA	NA
203	C01991	NA	NA	NA
204	C03197	NA	NA	NA
205	C05984	NA	NA	NA
206	C06001	NA	NA	NA
207	C14601	NA	NA	NA
208	HMDB0000008	2-Hydroxybutyric acid	HMDB0000008	4408
209	HMDB0000011	3-Hydroxybutyric acid	HMDB0000011	441
210	HMDB0000023	(S)-3-Hydroxyisobutyric acid	HMDB0000023	4408
211	HMDB0000336	(R)-3-Hydroxyisobutyric acid	HMDB0000336	1121
212	HMDB0000357	NA	NA	NA
213	HMDB0000435	NA	NA	NA
214	HMDB0000442	(S)-3-Hydroxybutyric acid	HMDB0000442	9431
215	HMDB0000710	4-Hydroxybutyric acid	HMDB0000710	1041
216	HMDB0000729	alpha-Hydroxyisobutyric acid	HMDB0000729	1167
217	HMDB0000758	NA	NA	NA
218	HMDB0011597	NA	NA	NA
219	HMDB0015507	NA	NA	NA
220	HMDB0031212	Ethoxyacetic acid	HMDB0031212	1230
221	HMDB0059748	NA	NA	NA
222	HMDB0062640	NA	NA	NA
223	HMDB0126088	NA	NA	NA
224	CHEBI:1148	NA	NA	NA
225	CHEBI:11805	NA	NA	NA
226	CHEBI:17066	NA	NA	NA
227	CHEBI:17290	NA	NA	NA
228	CHEBI:18064	NA	NA	NA
229	CHEBI:20067	NA	NA	NA
230	CHEBI:30830	NA	NA	NA
231	CHEBI:37373	NA	NA	NA
232	CHEBI:37551	NA	NA	NA
233	CHEBI:50129	NA	NA	NA
234	CHEBI:50612	NA	NA	NA
235	CHEBI:50613	NA	NA	NA
236	CHEBI:741468	NA	NA	NA
237	CHEBI:74611	NA	NA	NA
238	CHEBI:83221	NA	NA	NA
239	CHEBI:83222	NA	NA	NA
240	C00065	NA	NA	NA
241	C00716	NA	NA	NA
242	C00740	NA	NA	NA
243	HMDB0000187	Serine	HMDB0000187	5951
244	HMDB0000589	NA	NA	NA
245	HMDB0003406	D-Serine	HMDB0003406	7107
246	HMDB0062263	NA	NA	NA
247	CHEBI:16523	NA	NA	NA
248	CHEBI:17115	NA	NA	NA
249	CHEBI:17822	NA	NA	NA
250	CHEBI:33384	NA	NA	NA
251	CHEBI:35243	NA	NA	NA
252	CHEBI:35247	NA	NA	NA
253	CHEBI:49042	NA	NA	NA
254	C00258	NA	NA	NA
255	HMDB0000139	Glyceric acid	HMDB0000139	4391
256	HMDB0006372	L-Glyceric acid	HMDB0006372	6326
257	HMDB0031818	NA	NA	NA
258	CHEBI:32398	NA	NA	NA
259	CHEBI:33508	NA	NA	NA
260	CHEBI:74324	NA	NA	NA
261	C14403	NA	NA	NA
262	C15562	NA	NA	NA
263	HMDB0029734	3-Ethylpyridine	HMDB0029734	1082
264	HMDB0032244	2,4-Dimethylpyridine	HMDB0032244	7936
265	HMDB0032972	2,6-Dimethylpyridine	HMDB0032972	7937
266	HMDB0033871	Benzylamine	HMDB0033871	7504
267	HMDB0041965	O-Toluidine	HMDB0041965	7242
268	CHEBI:127904	NA	NA	NA
269	CHEBI:32548	NA	NA	NA
270	CHEBI:40538	NA	NA	NA

271	CHEBI:66892	NA	NA	NA
272	C00090	NA	NA	NA
273	C00530	NA	NA	NA
274	C01751	NA	NA	NA
275	C01785	NA	NA	NA
276	C11115	NA	NA	NA
277	C15571	NA	NA	NA
278	HMDB0000957	Pyrocatechol	HMDB0000957	289
279	HMDB0002434	Hydroquinone	HMDB0002434	785
280	HMDB0031180	(E,E)-2,4-Hexadienedial	HMDB0031180	1141
281	HMDB0032037	1,3-Benzenediol	HMDB0032037	5054
282	HMDB0033002	5-Methyl-2-furancarboxaldehyde	HMDB0033002	1209
283	HMDB0033127	2-Acetylfuran	HMDB0033127	1450
284	CHEBI:17594	NA	NA	NA
285	CHEBI:18135	NA	NA	NA
286	CHEBI:27810	NA	NA	NA
287	CHEBI:59983	NA	NA	NA
288	C01546	NA	NA	NA
289	HMDB0000444	3-Furoic acid	HMDB0000444	1026
290	HMDB0000617	2-Furoic acid	HMDB0000617	6919
291	HMDB0032994	3-Hydroxy-2H-pyran-2-one	HMDB0032994	6813
292	HMDB0039437	NA	NA	NA
293	CHEBI:30845	NA	NA	NA
294	CHEBI:30846	NA	NA	NA
295	C00596	NA	NA	NA
296	C07091	NA	NA	NA
297	HMDB0031859	Norfuraneol	HMDB0031859	4564
298	HMDB0060461	cis-Acetylacrylate	HMDB0060461	5281
299	CHEBI:1113	NA	NA	NA
300	CHEBI:18355	NA	NA	NA
301	CHEBI:28993	NA	NA	NA
302	CHEBI:37318	NA	NA	NA
303	CHEBI:48643	NA	NA	NA
304	CHEBI:74456	NA	NA	NA
305	CHEBI:87123	NA	NA	NA
306	CHEBI:87587	NA	NA	NA
307	C00429	NA	NA	NA
308	C02512	NA	NA	NA
309	C02565	NA	NA	NA
310	C02777	NA	NA	NA
311	C08311	NA	NA	NA
312	HMDB0000076	Dihydrouracil	HMDB0000076	649
313	HMDB0003646	N-Methylhydantoin	HMDB0003646	6921
314	HMDB0060245	NA	NA	NA
315	CHEBI:15901	NA	NA	NA
316	CHEBI:16354	NA	NA	NA
317	CHEBI:16535	NA	NA	NA
318	CHEBI:16934	NA	NA	NA
319	CHEBI:32664	NA	NA	NA
320	CHEBI:50347	NA	NA	NA
321	CHEBI:50349	NA	NA	NA
322	CHEBI:7035	NA	NA	NA
323	CHEBI:71209	NA	NA	NA
324	CHEBI:77860	NA	NA	NA
325	C00122	NA	NA	NA
326	C01384	NA	NA	NA
327	C02150	NA	NA	NA
328	HMDB0000134	Fumaric acid	HMDB0000134	4446
329	HMDB0000176	Maleic acid	HMDB0000176	4442
330	CHEBI:17453	NA	NA	NA
331	CHEBI:18012	NA	NA	NA
332	CHEBI:18300	NA	NA	NA
333	CHEBI:22958	NA	NA	NA
334	CHEBI:30031	NA	NA	NA
335	C01585	NA	NA	NA
336	C02948	NA	NA	NA
337	C03739	NA	NA	NA
338	C12293	NA	NA	NA
339	C12304	NA	NA	NA
340	C12313	NA	NA	NA
341	HMDB0000535	Caproic acid	HMDB0000535	8892
342	HMDB0000689	Isocaproic acid	HMDB0000689	1258
343	HMDB0029762	Methyl (S)-2-Methylbutanoate	HMDB0029762	1335
344	HMDB0030027	Methyl 3-methylbutanoate	HMDB0030027	1116
345	HMDB0030056	Isopropyl propionate	HMDB0030056	1250
346	HMDB0030059	Propyl propionate	HMDB0030059	7803
347	HMDB0031207	Methyl pentanoate	HMDB0031207	1220
348	HMDB0031221	2-Ethylbutanoic acid	HMDB0031221	6915
349	HMDB0031246	2-Methylpropyl acetate	HMDB0031246	8038
350	HMDB0031248	Ethyl 2-methylpropanoate	HMDB0031248	7342
351	HMDB0031325	n-Butyl acetate	HMDB0031325	3127
352	HMDB0031511	Diacetone alcohol	HMDB0031511	3125
353	HMDB0031580	(±)-2-Methylpentanoic acid	HMDB0031580	7341
354	HMDB0033774	3-Methylpentanoic acid	HMDB0033774	7755
355	HMDB0033889	Ethyl butyrate	HMDB0033889	7762
356	HMDB0034163	3-Methylbutyl formate	HMDB0034163	8052
357	HMDB0037266	2,2,4-Trimethyl-1,3-dioxolane	HMDB0037266	6238

358	HMDB0040279	2,4,5-Trimethyl-1,3-dioxolane	HMDB0040279	1029
359	HMDB0040327	Pentyl formate	HMDB0040327	1252
360	HMDB0061883	NA	NA	NA
361	CHEBI:167422	NA	NA	NA
362	CHEBI:16931	NA	NA	NA
363	CHEBI:17120	NA	NA	NA
364	CHEBI:18351	NA	NA	NA
365	CHEBI:24567	NA	NA	NA
366	CHEBI:30776	NA	NA	NA
367	CHEBI:31328	NA	NA	NA
368	CHEBI:31726	NA	NA	NA
369	CHEBI:32329	NA	NA	NA
370	CHEBI:38647	NA	NA	NA
371	CHEBI:38649	NA	NA	NA
372	CHEBI:38650	NA	NA	NA
373	CHEBI:38651	NA	NA	NA
374	CHEBI:38652	NA	NA	NA
375	CHEBI:410868	NA	NA	NA
376	CHEBI:50569	NA	NA	NA
377	CHEBI:55381	NA	NA	NA
378	CHEBI:74903	NA	NA	NA
379	CHEBI:78816	NA	NA	NA
380	CHEBI:78817	NA	NA	NA
381	CHEBI:87303	NA	NA	NA
382	CHEBI:87317	NA	NA	NA
383	CHEBI:87526	NA	NA	NA
384	CHEBI:87572	NA	NA	NA
385	CHEBI:87595	NA	NA	NA
386	C00463	NA	NA	NA
387	C16074	NA	NA	NA
388	HMDB0000738	Indole	HMDB0000738	798
389	HMDB0034171	Benzeneacetonitrile	HMDB0034171	8794
390	CHEBI:16881	NA	NA	NA
391	CHEBI:25979	NA	NA	NA
392	C00183	NA	NA	NA
393	C00431	NA	NA	NA
394	C00719	NA	NA	NA
395	C01799	NA	NA	NA
396	C01826	NA	NA	NA
397	C03571	NA	NA	NA
398	C06417	NA	NA	NA
399	C07457	NA	NA	NA
400	C15987	NA	NA	NA
401	C16436	NA	NA	NA
402	HMDB0000043	Betaine	HMDB0000043	247
403	HMDB0000883	L-Valine	HMDB0000883	6287
404	HMDB0001382	Vaporole	HMDB0001382	8053
405	HMDB0002141	N-Methyl-a-aminoisobutyric acid	HMDB0002141	6951
406	HMDB0003355	5-Aminopentanoic acid	HMDB0003355	138
407	HMDB0013716	Norvaline	HMDB0013716	4395
408	HMDB0015550	Amyl Nitrite	HMDB0015550	1002
409	HMDB0034366	NA	NA	NA
410	CHEBI:15887	NA	NA	NA
411	CHEBI:16414	NA	NA	NA
412	CHEBI:17750	NA	NA	NA
413	CHEBI:18314	NA	NA	NA
414	CHEBI:19475	NA	NA	NA
415	CHEBI:2691	NA	NA	NA
416	CHEBI:27266	NA	NA	NA
417	CHEBI:27477	NA	NA	NA
418	CHEBI:28804	NA	NA	NA
419	CHEBI:356010	NA	NA	NA
420	CHEBI:37755	NA	NA	NA
421	CHEBI:42955	NA	NA	NA
422	CHEBI:52093	NA	NA	NA
423	CHEBI:55344	NA	NA	NA
424	CHEBI:57762	NA	NA	NA
425	CHEBI:58441	NA	NA	NA
426	CHEBI:66882	NA	NA	NA
427	CHEBI:74338	NA	NA	NA
428	CHEBI:77042	NA	NA	NA
429	CHEBI:87977	NA	NA	NA
430	C00042	NA	NA	NA
431	C02170	NA	NA	NA
432	C10900	NA	NA	NA
433	HMDB0000202	Methylmalonic acid	HMDB0000202	487
434	HMDB0000254	Succinic acid	HMDB0000254	1110
435	HMDB0000349	Erythrono-1,4-lactone	HMDB0000349	5322
436	HMDB0000940	Threonolactone	HMDB0000940	2724
437	HMDB0002475	NA	NA	NA
438	HMDB0031204	4-Hydroxy-2-oxobutanoic acid	HMDB0031204	1196
439	HMDB0039324	xi-3-Hydroxy-2-oxobutanoic acid	HMDB0039324	1885
440	HMDB0130020	NA	NA	NA
441	CHEBI:15741	NA	NA	NA
442	CHEBI:30860	NA	NA	NA
443	CHEBI:46669	NA	NA	NA
444	CHEBI:71176	NA	NA	NA

445	CHEBI:87625	NA	NA	NA
446	C14512	NA	NA	NA
447	HMDB0030968	2,4,6-Octatriyn-1-ol	HMDB0030968	1167
448	HMDB0032929	Benzofuran	HMDB0032929	9223
449	HMDB0038998	3,5,7-Octatriyn-1-ol	HMDB0038998	8586
450	HMDB0040549	xi-2,3-Octadiene-5,7-diyne-1-ol	HMDB0040549	7144
451	CHEBI:35260	NA	NA	NA
452	CHEBI:35261	NA	NA	NA
453	C02804	NA	NA	NA
454	C20827	NA	NA	NA
455	HMDB0000351	(2S,3R)-3-Hydroxy-2-methylbutanoic acid	HMDB0000351	1231
456	HMDB0000354	2-Methyl-3-hydroxybutyric acid	HMDB0000354	1604
457	HMDB0000396	2-Ethylhydracrylic acid	HMDB0000396	1889
458	HMDB0000407	2-Hydroxy-3-methylbutyric acid	HMDB0000407	9982
459	HMDB0000410	3-Hydroxy-2-methyl-[S-(R,R)]-butanoic acid	HMDB0000410	1231
460	HMDB0000420	NA	NA	NA
461	HMDB0000531	3-Hydroxyvaleric acid	HMDB0000531	1078
462	HMDB0000605	NA	NA	NA
463	HMDB0000642	Erythronilic acid	HMDB0000642	1181
464	HMDB0000754	3-Hydroxyisovaleric acid	HMDB0000754	6936
465	HMDB0001863	2-Hydroxyvaleric acid	HMDB0001863	9800
466	HMDB0001987	2-Hydroxy-2-methylbutyric acid	HMDB0001987	9543
467	HMDB0002011	4-Hydroxyisovaleric acid	HMDB0002011	1317
468	HMDB0002187	NA	NA	NA
469	HMDB0002321	NA	NA	NA
470	HMDB0040735	Ethyl lactate	HMDB0040735	7344
471	HMDB0041603	Methyl 3-hydroxybutyrate	HMDB0041603	1514
472	HMDB0059844	NA	NA	NA
473	HMDB0061927	5-Hydroxypentanoic acid	HMDB0061927	2594
474	HMDB0062584	NA	NA	NA
475	HMDB0130836	NA	NA	NA
476	CHEBI:37051	NA	NA	NA
477	CHEBI:37052	NA	NA	NA
478	CHEBI:37084	NA	NA	NA
479	CHEBI:37552	NA	NA	NA
480	CHEBI:384411	NA	NA	NA
481	CHEBI:45564	NA	NA	NA
482	CHEBI:46415	NA	NA	NA
483	CHEBI:60631	NA	NA	NA
484	CHEBI:60645	NA	NA	NA
485	CHEBI:60647	NA	NA	NA
486	CHEBI:68454	NA	NA	NA
487	CHEBI:78321	NA	NA	NA
488	CHEBI:78322	NA	NA	NA
489	CHEBI:78323	NA	NA	NA
490	CHEBI:79019	NA	NA	NA
491	CHEBI:82956	NA	NA	NA
492	CHEBI:89628	NA	NA	NA
493	C03283	NA	NA	NA
494	C08291	NA	NA	NA
495	HMDB0002362	2,4-Diaminobutyric acid	HMDB0002362	470
496	HMDB0006284	L-2,4-diaminobutyric acid	HMDB0006284	1344
497	CHEBI:48950	NA	NA	NA
498	CHEBI:64307	NA	NA	NA
499	CHEBI:73169	NA	NA	NA
500	HMDB0029579	Diisopropyl sulfide	HMDB0029579	1226
501	HMDB0031431	Dipropyl sulfide	HMDB0031431	8118
502	HMDB0039806	1-Hexanethiol	HMDB0039806	8106
503	C01871	NA	NA	NA
504	C08383	NA	NA	NA
505	HMDB0031473	1,3-Dithiane	HMDB0031473	1045
506	HMDB0031474	1,4-Dithiane	HMDB0031474	1045
507	HMDB0033052	Ethyl vinyl disulfide	HMDB0033052	1564
508	HMDB0036179	2-Methyl-1,3-dithiolane	HMDB0036179	2182
509	HMDB0040250	xi-Tetrahydro-2-thiophenethiol	HMDB0040250	5261
510	HMDB0041389	Methyl 2-propenyl disulfide	HMDB0041389	6243
511	HMDB0041391	(E)-Methyl 1-propenyl disulfide	HMDB0041391	6164
512	CHEBI:47845	NA	NA	NA
513	CHEBI:540	NA	NA	NA
514	CHEBI:6854	NA	NA	NA
515	C01796	NA	NA	NA
516	C02022	NA	NA	NA
517	C02045	NA	NA	NA
518	C06463	NA	NA	NA
519	HMDB0000337	(S)-3,4-Dihydroxybutyric acid	HMDB0000337	1509
520	HMDB0000360	2,4-Dihydroxybutanoic acid	HMDB0000360	1927
521	HMDB0000498	4-Deoxyerythronic acid	HMDB0000498	1312
522	HMDB0002453	4-Deoxythreonic acid	HMDB0002453	1096
523	HMDB0002601	A,b-Dihydroxyisobutyric acid	HMDB0002601	5607
524	HMDB0002649	Erythrose	HMDB0002649	4395
525	HMDB0006118	NA	NA	NA
526	HMDB0006293	L-Erythrulose	HMDB0006293	5460
527	CHEBI:16023	NA	NA	NA
528	CHEBI:21288	NA	NA	NA
529	CHEBI:21405	NA	NA	NA
530	CHEBI:23956	NA	NA	NA
531	CHEBI:23958	NA	NA	NA

532	CHEBI:27904	NA	NA	NA
533	CHEBI:27913	NA	NA	NA
534	CHEBI:28587	NA	NA	NA
535	CHEBI:36532	NA	NA	NA
536	CHEBI:86347	NA	NA	NA
537	CHEBI:86348	NA	NA	NA
538	CHEBI:86371	NA	NA	NA
539	CHEBI:86391	NA	NA	NA
540	C00097	NA	NA	NA
541	C00736	NA	NA	NA
542	C00793	NA	NA	NA
543	HMDB0000574	L-Cysteine	HMDB0000574	5862
544	HMDB0003417	D-Cysteine	HMDB0003417	9285
545	CHEBI:15356	NA	NA	NA
546	CHEBI:16375	NA	NA	NA
547	CHEBI:17561	NA	NA	NA
548	CHEBI:35235	NA	NA	NA
549	CHEBI:35236	NA	NA	NA
550	CHEBI:35237	NA	NA	NA
551	C09815	NA	NA	NA
552	HMDB0004461	Benzamide	HMDB0004461	2331
553	HMDB0033131	3-Acetylpyridine	HMDB0033131	9589
554	HMDB0035281	2-Acetylpyridine	HMDB0035281	1428
555	CHEBI:28179	NA	NA	NA
556	CHEBI:42416	NA	NA	NA
557	CHEBI:50520	NA	NA	NA
558	CHEBI:55426	NA	NA	NA
559	C00253	NA	NA	NA
560	C06813	NA	NA	NA
561	C07446	NA	NA	NA
562	C10164	NA	NA	NA
563	HMDB0001488	Nicotinic acid	HMDB0001488	938
564	HMDB0002243	Picolinic acid	HMDB0002243	1018
565	HMDB0031713	2-Hydroxy-4-imino-2,5-cyclohexadienone	HMDB0031713	
566	HMDB0041950	Nitrobenzene	HMDB0041950	7416
567	HMDB0060665	Isonicotinic acid	HMDB0060665	5922
568	CHEBI:15940	NA	NA	NA
569	CHEBI:27798	NA	NA	NA
570	CHEBI:28747	NA	NA	NA
571	CHEBI:6032	NA	NA	NA
572	C05123	NA	NA	NA
573	C19177	NA	NA	NA
574	HMDB0003903	2-Hydroxyethanesulfonate	HMDB0003903	7866
575	HMDB0031233	Ethyl hydrogen sulfate	HMDB0031233	6004
576	CHEBI:11157	NA	NA	NA
577	CHEBI:59050	NA	NA	NA
578	C00178	NA	NA	NA
579	C02835	NA	NA	NA
580	HMDB0000262	Thymine	HMDB0000262	1135
581	HMDB0002024	Imidazoleacetic acid	HMDB0002024	9621
582	HMDB0029736	1H-Imidazole-1-acetic acid	HMDB0029736	6561
583	HMDB0060261	NA	NA	NA
584	CHEBI:16974	NA	NA	NA
585	CHEBI:17821	NA	NA	NA
586	CHEBI:43615	NA	NA	NA
587	CHEBI:69445	NA	NA	NA
588	CHEBI:70801	NA	NA	NA
589	CHEBI:70804	NA	NA	NA
590	CHEBI:70806	NA	NA	NA
591	CHEBI:74732	NA	NA	NA
592	CHEBI:74733	NA	NA	NA
593	CHEBI:74737	NA	NA	NA
594	CHEBI:74738	NA	NA	NA
595	CHEBI:74739	NA	NA	NA
596	CHEBI:74740	NA	NA	NA
597	CHEBI:74741	NA	NA	NA
598	CHEBI:74742	NA	NA	NA
599	CHEBI:74743	NA	NA	NA
600	CHEBI:74745	NA	NA	NA
601	CHEBI:74747	NA	NA	NA
602	C08487	NA	NA	NA
603	C09822	NA	NA	NA
604	C10921	NA	NA	NA
605	C10976	NA	NA	NA
606	C11950	NA	NA	NA
607	C13714	NA	NA	NA
608	C13717	NA	NA	NA
609	HMDB0029165	1,3-Diacetylpropane	HMDB0029165	1005
610	HMDB0029314	Isopentenyl acetate	HMDB0029314	1448
611	HMDB0030330	1-Methoxy-3-methylene-2-pentanone	HMDB0030330	1393
612	HMDB0031174	4-Methyl-5-hexanolide	HMDB0031174	5446
613	HMDB0031342	Cyclohexanecarboxylic acid	HMDB0031342	7413
614	HMDB0031351	Cyclohexyl formate	HMDB0031351	2035
615	HMDB0031476	2,3-Heptanedione	HMDB0031476	6098
616	HMDB0031477	3,4-Heptanedione	HMDB0031477	8367
617	HMDB0031484	2-Heptenoic acid	HMDB0031484	5282
618	HMDB0031500	Methyl 2E-hexenoate	HMDB0031500	5364



619	HMDB0031504	Methyl (Z)-3-hexenoate	HMDB0031504	5362
620	HMDB0031593	5-Methyl-2,3-hexanedione	HMDB0031593	2620
621	HMDB0031603	Ethyl 4-pentenoate	HMDB0031603	7478
622	HMDB0031681	Dihydro-5-propyl-2(3H)-furanone	HMDB0031681	7742
623	HMDB0032391	3-Methyl-3-butenyl acetate	HMDB0032391	7887
624	HMDB0032460	4-Pentenyl acetate	HMDB0032460	7409
625	HMDB0033793	4-Heptenoic acid	HMDB0033793	5312
626	HMDB0038271	2-Hexenyl formate	HMDB0038271	5352
627	HMDB0038962	Ethyl tiglate	HMDB0038962	5281
628	HMDB0039819	2,4-Dimethyl-2-pentenoic acid	HMDB0039819	5362
629	HMDB0040214	cis-3-Hexenyl formate	HMDB0040214	5365
630	HMDB0040591	Allyl butyrate	HMDB0040591	1632
631	HMDB0059876	NA	NA	NA
632	CHEBI:3245	NA	NA	NA
633	CHEBI:36096	NA	NA	NA
634	CHEBI:36152	NA	NA	NA
635	CHEBI:38363	NA	NA	NA
636	CHEBI:38364	NA	NA	NA
637	CHEBI:38365	NA	NA	NA
638	CHEBI:41476	NA	NA	NA
639	CHEBI:663	NA	NA	NA
640	CHEBI:87515	NA	NA	NA
641	C01877	NA	NA	NA
642	C01879	NA	NA	NA
643	C02237	NA	NA	NA
644	C04281	NA	NA	NA
645	C04282	NA	NA	NA
646	HMDB0000267	Pyroglutamic acid	HMDB0000267	7405
647	HMDB0000805	NA	NA	NA
648	HMDB0001369	Pyrroline hydroxy carboxylic acid	HMDB0001369	1055
649	HMDB0001843	N-Acryloylglycine	HMDB0001843	1003
650	HMDB0002234	1-Pyrroline-4-hydroxy-2-carboxylate	HMDB0002234	4402
651	HMDB0060262	NA	NA	NA
652	HMDB0061093	dimethadione	HMDB0061093	3081
653	HMDB0062585	NA	NA	NA
654	CHEBI:16010	NA	NA	NA
655	CHEBI:16352	NA	NA	NA
656	CHEBI:16821	NA	NA	NA
657	CHEBI:16924	NA	NA	NA
658	CHEBI:18183	NA	NA	NA
659	CHEBI:27391	NA	NA	NA
660	CHEBI:29972	NA	NA	NA
661	CHEBI:32483	NA	NA	NA
662	CHEBI:37005	NA	NA	NA
663	CHEBI:37011	NA	NA	NA
664	CHEBI:48096	NA	NA	NA
665	CHEBI:6151	NA	NA	NA
666	CHEBI:77656	NA	NA	NA
667	CHEBI:84813	NA	NA	NA
668	CHEBI:88149	NA	NA	NA
669	CHEBI:90598	NA	NA	NA
670	C00433	NA	NA	NA
671	C00490	NA	NA	NA
672	C01732	NA	NA	NA
673	C02132	NA	NA	NA
674	C02214	NA	NA	NA
675	C02226	NA	NA	NA
676	C02800	NA	NA	NA
677	HMDB0000620	Glutaconic acid	HMDB0000620	5280
678	HMDB0000634	Citraconic acid	HMDB0000634	6437
679	HMDB0000749	Mesaconic acid	HMDB0000749	6381
680	HMDB0001657	NA	NA	NA
681	HMDB0002092	Itaconic acid	HMDB0002092	811
682	HMDB0013233	Gamma-delta-Dioxovaleric acid	HMDB0013233	1194
683	HMDB0033809	Methyl hydrogen fumarate	HMDB0033809	5354
684	HMDB0059743	2-Hydroxyglutaric acid lactone	HMDB0059743	2515
685	HMDB0060365	2,5-Dioxopentanoate	HMDB0060365	523
686	HMDB0061185	NA	NA	NA
687	CHEBI:15670	NA	NA	NA
688	CHEBI:16600	NA	NA	NA
689	CHEBI:17204	NA	NA	NA
690	CHEBI:17415	NA	NA	NA
691	CHEBI:17626	NA	NA	NA
692	CHEBI:2424	NA	NA	NA
693	CHEBI:24309	NA	NA	NA
694	CHEBI:30838	NA	NA	NA
695	CHEBI:30921	NA	NA	NA
696	CHEBI:50429	NA	NA	NA
697	CHEBI:73677	NA	NA	NA
698	CHEBI:74524	NA	NA	NA
699	HMDB0031370	2-[(Methylthio)methyl]-2-butenal	HMDB0031370	5750
700	HMDB0037493	S-2-Propenyl propanethioate	HMDB0037493	6199
701	HMDB0040238	2-Ethylidihydro-3(2H)-thiophenone	HMDB0040238	5304
702	C00233	NA	NA	NA
703	C00671	NA	NA	NA
704	C00902	NA	NA	NA
705	C01012	NA	NA	NA

706	C02122	NA	NA	NA
707	C02129	NA	NA	NA
708	C03241	NA	NA	NA
709	C03465	NA	NA	NA
710	C03467	NA	NA	NA
711	C03500	NA	NA	NA
712	C06008	NA	NA	NA
713	C06102	NA	NA	NA
714	C12314	NA	NA	NA
715	C14530	NA	NA	NA
716	HMDB0000408	2-Methyl-3-ketovaleric acid	HMDB0000408	1890
717	HMDB0000491	3-Methyl-2-oxovaleric acid	HMDB0000491	4392
718	HMDB0000695	Ketoleucine	HMDB0000695	70
719	HMDB0000762	NA	NA	NA
720	HMDB0001864	2-Ketohexanoic acid	HMDB0001864	1596
721	HMDB0001962	NA	NA	NA
722	HMDB0002254	NA	NA	NA
723	HMDB0003736	NA	NA	NA
724	HMDB0004750	NA	NA	NA
725	HMDB0006024	Mevalonolactone	HMDB0006024	5325
726	HMDB0010717	3-Oxohexanoic acid	HMDB0010717	4396
727	HMDB0011647	NA	NA	NA
728	HMDB0012882	Adipate semialdehyde	HMDB0012882	4409
729	HMDB0031214	5-Ethoxy-4,5-dihydro-2(3H)furanone	HMDB0031214	3560
730	HMDB0031216	Ethyl acetoacetate	HMDB0031216	8868
731	HMDB0031218	NA	NA	NA
732	HMDB0033286	Sherry lactone	HMDB0033286	1009
733	HMDB0033302	(4S,6S)-3,4,5,6-Tetrahydro-4-hydroxy-6-methyl-2H-pyran-2-one	HMDB0033302	2410
734	HMDB0033698	Acetoin acetate	HMDB0033698	5212
735	HMDB0041602	Methyl levulinate	HMDB0041602	6935
736	HMDB0061881	4-Acetylbutyrate	HMDB0061881	1840
737	CHEBI:15614	NA	NA	NA
738	CHEBI:15888	NA	NA	NA
739	CHEBI:16719	NA	NA	NA
740	CHEBI:17075	NA	NA	NA
741	CHEBI:17308	NA	NA	NA
742	CHEBI:2490	NA	NA	NA
743	CHEBI:28379	NA	NA	NA
744	CHEBI:28422	NA	NA	NA
745	CHEBI:29024	NA	NA	NA
746	CHEBI:31046	NA	NA	NA
747	CHEBI:34288	NA	NA	NA
748	CHEBI:35932	NA	NA	NA
749	CHEBI:48430	NA	NA	NA
750	CHEBI:49293	NA	NA	NA
751	CHEBI:86365	NA	NA	NA
752	CHEBI:87282	NA	NA	NA
753	CHEBI:87296	NA	NA	NA
754	CHEBI:87307	NA	NA	NA
755	CHEBI:87390	NA	NA	NA
756	C10140	NA	NA	NA
757	C19780	NA	NA	NA
758	C19783	NA	NA	NA
759	HMDB0029396	L-cis-3-Amino-2-pyrrolidinecarboxylic acid	HMDB0029396	2199
760	HMDB0030405	D-1-Amino-2-pyrrolidinecarboxylic acid	HMDB0030405	2730
761	CHEBI:41221	NA	NA	NA
762	CHEBI:55357	NA	NA	NA
763	CHEBI:55392	NA	NA	NA
764	CHEBI:58917	NA	NA	NA
765	CHEBI:58920	NA	NA	NA
766	CHEBI:64722	NA	NA	NA
767	CHEBI:74101	NA	NA	NA
768	C00430	NA	NA	NA
769	C01015	NA	NA	NA
770	C01073	NA	NA	NA
771	C01110	NA	NA	NA
772	C01157	NA	NA	NA
773	C01165	NA	NA	NA
774	C03341	NA	NA	NA
775	C03440	NA	NA	NA
776	C03651	NA	NA	NA
777	C03741	NA	NA	NA
778	C04397	NA	NA	NA
779	C05147	NA	NA	NA
780	C19706	NA	NA	NA
781	HMDB0000725	4-Hydroxyproline	HMDB0000725	5810
782	HMDB0000766	N-Acetyl-L-alanine	HMDB0000766	8806
783	HMDB0000783	Propionylglycine	HMDB0000783	9868
784	HMDB0001149	5-Aminolevulinic acid	HMDB0001149	137
785	HMDB0002104	L-Glutamic gamma-semialdehyde	HMDB0002104	1933
786	HMDB0002113	3-Hydroxy-L-proline	HMDB0002113	1113
787	HMDB0006055	NA	NA	NA
788	HMDB0006272	5-Amino-2-oxopentanoic acid	HMDB0006272	4394
789	HMDB0036576	NA	NA	NA
790	HMDB0059659	Trans-3-hydroxy-L-proline	HMDB0059659	4405
791	HMDB0060460	cis-4-Hydroxy-D-proline	HMDB0060460	4400
792	HMDB0061880	N-Acetyl-beta-alanine	HMDB0061880	7640

793	HMDB0240251	NA	NA	NA
794	CHEBI:15757	NA	NA	NA
795	CHEBI:15914	NA	NA	NA
796	CHEBI:16231	NA	NA	NA
797	CHEBI:16682	NA	NA	NA
798	CHEBI:16889	NA	NA	NA
799	CHEBI:17232	NA	NA	NA
800	CHEBI:17549	NA	NA	NA
801	CHEBI:18095	NA	NA	NA
802	CHEBI:18240	NA	NA	NA
803	CHEBI:20056	NA	NA	NA
804	CHEBI:20392	NA	NA	NA
805	CHEBI:24326	NA	NA	NA
806	CHEBI:28397	NA	NA	NA
807	CHEBI:356416	NA	NA	NA
808	CHEBI:40719	NA	NA	NA
809	CHEBI:40992	NA	NA	NA
810	CHEBI:49268	NA	NA	NA
811	CHEBI:55479	NA	NA	NA
812	CHEBI:57501	NA	NA	NA
813	CHEBI:57563	NA	NA	NA
814	CHEBI:57690	NA	NA	NA
815	CHEBI:57938	NA	NA	NA
816	CHEBI:58066	NA	NA	NA
817	CHEBI:58375	NA	NA	NA
818	CHEBI:58419	NA	NA	NA
819	CHEBI:58802	NA	NA	NA
820	CHEBI:60041	NA	NA	NA
821	CHEBI:63137	NA	NA	NA
822	CHEBI:63727	NA	NA	NA
823	CHEBI:64368	NA	NA	NA
824	CHEBI:70756	NA	NA	NA
825	CHEBI:87840	NA	NA	NA
826	CHEBI:88157	NA	NA	NA
827	CHEBI:89836	NA	NA	NA
828	C00123	NA	NA	NA
829	C00407	NA	NA	NA
830	C01570	NA	NA	NA
831	C01933	NA	NA	NA
832	C02378	NA	NA	NA
833	C02486	NA	NA	NA
834	C06418	NA	NA	NA
835	C08263	NA	NA	NA
836	C16434	NA	NA	NA
837	C16439	NA	NA	NA
838	C16647	NA	NA	NA
839	HMDB0000172	Isoleucine	HMDB0000172	6306
840	HMDB0000557	L-Alloisoleucine	HMDB0000557	9928
841	HMDB0000687	Leucine	HMDB0000687	6106
842	HMDB0001645	L-Norleucine	HMDB0001645	2123
843	HMDB0001901	Aminocaproic acid	HMDB0001901	564
844	HMDB0002002	NA	NA	NA
845	HMDB0002291	NA	NA	NA
846	HMDB0003640	Beta-Leucine	HMDB0003640	4397
847	HMDB0013773	D-Leucine	HMDB0013773	4395
848	HMDB0029168	3-Aminocaproic acid	HMDB0029168	5275
849	HMDB0033923	(±)-erythro-Isoleucine	HMDB0033923	791
850	HMDB0036382	6-Deoxyfagomine	HMDB0036382	5744
851	HMDB0060650	N-(2-Hydroxyethyl)-morpholine	HMDB0060650	6116
852	HMDB0061716	NA	NA	NA
853	HMDB0062203	NA	NA	NA
854	CHEBI:15603	NA	NA	NA
855	CHEBI:15604	NA	NA	NA
856	CHEBI:16586	NA	NA	NA
857	CHEBI:17191	NA	NA	NA
858	CHEBI:18347	NA	NA	NA
859	CHEBI:20899	NA	NA	NA
860	CHEBI:25017	NA	NA	NA
861	CHEBI:27730	NA	NA	NA
862	CHEBI:28225	NA	NA	NA
863	CHEBI:28825	NA	NA	NA
864	CHEBI:36405	NA	NA	NA
865	CHEBI:38264	NA	NA	NA
866	CHEBI:42101	NA	NA	NA
867	CHEBI:43433	NA	NA	NA
868	CHEBI:44212	NA	NA	NA
869	CHEBI:57427	NA	NA	NA
870	CHEBI:57428	NA	NA	NA
871	CHEBI:57826	NA	NA	NA
872	CHEBI:58045	NA	NA	NA
873	CHEBI:58455	NA	NA	NA
874	CHEBI:64348	NA	NA	NA
875	CHEBI:67144	NA	NA	NA
876	CHEBI:72770	NA	NA	NA
877	CHEBI:72772	NA	NA	NA
878	CHEBI:85304	NA	NA	NA
879	CHEBI:85306	NA	NA	NA

880	CHEBI:85338	NA	NA	NA
881	CHEBI:86261	NA	NA	NA
882	C00489	NA	NA	NA
883	C00900	NA	NA	NA
884	C02674	NA	NA	NA
885	C03589	NA	NA	NA
886	C04106	NA	NA	NA
887	C04181	NA	NA	NA
888	C06010	NA	NA	NA
889	C08645	NA	NA	NA
890	C11838	NA	NA	NA
891	HMDB0000576	Monoethyl malonic acid	HMDB0000576	7061
892	HMDB0000622	Ethylmalonic acid	HMDB0000622	1175
893	HMDB0000661	Glutaric acid	HMDB0000661	743
894	HMDB0001844	Methylsuccinic acid	HMDB0001844	6950
895	HMDB0002001	Dimethylmalonic acid	HMDB0002001	1168
896	HMDB0006833	2-Acetolactate	HMDB0006833	22
897	HMDB0006855	(S)-2-Acetolactate	HMDB0006855	4408
898	HMDB0029884	2-C-Methyl-1,4-erythrono-D-lactone	HMDB0029884	1146
899	HMDB0033958	2-Deoxy-L-ribo-1,4-lactone	HMDB0033958	4635
900	HMDB0040531	2-Hydroxy-4-oxopentanoic acid	HMDB0040531	1010
901	HMDB0061879	(S)-Methylbutanethioic acid	HMDB0061879	8720
902	CHEBI:111517	NA	NA	NA
903	CHEBI:16444	NA	NA	NA
904	CHEBI:17281	NA	NA	NA
905	CHEBI:17413	NA	NA	NA
906	CHEBI:17655	NA	NA	NA
907	CHEBI:17667	NA	NA	NA
908	CHEBI:17859	NA	NA	NA
909	CHEBI:18409	NA	NA	NA
910	CHEBI:29484	NA	NA	NA
911	CHEBI:58751	NA	NA	NA
912	CHEBI:71316	NA	NA	NA
913	CHEBI:73148	NA	NA	NA
914	CHEBI:741548	NA	NA	NA
915	CHEBI:75146	NA	NA	NA
916	CHEBI:91315	NA	NA	NA
917	CHEBI:91316	NA	NA	NA
918	CHEBI:91317	NA	NA	NA
919	C00152	NA	NA	NA
920	C01043	NA	NA	NA
921	C01905	NA	NA	NA
922	C02037	NA	NA	NA
923	C02642	NA	NA	NA
924	C16438	NA	NA	NA
925	C19258	NA	NA	NA
926	C19301	NA	NA	NA
927	HMDB0000026	Ureidopropionic acid	HMDB0000026	111
928	HMDB0000168	L-Asparagine	HMDB0000168	6267
929	HMDB0011733	Glycyl-glycine	HMDB0011733	1116
930	HMDB0012265	N-Carbamoylsarcosine	HMDB0012265	4393
931	HMDB0033780	D-Asparagine	HMDB0033780	4396
932	HMDB0062812	NA	NA	NA
933	CHEBI:11892	NA	NA	NA
934	CHEBI:15737	NA	NA	NA
935	CHEBI:17196	NA	NA	NA
936	CHEBI:17201	NA	NA	NA
937	CHEBI:18261	NA	NA	NA
938	CHEBI:21248	NA	NA	NA
939	CHEBI:22653	NA	NA	NA
940	CHEBI:28159	NA	NA	NA
941	CHEBI:356445	NA	NA	NA
942	CHEBI:49010	NA	NA	NA
943	CHEBI:49011	NA	NA	NA
944	CHEBI:58048	NA	NA	NA
945	CHEBI:74337	NA	NA	NA
946	C03264	NA	NA	NA
947	C03499	NA	NA	NA
948	C06103	NA	NA	NA
949	C07834	NA	NA	NA
950	HMDB0000317	2-Hydroxy-3-methylpentanoic acid	HMDB0000317	1079
951	HMDB0000409	(5R)-5-Hydroxyhexanoic acid	HMDB0000409	7131
952	HMDB0000525	5-Hydroxyhexanoic acid	HMDB0000525	1707
953	HMDB0000624	D-Leucic acid	HMDB0000624	4399
954	HMDB0000665	Leucinic acid	HMDB0000665	9277
955	HMDB0000746	Hydroxyisocaproic acid	HMDB0000746	8369
956	HMDB0001624	2-Hydroxycaproic acid	HMDB0001624	9982
957	HMDB0001975	2-Ethyl-2-Hydroxybutyric acid	HMDB0001975	7719
958	HMDB0010718	(R)-3-Hydroxyhexanoic acid	HMDB0010718	1019
959	HMDB0012843	6-Hydroxyhexanoic acid	HMDB0012843	1449
960	HMDB0029166	2-Methyl-3-hydroxyvaleric acid	HMDB0029166	1522
961	HMDB0032158	(+/-)-1-Acetoxy-1-ethoxyethane	HMDB0032158	9789
962	HMDB0032456	Paraldehyde	HMDB0032456	3126
963	HMDB0033851	4,4-Dimethoxy-2-butanone	HMDB0033851	2285
964	HMDB0040409	Ethyl (±)-3-hydroxybutyrate	HMDB0040409	6257
965	HMDB0041844	NA	NA	NA
966	HMDB0059770	Threo-3-Hydroxy-2-methylbutyric acid	HMDB0059770	6422

967	HMDB0061652	3-Hydroxyhexanoic acid	HMDB0061652	1182
968	CHEBI:131434	NA	NA	NA
969	CHEBI:17869	NA	NA	NA
970	CHEBI:27909	NA	NA	NA
971	CHEBI:28707	NA	NA	NA
972	CHEBI:30941	NA	NA	NA
973	CHEBI:32400	NA	NA	NA
974	CHEBI:32485	NA	NA	NA
975	CHEBI:37035	NA	NA	NA
976	CHEBI:37049	NA	NA	NA
977	CHEBI:37553	NA	NA	NA
978	CHEBI:44510	NA	NA	NA
979	CHEBI:55434	NA	NA	NA
980	CHEBI:55534	NA	NA	NA
981	CHEBI:55536	NA	NA	NA
982	CHEBI:59783	NA	NA	NA
983	CHEBI:78842	NA	NA	NA
984	CHEBI:86542	NA	NA	NA
985	CHEBI:87685	NA	NA	NA
986	CHEBI:89228	NA	NA	NA
987	C00077	NA	NA	NA
988	C00515	NA	NA	NA
989	C01602	NA	NA	NA
990	C03943	NA	NA	NA
991	C11320	NA	NA	NA
992	HMDB0000214	Ornithine	HMDB0000214	6262
993	HMDB0000818	NA	NA	NA
994	HMDB0003374	D-Ornithine	HMDB0003374	7108
995	HMDB0004984	NA	NA	NA
996	CHEBI:15729	NA	NA	NA
997	CHEBI:16176	NA	NA	NA
998	CHEBI:18257	NA	NA	NA
999	CHEBI:25234	NA	NA	NA
1000	CHEBI:4280	NA	NA	NA
1001	CHEBI:74403	NA	NA	NA
1002	CHEBI:88163	NA	NA	NA
1003	CHEBI:904	NA	NA	NA
1004	C20313	NA	NA	NA
1005	HMDB0031658	L-2-Amino-5-hydroxypentanoic acid	HMDB0031658	9556
1006	HMDB0032356	N-Lactoyl ethanolamine	HMDB0032356	9545
1007	HMDB0039499	1,4-Dideoxy-1,4-imino-D-ribitol	HMDB0039499	1335
1008	CHEBI:61138	NA	NA	NA
1009	CHEBI:74112	NA	NA	NA
1010	C00149	NA	NA	NA
1011	C00497	NA	NA	NA
1012	C00711	NA	NA	NA
1013	C03064	NA	NA	NA
1014	C03668	NA	NA	NA
1015	HMDB0000156	Malic acid	HMDB0000156	2226
1016	HMDB0000744	NA	NA	NA
1017	HMDB0031518	D-Malic acid	HMDB0031518	9282
1018	HMDB0032872	Velcorin	HMDB0032872	3086
1019	CHEBI:16943	NA	NA	NA
1020	CHEBI:30796	NA	NA	NA
1021	CHEBI:30797	NA	NA	NA
1022	CHEBI:6650	NA	NA	NA
1023	C09921	NA	NA	NA
1024	HMDB0032469	Phthalide	HMDB0032469	6885
1025	HMDB0061916	Phenylglyoxal	HMDB0061916	1409
1026	HMDB0129378	NA	NA	NA
1027	CHEBI:38085	NA	NA	NA
1028	CHEBI:70851	NA	NA	NA
1029	C01801	NA	NA	NA
1030	C02783	NA	NA	NA
1031	C04039	NA	NA	NA
1032	C04272	NA	NA	NA
1033	C06257	NA	NA	NA
1034	C08347	NA	NA	NA
1035	HMDB0000421	2,3-Dihydroxyvaleric acid	HMDB0000421	2084
1036	HMDB0001292	1-Deoxy-D-xylulose	HMDB0001292	1244
1037	HMDB0003224	Deoxyribose	HMDB0003224	2283
1038	HMDB0012141	(R)-2,3-Dihydroxy-isovalerate	HMDB0012141	4402
1039	HMDB0012485	(R)-glycerol 1-acetate	HMDB0012485	6993
1040	HMDB0029576	2,3-Dihydroxy-2-methylbutanoic acid	HMDB0029576	3019
1041	HMDB0127615	NA	NA	NA
1042	CHEBI:15684	NA	NA	NA
1043	CHEBI:15689	NA	NA	NA
1044	CHEBI:27806	NA	NA	NA
1045	CHEBI:27816	NA	NA	NA
1046	CHEBI:28354	NA	NA	NA
1047	CHEBI:28816	NA	NA	NA
1048	CHEBI:62012	NA	NA	NA
1049	C02505	NA	NA	NA
1050	C07565	NA	NA	NA
1051	C15561	NA	NA	NA
1052	C16075	NA	NA	NA
1053	C19714	NA	NA	NA

1054	HMDB0001250	N-Acety lary lamine	HMDB0001250	904
1055	HMDB0010715	2-Phenylacetamide	HMDB0010715	7680
1056	HMDB0032628	2-Aminoacetophenone	HMDB0032628	1195
1057	HMDB0032630	2'-Aminoacetophenone	HMDB0032630	1108
1058	HMDB0037071	2-Acetyl-4-methylpyridine	HMDB0037071	5647
1059	HMDB0037072	2-Acetyl-6-methylpyridine	HMDB0037072	1388
1060	HMDB0040008	2,3-Dihydro-1H-pyrrolizine-5-carboxaldehyde	HMDB0040008	6428
1061	HMDB0040013	5-(2-Furanyl)-3,4-dihydro-2H-pyrrole	HMDB0040013	1674
1062	HMDB0040222	2-Acetyl-5-methylpyridine	HMDB0040222	1306
1063	HMDB0040223	4-Acetyl-2-methylpyridine	HMDB0040223	2070
1064	HMDB0040224	4-Acetyl-3-methylpyridine	HMDB0040224	1486
1065	CHEBI:16562	NA	NA	NA
1066	CHEBI:28884	NA	NA	NA
1067	CHEBI:41117	NA	NA	NA
1068	CHEBI:47791	NA	NA	NA
1069	CHEBI:47793	NA	NA	NA
1070	CHEBI:50723	NA	NA	NA
1071	CHEBI:52478	NA	NA	NA
1072	C01620	NA	NA	NA
1073	HMDB0000613	Erythronic acid	HMDB0000613	2781
1074	HMDB0000943	Threononic acid	HMDB0000943	5460
1075	HMDB0062620	NA	NA	NA
1076	CHEBI:15908	NA	NA	NA
1077	CHEBI:37655	NA	NA	NA
1078	CHEBI:49058	NA	NA	NA
1079	CHEBI:49059	NA	NA	NA
1080	CHEBI:49060	NA	NA	NA
1081	CHEBI:73967	NA	NA	NA
1082	HMDB0031160	1-Pentanesulfenothioic acid	HMDB0031160	2125
1083	HMDB0033053	Ethyl propyl disulfide	HMDB0033053	3534
1084	HMDB0033054	Ethyl isopropyl disulfide	HMDB0033054	5214
1085	C17512	NA	NA	NA
1086	HMDB00003152	N-Methylnicotinamide	HMDB00003152	6495
1087	HMDB0030001	2-Acetyl-3-methylpyrazine	HMDB0030001	3209
1088	HMDB0033947	2-Aminobenzamide	HMDB0033947	6942
1089	HMDB0037819	4-Acetyl-2-methylpyrimidine	HMDB0037819	5362
1090	HMDB0059711	NA	NA	NA
1091	HMDB0062267	NA	NA	NA
1092	HMDB0062268	NA	NA	NA
1093	CHEBI:38454	NA	NA	NA
1094	CHEBI:64042	NA	NA	NA
1095	CHEBI:64399	NA	NA	NA
1096	CHEBI:68440	NA	NA	NA
1097	CHEBI:83354	NA	NA	NA
1098	C00483	NA	NA	NA
1099	C01183	NA	NA	NA
1100	C02735	NA	NA	NA
1101	C03473	NA	NA	NA
1102	C16570	NA	NA	NA
1103	C18396	NA	NA	NA
1104	C19216	NA	NA	NA
1105	C19376	NA	NA	NA
1106	HMDB0000306	Tyramine	HMDB0000306	5610
1107	HMDB0001065	2-Hydroxyphenethylamine	HMDB0001065	1000
1108	HMDB0001466	Dimethylaniline-N-oxide	HMDB0001466	950
1109	HMDB0004989	m-Tyramine	HMDB0004989	1149
1110	HMDB0029759	2-Acetyl-1-ethylpyrrole	HMDB0029759	6198
1111	HMDB0039657	1,2,3,4,5,6-Hexahydro-7H-cyclopenta[b]pyridin-7-one	HMDB0039657	6428
1112	HMDB0040059	(±)-2-(2-Furanyl)pyrrolidine	HMDB0040059	3675
1113	HMDB0060681	4-Hydroxy-2,6-dimethylaniline	HMDB0060681	7654
1114	CHEBI:15760	NA	NA	NA
1115	CHEBI:16343	NA	NA	NA
1116	CHEBI:17735	NA	NA	NA
1117	CHEBI:341165	NA	NA	NA
1118	CHEBI:49837	NA	NA	NA
1119	CHEBI:55545	NA	NA	NA
1120	CHEBI:85505	NA	NA	NA
1121	C17357	NA	NA	NA
1122	HMDB0000894	Vinylacetylglycine	HMDB0000894	5347
1123	HMDB0006723	NA	NA	NA
1124	HMDB0006724	NA	NA	NA
1125	HMDB0014491	Trimethadione	HMDB0014491	5576
1126	HMDB0061082	5-ethyl-5-methyl-2,4-oxazolidinedione	HMDB0061082	2325
1127	HMDB0061705	6-Oxopiperidine-2-carboxylic acid	HMDB0061705	3014
1128	CHEBI:131804	NA	NA	NA
1129	CHEBI:74435	NA	NA	NA
1130	CHEBI:82795	NA	NA	NA
1131	CHEBI:87998	NA	NA	NA
1132	C04114	NA	NA	NA
1133	C10172	NA	NA	NA
1134	HMDB0004827	Proline betaine	HMDB0004827	1152
1135	HMDB0030410	L-2-Amino-3-methylenehexanoic acid	HMDB0030410	7622
1136	HMDB0038949	3beta,6beta-Dihydroxynortropane	HMDB0038949	2229
1137	CHEBI:11946	NA	NA	NA
1138	CHEBI:17237	NA	NA	NA
1139	CHEBI:35280	NA	NA	NA
1140	CHEBI:86534	NA	NA	NA

1141	C11713	NA	NA	NA
1142	C11714	NA	NA	NA
1143	C14786	NA	NA	NA
1144	C14787	NA	NA	NA
1145	HMDB0006215	Naphthalene epoxide	HMDB0006215	1080
1146	HMDB0012138	1-Naphthol	HMDB0012138	7005
1147	HMDB0012322	2-Naphthol	HMDB0012322	8663
1148	HMDB0031001	(Z)-2-Decene-4,6,8-trien-1-ol	HMDB0031001	6365
1149	HMDB0060301	(1S,2R)-Naphthalene 1,2-oxide	HMDB0060301	1109
1150	CHEBI:10319	NA	NA	NA
1151	CHEBI:10432	NA	NA	NA
1152	CHEBI:33998	NA	NA	NA
1153	CHEBI:34001	NA	NA	NA
1154	CHEBI:51731	NA	NA	NA
1155	CHEBI:52431	NA	NA	NA
1156	C06423	NA	NA	NA
1157	C07185	NA	NA	NA
1158	HMDB0000482	Caprylic acid	HMDB0000482	379
1159	HMDB0001877	Valproic acid	HMDB0001877	3121
1160	HMDB0029980	Hexyl acetate	HMDB0029980	8908
1161	HMDB0030368	(3R,5Z)-5-Octene-1,3-diol	HMDB0030368	2115
1162	HMDB0031230	2-Ethylhexanoic acid	HMDB0031230	8697
1163	HMDB0031290	1-Hydroxy-3-octanone	HMDB0031290	1386
1164	HMDB0031478	Methyl heptanoate	HMDB0031478	7826
1165	HMDB0031579	Ethyl (±)-2-methylpentanoate	HMDB0031579	6290
1166	HMDB0031587	2-Methylheptanoic acid	HMDB0031587	1447
1167	HMDB0031588	6-Methylheptanoic acid	HMDB0031588	9071
1168	HMDB0031596	Methyl 5-methylhexanoate	HMDB0031596	5198
1169	HMDB0031638	Pentyl propanoate	HMDB0031638	1221
1170	HMDB0031703	2-Ethylbutyl acetate	HMDB0031703	6144
1171	HMDB0032046	Isopropyl 3-methylbutanoate	HMDB0032046	6191
1172	HMDB0032047	Propyl 3-methylbutanoate	HMDB0032047	1117
1173	HMDB0032203	cis- and trans-2-Isobutyl-4-methyl-1,3-dioxolane	HMDB0032203	8673
1174	HMDB0032225	1,1-Dimethoxy-trans-2-hexene	HMDB0032225	6436
1175	HMDB0032272	Ethyl 4-methylpentanoate	HMDB0032272	1174
1176	HMDB0032335	3-Hydroxy-2-octanone	HMDB0032335	6428
1177	HMDB0032551	Valeraldehyde propyleneglycol acetal	HMDB0032551	1562
1178	HMDB0034161	2-Methylpropyl butanoate	HMDB0034161	1088
1179	HMDB0034164	3-Methylbutyl propanoate	HMDB0034164	7772
1180	HMDB0034234	Ethyl (±)-3-methylpentanoate	HMDB0034234	5602
1181	HMDB0034459	Heptyl formate	HMDB0034459	8169
1182	HMDB0035457	(±)-5-Hydroxy-4-octanone	HMDB0035457	2197
1183	HMDB0036165	3-(Hydroxymethyl)-2-heptanone	HMDB0036165	5362
1184	HMDB0039217	Isopropyl 2-methylbutanoate	HMDB0039217	5222
1185	HMDB0039620	Butyl butyrate	HMDB0039620	7983
1186	HMDB0040209	Ethyl hexanoate	HMDB0040209	3126
1187	HMDB0040251	Butyl isobutyrate	HMDB0040251	7353
1188	HMDB0040252	Isobutyl isobutyrate	HMDB0040252	7351
1189	HMDB0040296	Propyl pentanoate	HMDB0040296	6732
1190	HMDB0040298	Ethyl 2-ethylbutanoate	HMDB0040298	7632
1191	HMDB0061931	Tetrahydro-2,5-dimethyl-2H-pyranmethanol	HMDB0061931	9803
1192	HMDB0062511	NA	NA	NA
1193	HMDB0062546	NA	NA	NA
1194	CHEBI:25646	NA	NA	NA
1195	CHEBI:28837	NA	NA	NA
1196	CHEBI:39867	NA	NA	NA
1197	CHEBI:744024	NA	NA	NA
1198	CHEBI:86055	NA	NA	NA
1199	CHEBI:87318	NA	NA	NA
1200	CHEBI:87373	NA	NA	NA
1201	CHEBI:87419	NA	NA	NA
1202	CHEBI:87429	NA	NA	NA
1203	CHEBI:87510	NA	NA	NA
1204	CHEBI:87683	NA	NA	NA
1205	CHEBI:88826	NA	NA	NA
1206	HMDB0002284	N-Acetyl cadaverine	HMDB0002284	1890
1207	HMDB0012135	1-(3-Aminopropyl)-4-aminobutanal	HMDB0012135	1991
1208	CHEBI:51824	NA	NA	NA
1209	CHEBI:86554	NA	NA	NA
1210	C00940	NA	NA	NA
1211	C05572	NA	NA	NA
1212	HMDB0001552	2-Keto-glutaramic acid	HMDB0001552	48
1213	CHEBI:16378	NA	NA	NA
1214	CHEBI:29987	NA	NA	NA
1215	CHEBI:29988	NA	NA	NA
1216	CHEBI:29989	NA	NA	NA
1217	CHEBI:30882	NA	NA	NA
1218	CHEBI:30883	NA	NA	NA
1219	C02796	NA	NA	NA
1220	C06324	NA	NA	NA
1221	C06338	NA	NA	NA
1222	C06343	NA	NA	NA
1223	C06415	NA	NA	NA
1224	C08493	NA	NA	NA
1225	C19434	NA	NA	NA
1226	HMDB0029737	Indole-3-carboxaldehyde	HMDB0029737	1025
1227	CHEBI:15815	NA	NA	NA

1228	CHEBI:16365	NA	NA	NA
1229	CHEBI:17920	NA	NA	NA
1230	CHEBI:18289	NA	NA	NA
1231	CHEBI:18350	NA	NA	NA
1232	CHEBI:343043	NA	NA	NA
1233	CHEBI:48980	NA	NA	NA
1234	CHEBI:48981	NA	NA	NA
1235	CHEBI:48993	NA	NA	NA
1236	CHEBI:48994	NA	NA	NA
1237	CHEBI:51855	NA	NA	NA
1238	CHEBI:59833	NA	NA	NA
1239	C01475	NA	NA	NA
1240	C02946	NA	NA	NA
1241	C03239	NA	NA	NA
1242	C03656	NA	NA	NA
1243	C04076	NA	NA	NA
1244	C05825	NA	NA	NA
1245	HMDB0000730	Isobutyrylglycine	HMDB0000730	1085
1246	HMDB0000808	N-Butyrylglycine	HMDB0000808	8841
1247	HMDB0001263	Allysine	HMDB0001263	1606
1248	HMDB0003681	4-Acetamidobutanoic acid	HMDB0003681	1818
1249	HMDB0006238	NA	NA	NA
1250	HMDB0012131	(S)-5-Amino-3-oxohexanoate	HMDB0012131	4400
1251	HMDB0012151	2-Keto-6-aminocaproate	HMDB0012151	4399
1252	HMDB0015127	Methyl aminolevulinate	HMDB0015127	1579
1253	HMDB0029425	L-cis-4-(Hydroxymethyl)-2-pyrrolidinecarboxylic acid	HMDB0029425	5318
1254	HMDB0029426	L-trans-5-Hydroxy-2-piperidinecarboxylic acid	HMDB0029426	1517
1255	HMDB0059595	NA	NA	NA
1256	HMDB0060265	NA	NA	NA
1257	HMDB0061156	N-(2-Carboxymethyl)-morpholine	HMDB0061156	4389
1258	HMDB0094698	N-Propionylalanine	HMDB0094698	2278
1259	CHEBI:17027	NA	NA	NA
1260	CHEBI:17534	NA	NA	NA
1261	CHEBI:17645	NA	NA	NA
1262	CHEBI:17917	NA	NA	NA
1263	CHEBI:19450	NA	NA	NA
1264	CHEBI:27713	NA	NA	NA
1265	CHEBI:43739	NA	NA	NA
1266	CHEBI:57988	NA	NA	NA
1267	CHEBI:58183	NA	NA	NA
1268	CHEBI:58321	NA	NA	NA
1269	CHEBI:58523	NA	NA	NA
1270	CHEBI:59042	NA	NA	NA
1271	CHEBI:70979	NA	NA	NA
1272	CHEBI:724125	NA	NA	NA
1273	CHEBI:74048	NA	NA	NA
1274	CHEBI:89963	NA	NA	NA
1275	C00026	NA	NA	NA
1276	C03716	NA	NA	NA
1277	C05406	NA	NA	NA
1278	C06030	NA	NA	NA
1279	C06316	NA	NA	NA
1280	HMDB0000208	Oxoglutaric acid	HMDB0000208	51
1281	HMDB0002812	NA	NA	NA
1282	HMDB0013701	3-Oxoglutaric acid	HMDB0013701	6832
1283	CHEBI:11596	NA	NA	NA
1284	CHEBI:13997	NA	NA	NA
1285	CHEBI:15801	NA	NA	NA
1286	CHEBI:16782	NA	NA	NA
1287	CHEBI:16859	NA	NA	NA
1288	CHEBI:17803	NA	NA	NA
1289	CHEBI:28679	NA	NA	NA
1290	CHEBI:30915	NA	NA	NA
1291	CHEBI:30934	NA	NA	NA
1292	CHEBI:30936	NA	NA	NA
1293	CHEBI:50793	NA	NA	NA
1294	CHEBI:50794	NA	NA	NA
1295	CHEBI:58511	NA	NA	NA
1296	CHEBI:6885	NA	NA	NA
1297	CHEBI:87810	NA	NA	NA
1298	C00659	NA	NA	NA
1299	C00772	NA	NA	NA
1300	C00966	NA	NA	NA
1301	C01053	NA	NA	NA
1302	C04237	NA	NA	NA
1303	C06006	NA	NA	NA
1304	C06104	NA	NA	NA
1305	C06762	NA	NA	NA
1306	C13811	NA	NA	NA
1307	C14463	NA	NA	NA
1308	C16272	NA	NA	NA
1309	HMDB0000422	2-Methylglutaric acid	HMDB0000422	1204
1310	HMDB0000448	Adipic acid	HMDB0000448	196
1311	HMDB0000752	Methylglutaric acid	HMDB0000752	1228
1312	HMDB0000858	Monomethyl glutaric acid	HMDB0000858	7391
1313	HMDB0002074	2,2-Dimethylsuccinic acid	HMDB0002074	1170
1314	HMDB0002173	Solero1	HMDB0002173	2125



1315	HMDB0004862	NA	NA	NA
1316	HMDB0006854	NA	NA	NA
1317	HMDB0006900	(S)-2-Aceto-2-hydroxybutanoic acid	HMDB0006900	4408
1318	HMDB0033837	Dimethyl succinate	HMDB0033837	7820
1319	HMDB0061930	4-Ethoxy-4-oxobutanoic acid	HMDB0061930	7061
1320	CHEBI:16654	NA	NA	NA
1321	CHEBI:17094	NA	NA	NA
1322	CHEBI:17646	NA	NA	NA
1323	CHEBI:27530	NA	NA	NA
1324	CHEBI:27681	NA	NA	NA
1325	CHEBI:28028	NA	NA	NA
1326	CHEBI:28710	NA	NA	NA
1327	CHEBI:30832	NA	NA	NA
1328	CHEBI:34008	NA	NA	NA
1329	CHEBI:37032	NA	NA	NA
1330	CHEBI:53335	NA	NA	NA
1331	CHEBI:63139	NA	NA	NA
1332	CHEBI:67218	NA	NA	NA
1333	CHEBI:67221	NA	NA	NA
1334	CHEBI:67224	NA	NA	NA
1335	CHEBI:67226	NA	NA	NA
1336	CHEBI:68566	NA	NA	NA
1337	CHEBI:68567	NA	NA	NA
1338	CHEBI:73151	NA	NA	NA
1339	CHEBI:86396	NA	NA	NA
1340	CHEBI:86537	NA	NA	NA
1341	CHEBI:87268	NA	NA	NA
1342	CHEBI:89760	NA	NA	NA
1343	C00025	NA	NA	NA
1344	C00217	NA	NA	NA
1345	C00302	NA	NA	NA
1346	C00979	NA	NA	NA
1347	C03618	NA	NA	NA
1348	C03790	NA	NA	NA
1349	C05574	NA	NA	NA
1350	C05938	NA	NA	NA
1351	C05941	NA	NA	NA
1352	C12269	NA	NA	NA
1353	HMDB0000148	Glutamic acid	HMDB0000148	3303
1354	HMDB0002393	N-Methyl-D-aspartic acid	HMDB0002393	2288
1355	HMDB0002931	N-Acetylserine	HMDB0002931	6524
1356	HMDB0003011	O-Acetylserine	HMDB0003011	9947
1357	HMDB0003339	D-Glutamic acid	HMDB0003339	2332
1358	HMDB0006556	L-4-Hydroxyglutamate semialdehyde	HMDB0006556	4408
1359	HMDB0033550	3-(Carboxymethylamino)propanoic acid	HMDB0033550	2816
1360	HMDB0060475	DL-Glutamate	HMDB0060475	611
1361	HMDB0062183	NA	NA	NA
1362	CHEBI:15966	NA	NA	NA
1363	CHEBI:16015	NA	NA	NA
1364	CHEBI:16439	NA	NA	NA
1365	CHEBI:17981	NA	NA	NA
1366	CHEBI:18237	NA	NA	NA
1367	CHEBI:27041	NA	NA	NA
1368	CHEBI:27809	NA	NA	NA
1369	CHEBI:28791	NA	NA	NA
1370	CHEBI:31882	NA	NA	NA
1371	CHEBI:45441	NA	NA	NA
1372	CHEBI:47980	NA	NA	NA
1373	CHEBI:58340	NA	NA	NA
1374	CHEBI:62637	NA	NA	NA
1375	CHEBI:76051	NA	NA	NA
1376	C10144	NA	NA	NA
1377	C20310	NA	NA	NA
1378	C20802	NA	NA	NA
1379	HMDB0029449	(2R,3R,4R)-2-Amino-4-hydroxy-3-methylpentanoic acid	HMDB0029449	3541
1380	HMDB0033453	Fagomine	HMDB0033453	7225
1381	HMDB0061157	N-(2-Hydroxyethyl)-morpholine N-oxide	HMDB0061157	1303
1382	HMDB0142963	NA	NA	NA
1383	CHEBI:32537	NA	NA	NA
1384	CHEBI:32539	NA	NA	NA
1385	CHEBI:435538	NA	NA	NA
1386	CHEBI:4969	NA	NA	NA
1387	CHEBI:61129	NA	NA	NA
1388	CHEBI:78247	NA	NA	NA
1389	CHEBI:79079	NA	NA	NA
1390	C00652	NA	NA	NA
1391	C00684	NA	NA	NA
1392	C00815	NA	NA	NA
1393	C01087	NA	NA	NA
1394	C01114	NA	NA	NA
1395	C02266	NA	NA	NA
1396	C02612	NA	NA	NA
1397	C02614	NA	NA	NA
1398	C02630	NA	NA	NA
1399	C02753	NA	NA	NA
1400	C02994	NA	NA	NA
1401	C03196	NA	NA	NA

1402	C03826	NA	NA	NA
1403	C05405	NA	NA	NA
1404	C06029	NA	NA	NA
1405	C06031	NA	NA	NA
1406	C06032	NA	NA	NA
1407	HMDB0000426	Citramalic acid	HMDB0000426	1081
1408	HMDB0000428	3-Hydroxyglutaric acid	HMDB0000428	1819
1409	HMDB0000606	D-2-Hydroxyglutaric acid	HMDB0000606	4393
1410	HMDB0000694	L-2-Hydroxyglutaric acid	HMDB0000694	4393
1411	HMDB0001900	Ribonolactone	HMDB0001900	1110
1412	HMDB0002323	NA	NA	NA
1413	HMDB0011676	D-Xylono-1,5-lactone	HMDB0011676	4396
1414	HMDB0059655	2-Hydroxyglutarate	HMDB0059655	43
1415	HMDB0062739	3-methylmalate(2-)	HMDB0062739	5588
1416	CHEBI:1060	NA	NA	NA
1417	CHEBI:15584	NA	NA	NA
1418	CHEBI:15586	NA	NA	NA
1419	CHEBI:15867	NA	NA	NA
1420	CHEBI:16292	NA	NA	NA
1421	CHEBI:16392	NA	NA	NA
1422	CHEBI:17084	NA	NA	NA
1423	CHEBI:17100	NA	NA	NA
1424	CHEBI:17647	NA	NA	NA
1425	CHEBI:18118	NA	NA	NA
1426	CHEBI:25312	NA	NA	NA
1427	CHEBI:27394	NA	NA	NA
1428	CHEBI:27736	NA	NA	NA
1429	CHEBI:28456	NA	NA	NA
1430	CHEBI:29003	NA	NA	NA
1431	CHEBI:32796	NA	NA	NA
1432	CHEBI:32797	NA	NA	NA
1433	CHEBI:46673	NA	NA	NA
1434	CHEBI:46675	NA	NA	NA
1435	CHEBI:50787	NA	NA	NA
1436	CHEBI:60785	NA	NA	NA
1437	CHEBI:74168	NA	NA	NA
1438	C00423	NA	NA	NA
1439	C02274	NA	NA	NA
1440	C05608	NA	NA	NA
1441	C07720	NA	NA	NA
1442	C07728	NA	NA	NA
1443	C10438	NA	NA	NA
1444	C17268	NA	NA	NA
1445	HMDB0000567	Cinnamic acid	HMDB0000567	5372
1446	HMDB0000930	trans-Cinnamic acid	HMDB0000930	4445
1447	HMDB0031725	(E)-3-(2-Hydroxyphenyl)-2-propenal	HMDB0031725	5318
1448	HMDB0032947	Di-2-furanylmethane	HMDB0032947	7097
1449	HMDB0035243	1-Phenyl-1,2-propanedione	HMDB0035243	1136
1450	HMDB0036626	3,4-Dihydro-2H-1-benzopyran-2-one	HMDB0036626	660
1451	HMDB0040986	p-Coumaraldehyde	HMDB0040986	6413
1452	HMDB0128078	NA	NA	NA
1453	HMDB0134039	NA	NA	NA
1454	HMDB0135273	NA	NA	NA
1455	HMDB0135274	NA	NA	NA
1456	HMDB0135275	NA	NA	NA
1457	HMDB0135648	NA	NA	NA
1458	CHEBI:16151	NA	NA	NA
1459	CHEBI:23745	NA	NA	NA
1460	CHEBI:27386	NA	NA	NA
1461	CHEBI:28353	NA	NA	NA
1462	CHEBI:35697	NA	NA	NA
1463	CHEBI:35699	NA	NA	NA
1464	CHEBI:63552	NA	NA	NA
1465	CHEBI:84279	NA	NA	NA
1466	C00418	NA	NA	NA
1467	C00522	NA	NA	NA
1468	C02104	NA	NA	NA
1469	C03348	NA	NA	NA
1470	C04104	NA	NA	NA
1471	C06007	NA	NA	NA
1472	C06471	NA	NA	NA
1473	HMDB0000227	Mevalonic acid	HMDB0000227	4392
1474	HMDB0012140	(R)-2,3-Dihydroxy-3-methylvalerate	HMDB0012140	4481
1475	HMDB0031639	Glycerol 1-propanoate	HMDB0031639	1173
1476	HMDB0059629	NA	NA	NA
1477	HMDB0059705	NA	NA	NA
1478	CHEBI:14737	NA	NA	NA
1479	CHEBI:17710	NA	NA	NA
1480	CHEBI:18697	NA	NA	NA
1481	CHEBI:23360	NA	NA	NA
1482	CHEBI:25351	NA	NA	NA
1483	CHEBI:27512	NA	NA	NA
1484	CHEBI:27778	NA	NA	NA
1485	CHEBI:28880	NA	NA	NA
1486	CHEBI:30943	NA	NA	NA
1487	CHEBI:30981	NA	NA	NA
1488	CHEBI:32478	NA	NA	NA

1489	CHEBI:32576	NA	NA	NA
1490	CHEBI:59052	NA	NA	NA
1491	CHEBI:59988	NA	NA	NA
1492	CHEBI:59992	NA	NA	NA
1493	CHEBI:59993	NA	NA	NA
1494	CHEBI:67254	NA	NA	NA
1495	CHEBI:67255	NA	NA	NA
1496	CHEBI:78669	NA	NA	NA
1497	CHEBI:78771	NA	NA	NA
1498	CHEBI:78772	NA	NA	NA
1499	CHEBI:78773	NA	NA	NA
1500	C06577	NA	NA	NA
1501	C10428	NA	NA	NA
1502	C10452	NA	NA	NA
1503	C14309	NA	NA	NA
1504	C17965	NA	NA	NA
1505	HMDB0002214	Cuminaldehyde	HMDB0002214	326
1506	HMDB0030837	Anethole	HMDB0030837	1549
1507	HMDB0031616	4-Phenyl-3-buten-2-ol	HMDB0031616	1146
1508	HMDB0032014	2,3,6-Trimethylbenzaldehyde	HMDB0032014	1023
1509	HMDB0032015	Duryl aldehyde	HMDB0032015	2201
1510	HMDB0032016	2,4,6-Trimethylbenzaldehyde	HMDB0032016	1023
1511	HMDB0032017	3,4,5-Trimethylbenzaldehyde	HMDB0032017	1228
1512	HMDB0032140	2',4'-Dimethylacetophenone	HMDB0032140	6985
1513	HMDB0033382	2-(4-Methylphenyl)propanal	HMDB0033382	6099
1514	HMDB0034121	1-Methoxy-4-(2-propenyl) benzene	HMDB0034121	8815
1515	HMDB0059845	p-Ethylacetophenone	HMDB0059845	1364
1516	HMDB0133593	NA	NA	NA
1517	HMDB0133746	NA	NA	NA
1518	CHEBI:2716	NA	NA	NA
1519	CHEBI:28671	NA	NA	NA
1520	CHEBI:34448	NA	NA	NA
1521	CHEBI:35616	NA	NA	NA
1522	CHEBI:38475	NA	NA	NA
1523	CHEBI:45900	NA	NA	NA
1524	CHEBI:59335	NA	NA	NA
1525	CHEBI:78412	NA	NA	NA
1526	CHEBI:992716	NA	NA	NA
1527	C00073	NA	NA	NA
1528	C00855	NA	NA	NA
1529	C01733	NA	NA	NA
1530	C07418	NA	NA	NA
1531	HMDB0000696	Methionine	HMDB0000696	6137
1532	HMDB0014997	Penicillamine	HMDB0014997	4727
1533	HMDB0033951	Racemethionine	HMDB0033951	876
1534	CHEBI:16643	NA	NA	NA
1535	CHEBI:16811	NA	NA	NA
1536	CHEBI:16867	NA	NA	NA
1537	CHEBI:50868	NA	NA	NA
1538	CHEBI:50869	NA	NA	NA
1539	CHEBI:57844	NA	NA	NA
1540	CHEBI:57932	NA	NA	NA
1541	CHEBI:64558	NA	NA	NA
1542	CHEBI:7959	NA	NA	NA
1543	C00913	NA	NA	NA
1544	C02216	NA	NA	NA
1545	C02241	NA	NA	NA
1546	C08434	NA	NA	NA
1547	HMDB0002099	6-Methyladenine	HMDB0002099	6793
1548	HMDB0011599	1-Methyladenine	HMDB0011599	7882
1549	HMDB0011600	3-Methyladenine	HMDB0011600	1673
1550	HMDB0011614	7-Methyladenine	HMDB0011614	7159
1551	CHEBI:18083	NA	NA	NA
1552	CHEBI:28871	NA	NA	NA
1553	CHEBI:28921	NA	NA	NA
1554	CHEBI:38635	NA	NA	NA
1555	C08301	NA	NA	NA
1556	C17236	NA	NA	NA
1557	HMDB0030175	Venoterpine	HMDB0030175	5315
1558	HMDB0039662	2,3,6,7-Tetrahydrocyclopent[b]azepin-8(1H)-one	HMDB0039662	6428
1559	HMDB0040016	2-(2-Furanyl)-3,4,5,6-tetrahydropyridine	HMDB0040016	9174
1560	HMDB0040029	2,3-Dihydro-5-methyl-1H-pyrrolizine-7-carboxaldehyde	HMDB0040029	4508
1561	HMDB0040043	3-(2-Furanylmethylene)pyrrolidine	HMDB0040043	9174
1562	HMDB0040047	2,3-Dihydro-6-methyl-1H-pyrrolizine-5-carboxaldehyde	HMDB0040047	6429
1563	HMDB0040050	3,4-Dihydro-5-(5-methyl-2-furanyl)-2H-pyrrole	HMDB0040050	8557
1564	HMDB0040051	5-Acetyl-2,3-dihydro-1H-pyrrolizine	HMDB0040051	5265
1565	CHEBI:4110	NA	NA	NA
1566	CHEBI:59332	NA	NA	NA
1567	CHEBI:64737	NA	NA	NA
1568	CHEBI:91114	NA	NA	NA
1569	C14872	NA	NA	NA
1570	HMDB0042032	Thiodiacetic acid	HMDB0042032	3127
1571	CHEBI:35012	NA	NA	NA
1572	CHEBI:38705	NA	NA	NA
1573	CHEBI:38719	NA	NA	NA
1574	CHEBI:38720	NA	NA	NA
1575	C00121	NA	NA	NA

1576	C00181	NA	NA	NA
1577	C00216	NA	NA	NA
1578	C00259	NA	NA	NA
1579	C00309	NA	NA	NA
1580	C00310	NA	NA	NA
1581	C00312	NA	NA	NA
1582	C00476	NA	NA	NA
1583	C00508	NA	NA	NA
1584	C01394	NA	NA	NA
1585	C01488	NA	NA	NA
1586	C01508	NA	NA	NA
1587	C01510	NA	NA	NA
1588	C02096	NA	NA	NA
1589	C02204	NA	NA	NA
1590	C02205	NA	NA	NA
1591	C02479	NA	NA	NA
1592	C02604	NA	NA	NA
1593	C05052	NA	NA	NA
1594	C06115	NA	NA	NA
1595	C08346	NA	NA	NA
1596	C08353	NA	NA	NA
1597	C08354	NA	NA	NA
1598	C11476	NA	NA	NA
1599	C16639	NA	NA	NA
1600	C20569	NA	NA	NA
1601	HMDB0000098	D-Xylose	HMDB0000098	1351
1602	HMDB0000283	D-Ribose	HMDB0000283	5779
1603	HMDB0000366	2-Deoxyribonic acid	HMDB0000366	1152
1604	HMDB0000487	NA	NA	NA
1605	HMDB0000621	D-Ribulose	HMDB0000621	1235
1606	HMDB0000646	L-Arabinose	HMDB0000646	4397
1607	HMDB0000654	NA	NA	NA
1608	HMDB0000751	L-Xylulose	HMDB0000751	8981
1609	HMDB0001644	D-Xylulose	HMDB0001644	1235
1610	HMDB0002245	NA	NA	NA
1611	HMDB0003371	L-Ribulose	HMDB0003371	9920
1612	HMDB0003763	NA	NA	NA
1613	HMDB0012194	NA	NA	NA
1614	HMDB0012325	Arabinofuranose	HMDB0012325	4409
1615	HMDB0029941	D-Apiose	HMDB0029941	4479
1616	HMDB0029942	D-Arabinose	HMDB0029942	4441
1617	HMDB0059753	2-Deoxypentonic acid	HMDB0059753	1387
1618	HMDB0060254	NA	NA	NA
1619	HMDB0094694	NA	NA	NA
1620	HMDB0127617	NA	NA	NA
1621	CHEBI:15936	NA	NA	NA
1622	CHEBI:16689	NA	NA	NA
1623	CHEBI:16789	NA	NA	NA
1624	CHEBI:16880	NA	NA	NA
1625	CHEBI:17140	NA	NA	NA
1626	CHEBI:17173	NA	NA	NA
1627	CHEBI:17399	NA	NA	NA
1628	CHEBI:17535	NA	NA	NA
1629	CHEBI:17979	NA	NA	NA
1630	CHEBI:27476	NA	NA	NA
1631	CHEBI:27672	NA	NA	NA
1632	CHEBI:28161	NA	NA	NA
1633	CHEBI:28272	NA	NA	NA
1634	CHEBI:28480	NA	NA	NA
1635	CHEBI:28518	NA	NA	NA
1636	CHEBI:28543	NA	NA	NA
1637	CHEBI:28552	NA	NA	NA
1638	CHEBI:28772	NA	NA	NA
1639	CHEBI:40886	NA	NA	NA
1640	CHEBI:43934	NA	NA	NA
1641	CHEBI:44800	NA	NA	NA
1642	CHEBI:45506	NA	NA	NA
1643	CHEBI:46983	NA	NA	NA
1644	CHEBI:46987	NA	NA	NA
1645	CHEBI:46994	NA	NA	NA
1646	CHEBI:46995	NA	NA	NA
1647	CHEBI:46996	NA	NA	NA
1648	CHEBI:47000	NA	NA	NA
1649	CHEBI:47002	NA	NA	NA
1650	CHEBI:47004	NA	NA	NA
1651	CHEBI:47005	NA	NA	NA
1652	CHEBI:47006	NA	NA	NA
1653	CHEBI:47008	NA	NA	NA
1654	CHEBI:47010	NA	NA	NA
1655	CHEBI:47011	NA	NA	NA
1656	CHEBI:47012	NA	NA	NA
1657	CHEBI:47013	NA	NA	NA
1658	CHEBI:47014	NA	NA	NA
1659	CHEBI:47015	NA	NA	NA
1660	CHEBI:53455	NA	NA	NA
1661	CHEBI:59275	NA	NA	NA
1662	CHEBI:6178	NA	NA	NA

1663	CHEBI:6182	NA	NA	NA
1664	CHEBI:62321	NA	NA	NA
1665	CHEBI:79054	NA	NA	NA
1666	CHEBI:79055	NA	NA	NA
1667	CHEBI:82838	NA	NA	NA
1668	CHEBI:86350	NA	NA	NA
1669	CHEBI:89890	NA	NA	NA
1670	C00385	NA	NA	NA
1671	C07599	NA	NA	NA
1672	HMDB0000292	Xanthine	HMDB0000292	1188
1673	HMDB0000786	Oxypurinol	HMDB0000786	4644
1674	HMDB0001182	6,8-Dihydroxy purine	HMDB0001182	8325
1675	CHEBI:17712	NA	NA	NA
1676	CHEBI:28315	NA	NA	NA
1677	CHEBI:48517	NA	NA	NA
1678	CHEBI:72574	NA	NA	NA
1679	C00379	NA	NA	NA
1680	C00474	NA	NA	NA
1681	C00532	NA	NA	NA
1682	C01569	NA	NA	NA
1683	C01904	NA	NA	NA
1684	HMDB0000199	NA	NA	NA
1685	HMDB0000508	Ribitol	HMDB0000508	9415
1686	HMDB0000568	D-Arabitol	HMDB0000568	4392
1687	HMDB0001851	L-Arabitol	HMDB0001851	6912
1688	HMDB0002917	D-Xylitol	HMDB0002917	1592
1689	HMDB00033730	L-2-(Hydroxymethyl)-1,2,3,4-butanetetrol	HMDB00033730	NA
1690	CHEBI:1305691	NA	NA	NA
1691	CHEBI:15963	NA	NA	NA
1692	CHEBI:17151	NA	NA	NA
1693	CHEBI:17702	NA	NA	NA
1694	CHEBI:18333	NA	NA	NA
1695	CHEBI:18403	NA	NA	NA
1696	CHEBI:48307	NA	NA	NA
1697	CHEBI:48310	NA	NA	NA
1698	C00808	NA	NA	NA
1699	C00809	NA	NA	NA
1700	C00964	NA	NA	NA
1701	C01123	NA	NA	NA
1702	C01499	NA	NA	NA
1703	C02213	NA	NA	NA
1704	C02452	NA	NA	NA
1705	C02759	NA	NA	NA
1706	C04435	NA	NA	NA
1707	C07271	NA	NA	NA
1708	C09847	NA	NA	NA
1709	C09859	NA	NA	NA
1710	C09885	NA	NA	NA
1711	C09893	NA	NA	NA
1712	C09906	NA	NA	NA
1713	C11387	NA	NA	NA
1714	C11395	NA	NA	NA
1715	C11398	NA	NA	NA
1716	C11401	NA	NA	NA
1717	C11408	NA	NA	NA
1718	C11409	NA	NA	NA
1719	C11412	NA	NA	NA
1720	C11415	NA	NA	NA
1721	C11938	NA	NA	NA
1722	C11941	NA	NA	NA
1723	C11942	NA	NA	NA
1724	C11951	NA	NA	NA
1725	C17623	NA	NA	NA
1726	C18018	NA	NA	NA
1727	C18369	NA	NA	NA
1728	C19081	NA	NA	NA
1729	C20260	NA	NA	NA
1730	C20425	NA	NA	NA
1731	HMDB0003450	(-)-trans-Carveol	HMDB0003450	9422
1732	HMDB0003634	Perillyl alcohol	HMDB0003634	1081
1733	HMDB0003667	Alpha-Pinene-oxide	HMDB0003667	9150
1734	HMDB0006291	NA	NA	NA
1735	HMDB0006410	NA	NA	NA
1736	HMDB0030892	p-Menth-3-en-9-al	HMDB0030892	8842
1737	HMDB0030893	Isocitral	HMDB0030893	6428
1738	HMDB0031854	3-Methyl-5-propyl-2-cyclohexen-1-one	HMDB0031854	3782
1739	HMDB0032120	2,6-Dimethyl-1,7-octadien-3-one	HMDB0032120	1584
1740	HMDB0032242	(E)-3,7-Dimethyl-1,5,7-octatrien-3-ol	HMDB0032242	6284
1741	HMDB0032536	2-(trans-2-Pentenyl)cyclopentanone	HMDB0032536	6437
1742	HMDB0034715	p-Mentha-1(6),8-dien-3-ol	HMDB0034715	1484
1743	HMDB0034916	cis-2-Thujen-4-ol	HMDB0034916	5618
1744	HMDB0034973	(R)-Campholenic aldehyde	HMDB0034973	9849
1745	HMDB0034974	(R)-Carvotanacetone	HMDB0034974	5212
1746	HMDB0034975	Piperitone	HMDB0034975	6987
1747	HMDB0034985	(+)-Fenchone	HMDB0034985	1452
1748	HMDB0035054	(1S,4R)-p-Mentha-2,8-dien-1-ol	HMDB0035054	1110
1749	HMDB0035077	(1R,4R)-p-Mentha-2,8-dien-1-ol	HMDB0035077	1112

1750	HMDB0035078	Geranial	HMDB0035078	6380
1751	HMDB0035092	cis-Citral	HMDB0035092	6437
1752	HMDB0035100	2-Pinen-10-ol	HMDB0035100	1058
1753	HMDB0035120	Dehydrolinalool	HMDB0035120	8547
1754	HMDB0035125	Darwinol	HMDB0035125	6364
1755	HMDB0035158	1,2-Epoxy-p-menth-8-ene	HMDB0035158	9149
1756	HMDB0035203	(S)-9,10-Cyclo-p-menth-1-en-4-ol	HMDB0035203	7381
1757	HMDB0035241	(Z)-2-Methyl-6-methylene-2,7-octadien-1-ol	HMDB0035241	5319
1758	HMDB0035277	(2S,4R)-p-Mentha-1(7),5-dien-2-ol	HMDB0035277	5319
1759	HMDB0035280	Teresantalol	HMDB0035280	5782
1760	HMDB0035600	(S)-Phellandral	HMDB0035600	8948
1761	HMDB0035604	Pulegone	HMDB0035604	4424
1762	HMDB0035622	(+)-cis-Carveol	HMDB0035622	4431
1763	HMDB0035656	3-Pinanone	HMDB0035656	1103
1764	HMDB0035706	alpha-Cyclocitral	HMDB0035706	9414
1765	HMDB0035737	(R)-Piperitone	HMDB0035737	1075
1766	HMDB0035738	NA	NA	NA
1767	HMDB0035741	(-)-trans-Isopulegone	HMDB0035741	3464
1768	HMDB0035743	Pinocarveol	HMDB0035743	1026
1769	HMDB0035744	(-)-Isopinocampnone	HMDB0035744	8453
1770	HMDB0036044	Marmelo oxide A	HMDB0036044	1317
1771	HMDB0036079	Dihydrocarvone	HMDB0036079	2447
1772	HMDB0036080	(1S,4S)-Dihydrocarvone	HMDB0036080	4431
1773	HMDB0036082	(-)-cis-Carveol	HMDB0036082	3305
1774	HMDB0036083	Carveol	HMDB0036083	7438
1775	HMDB0036085	Dehydro-1,8-cineole	HMDB0036085	5230
1776	HMDB0036087	(R)-p-Mentha-1,8-dien-7-ol	HMDB0036087	1178
1777	HMDB0036088	NA	NA	NA
1778	HMDB0036113	(+)-3-Thujone	HMDB0036113	9145
1779	HMDB0036114	(-)-3-Thujone	HMDB0036114	6553
1780	HMDB0036115	(-)-3-Isotujone	HMDB0036115	2614
1781	HMDB0036127	(-)-Pinocampnone	HMDB0036127	6427
1782	HMDB0036128	(-)-trans-Pinocarveol	HMDB0036128	1201
1783	HMDB0036129	Verbenol	HMDB0036129	6112
1784	HMDB0036598	(E,E)-2,4-Decadienal	HMDB0036598	6427
1785	HMDB0037008	6,8-Epoxy-p-menth-2-ene	HMDB0037008	7274
1786	HMDB0037009	Terpinolene oxide	HMDB0037009	1073
1787	HMDB0037010	(2S,4R)-p-Mentha-1(7),8-dien-2-ol	HMDB0037010	5274
1788	HMDB0037015	p-Mentha-1,8-dien-4-ol	HMDB0037015	5274
1789	HMDB0037017	(R)-p-Mentha-1,8-dien-10-ol	HMDB0037017	5271
1790	HMDB0037024	4-Acetyl-1,4-dimethyl-1-cyclohexene	HMDB0037024	6528
1791	HMDB0037025	Hop ether	HMDB0037025	5565
1792	HMDB0037172	Tetrahydro-5-isopropenyl-2-methyl-2-vinylfuran	HMDB0037172	6166
1793	HMDB0037280	Junonone	HMDB0037280	1103
1794	HMDB0037302	xi-p-Mentha-3,8-dien-1-ol	HMDB0037302	7838
1795	HMDB0037303	xi-p-Mentha-1(7),2-dien-4-ol	HMDB0037303	5319
1796	HMDB0038251	xi-Pinol	HMDB0038251	1011
1797	HMDB0038290	Photocitral A	HMDB0038290	1026
1798	HMDB0038557	xi-3,6-Dihydro-4-methyl-2-(2-methyl-1-propenyl)-2H-pyran	HMDB0038557	6127
1799	HMDB0039008	3,4-Epoxy-p-menth-1(7)-ene	HMDB0039008	1014
1800	HMDB0039816	2-Hexylfuran	HMDB0039816	7740
1801	HMDB0040766	Anethofuran	HMDB0040766	5862
1802	HMDB0041011	beta-Cyclocitral	HMDB0041011	9895
1803	HMDB0041013	Isocyclocitral	HMDB0041013	1011
1804	HMDB0041631	3-Thujanone	HMDB0041631	1102
1805	HMDB0059608	(+)-trans-Carveol	HMDB0059608	4431
1806	HMDB0059761	4-(1-Methylethyl)-1-cyclohexene-4-carboxaldehyde	HMDB0059761	1242
1807	HMDB0059827	3-Cyclohexene-1-carboxaldehyde, 1,3,4-trimethyl-	HMDB0059827	3862
1808	HMDB0059838	Camphor	HMDB0059838	1590
1809	HMDB0059875	Carvotanacetone	HMDB0059875	6432
1810	HMDB0059885	p-Menth-1-en-9-al	HMDB0059885	5204
1811	HMDB0061794	NA	NA	NA
1812	CHEBI:10782	NA	NA	NA
1813	CHEBI:15387	NA	NA	NA
1814	CHEBI:15388	NA	NA	NA
1815	CHEBI:15389	NA	NA	NA
1816	CHEBI:15396	NA	NA	NA
1817	CHEBI:15397	NA	NA	NA
1818	CHEBI:154	NA	NA	NA
1819	CHEBI:15406	NA	NA	NA
1820	CHEBI:15420	NA	NA	NA
1821	CHEBI:155	NA	NA	NA
1822	CHEBI:16431	NA	NA	NA
1823	CHEBI:165	NA	NA	NA
1824	CHEBI:166	NA	NA	NA
1825	CHEBI:168	NA	NA	NA
1826	CHEBI:16980	NA	NA	NA
1827	CHEBI:17546	NA	NA	NA
1828	CHEBI:18481	NA	NA	NA
1829	CHEBI:227	NA	NA	NA
1830	CHEBI:23046	NA	NA	NA
1831	CHEBI:232	NA	NA	NA
1832	CHEBI:23316	NA	NA	NA
1833	CHEBI:23733	NA	NA	NA
1834	CHEBI:24911	NA	NA	NA
1835	CHEBI:26137	NA	NA	NA
1836	CHEBI:26381	NA	NA	NA

1837	CHEBI:26590	NA	NA	NA
1838	CHEBI:27049	NA	NA	NA
1839	CHEBI:29020	NA	NA	NA
1840	CHEBI:29060	NA	NA	NA
1841	CHEBI:35596	NA	NA	NA
1842	CHEBI:35669	NA	NA	NA
1843	CHEBI:35672	NA	NA	NA
1844	CHEBI:36612	NA	NA	NA
1845	CHEBI:36773	NA	NA	NA
1846	CHEBI:37046	NA	NA	NA
1847	CHEBI:37047	NA	NA	NA
1848	CHEBI:41	NA	NA	NA
1849	CHEBI:43812	NA	NA	NA
1850	CHEBI:48697	NA	NA	NA
1851	CHEBI:48933	NA	NA	NA
1852	CHEBI:48934	NA	NA	NA
1853	CHEBI:49150	NA	NA	NA
1854	CHEBI:4999	NA	NA	NA
1855	CHEBI:50040	NA	NA	NA
1856	CHEBI:50043	NA	NA	NA
1857	CHEBI:50045	NA	NA	NA
1858	CHEBI:50046	NA	NA	NA
1859	CHEBI:53177	NA	NA	NA
1860	CHEBI:61551	NA	NA	NA
1861	CHEBI:83263	NA	NA	NA
1862	CHEBI:84970	NA	NA	NA
1863	CHEBI:87568	NA	NA	NA
1864	CHEBI:89872	NA	NA	NA
1865	CHEBI:9577	NA	NA	NA
1866	C00196	NA	NA	NA
1867	C00230	NA	NA	NA
1868	C00628	NA	NA	NA
1869	C16748	NA	NA	NA
1870	HMDB0000152	Gentisic acid	HMDB0000152	3469
1871	HMDB0000397	2-Pyrocatechuic acid	HMDB0000397	19
1872	HMDB0001856	Protocatechuic acid	HMDB0001856	72
1873	HMDB0013676	2,6-Dihydroxybenzoic acid	HMDB0013676	9338
1874	HMDB0013677	3,5-Dihydroxybenzoic acid	HMDB0013677	7424
1875	HMDB0029666	2,4-Dihydroxybenzoic acid	HMDB0029666	1491
1876	HMDB0034299	Patulin	HMDB0034299	4696
1877	HMDB0125090	NA	NA	NA
1878	CHEBI:17189	NA	NA	NA
1879	CHEBI:18026	NA	NA	NA
1880	CHEBI:248101	NA	NA	NA
1881	CHEBI:36062	NA	NA	NA
1882	CHEBI:39912	NA	NA	NA
1883	CHEBI:46691	NA	NA	NA
1884	CHEBI:68465	NA	NA	NA
1885	CHEBI:74926	NA	NA	NA
1886	C09772	NA	NA	NA
1887	HMDB0031302	Methyl 2-octynoate	HMDB0031302	8092
1888	HMDB0032314	2,4-Hexadienyl propionate	HMDB0032314	6386
1889	HMDB0032442	2-Nonenoic acid gamma-lactone	HMDB0032442	8955
1890	HMDB0035135	(E)-2,6-Dimethyl-2,5-heptadienoic acid	HMDB0035135	1588
1891	HMDB0036177	3,5,5-Trimethyl-1,2-cyclohexanedione	HMDB0036177	5510
1892	HMDB0036239	NA	NA	NA
1893	HMDB0037276	Octahydro-2H-1-benzopyran-2-one	HMDB0037276	2048
1894	HMDB0038268	Allyl hexenoate	HMDB0038268	1181
1895	HMDB0038697	xi-2,2,6-Trimethyl-1,4-cyclohexanedione	HMDB0038697	3018
1896	HMDB0040285	Anapear	HMDB0040285	1098
1897	HMDB0060285	4-Oxo-2-nonenal	HMDB0060285	6445
1898	CHEBI:58972	NA	NA	NA
1899	CHEBI:86400	NA	NA	NA
1900	CHEBI:87524	NA	NA	NA
1901	C20450	NA	NA	NA
1902	HMDB0000578	NA	NA	NA
1903	HMDB0004812	2,5-Furandicarboxylic acid	HMDB0004812	7672
1904	CHEBI:12040	NA	NA	NA
1905	CHEBI:16468	NA	NA	NA
1906	CHEBI:16967	NA	NA	NA
1907	CHEBI:28080	NA	NA	NA
1908	CHEBI:37161	NA	NA	NA
1909	CHEBI:58139	NA	NA	NA
1910	CHEBI:64011	NA	NA	NA
1911	CHEBI:64016	NA	NA	NA
1912	CHEBI:64908	NA	NA	NA
1913	CHEBI:64928	NA	NA	NA
1914	CHEBI:84212	NA	NA	NA
1915	C03680	NA	NA	NA
1916	C03817	NA	NA	NA
1917	C05132	NA	NA	NA
1918	C05568	NA	NA	NA
1919	C19481	NA	NA	NA
1920	HMDB0000544	5-Hydroxymethyl-4-methyluracil	HMDB0000544	8983
1921	HMDB0001014	4-Imidazolone-5-propionic acid	HMDB0001014	128
1922	HMDB0002320	Imidazolelactic acid	HMDB0002320	4591
1923	HMDB0062719	NA	NA	NA

1924	CHEBI:11041	NA	NA	NA
1925	CHEBI:16373	NA	NA	NA
1926	CHEBI:27384	NA	NA	NA
1927	CHEBI:27487	NA	NA	NA
1928	CHEBI:70808	NA	NA	NA
1929	C02445	NA	NA	NA
1930	C08471	NA	NA	NA
1931	C08501	NA	NA	NA
1932	HMDB0004362	4-Hydroxynonenal	HMDB0004362	5283
1933	HMDB0031263	2,4-Nonanedione	HMDB0031263	8031
1934	HMDB0031271	2-Nonenoic acid	HMDB0031271	5282
1935	HMDB0031514	6-Butyltetrahydro-2H-pyran-2-one	HMDB0031514	1869
1936	HMDB0031531	Dihydro-5-pentyl-2(3H)-furanone	HMDB0031531	7710
1937	HMDB0032265	cis-Ethyl 4-heptenoate	HMDB0032265	1582
1938	HMDB0032307	Hept-trans-2-en-1-yl acetate	HMDB0032307	5363
1939	HMDB0032413	Methyl 2-octenoate	HMDB0032413	5364
1940	HMDB0032491	Prenyl isobutyrate	HMDB0032491	1735
1941	HMDB0033167	Ethyl cyclohexanecarboxylate	HMDB0033167	1868
1942	HMDB0034716	4-Oxononanal	HMDB0034716	1562
1943	HMDB0035307	Quercuslactone a	HMDB0035307	6290
1944	HMDB0036208	2-Propenyl 2-ethylbutanoate	HMDB0036208	6140
1945	HMDB0036222	Cyclohexyl propionate	HMDB0036222	6137
1946	HMDB0037023	2-Hydroxy-2,6,6-trimethylcyclohexanone	HMDB0037023	1011
1947	HMDB0037496	Methyl (E)-2-octenoate	HMDB0037496	1104
1948	HMDB0037618	(E)-3-Heptenyl acetate	HMDB0037618	5363
1949	HMDB0037629	Isobutyl angelate	HMDB0037629	5367
1950	HMDB0038272	trans-2-Hexenyl propanoate	HMDB0038272	5352
1951	HMDB0038275	cis-3-Hexenyl propanoate	HMDB0038275	5365
1952	HMDB0039736	6-Hydroxy-4,6-dimethyl-3-hepten-2-one	HMDB0039736	1161
1953	HMDB0039794	Methyl 4Z-octenoate	HMDB0039794	5366
1954	HMDB0040210	2-Propenyl hexanoate	HMDB0040210	3126
1955	HMDB0059728	Methyl 3-Octenoate	HMDB0059728	5364
1956	HMDB0059817	(Z)-Oak lactone	HMDB0059817	4128
1957	HMDB0059840	(E)-2-Ethyl heptenoate	HMDB0059840	5358
1958	HMDB0059894	NA	NA	NA
1959	HMDB0060286	NA	NA	NA
1960	CHEBI:16111	NA	NA	NA
1961	CHEBI:206353	NA	NA	NA
1962	CHEBI:32585	NA	NA	NA
1963	CHEBI:43219	NA	NA	NA
1964	CHEBI:58967	NA	NA	NA
1965	CHEBI:58968	NA	NA	NA
1966	CHEBI:86399	NA	NA	NA
1967	CHEBI:87682	NA	NA	NA
1968	CHEBI:87688	NA	NA	NA
1969	C02728	NA	NA	NA
1970	HMDB0002038	N(6)-Methyllysine	HMDB0002038	1647
1971	HMDB0006009	Isoputrescine	HMDB0006009	1717
1972	CHEBI:17604	NA	NA	NA
1973	CHEBI:21354	NA	NA	NA
1974	CHEBI:21756	NA	NA	NA
1975	CHEBI:41030	NA	NA	NA
1976	CHEBI:64349	NA	NA	NA
1977	C00478	NA	NA	NA
1978	C01088	NA	NA	NA
1979	C01989	NA	NA	NA
1980	C02360	NA	NA	NA
1981	C02488	NA	NA	NA
1982	C02991	NA	NA	NA
1983	C03652	NA	NA	NA
1984	C03761	NA	NA	NA
1985	C03827	NA	NA	NA
1986	C03979	NA	NA	NA
1987	C06158	NA	NA	NA
1988	C06159	NA	NA	NA
1989	C06474	NA	NA	NA
1990	C06478	NA	NA	NA
1991	C06485	NA	NA	NA
1992	C11592	NA	NA	NA
1993	C16390	NA	NA	NA
1994	C17209	NA	NA	NA
1995	C18028	NA	NA	NA
1996	HMDB0000321	2-Hydroxyadipic acid	HMDB0000321	1935
1997	HMDB0000345	3-Hydroxyadipic acid	HMDB0000345	1519
1998	HMDB0000355	3-Hydroxymethylglutaric acid	HMDB0000355	1662
1999	HMDB0000368	2(R)-Hydroxyadipic acid	HMDB0000368	9855
2000	HMDB0000640	Levogluconan	HMDB0000640	2724
2001	HMDB0029934	D-1-Deoxy-erythro-hexo-2,3-diulose	HMDB0029934	1317
2002	HMDB0032873	Diethyl dicarbonate	HMDB0032873	3051
2003	HMDB0041561	D-1,5-Anhydrofructose	HMDB0041561	1429
2004	HMDB0059737	NA	NA	NA
2005	HMDB0059758	2-Hydroxy-2-ethylsuccinic acid	HMDB0059758	4397
2006	CHEBI:15582	NA	NA	NA
2007	CHEBI:15583	NA	NA	NA
2008	CHEBI:15587	NA	NA	NA
2009	CHEBI:15590	NA	NA	NA
2010	CHEBI:15591	NA	NA	NA



2011	CHEBI:16715	NA	NA	NA
2012	CHEBI:16831	NA	NA	NA
2013	CHEBI:16950	NA	NA	NA
2014	CHEBI:17023	NA	NA	NA
2015	CHEBI:17937	NA	NA	NA
2016	CHEBI:18078	NA	NA	NA
2017	CHEBI:18104	NA	NA	NA
2018	CHEBI:27550	NA	NA	NA
2019	CHEBI:27861	NA	NA	NA
2020	CHEBI:30997	NA	NA	NA
2021	CHEBI:32519	NA	NA	NA
2022	CHEBI:49076	NA	NA	NA
2023	CHEBI:49077	NA	NA	NA
2024	CHEBI:49078	NA	NA	NA
2025	CHEBI:55541	NA	NA	NA
2026	CHEBI:57245	NA	NA	NA
2027	CHEBI:57247	NA	NA	NA
2028	CHEBI:57249	NA	NA	NA
2029	CHEBI:59051	NA	NA	NA
2030	CHEBI:60777	NA	NA	NA
2031	CHEBI:64796	NA	NA	NA
2032	CHEBI:67233	NA	NA	NA
2033	CHEBI:67234	NA	NA	NA
2034	CHEBI:67235	NA	NA	NA
2035	CHEBI:83433	NA	NA	NA
2036	CHEBI:89205	NA	NA	NA
2037	CHEBI:89897	NA	NA	NA
2038	C13840	NA	NA	NA
2039	HMDB0001297	Norcotinine	HMDB0001297	413
2040	CHEBI:89406	NA	NA	NA
2041	HMDB0031208	1-Phenyl-1-pentanone	HMDB0031208	6609
2042	HMDB0031856	(±)-2-Methyl-3-(4-methylphenyl)propanal	HMDB0031856	9555
2043	HMDB0032025	4'-Isopropylacetophenone	HMDB0032025	1257
2044	HMDB0032415	2-Methyl-4-phenylbutyraldehyde	HMDB0032415	6291
2045	HMDB0033562	3-Methyl-2-phenylbutanal	HMDB0033562	1225
2046	HMDB0036183	4-(4-Methylphenyl)-2-butanone	HMDB0036183	5463
2047	HMDB0039803	4,4alpha,5,6-Tetrahydro-7-methyl-2(3H)-naphthalenone	HMDB0039803	6193
2048	HMDB0040245	(±)-2-Methyl-3-(2-methylphenyl)propanal	HMDB0040245	9384
2049	HMDB0041493	4-Isopropylphenylacetaldehyde	HMDB0041493	6135
2050	HMDB0133676	NA	NA	NA
2051	CHEBI:36812	NA	NA	NA
2052	C06809	NA	NA	NA
2053	C12876	NA	NA	NA
2054	HMDB0001890	Acetylcysteine	HMDB0001890	1203
2055	CHEBI:28939	NA	NA	NA
2056	C00166	NA	NA	NA
2057	C00811	NA	NA	NA
2058	C01772	NA	NA	NA
2059	C02763	NA	NA	NA
2060	C05838	NA	NA	NA
2061	C06738	NA	NA	NA
2062	C07114	NA	NA	NA
2063	C10945	NA	NA	NA
2064	C12621	NA	NA	NA
2065	HMDB0000205	Phenylpyruvic acid	HMDB0000205	997
2066	HMDB0001237	NA	NA	NA
2067	HMDB0001713	m-Coumaric acid	HMDB0001713	6375
2068	HMDB0002035	4-Hydroxycinnamic acid	HMDB0002035	6375
2069	HMDB0002641	2-Hydroxycinnamic acid	HMDB0002641	6375
2070	HMDB0012225	Enol-phenylpyruvate	HMDB0012225	6416
2071	HMDB0030677	cis-p-Coumaric acid	HMDB0030677	1549
2072	HMDB0031629	NA	NA	NA
2073	HMDB0041592	Coumarinic acid	HMDB0041592	5280
2074	HMDB0062605	NA	NA	NA
2075	HMDB0062655	NA	NA	NA
2076	HMDB0062774	NA	NA	NA
2077	HMDB0125104	NA	NA	NA
2078	HMDB0126545	NA	NA	NA
2079	HMDB0128076	NA	NA	NA
2080	HMDB0129375	NA	NA	NA
2081	HMDB0134028	NA	NA	NA
2082	HMDB0134029	NA	NA	NA
2083	HMDB0134030	NA	NA	NA
2084	HMDB0134031	NA	NA	NA
2085	HMDB0141767	NA	NA	NA
2086	HMDB0141768	NA	NA	NA
2087	CHEBI:16815	NA	NA	NA
2088	CHEBI:17450	NA	NA	NA
2089	CHEBI:18125	NA	NA	NA
2090	CHEBI:18176	NA	NA	NA
2091	CHEBI:28323	NA	NA	NA
2092	CHEBI:28759	NA	NA	NA
2093	CHEBI:28873	NA	NA	NA
2094	CHEBI:30851	NA	NA	NA
2095	CHEBI:32357	NA	NA	NA
2096	CHEBI:32374	NA	NA	NA
2097	CHEBI:32815	NA	NA	NA

2098	CHEBI:36090	NA	NA	NA
2099	CHEBI:36633	NA	NA	NA
2100	CHEBI:47921	NA	NA	NA
2101	CHEBI:47925	NA	NA	NA
2102	CHEBI:47926	NA	NA	NA
2103	CHEBI:47928	NA	NA	NA
2104	CHEBI:84256	NA	NA	NA
2105	CHEBI:86559	NA	NA	NA
2106	C00507	NA	NA	NA
2107	C00586	NA	NA	NA
2108	C00861	NA	NA	NA
2109	C01018	NA	NA	NA
2110	C01019	NA	NA	NA
2111	C01684	NA	NA	NA
2112	C01721	NA	NA	NA
2113	C02095	NA	NA	NA
2114	C02338	NA	NA	NA
2115	C02431	NA	NA	NA
2116	C02476	NA	NA	NA
2117	C02522	NA	NA	NA
2118	C02781	NA	NA	NA
2119	C07326	NA	NA	NA
2120	C08258	NA	NA	NA
2121	C08259	NA	NA	NA
2122	C08352	NA	NA	NA
2123	C16538	NA	NA	NA
2124	C20835	NA	NA	NA
2125	C20836	NA	NA	NA
2126	HMDB0000174	L-Fucose	HMDB0000174	1710
2127	HMDB0000849	Rhamnose	HMDB0000849	2531
2128	HMDB0002712	1,5-Anhydrosorbitol	HMDB0002712	6496
2129	HMDB0003081	beta-D-Fucose	HMDB0003081	4396
2130	HMDB0005876	3-Deoxyfructose	HMDB0005876	3080
2131	HMDB0010207	L-Rhamnulose	HMDB0010207	1555
2132	HMDB0011726	NA	NA	NA
2133	HMDB0011736	NA	NA	NA
2134	HMDB0012327	2-Deoxygalactopyranose	HMDB0012327	4398
2135	HMDB0029196	D-Fucose	HMDB0029196	4442
2136	HMDB0033821	2-O-Methyl-D-xylose	HMDB0033821	5601
2137	HMDB0059624	NA	NA	NA
2138	HMDB0059625	NA	NA	NA
2139	HMDB0060267	L-Fuculose	HMDB0060267	6857
2140	HMDB0062477	2-Deoxyglucose	HMDB0062477	1082
2141	HMDB0062489	NA	NA	NA
2142	HMDB0124735	NA	NA	NA
2143	CHEBI:16055	NA	NA	NA
2144	CHEBI:16070	NA	NA	NA
2145	CHEBI:16935	NA	NA	NA
2146	CHEBI:17617	NA	NA	NA
2147	CHEBI:17897	NA	NA	NA
2148	CHEBI:2179	NA	NA	NA
2149	CHEBI:2181	NA	NA	NA
2150	CHEBI:27371	NA	NA	NA
2151	CHEBI:27411	NA	NA	NA
2152	CHEBI:27442	NA	NA	NA
2153	CHEBI:27586	NA	NA	NA
2154	CHEBI:27907	NA	NA	NA
2155	CHEBI:28029	NA	NA	NA
2156	CHEBI:28140	NA	NA	NA
2157	CHEBI:37600	NA	NA	NA
2158	CHEBI:42548	NA	NA	NA
2159	CHEBI:42564	NA	NA	NA
2160	CHEBI:42589	NA	NA	NA
2161	CHEBI:42606	NA	NA	NA
2162	CHEBI:46689	NA	NA	NA
2163	CHEBI:48203	NA	NA	NA
2164	CHEBI:48204	NA	NA	NA
2165	CHEBI:49182	NA	NA	NA
2166	CHEBI:59274	NA	NA	NA
2167	CHEBI:62346	NA	NA	NA
2168	CHEBI:63151	NA	NA	NA
2169	CHEBI:63152	NA	NA	NA
2170	CHEBI:74863	NA	NA	NA
2171	CHEBI:75862	NA	NA	NA
2172	CHEBI:75892	NA	NA	NA
2173	CHEBI:76035	NA	NA	NA
2174	CHEBI:76038	NA	NA	NA
2175	CHEBI:76039	NA	NA	NA
2176	CHEBI:84755	NA	NA	NA
2177	CHEBI:90759	NA	NA	NA
2178	C00079	NA	NA	NA
2179	C02057	NA	NA	NA
2180	C02265	NA	NA	NA
2181	C07527	NA	NA	NA
2182	C18090	NA	NA	NA
2183	C18747	NA	NA	NA
2184	C19565	NA	NA	NA

2185	C19578	NA	NA	NA
2186	C20487	NA	NA	NA
2187	C20488	NA	NA	NA
2188	HMDB0000159	Phenylalanine	HMDB0000159	6140
2189	HMDB0000612	NA	NA	NA
2190	HMDB0001007	3-Pyridinebutanoic acid	HMDB0001007	114
2191	HMDB0004992	Benzocaine	HMDB0004992	2337
2192	HMDB0006044	Norsalsolinol	HMDB0006044	3693
2193	HMDB0033485	Gentiatibetine	HMDB0033485	5317
2194	HMDB0033589	Ethyl 2-aminobenzoate	HMDB0033589	6877
2195	HMDB0034169	Methyl N-methylanthranilate	HMDB0034169	6826
2196	HMDB0059934	NA	NA	NA
2197	HMDB0062402	4-Hydroxy-1-(3-pyridinyl)-1-butanone	HMDB0062402	1078
2198	HMDB0062407	5-(3-Pyridyl)-2-hydroxytetrahydrofuran	HMDB0062407	1796
2199	CHEBI:110006	NA	NA	NA
2200	CHEBI:116735	NA	NA	NA
2201	CHEBI:16998	NA	NA	NA
2202	CHEBI:17295	NA	NA	NA
2203	CHEBI:28044	NA	NA	NA
2204	CHEBI:38537	NA	NA	NA
2205	CHEBI:57981	NA	NA	NA
2206	CHEBI:58095	NA	NA	NA
2207	CHEBI:59742	NA	NA	NA
2208	CHEBI:65248	NA	NA	NA
2209	CHEBI:67158	NA	NA	NA
2210	CHEBI:67172	NA	NA	NA
2211	CHEBI:68506	NA	NA	NA
2212	CHEBI:68525	NA	NA	NA
2213	CHEBI:68527	NA	NA	NA
2214	CHEBI:68528	NA	NA	NA
2215	CHEBI:76052	NA	NA	NA
2216	CHEBI:81494	NA	NA	NA
2217	CHEBI:82572	NA	NA	NA
2218	C03092	NA	NA	NA
2219	C03246	NA	NA	NA
2220	C04433	NA	NA	NA
2221	C07276	NA	NA	NA
2222	C09790	NA	NA	NA
2223	C16462	NA	NA	NA
2224	C17621	NA	NA	NA
2225	C18020	NA	NA	NA
2226	C18027	NA	NA	NA
2227	C18066	NA	NA	NA
2228	C18202	NA	NA	NA
2229	C19082	NA	NA	NA
2230	C20326	NA	NA	NA
2231	HMDB0004980	cis-4-Decenoic acid	HMDB0004980	5312
2232	HMDB0010726	trans-Dec-2-enoic acid	HMDB0010726	5282
2233	HMDB0012183	8-Methylnonenoate	HMDB0012183	5365
2234	HMDB0029358	5Z-Octenyl acetate	HMDB0029358	5352
2235	HMDB0029859	Methyl (xi)-3-nonenoate	HMDB0029859	1465
2236	HMDB0030031	(±)-6-Methyl-5-hepten-2-yl acetate	HMDB0030031	8794
2237	HMDB0031002	3-Decenoic acid	HMDB0031002	5312
2238	HMDB0031003	9-Decenoic acid	HMDB0031003	6174
2239	HMDB0031297	2-Octenyl acetate	HMDB0031297	1280
2240	HMDB0031362	Cyclohexylethyl acetate	HMDB0031362	3077
2241	HMDB0031440	Linalool oxide (trans-pyranoid)	HMDB0031440	6427
2242	HMDB0031441	Linalool oxide III	HMDB0031441	6428
2243	HMDB0032119	4-Hydroxy-2,6-dimethyl-7-octen-3-one	HMDB0032119	1584
2244	HMDB0032275	Ethyl 3-octenoate	HMDB0032275	5364
2245	HMDB0032393	2-Methylbutyl 3-methyl-2-butenate	HMDB0032393	1134
2246	HMDB0032452	1-Octen-3-yl acetate	HMDB0032452	1712
2247	HMDB0033203	6-Decanolide	HMDB0033203	6258
2248	HMDB0033377	cis-3-Hexenyl butyrate	HMDB0033377	5352
2249	HMDB0034427	Cyclohexyl butanoate	HMDB0034427	2437
2250	HMDB0034581	2-Hexenyl butanoate	HMDB0034581	5352
2251	HMDB0034880	3-Methyl-2,4-nonanedione	HMDB0034880	5294
2252	HMDB0035122	(S,E)-2,6-Dimethyl-5,7-octadiene-2,3-diol	HMDB0035122	8980
2253	HMDB0035365	Cnidiol C	HMDB0035365	2635
2254	HMDB0035837	Citronellie acid	HMDB0035837	1040
2255	HMDB0035839	(E)-3-(Tetrahydro-5,5-dimethyl-2-furanyl)-2-buten-1-ol	HMDB0035839	1317
2256	HMDB0035907	Linalyl oxide	HMDB0035907	2231
2257	HMDB0036099	Lilac alcohol	HMDB0036099	5265
2258	HMDB0036211	Hexyl crotonate	HMDB0036211	5356
2259	HMDB0036990	2,6-Dimethyl-3,7-octadiene-2,6-diol	HMDB0036990	5352
2260	HMDB0036992	1-Cyclopropyl-4-methyl-1,3-cyclohexanediol	HMDB0036992	7381
2261	HMDB0037021	trans-p-Menth-2-ene-1,4-diol	HMDB0037021	3000
2262	HMDB0037116	delta-Decalactone	HMDB0037116	1281
2263	HMDB0037217	xi-5-Hexyldihydro-2(3H)-furanone	HMDB0037217	1281
2264	HMDB0037497	Ethyl (E)-2-octenoate	HMDB0037497	5352
2265	HMDB0037632	xi-Tetrahydro-3-pentyl-2H-pyran-2-one	HMDB0037632	1229
2266	HMDB0038744	9-Hydroxygeraniol	HMDB0038744	1361
2267	HMDB0039149	(+)-6-Hydroxy-2,6-dimethyl-7-octen-4-one	HMDB0039149	5224
2268	HMDB0039768	5-Decenoic acid	HMDB0039768	5362
2269	HMDB0039795	Ethyl 4Z-octenoate	HMDB0039795	5352
2270	HMDB0040194	Methyl 2-nonenoate	HMDB0040194	5357
2271	HMDB0040208	2-Propenyl heptanoate	HMDB0040208	8878

2272	HMDB0040213	cis-3-Hexenyl isobutyrate	HMDB0040213	5352
2273	HMDB0040330	Menthone lactone	HMDB0040330	6234
2274	HMDB0040530	Isopentyl 3-methyl-2-butenolate	HMDB0040530	9257
2275	HMDB0040726	(±)-cis-Linalyl oxide	HMDB0040726	6428
2276	HMDB0040727	(±)-trans-Linalyl oxide	HMDB0040727	6432
2277	HMDB0041012	6-Decenoic acid	HMDB0041012	5362
2278	HMDB0041630	NA	NA	NA
2279	HMDB0059610	2-Exo-hydroxy-1,8-cineole	HMDB0059610	6857
2280	HMDB0059852	2-Hydroxycineol	HMDB0059852	5298
2281	CHEBI:132839	NA	NA	NA
2282	CHEBI:15662	NA	NA	NA
2283	CHEBI:16271	NA	NA	NA
2284	CHEBI:17219	NA	NA	NA
2285	CHEBI:18515	NA	NA	NA
2286	CHEBI:32380	NA	NA	NA
2287	CHEBI:32381	NA	NA	NA
2288	CHEBI:35811	NA	NA	NA
2289	CHEBI:37463	NA	NA	NA
2290	CHEBI:37809	NA	NA	NA
2291	CHEBI:50243	NA	NA	NA
2292	CHEBI:50244	NA	NA	NA
2293	CHEBI:50250	NA	NA	NA
2294	CHEBI:50251	NA	NA	NA
2295	CHEBI:50465	NA	NA	NA
2296	CHEBI:50466	NA	NA	NA
2297	CHEBI:50467	NA	NA	NA
2298	CHEBI:59623	NA	NA	NA
2299	CHEBI:61200	NA	NA	NA
2300	CHEBI:64235	NA	NA	NA
2301	CHEBI:81581	NA	NA	NA
2302	CHEBI:82759	NA	NA	NA
2303	CHEBI:87325	NA	NA	NA
2304	CHEBI:87327	NA	NA	NA
2305	CHEBI:87575	NA	NA	NA
2306	CHEBI:90956	NA	NA	NA
2307	HMDB0000721	Glycylproline	HMDB0000721	3013
2308	HMDB0011178	Prolylglycine	HMDB0011178	6426
2309	CHEBI:356660	NA	NA	NA
2310	CHEBI:49185	NA	NA	NA
2311	CHEBI:61695	NA	NA	NA
2312	CHEBI:61696	NA	NA	NA
2313	CHEBI:70744	NA	NA	NA
2314	CHEBI:73594	NA	NA	NA
2315	CHEBI:73779	NA	NA	NA
2316	C01571	NA	NA	NA
2317	C02904	NA	NA	NA
2318	C12289	NA	NA	NA
2319	C12292	NA	NA	NA
2320	HMDB0000511	Capric acid	HMDB0000511	2969
2321	HMDB0029760	1,1-Diethoxy-2-hexene	HMDB0029760	5365
2322	HMDB0030029	Isopentyl isopentanoate	HMDB0030029	1261
2323	HMDB0031264	Methyl nonanoate	HMDB0031264	1560
2324	HMDB0031739	7-Hydroxy-3,7-dimethyloctanal	HMDB0031739	7888
2325	HMDB0032045	Pentyl 3-methylbutanoate	HMDB0032045	9597
2326	HMDB0032070	Isooctyl acetate	HMDB0032070	5000
2327	HMDB0032155	Acetaldehyde 1,3-octanediol acetal	HMDB0032155	1110
2328	HMDB0032264	Ethyl 2-ethylhexanoate	HMDB0032264	1022
2329	HMDB0032302	Heptanal propyleneglycol acetal	HMDB0032302	2035
2330	HMDB0032315	Hexanal butane-2,3-diol acetal	HMDB0032315	1108
2331	HMDB0033620	Hexyl butyrate	HMDB0033620	1752
2332	HMDB0034457	Propyl heptanoate	HMDB0034457	2293
2333	HMDB0034849	4-Methylnonanoic acid	HMDB0034849	6200
2334	HMDB0035595	trans-p-Menthane-1,8-diol	HMDB0035595	6651
2335	HMDB0035723	(1R,2S,3S,4R)-p-Menthane-2,3-diol	HMDB0035723	1071
2336	HMDB0036136	4-Ethyl octanoic acid	HMDB0036136	6184
2337	HMDB0036145	p-Menthane-3,8-diol	HMDB0036145	5569
2338	HMDB0036228	2-Methylpropyl hexanoate	HMDB0036228	7775
2339	HMDB0037387	(1S,3R,4R)-p-Menthane-1,3-diol	HMDB0037387	5240
2340	HMDB0037849	Hexyl 2-methylpropanoate	HMDB0037849	1687
2341	HMDB0038038	2-Methylbutyl 3-methylbutanoate	HMDB0038038	6244
2342	HMDB0038602	Octyl acetate	HMDB0038602	8164
2343	HMDB0038783	(Z)-1-(1-Ethoxyethoxy)-3-hexene	HMDB0038783	5463
2344	HMDB0039218	2-Methylbutyl 2-methylbutanoate	HMDB0039218	1712
2345	HMDB0040157	3-Methylbutyl 2-methylbutanoate	HMDB0040157	5203
2346	HMDB0040167	(±)-3-Octyl acetate	HMDB0040167	5212
2347	HMDB0040195	Ethyl octanoate	HMDB0040195	7799
2348	HMDB0040211	Butyl hexanoate	HMDB0040211	1229
2349	HMDB0040529	3-Methylbutyl pentanoate	HMDB0040529	7490
2350	HMDB0041216	2,6-Dimethyl-7-octene-2,6-diol	HMDB0041216	1201
2351	HMDB0061805	(2S)-2-Ethylhexyl acetate	HMDB0061805	1065
2352	HMDB0094654	1-Methylethyl heptanoic acid	HMDB0094654	5207
2353	CHEBI:120941	NA	NA	NA
2354	CHEBI:16053	NA	NA	NA
2355	CHEBI:30813	NA	NA	NA
2356	CHEBI:44499	NA	NA	NA
2357	CHEBI:48250	NA	NA	NA
2358	CHEBI:48251	NA	NA	NA

2359	CHEBI:48255	NA	NA	NA
2360	CHEBI:48256	NA	NA	NA
2361	CHEBI:48258	NA	NA	NA
2362	CHEBI:48260	NA	NA	NA
2363	CHEBI:53459	NA	NA	NA
2364	CHEBI:59627	NA	NA	NA
2365	CHEBI:606526	NA	NA	NA
2366	CHEBI:87320	NA	NA	NA
2367	CHEBI:87326	NA	NA	NA
2368	CHEBI:87332	NA	NA	NA
2369	CHEBI:87392	NA	NA	NA
2370	CHEBI:87421	NA	NA	NA
2371	CHEBI:87426	NA	NA	NA
2372	CHEBI:87495	NA	NA	NA
2373	CHEBI:87559	NA	NA	NA
2374	CHEBI:88553	NA	NA	NA
2375	HMDB0031513	(±)-3-Hydroxynonanoic acid	HMDB0031513	3655
2376	HMDB0034040	2,4,6-Triethyl-1,3,5-trioxane	HMDB0034040	9566
2377	CHEBI:55538	NA	NA	NA
2378	CHEBI:72563	NA	NA	NA
2379	CHEBI:73753	NA	NA	NA
2380	CHEBI:78839	NA	NA	NA
2381	CHEBI:79121	NA	NA	NA
2382	CHEBI:87270	NA	NA	NA
2383	C07473	NA	NA	NA
2384	HMDB0013223	Butyrylcholine	HMDB0013223	1723
2385	HMDB0029936	(2S,4R,5S)-Muscarine	HMDB0029936	5079
2386	CHEBI:327449	NA	NA	NA
2387	CHEBI:522933	NA	NA	NA
2388	HMDB0030083	(±)-Hydroxycitronellol	HMDB0030083	2494
2389	HMDB0037639	xi-1-Ethoxy-1-hexyloxyethane	HMDB0037639	1082
2390	HMDB0040267	1,1-Dimethoxyoctane	HMDB0040267	6143
2391	HMDB0061936	Isooctanedioldibutyrate	HMDB0061936	9537
2392	CHEBI:88828	NA	NA	NA
2393	C00327	NA	NA	NA
2394	HMDB0000904	Citrulline	HMDB0000904	9750
2395	HMDB0003148	Argininic acid	HMDB0003148	1604
2396	CHEBI:16349	NA	NA	NA
2397	CHEBI:18211	NA	NA	NA
2398	CHEBI:49007	NA	NA	NA
2399	CHEBI:57743	NA	NA	NA
2400	C00072	NA	NA	NA
2401	C01041	NA	NA	NA
2402	C02670	NA	NA	NA
2403	C03217	NA	NA	NA
2404	C03289	NA	NA	NA
2405	C03387	NA	NA	NA
2406	C04053	NA	NA	NA
2407	C04349	NA	NA	NA
2408	C04471	NA	NA	NA
2409	C06033	NA	NA	NA
2410	C06430	NA	NA	NA
2411	C06440	NA	NA	NA
2412	C19806	NA	NA	NA
2413	C20364	NA	NA	NA
2414	HMDB0000044	Ascorbic acid	HMDB0000044	5467
2415	HMDB0006355	D-Glucurono-6,3-lactone	HMDB0006355	2724
2416	HMDB0014273	NA	NA	NA
2417	HMDB0029945	NA	NA	NA
2418	HMDB0031193	1,2,3-Propanetricarboxylic acid	HMDB0031193	1492
2419	CHEBI:100148	NA	NA	NA
2420	CHEBI:15623	NA	NA	NA
2421	CHEBI:15624	NA	NA	NA
2422	CHEBI:16278	NA	NA	NA
2423	CHEBI:17039	NA	NA	NA
2424	CHEBI:17782	NA	NA	NA
2425	CHEBI:17801	NA	NA	NA
2426	CHEBI:18268	NA	NA	NA
2427	CHEBI:28745	NA	NA	NA
2428	CHEBI:29073	NA	NA	NA
2429	CHEBI:41893	NA	NA	NA
2430	CHEBI:45969	NA	NA	NA
2431	CHEBI:51384	NA	NA	NA
2432	CHEBI:51438	NA	NA	NA
2433	CHEBI:51440	NA	NA	NA
2434	CHEBI:55433	NA	NA	NA
2435	CHEBI:55463	NA	NA	NA
2436	CHEBI:62479	NA	NA	NA
2437	CHEBI:73681	NA	NA	NA
2438	C06359	NA	NA	NA
2439	C10389	NA	NA	NA
2440	C12299	NA	NA	NA
2441	C14083	NA	NA	NA
2442	C14102	NA	NA	NA
2443	C14111	NA	NA	NA
2444	HMDB0029699	Cinnamyl acetate	HMDB0029699	5315
2445	HMDB0033834	Ethyl cinnamate	HMDB0033834	5284

2446	HMDB0036905	2-Propenyl phenylacetate	HMDB0036905	1571
2447	HMDB0037142	2-(Phenylethenyl)-1,3-dioxolane	HMDB0037142	6284
2448	HMDB0037145	3-(4-Methoxyphenyl)-2-methyl-2-propenal	HMDB0037145	5388
2449	HMDB0126379	NA	NA	NA
2450	HMDB0126467	NA	NA	NA
2451	HMDB0132267	NA	NA	NA
2452	HMDB0132973	NA	NA	NA
2453	HMDB0133466	NA	NA	NA
2454	HMDB0133677	NA	NA	NA
2455	HMDB0133678	NA	NA	NA
2456	HMDB0133679	NA	NA	NA
2457	HMDB0133680	NA	NA	NA
2458	HMDB0133681	NA	NA	NA
2459	CHEBI:31402	NA	NA	NA
2460	CHEBI:34447	NA	NA	NA
2461	CHEBI:35796	NA	NA	NA
2462	HMDB0031162	3,3'-Thiobispropanoic acid	HMDB0031162	8096
2463	CHEBI:1093323	NA	NA	NA
2464	C01624	NA	NA	NA
2465	C02666	NA	NA	NA
2466	C10667	NA	NA	NA
2467	C14784	NA	NA	NA
2468	C20327	NA	NA	NA
2469	C20646	NA	NA	NA
2470	HMDB0002040	4-Methoxycinnamic acid	HMDB0002040	6994
2471	HMDB0030903	3-(4-Methylphenyl)oxiranecarboxylic acid	HMDB0030903	1522
2472	HMDB0031055	(Z)-10-Hydroxy-8-decene-4,6-dienoic acid	HMDB0031055	9545
2473	HMDB0033248	Di-alpha-furfuryl ether	HMDB0033248	2630
2474	HMDB0038712	(S)-Isosclerone	HMDB0038712	1044
2475	HMDB0038965	(E)-10-Hydroxy-2-decene-4,6-dienoic acid	HMDB0038965	1014
2476	HMDB0039471	3-(4-Hydroxy-2-methoxyphenyl)-2-propenal	HMDB0039471	5374
2477	HMDB0062273	1,2-Dihydroxy-3,4-epoxy-1,2,3,4-tetrahydronaphthalene	HMDB0062273	1869
2478	HMDB0062729	NA	NA	NA
2479	HMDB0125103	NA	NA	NA
2480	HMDB0125518	NA	NA	NA
2481	HMDB0131168	NA	NA	NA
2482	HMDB0133457	NA	NA	NA
2483	HMDB0133611	NA	NA	NA
2484	HMDB0133612	NA	NA	NA
2485	HMDB0133613	NA	NA	NA
2486	HMDB0133614	NA	NA	NA
2487	HMDB0133615	NA	NA	NA
2488	HMDB0134055	NA	NA	NA
2489	HMDB0135647	NA	NA	NA
2490	HMDB0135649	NA	NA	NA
2491	HMDB0135650	NA	NA	NA
2492	HMDB0135651	NA	NA	NA
2493	HMDB0141076	NA	NA	NA
2494	HMDB0141077	NA	NA	NA
2495	HMDB0141078	NA	NA	NA
2496	HMDB0141782	NA	NA	NA
2497	CHEBI:16547	NA	NA	NA
2498	CHEBI:260249	NA	NA	NA
2499	CHEBI:34048	NA	NA	NA
2500	CHEBI:38760	NA	NA	NA
2501	CHEBI:48541	NA	NA	NA
2502	CHEBI:64437	NA	NA	NA
2503	CHEBI:74122	NA	NA	NA
2504	CHEBI:84260	NA	NA	NA
2505	CHEBI:86558	NA	NA	NA
2506	HMDB0032581	1-(Isothiocyanatomethyl)-4-methoxybenzene	HMDB0032581	1231
2507	C01586	NA	NA	NA
2508	C06332	NA	NA	NA
2509	C06339	NA	NA	NA
2510	C19569	NA	NA	NA
2511	HMDB0000714	Hippuric acid	HMDB0000714	464
2512	HMDB0000992	3-Succinoylpyridine	HMDB0000992	437
2513	HMDB0012884	Adrenochrome	HMDB0012884	2488
2514	HMDB0032398	Methyl n-formylanthranilate	HMDB0032398	1624
2515	HMDB0032595	1-(4-Methoxyphenyl)-2-nitroethylene	HMDB0032595	6975
2516	HMDB0062583	NA	NA	NA
2517	CHEBI:17244	NA	NA	NA
2518	CHEBI:18089	NA	NA	NA
2519	CHEBI:32761	NA	NA	NA
2520	CHEBI:32774	NA	NA	NA
2521	CHEBI:32785	NA	NA	NA
2522	CHEBI:36555	NA	NA	NA
2523	CHEBI:46171	NA	NA	NA
2524	CHEBI:606565	NA	NA	NA
2525	CHEBI:66951	NA	NA	NA
2526	CHEBI:838058	NA	NA	NA
2527	C00082	NA	NA	NA
2528	C01536	NA	NA	NA
2529	C03290	NA	NA	NA
2530	C04368	NA	NA	NA
2531	C06420	NA	NA	NA
2532	C19579	NA	NA	NA

2533	C19712	NA	NA	NA
2534	C20807	NA	NA	NA
2535	HMDB0000158	L-Tyrosine	HMDB0000158	6057
2536	HMDB0000647	NA	NA	NA
2537	HMDB0001119	4-Hydroxy-4-(3-pyridyl)-butanoic acid	HMDB0001119	438
2538	HMDB0002184	L-Threo-3-Phenylserine	HMDB0002184	1231
2539	HMDB0003831	Beta-Tyrosine	HMDB0003831	4403
2540	HMDB0006050	o-Tyrosine	HMDB0006050	9148
2541	HMDB0059720	NA	NA	NA
2542	HMDB0060280	NA	NA	NA
2543	CHEBI:16795	NA	NA	NA
2544	CHEBI:16939	NA	NA	NA
2545	CHEBI:17895	NA	NA	NA
2546	CHEBI:18186	NA	NA	NA
2547	CHEBI:28479	NA	NA	NA
2548	CHEBI:32763	NA	NA	NA
2549	CHEBI:32776	NA	NA	NA
2550	CHEBI:32787	NA	NA	NA
2551	CHEBI:44303	NA	NA	NA
2552	CHEBI:47990	NA	NA	NA
2553	CHEBI:57901	NA	NA	NA
2554	CHEBI:57956	NA	NA	NA
2555	CHEBI:58315	NA	NA	NA
2556	CHEBI:58570	NA	NA	NA
2557	CHEBI:78290	NA	NA	NA
2558	CHEBI:82573	NA	NA	NA
2559	CHEBI:91037	NA	NA	NA
2560	CHEBI:91038	NA	NA	NA
2561	CHEBI:91041	NA	NA	NA
2562	C16355	NA	NA	NA
2563	C16359	NA	NA	NA
2564	HMDB0001970	3-Methyluric acid	HMDB0001970	1180
2565	HMDB0001973	9-Methyluric acid	HMDB0001973	1087
2566	HMDB0003099	1-Methyluric acid	HMDB0003099	6972
2567	HMDB0011107	7-Methyluric acid	HMDB0011107	6916
2568	CHEBI:149031	NA	NA	NA
2569	CHEBI:149744	NA	NA	NA
2570	CHEBI:68441	NA	NA	NA
2571	C03672	NA	NA	NA
2572	C03964	NA	NA	NA
2573	C04044	NA	NA	NA
2574	C05582	NA	NA	NA
2575	C05583	NA	NA	NA
2576	C10447	NA	NA	NA
2577	C10680	NA	NA	NA
2578	C12622	NA	NA	NA
2579	HMDB0000118	Homovanillic acid	HMDB0000118	1738
2580	HMDB0000333	Isohomovanillic acid	HMDB0000333	1605
2581	HMDB0000423	3,4-Dihydroxyhydrocinnamic acid	HMDB0000423	3481
2582	HMDB0000755	Hydroxyphenyllactic acid	HMDB0000755	9378
2583	HMDB0002643	HPPA	HMDB0002643	10225
2584	HMDB0004061	3-Methoxy-4-hydroxyphenylglycolaldehyde	HMDB0004061	4407
2585	HMDB0004285	NA	NA	NA
2586	HMDB0006776	NA	NA	NA
2587	HMDB0029232	3-Hydroxyphenyllactate	HMDB0029232	2657
2588	HMDB0029273	2,6-Dimethoxybenzoic acid	HMDB0029273	1510
2589	HMDB0029646	2',6'-Dihydroxy-4'-methoxyacetophenone	HMDB0029646	2413
2590	HMDB0033624	(±)-2-Hydroxy-3-(2-hydroxyphenyl)propanoic acid	HMDB0033624	3083
2591	HMDB0037274	Maltol propionate	HMDB0037274	1103
2592	HMDB0041270	2',4'-Dihydroxy-6'-methoxyacetophenone	HMDB0041270	1096
2593	HMDB0059763	NA	NA	NA
2594	HMDB0062595	Meta-hydroxyphenylhydracrylic Acid	HMDB0062595	2260
2595	HMDB0124923	NA	NA	NA
2596	HMDB0125533	NA	NA	NA
2597	HMDB0125591	NA	NA	NA
2598	HMDB0125595	NA	NA	NA
2599	HMDB0126386	NA	NA	NA
2600	HMDB0127495	NA	NA	NA
2601	HMDB0129348	NA	NA	NA
2602	HMDB0131428	NA	NA	NA
2603	HMDB0133494	NA	NA	NA
2604	HMDB0133788	NA	NA	NA
2605	HMDB0134042	NA	NA	NA
2606	HMDB0134043	NA	NA	NA
2607	HMDB0140294	NA	NA	NA
2608	HMDB0140892	NA	NA	NA
2609	HMDB0240266	NA	NA	NA
2610	CHEBI:16003	NA	NA	NA
2611	CHEBI:17385	NA	NA	NA
2612	CHEBI:18136	NA	NA	NA
2613	CHEBI:27906	NA	NA	NA
2614	CHEBI:296881	NA	NA	NA
2615	CHEBI:46477	NA	NA	NA
2616	CHEBI:48400	NA	NA	NA
2617	CHEBI:49070	NA	NA	NA
2618	CHEBI:49071	NA	NA	NA
2619	CHEBI:545935	NA	NA	NA

2620	CHEBI:545959	NA	NA	NA
2621	CHEBI:562351	NA	NA	NA
2622	CHEBI:61462	NA	NA	NA
2623	CHEBI:62195	NA	NA	NA
2624	CHEBI:64939	NA	NA	NA
2625	CHEBI:64942	NA	NA	NA
2626	CHEBI:67380	NA	NA	NA
2627	CHEBI:70818	NA	NA	NA
2628	CHEBI:78336	NA	NA	NA
2629	CHEBI:85344	NA	NA	NA
2630	CHEBI:85357	NA	NA	NA
2631	CHEBI:86369	NA	NA	NA
2632	CHEBI:86541	NA	NA	NA
2633	C00392	NA	NA	NA
2634	C00794	NA	NA	NA
2635	C01489	NA	NA	NA
2636	C01507	NA	NA	NA
2637	C01697	NA	NA	NA
2638	C01722	NA	NA	NA
2639	HMDB0000107	Galactitol	HMDB0000107	1185
2640	HMDB0000247	Sorbitol	HMDB0000247	5780
2641	HMDB0000765	Mannitol	HMDB0000765	6251
2642	HMDB0001363	NA	NA	NA
2643	HMDB0011632	L-Iditol	HMDB0011632	5460
2644	CHEBI:16813	NA	NA	NA
2645	CHEBI:16899	NA	NA	NA
2646	CHEBI:17459	NA	NA	NA
2647	CHEBI:17924	NA	NA	NA
2648	CHEBI:18202	NA	NA	NA
2649	CHEBI:28789	NA	NA	NA
2650	CHEBI:38030	NA	NA	NA
2651	CHEBI:87978	NA	NA	NA
2652	C02952	NA	NA	NA
2653	C06070	NA	NA	NA
2654	C07159	NA	NA	NA
2655	C10448	NA	NA	NA
2656	C17822	NA	NA	NA
2657	C17823	NA	NA	NA
2658	C17825	NA	NA	NA
2659	C19351	NA	NA	NA
2660	C20271	NA	NA	NA
2661	HMDB0029456	Amyl 2-furoate	HMDB0029456	7400
2662	HMDB0032607	(±)-threo-Anethole glycol	HMDB0032607	3016
2663	HMDB0033394	4-Ethyl-2,6-dimethoxyphenol	HMDB0033394	6171
2664	HMDB0036522	Verimol J	HMDB0036522	1065
2665	HMDB0037641	4-(Ethoxymethyl)-2-methoxyphenol	HMDB0037641	6158
2666	HMDB0037727	Furfuryl pentanoate	HMDB0037727	6195
2667	HMDB0038181	Peperinic acid	HMDB0038181	1562
2668	HMDB0038354	2-Ethoxy-4-(methoxymethyl)phenol	HMDB0038354	6453
2669	HMDB0039874	Furfuryl isovalerate	HMDB0039874	6165
2670	HMDB0059891	Isoamyl 2-furoate	HMDB0059891	6920
2671	CHEBI:18130	NA	NA	NA
2672	CHEBI:19051	NA	NA	NA
2673	CHEBI:28045	NA	NA	NA
2674	CHEBI:4559	NA	NA	NA
2675	CHEBI:64817	NA	NA	NA
2676	CHEBI:66896	NA	NA	NA
2677	CHEBI:66953	NA	NA	NA
2678	CHEBI:66958	NA	NA	NA
2679	CHEBI:86531	NA	NA	NA
2680	CHEBI:86961	NA	NA	NA
2681	C12294	NA	NA	NA
2682	C14113	NA	NA	NA
2683	HMDB0030006	2,2,7,7-Tetramethyl-1,6-dioxaspiro[4.4]non-3-ene	HMDB0030006	1085
2684	HMDB0030424	Linalyl formate	HMDB0030424	6104
2685	HMDB0032050	alpha-Terpeneol formate	HMDB0032050	1653
2686	HMDB0032463	5-Pentyl-3h-furan-2-one	HMDB0032463	9855
2687	HMDB0034708	Methyl 4,8-decadienoate	HMDB0034708	1317
2688	HMDB0034730	Methyl (2E,4Z)-decadienoate	HMDB0034730	6436
2689	HMDB0035156	Neryl formate	HMDB0035156	5354
2690	HMDB0036191	4-Hydroxy-4-methyl-7-decenoic acid gamma-lactone	HMDB0036191	6436
2691	HMDB0036215	Ethyl octynecarboxylate	HMDB0036215	6145
2692	HMDB0037388	Tsibulin 2	HMDB0037388	1435
2693	HMDB0037829	6-(3-Hexenyl)tetrahydro-2H-pyran-2-one	HMDB0037829	2084
2694	HMDB0038005	xi-2-Hexyl-5-methyl-3(2H)-furanone	HMDB0038005	5669
2695	HMDB0038068	(3E,6Z)-Nonadien-1-yl acetate	HMDB0038068	7158
2696	HMDB0038079	(2E,6Z)-2,6-Nonadien-1-yl acetate	HMDB0038079	1243
2697	HMDB0038245	Bornyl formate	HMDB0038245	5184
2698	HMDB0038279	cis-3-Hexenyl tiglate	HMDB0038279	1546
2699	HMDB0040595	Allyl cyclohexylacetate	HMDB0040595	2203
2700	HMDB0059816	Methyl geranate	HMDB0059816	5365
2701	CHEBI:31648	NA	NA	NA
2702	C05580	NA	NA	NA
2703	C05616	NA	NA	NA
2704	C18724	NA	NA	NA
2705	HMDB0001866	3,4-Dihydroxymandelic acid	HMDB0001866	8578
2706	HMDB0013198	4-O-Methylgallic acid	HMDB0013198	7801



2707	HMDB0029650	Methyl 2,4,6-trihydroxy benzoate	HMDB0029650	7660
2708	HMDB0125522	NA	NA	NA
2709	HMDB0125542	NA	NA	NA
2710	HMDB0126480	NA	NA	NA
2711	HMDB0130405	NA	NA	NA
2712	HMDB0130407	NA	NA	NA
2713	HMDB0130408	NA	NA	NA
2714	HMDB0130482	NA	NA	NA
2715	HMDB0140912	NA	NA	NA
2716	CHEBI:27637	NA	NA	NA
2717	CHEBI:28647	NA	NA	NA
2718	CHEBI:297061	NA	NA	NA
2719	C10356	NA	NA	NA
2720	C10858	NA	NA	NA
2721	C12449	NA	NA	NA
2722	C20673	NA	NA	NA
2723	HMDB0006348	Pseudoecgonine	HMDB0006348	4438
2724	HMDB0006548	Ecgonine	HMDB0006548	4430
2725	HMDB0094728	2-Hepteneoylglycine	HMDB0094728	
2726	HMDB0094729	3-Hepteneoylglycine	HMDB0094729	
2727	HMDB0094730	4-Hepteneoylglycine	HMDB0094730	
2728	HMDB0094731	5-Hepteneoylglycine	HMDB0094731	
2729	CHEBI:32072	NA	NA	NA
2730	CHEBI:4743	NA	NA	NA
2731	CHEBI:64791	NA	NA	NA
2732	CHEBI:64807	NA	NA	NA
2733	CHEBI:708641	NA	NA	NA
2734	CHEBI:74958	NA	NA	NA
2735	C17715	NA	NA	NA
2736	HMDB0000947	Undecanoic acid	HMDB0000947	8180
2737	HMDB0002373	4,6-Dimethylnonanoic acid	HMDB0002373	1362
2738	HMDB0032044	Hexyl 3-methylbutanoate	HMDB0032044	6145
2739	HMDB0032325	2-Hexyl-4,5-dimethyl-1,3-dioxolane	HMDB0032325	9488
2740	HMDB0032448	Octanal propyleneglycol acetal	HMDB0032448	5601
2741	HMDB0033618	3-Methylbutyl hexanoate	HMDB0033618	1661
2742	HMDB0033848	Methyl decanoate	HMDB0033848	8050
2743	HMDB0034134	Octyl propanoate	HMDB0034134	6109
2744	HMDB0034456	9-Methyldecanoic acid	HMDB0034456	5312
2745	HMDB0034458	Isobutyl enanthate	HMDB0034458	2451
2746	HMDB0034460	Heptyl butanoate	HMDB0034460	6259
2747	HMDB0036034	6,6-Dimethoxy-2,5,5-trimethyl-2-hexene	HMDB0036034	1067
2748	HMDB0036229	Pentyl hexanoate	HMDB0036229	1088
2749	HMDB0038237	xi-8-Methyldecanoic acid	HMDB0038237	2181
2750	HMDB0038267	7,7-Diethoxy-3-heptene	HMDB0038267	5369
2751	HMDB0039215	Hexyl 2-methylbutanoate	HMDB0039215	2483
2752	HMDB0040171	Heptyl 2-methylpropanoate	HMDB0040171	6130
2753	HMDB0040193	Ethyl nonanoate	HMDB0040193	3125
2754	HMDB0040266	Nonyl acetate	HMDB0040266	8918
2755	HMDB0041559	Butyl heptanoate	HMDB0041559	2150
2756	HMDB0059831	Propyl octanoate	HMDB0059831	6935
2757	HMDB0059860	2-Methylbutyl hexanoate	HMDB0059860	1028
2758	HMDB0062119	Hexyl valerate	HMDB0062119	7069
2759	HMDB0094659	1,1-Dimethylethyl heptanoic acid	HMDB0094659	5452
2760	CHEBI:32368	NA	NA	NA
2761	CHEBI:48317	NA	NA	NA
2762	CHEBI:63864	NA	NA	NA
2763	CHEBI:87374	NA	NA	NA
2764	CHEBI:87501	NA	NA	NA
2765	CHEBI:87511	NA	NA	NA
2766	CHEBI:87542	NA	NA	NA
2767	C06678	NA	NA	NA
2768	HMDB0011635	p-Cresol sulfate	HMDB0011635	4615
2769	HMDB0034782	Benzyl sulfate	HMDB0034782	2081
2770	HMDB0059933	p-Toluenesulfonic acid	HMDB0059933	6101
2771	CHEBI:18312	NA	NA	NA
2772	CHEBI:82914	NA	NA	NA
2773	C02774	NA	NA	NA
2774	C18067	NA	NA	NA
2775	HMDB0002203	3-Hydroxycapric acid	HMDB0002203	5312
2776	HMDB0010725	(R)-3-Hydroxydecanoic acid	HMDB0010725	5312
2777	HMDB0033201	9-Hydroxydecanoic acid	HMDB0033201	4575
2778	HMDB0033574	(1R,2R,4R,8R)-p-Menthane-2,8,9-triol	HMDB0033574	7380
2779	HMDB0033640	7-Methyl-3-methylene-1,6,7-octanetriol	HMDB0033640	1060
2780	HMDB0034783	cis-p-Menthane-1,7,8-triol	HMDB0034783	1268
2781	HMDB0038186	2,6-Dimethyl-7-octene-2,3,6-triol	HMDB0038186	1524
2782	HMDB0039470	(1S,2S,4R,8R)-p-Menthane-1,2,9-triol	HMDB0039470	7380
2783	HMDB0039668	2-Hexyl-1,3-dioxan-5-ol	HMDB0039668	7436
2784	HMDB0039669	2-Hexyl-1,3-dioxolane-4-methanol	HMDB0039669	1557
2785	HMDB0039893	(1R,2R,4S)-p-Menthane-1,2,8-triol	HMDB0039893	1867
2786	HMDB0040329	xi-5-Hydroxydecanoic acid	HMDB0040329	1825
2787	HMDB0041600	Ethyl (±)-3-hydroxyoctanoate	HMDB0041600	1109
2788	HMDB0094656	2-Hydroxydecanoate	HMDB0094656	5312
2789	CHEBI:132983	NA	NA	NA
2790	CHEBI:133174	NA	NA	NA
2791	CHEBI:17409	NA	NA	NA
2792	CHEBI:37371	NA	NA	NA
2793	CHEBI:50451	NA	NA	NA

2794	CHEBI:64265	NA	NA	NA
2795	CHEBI:64269	NA	NA	NA
2796	CHEBI:78951	NA	NA	NA
2797	HMDB0012286	S-Prenyl-L-cysteine	HMDB0012286	5121
2798	CHEBI:47914	NA	NA	NA
2799	CHEBI:61637	NA	NA	NA
2800	C06336	NA	NA	NA
2801	C06674	NA	NA	NA
2802	HMDB0059724	Pyrocatechol sulfate	HMDB0059724	3083
2803	HMDB0061713	NA	NA	NA
2804	HMDB0240263	NA	NA	NA
2805	CHEBI:27758	NA	NA	NA
2806	CHEBI:27802	NA	NA	NA
2807	CHEBI:68505	NA	NA	NA
2808	CHEBI:71062	NA	NA	NA
2809	CHEBI:71157	NA	NA	NA
2810	CHEBI:71158	NA	NA	NA
2811	CHEBI:71159	NA	NA	NA
2812	CHEBI:71160	NA	NA	NA
2813	CHEBI:71267	NA	NA	NA
2814	C00944	NA	NA	NA
2815	C04049	NA	NA	NA
2816	C05601	NA	NA	NA
2817	C06201	NA	NA	NA
2818	HMDB0012710	3-Dehydroquinic acid	HMDB0012710	4393
2819	HMDB0059927	NA	NA	NA
2820	HMDB0240294	NA	NA	NA
2821	CHEBI:17947	NA	NA	NA
2822	CHEBI:51822	NA	NA	NA
2823	CHEBI:73089	NA	NA	NA
2824	CHEBI:87773	NA	NA	NA
2825	CHEBI:915	NA	NA	NA
2826	C17204	NA	NA	NA
2827	HMDB0031173	6-Hydroxy-1H-indole-3-acetamide	HMDB0031173	2865
2828	CHEBI:19363	NA	NA	NA
2829	CHEBI:563250	NA	NA	NA
2830	C05659	NA	NA	NA
2831	C06212	NA	NA	NA
2832	C10763	NA	NA	NA
2833	C13665	NA	NA	NA
2834	HMDB0004095	5-Methoxytryptamine	HMDB0004095	1833
2835	HMDB0004369	N-Methylserotonin	HMDB0004369	1508
2836	HMDB0030533	Alline	HMDB0030533	7312
2837	CHEBI:2089	NA	NA	NA
2838	CHEBI:31085	NA	NA	NA
2839	CHEBI:4055	NA	NA	NA
2840	CHEBI:48294	NA	NA	NA
2841	CHEBI:48295	NA	NA	NA
2842	CHEBI:48297	NA	NA	NA
2843	CHEBI:48298	NA	NA	NA
2844	C00191	NA	NA	NA
2845	C00333	NA	NA	NA
2846	C00470	NA	NA	NA
2847	C00558	NA	NA	NA
2848	C00618	NA	NA	NA
2849	C00905	NA	NA	NA
2850	C01062	NA	NA	NA
2851	C02024	NA	NA	NA
2852	C03342	NA	NA	NA
2853	C06472	NA	NA	NA
2854	C06473	NA	NA	NA
2855	C06477	NA	NA	NA
2856	C08348	NA	NA	NA
2857	C08350	NA	NA	NA
2858	C15673	NA	NA	NA
2859	C16245	NA	NA	NA
2860	HMDB0000127	D-Glucuronic acid	HMDB0000127	4447
2861	HMDB0002545	Galacturonic acid	HMDB0002545	8474
2862	HMDB0002704	Iduronic acid	HMDB0002704	1884
2863	HMDB0003348	NA	NA	NA
2864	HMDB0003363	Pectic acid	HMDB0003363	4459
2865	HMDB0003402	Pectin	HMDB0003402	4414
2866	HMDB0006334	3-Dehydro-L-gulonate	HMDB0006334	4392
2867	HMDB0011731	5-Keto-D-gluconate	HMDB0011731	157
2868	HMDB0011732	2-Keto-L-gluconate	HMDB0011732	50
2869	HMDB0038491	NA	NA	NA
2870	HMDB0062783	NA	NA	NA
2871	HMDB0127846	NA	NA	NA
2872	CHEBI:16142	NA	NA	NA
2873	CHEBI:16224	NA	NA	NA
2874	CHEBI:17426	NA	NA	NA
2875	CHEBI:19543	NA	NA	NA
2876	CHEBI:21099	NA	NA	NA
2877	CHEBI:21338	NA	NA	NA
2878	CHEBI:24769	NA	NA	NA
2879	CHEBI:27469	NA	NA	NA
2880	CHEBI:28378	NA	NA	NA

2881	CHEBI:28481	NA	NA	NA
2882	CHEBI:28860	NA	NA	NA
2883	CHEBI:33885	NA	NA	NA
2884	CHEBI:4126	NA	NA	NA
2885	CHEBI:4153	NA	NA	NA
2886	CHEBI:42717	NA	NA	NA
2887	CHEBI:43394	NA	NA	NA
2888	CHEBI:43832	NA	NA	NA
2889	CHEBI:47903	NA	NA	NA
2890	CHEBI:47948	NA	NA	NA
2891	CHEBI:47949	NA	NA	NA
2892	CHEBI:47950	NA	NA	NA
2893	CHEBI:47952	NA	NA	NA
2894	CHEBI:47953	NA	NA	NA
2895	CHEBI:47954	NA	NA	NA
2896	CHEBI:47962	NA	NA	NA
2897	CHEBI:79047	NA	NA	NA
2898	CHEBI:79049	NA	NA	NA
2899	CHEBI:85257	NA	NA	NA
2900	CHEBI:86363	NA	NA	NA
2901	CHEBI:88378	NA	NA	NA
2902	C03365	NA	NA	NA
2903	C03619	NA	NA	NA
2904	C03659	NA	NA	NA
2905	C03660	NA	NA	NA
2906	C03844	NA	NA	NA
2907	C05163	NA	NA	NA
2908	C06352	NA	NA	NA
2909	C06353	NA	NA	NA
2910	C08257	NA	NA	NA
2911	HMDB0029915	D-4-O-Methyl-myo-inositol	HMDB0029915	
2912	HMDB0029916	NA	NA	NA
2913	HMDB0029965	Methyl beta-D-glucopyranoside	HMDB0029965	4452
2914	HMDB0031437	(-)-Bornesitol	HMDB0031437	
2915	HMDB0031449	Sequoyitol	HMDB0031449	4399
2916	HMDB0033816	Mytilitol	HMDB0033816	
2917	HMDB0034219	D-Pinitol	HMDB0034219	0
2918	HMDB0034221	L-Quebrachitol	HMDB0034221	0
2919	HMDB0034222	NA	NA	NA
2920	HMDB0062564	NA	NA	NA
2921	CHEBI:111	NA	NA	NA
2922	CHEBI:113524	NA	NA	NA
2923	CHEBI:15975	NA	NA	NA
2924	CHEBI:17540	NA	NA	NA
2925	CHEBI:18173	NA	NA	NA
2926	CHEBI:18266	NA	NA	NA
2927	CHEBI:18427	NA	NA	NA
2928	CHEBI:20741	NA	NA	NA
2929	CHEBI:28310	NA	NA	NA
2930	CHEBI:28548	NA	NA	NA
2931	CHEBI:28762	NA	NA	NA
2932	CHEBI:320055	NA	NA	NA
2933	CHEBI:320061	NA	NA	NA
2934	CHEBI:37209	NA	NA	NA
2935	CHEBI:37656	NA	NA	NA
2936	CHEBI:37657	NA	NA	NA
2937	CHEBI:43943	NA	NA	NA
2938	CHEBI:55507	NA	NA	NA
2939	CHEBI:64171	NA	NA	NA
2940	CHEBI:73918	NA	NA	NA
2941	C03107	NA	NA	NA
2942	C08486	NA	NA	NA
2943	C09837	NA	NA	NA
2944	C09861	NA	NA	NA
2945	C09863	NA	NA	NA
2946	C11338	NA	NA	NA
2947	C12300	NA	NA	NA
2948	C12301	NA	NA	NA
2949	C12302	NA	NA	NA
2950	C12306	NA	NA	NA
2951	HMDB0030867	Dihydro-5-(2-octenyl)-2(3H)-furanone	HMDB0030867	5853
2952	HMDB0030945	Methyl 2-undecynoate	HMDB0030945	6152
2953	HMDB0031030	6-Heptyl-5,6-dihydro-2H-pyran-2-one	HMDB0031030	6183
2954	HMDB0031692	cis-3-Hexenyl trans-4-hexenoate	HMDB0031692	1298
2955	HMDB0032051	alpha-Terpineol acetate	HMDB0032051	1110
2956	HMDB0032193	alpha-Campholene acetate	HMDB0032193	6127
2957	HMDB0032331	(Z)-4-Hydroxy-6-dodecenoic acid lactone	HMDB0032331	5352
2958	HMDB0032901	Yuzu lactone	HMDB0032901	1453
2959	HMDB0034903	(3R,3aR,7aS)-3-Butylhexahydro-1(3H)-isobenzofuranone	HMDB0034903	1236
2960	HMDB0035157	Geranyl acetate	HMDB0035157	1549
2961	HMDB0036048	Artemisia alcohol acetate	HMDB0036048	5242
2962	HMDB0036599	Ethyl 2Z,4E-decadienoic acid	HMDB0036599	5281
2963	HMDB0037301	p-Menth-1-en-9-ol acetate	HMDB0037301	5271
2964	HMDB0038270	cis-3-Hexenyl cis-3-hexenoate	HMDB0038270	6435
2965	HMDB0038280	cis-3-Hexenyl trans-2-hexenoate	HMDB0038280	5367
2966	HMDB0039522	Linalyl acetate	HMDB0039522	8294
2967	HMDB0040206	Allyl 3-cyclohexylpropionate	HMDB0040206	1761

2968	HMDB0040227	Isopulegol acetate	HMDB0040227	9457
2969	HMDB0040397	(-)-Bornyl acetate	HMDB0040397	6448
2970	HMDB0040725	Fenchyl acetate	HMDB0040725	1401
2971	HMDB0041469	Dihydrocarveol acetate	HMDB0041469	3024
2972	HMDB0041494	(S)-Santolina acetate	HMDB0041494	2163
2973	HMDB0061816	3,7-Dimethyl-2,6-octadien-1-ylacetate	HMDB0061816	7780
2974	CHEBI:16165	NA	NA	NA
2975	CHEBI:37210	NA	NA	NA
2976	CHEBI:37212	NA	NA	NA
2977	CHEBI:5331	NA	NA	NA
2978	CHEBI:78333	NA	NA	NA
2979	CHEBI:78334	NA	NA	NA
2980	CHEBI:78335	NA	NA	NA
2981	C03372	NA	NA	NA
2982	C04309	NA	NA	NA
2983	HMDB0011750	Dihydroxyacetone Phosphate Acyl Ester	HMDB0011750	6857
2984	CHEBI:15835	NA	NA	NA
2985	CHEBI:16897	NA	NA	NA
2986	CHEBI:58002	NA	NA	NA
2987	CHEBI:63321	NA	NA	NA
2988	CHEBI:90796	NA	NA	NA
2989	CHEBI:90798	NA	NA	NA
2990	C16366	NA	NA	NA
2991	C18498	NA	NA	NA
2992	HMDB0004400	5-Acetylamino-6-amino-3-methyluracil	HMDB0004400	8829
2993	HMDB0059771	6-amino-5[N-methylformylamino]-1-methyluracil	HMDB0059771	9920
2994	CHEBI:81788	NA	NA	NA
2995	CHEBI:89861	NA	NA	NA
2996	C09870	NA	NA	NA
2997	C12298	NA	NA	NA
2998	C16825	NA	NA	NA
2999	C16947	NA	NA	NA
3000	HMDB0000529	5Z-Dodecenoic acid	HMDB0000529	5312
3001	HMDB0010729	trans-Dodec-2-enoic acid	HMDB0010729	5282
3002	HMDB0029585	Methyl 10-undecenoate	HMDB0029585	8138
3003	HMDB0029763	Allyl nonanoate	HMDB0029763	6141
3004	HMDB0031683	xi-Dihydro-5-octyl-2(3H)-furanone	HMDB0031683	1682
3005	HMDB0032214	cis-4-Decenyl acetate	HMDB0032214	5352
3006	HMDB0032235	2,6-Dimethyl-5-heptenal propyleneglycol acetal	HMDB0032235	4415
3007	HMDB0032248	11-Dodecenoic acid	HMDB0032248	1252
3008	HMDB0033378	cis-3-Hexenyl hexanoate	HMDB0033378	5352
3009	HMDB0034160	(±)-Citronellyl acetate	HMDB0034160	9017
3010	HMDB0034844	Citronellyl acetate	HMDB0034844	6708
3011	HMDB0036182	5,5-Dibutyl-4,5-dihydro-2(3H)furanone	HMDB0036182	1060
3012	HMDB0037186	Rhodinyl acetate	HMDB0037186	8833
3013	HMDB0037305	Methyl 9-undecenoate	HMDB0037305	1174
3014	HMDB0037329	Ethyl 2-decenoate	HMDB0037329	5463
3015	HMDB0037498	1-Ethenylhexyl butanoate	HMDB0037498	2789
3016	HMDB0037742	xi-5-Dodecanolide	HMDB0037742	1284
3017	HMDB0037813	3-Heptyldihydro-5-methyl-2(3H)-furanone	HMDB0037813	6199
3018	HMDB0038081	2-Octenyl butyrate	HMDB0038081	1243
3019	HMDB0038269	Hexyl 2E-hexenoate	HMDB0038269	6435
3020	HMDB0038895	7-Hexyl-2-oxepanone	HMDB0038895	6183
3021	HMDB0038924	2-Hexenyl hexanoate	HMDB0038924	5352
3022	HMDB0039220	Ethyl 4-decenoate	HMDB0039220	5362
3023	HMDB0040158	Hexyl 2-methyl-3-pentenoate	HMDB0040158	7158
3024	HMDB0040163	Hexyl 2-methyl-4-pentenoate	HMDB0040163	5735
3025	HMDB0040361	1,1-Dimethoxy-3,7-dimethyl-2,6-octadiene	HMDB0040361	5352
3026	HMDB0041264	(±)-Menthyl acetate	HMDB0041264	2206
3027	HMDB0041449	[(3,7-Dimethyl-6-octenyl)oxy]acetaldehyde	HMDB0041449	6140
3028	CHEBI:1030421	NA	NA	NA
3029	CHEBI:1115857	NA	NA	NA
3030	CHEBI:37162	NA	NA	NA
3031	CHEBI:37207	NA	NA	NA
3032	CHEBI:38371	NA	NA	NA
3033	CHEBI:38372	NA	NA	NA
3034	CHEBI:38373	NA	NA	NA
3035	CHEBI:38374	NA	NA	NA
3036	CHEBI:38375	NA	NA	NA
3037	CHEBI:38376	NA	NA	NA
3038	CHEBI:38377	NA	NA	NA
3039	CHEBI:38378	NA	NA	NA
3040	CHEBI:38379	NA	NA	NA
3041	CHEBI:38380	NA	NA	NA
3042	CHEBI:38381	NA	NA	NA
3043	CHEBI:70478	NA	NA	NA
3044	CHEBI:83044	NA	NA	NA
3045	CHEBI:86595	NA	NA	NA
3046	CHEBI:87324	NA	NA	NA
3047	CHEBI:87338	NA	NA	NA
3048	CHEBI:87493	NA	NA	NA
3049	C07721	NA	NA	NA
3050	C08458	NA	NA	NA
3051	C08741	NA	NA	NA
3052	C14244	NA	NA	NA
3053	C14298	NA	NA	NA
3054	C14747	NA	NA	NA

3055	C19800	NA	NA	NA
3056	HMDB0014738	Monobenzene	HMDB0014738	7638
3057	HMDB0030646	(Z)-3-(1-Butenyl)-1H-2-benzopyran-1-one	HMDB0030646	2160
3058	HMDB0036460	Safynol	HMDB0036460	1317
3059	CHEBI:28234	NA	NA	NA
3060	CHEBI:34380	NA	NA	NA
3061	CHEBI:62527	NA	NA	NA
3062	HMDB0000603	cis-4-Decenedioic acid	HMDB0000603	9545
3063	HMDB0013227	cis-5-Decenedioic acid	HMDB0013227	7563
3064	HMDB0030989	5-Pentyltetrahydro-2-oxo-3-furancarboxylic acid	HMDB0030989	1317
3065	HMDB0030990	alpha-Carboxy-delta-nonolactone	HMDB0030990	1317
3066	HMDB0034491	(±)-Camphoric acid	HMDB0034491	2149
3067	HMDB0034971	(1R,2R,3S,1'R)-Nepetalinic acid	HMDB0034971	1556
3068	HMDB0036715	Matsutakic acid A	HMDB0036715	1058
3069	CHEBI:76283	NA	NA	NA
3070	CHEBI:89730	NA	NA	NA
3071	HMDB0036451	(S)-gamma-Calacorene	HMDB0036451	5315
3072	HMDB0036453	3,4-Dihydrocadalene	HMDB0036453	5287
3073	HMDB0038204	alpha-Corocalene	HMDB0038204	5316
3074	HMDB0059829	Isolongifolene, 4,5,9,10-dehydro-	HMDB0059829	5887
3075	HMDB0059858	beta-Calacorene	HMDB0059858	5296
3076	CHEBI:89675	NA	NA	NA
3077	C02679	NA	NA	NA
3078	HMDB0000638	Dodecanoic acid	HMDB0000638	3893
3079	HMDB0030998	Ethyl decanoate	HMDB0030998	8048
3080	HMDB0032310	2-Heptyl butyrate	HMDB0032310	8930
3081	HMDB0032440	Nonanal propyleneglycol acetal	HMDB0032440	9557
3082	HMDB0033619	Hexyl hexanoate	HMDB0033619	2287
3083	HMDB0034128	Isopropyl nonanoate	HMDB0034128	1199
3084	HMDB0034136	Octyl butanoate	HMDB0034136	6103
3085	HMDB0034137	Octyl 2-methylpropanoate	HMDB0034137	6102
3086	HMDB0035410	(R)-Dihydrocitronellol acetate	HMDB0035410	3024
3087	HMDB0036225	Pentyl heptanoate	HMDB0036225	6141
3088	HMDB0040166	Decyl acetate	HMDB0040166	8167
3089	HMDB0059868	Isobutyl octanoate	HMDB0059868	7958
3090	CHEBI:201659	NA	NA	NA
3091	CHEBI:30805	NA	NA	NA
3092	CHEBI:84889	NA	NA	NA
3093	CHEBI:85059	NA	NA	NA
3094	CHEBI:87380	NA	NA	NA
3095	CHEBI:87430	NA	NA	NA
3096	CHEBI:87527	NA	NA	NA
3097	HMDB0029835	Tetrahydroharmol	HMDB0029835	3689
3098	HMDB0032756	N-Methyl-1H-indole-3-propanamide	HMDB0032756	7661
3099	CHEBI:114202	NA	NA	NA
3100	CHEBI:55515	NA	NA	NA
3101	C08277	NA	NA	NA
3102	C14566	NA	NA	NA
3103	C17803	NA	NA	NA
3104	HMDB0000792	Sebacic acid	HMDB0000792	5192
3105	HMDB0031510	R-2-Hydroxy-3-methylbutanoic acid 3-Methylbutanoyl	HMDB0031510	2292
3106	HMDB0040196	Oxalic acid dibutyl ester	HMDB0040196	1630
3107	HMDB0059708	2-Ethylsuberic acid	HMDB0059708	1987
3108	HMDB0059719	Heptylmalonic acid	HMDB0059719	1365
3109	HMDB0059754	3-Methylazelaic acid	HMDB0059754	2245
3110	HMDB0062180	NA	NA	NA
3111	CHEBI:41865	NA	NA	NA
3112	CHEBI:68453	NA	NA	NA
3113	CHEBI:70747	NA	NA	NA
3114	CHEBI:89889	NA	NA	NA
3115	HMDB0028690	Alanyl isoleucine	HMDB0028690	7408
3116	HMDB0028691	Alanyl leucine	HMDB0028691	9680
3117	HMDB0028900	Isoleucyl-Alanine	HMDB0028900	5246
3118	HMDB0028922	Leucylalanine	HMDB0028922	8172
3119	HMDB0094713	NA	NA	NA
3120	CHEBI:61061	NA	NA	NA
3121	CHEBI:64859	NA	NA	NA
3122	CHEBI:73527	NA	NA	NA
3123	CHEBI:73770	NA	NA	NA
3124	CHEBI:73805	NA	NA	NA
3125	CHEBI:73838	NA	NA	NA
3126	CHEBI:74062	NA	NA	NA
3127	CHEBI:74389	NA	NA	NA
3128	CHEBI:74527	NA	NA	NA
3129	HMDB0032443	3-Hydroxynonyl acetate	HMDB0032443	2342
3130	HMDB0059736	2-Hydroxyundecanoate	HMDB0059736	5282
3131	HMDB0061654	NA	NA	NA
3132	CHEBI:71005	NA	NA	NA
3133	CHEBI:77419	NA	NA	NA
3134	CHEBI:78956	NA	NA	NA
3135	CHEBI:79126	NA	NA	NA
3136	C09649	NA	NA	NA
3137	HMDB0035707	(6alpha,7alpha,10alpha)-1(5),3-Aromadendradiene	HMDB0035707	1389
3138	HMDB0036416	beta-Spathulene	HMDB0036416	1592
3139	HMDB0036796	(1alpha,6alpha,7alphaH)-2,4(15)-Copadiene	HMDB0036796	5316
3140	HMDB0038125	1,4,9-Cadinatriene	HMDB0038125	1408
3141	HMDB0059676	beta-Vatirenene	HMDB0059676	6087

3142	HMDB0059857	beta-Vetivenene	HMDB0059857	1447
3143	HMDB0059878	alpha-Curcumene	HMDB0059878	9213
3144	HMDB0059910	(E)-Calamene	HMDB0059910	1022
3145	HMDB0061837	Calamenene	HMDB0061837	1129
3146	HMDB0061838	(-)-alpha-Curcumene	HMDB0061838	4423
3147	CHEBI:10225	NA	NA	NA
3148	CHEBI:62757	NA	NA	NA
3149	CHEBI:88614	NA	NA	NA
3150	CHEBI:89456	NA	NA	NA
3151	C00977	NA	NA	NA
3152	HMDB0013318	Tryptophanamide	HMDB0013318	8936
3153	HMDB0060860	OR-1855	HMDB0060860	1046
3154	CHEBI:16533	NA	NA	NA
3155	CHEBI:48292	NA	NA	NA
3156	CHEBI:59026	NA	NA	NA
3157	CHEBI:791437	NA	NA	NA
3158	C00078	NA	NA	NA
3159	C00525	NA	NA	NA
3160	C00806	NA	NA	NA
3161	C07839	NA	NA	NA
3162	C10968	NA	NA	NA
3163	C14916	NA	NA	NA
3164	HMDB0000929	L-Tryptophan	HMDB0000929	6305
3165	HMDB0013609	D-Tryptophan	HMDB0013609	9060
3166	HMDB0013840	3-Hydroxymethylantipyrine	HMDB0013840	1238
3167	HMDB0014892	Ethotoin	HMDB0014892	3292
3168	HMDB0030396	(±)-Tryptophan	HMDB0030396	1148
3169	HMDB0060533	Nirvanol	HMDB0060533	9148
3170	HMDB0060878	4-Hydroxyantipyrine	HMDB0060878	9888
3171	HMDB0060967	S-nirvanol	HMDB0060967	6540
3172	CHEBI:16296	NA	NA	NA
3173	CHEBI:16828	NA	NA	NA
3174	CHEBI:27897	NA	NA	NA
3175	CHEBI:32713	NA	NA	NA
3176	CHEBI:32724	NA	NA	NA
3177	CHEBI:32729	NA	NA	NA
3178	CHEBI:4888	NA	NA	NA
3179	CHEBI:51053	NA	NA	NA
3180	CHEBI:51054	NA	NA	NA
3181	CHEBI:57719	NA	NA	NA
3182	CHEBI:57912	NA	NA	NA
3183	CHEBI:5862	NA	NA	NA
3184	CHEBI:60359	NA	NA	NA
3185	CHEBI:60360	NA	NA	NA
3186	CHEBI:64554	NA	NA	NA
3187	C01251	NA	NA	NA
3188	C02225	NA	NA	NA
3189	C04593	NA	NA	NA
3190	C05662	NA	NA	NA
3191	HMDB0000379	2-Methylcitric acid	HMDB0000379	515
3192	HMDB0003518	Homocitric acid	HMDB0003518	4394
3193	HMDB0003610	NA	NA	NA
3194	HMDB0006471	Methylisocitric acid	HMDB0006471	513
3195	HMDB0059932	NA	NA	NA
3196	CHEBI:15607	NA	NA	NA
3197	CHEBI:17852	NA	NA	NA
3198	CHEBI:29094	NA	NA	NA
3199	CHEBI:30835	NA	NA	NA
3200	CHEBI:30836	NA	NA	NA
3201	CHEBI:30903	NA	NA	NA
3202	CHEBI:50948	NA	NA	NA
3203	CHEBI:52222	NA	NA	NA
3204	C00725	NA	NA	NA
3205	C16241	NA	NA	NA
3206	HMDB0001451	(R)-Lipoic acid	HMDB0001451	6112
3207	HMDB0014312	(S)-Lipoic acid	HMDB0014312	4451
3208	CHEBI:16494	NA	NA	NA
3209	CHEBI:30314	NA	NA	NA
3210	CHEBI:43796	NA	NA	NA
3211	C09690	NA	NA	NA
3212	C11350	NA	NA	NA
3213	C14132	NA	NA	NA
3214	C14205	NA	NA	NA
3215	HMDB0013825	4-(1,1,3,3-Tetramethylbutyl)-phenol	HMDB0013825	8814
3216	HMDB0031737	delta-Methylionone	HMDB0031737	5372
3217	HMDB0031738	3-Methyl-4-(2,6,6-trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-3-buten-2-one	HMDB0031738	5372
3218	HMDB0032397	Methyl-delta-ionone	HMDB0032397	5463
3219	HMDB0032528	NA	NA	NA
3220	HMDB0035245	1-(2,6,6-Trimethyl-2-cyclohexen-1-yl)-1-penten-3-one	HMDB0035245	5371
3221	HMDB0035631	alpha-Irone	HMDB0035631	5371
3222	HMDB0036023	Etaspirene	HMDB0036023	2221
3223	HMDB0036024	10-Isopropyl-2,7-dimethyl-1-oxaspiro[4.5]deca-3,6-diene	HMDB0036024	2026
3224	HMDB0038130	1-(2,6,6-Trimethyl-1-cyclohexen-1-yl)-1-penten-3-one	HMDB0038130	5375
3225	HMDB0061831	(Z)-alpha-Irone	HMDB0061831	6431
3226	HMDB0133179	NA	NA	NA
3227	CHEBI:10284	NA	NA	NA
3228	CHEBI:34432	NA	NA	NA

3229	CHEBI:88618	NA	NA	NA
3230	CHEBI:88921	NA	NA	NA
3231	C19254	NA	NA	NA
3232	HMDB0029707	2-Amino-3,4-dimethylimidazo[4,5-f]quinoline	HMDB0029707	6227
3233	C18206	NA	NA	NA
3234	HMDB0031017	10-Undecenyl acetate	HMDB0031017	6103
3235	HMDB0031028	Methyl (E)-2-dodecenoate	HMDB0031028	6377
3236	HMDB0031741	Coniferan	HMDB0031741	6224
3237	HMDB0032792	(±)-(E)-3-Methyl-4-decen-1-yl acetate	HMDB0032792	1014
3238	HMDB0034286	Ethyl 10-undecenoate	HMDB0034286	1272
3239	HMDB0037187	Rhodinyl propionate	HMDB0037187	7781
3240	HMDB0037226	Citronellyl propionate	HMDB0037226	8834
3241	HMDB0037626	1-Ethylhexyl tiglate	HMDB0037626	1317
3242	HMDB0037907	2,6,10,10-Tetramethyl-1-oxaspiro[4.5]decan-6-ol	HMDB0037907	6542
3243	HMDB0038078	1,1-Diethoxy-2,6-nonadiene	HMDB0038078	2083
3244	HMDB0039805	4-(3-Hydroxybutyl)-3,3,5-trimethylcyclohexanone	HMDB0039805	1317
3245	HMDB0040451	Oxacyclotetradecan-2-one	HMDB0040451	1555
3246	CHEBI:87153	NA	NA	NA
3247	HMDB0000682	Indoxyl sulfate	HMDB0000682	1025
3248	HMDB0003309	NA	NA	NA
3249	CHEBI:43355	NA	NA	NA
3250	C02367	NA	NA	NA
3251	HMDB0010727	3-Oxododecanoic acid	HMDB0010727	4397
3252	HMDB0037398	4-Acetoxy-2-hexyltetrahydrofuran	HMDB0037398	6145
3253	CHEBI:18037	NA	NA	NA
3254	CHEBI:78977	NA	NA	NA
3255	CHEBI:79164	NA	NA	NA
3256	C04780	NA	NA	NA
3257	C16640	NA	NA	NA
3258	C17076	NA	NA	NA
3259	HMDB0000910	Tridecanoic acid	HMDB0000910	1253
3260	HMDB0029552	Ethyl undecanoate	HMDB0029552	1232
3261	HMDB0031018	Methyl dodecanoate	HMDB0031018	8139
3262	HMDB0032211	Decanal propyleneglycol acetal	HMDB0032211	9539
3263	HMDB0034140	Octyl 3-methylbutanoate	HMDB0034140	2287
3264	HMDB0036217	Pentyl octanoate	HMDB0036217	6118
3265	HMDB0036219	Octyl 2-methylbutyrate	HMDB0036219	5204
3266	HMDB0037311	Decyl propionate	HMDB0037311	2293
3267	HMDB0038729	3-Methylbutyl octanoate	HMDB0038729	1625
3268	HMDB0059900	Propyl decanoate	HMDB0059900	1217
3269	HMDB0061828	9-Methyldodecanoic acid	HMDB0061828	5282
3270	HMDB0061829	Isopropyl dodecanoic acid	HMDB0061829	1683
3271	CHEBI:15720	NA	NA	NA
3272	CHEBI:45919	NA	NA	NA
3273	CHEBI:75084	NA	NA	NA
3274	CHEBI:77359	NA	NA	NA
3275	CHEBI:84872	NA	NA	NA
3276	CHEBI:86973	NA	NA	NA
3277	CHEBI:87386	NA	NA	NA
3278	CHEBI:87494	NA	NA	NA
3279	CHEBI:87536	NA	NA	NA
3280	C08317	NA	NA	NA
3281	HMDB0000387	3-Hydroxydodecanoic acid	HMDB0000387	5312
3282	HMDB0002059	12-Hydroxydodecanoic acid	HMDB0002059	7903
3283	HMDB0010728	(R)-3-Hydroxydodecanoic acid	HMDB0010728	5312
3284	HMDB0040169	xi-5-Hydroxydodecanoic acid	HMDB0040169	2452
3285	CHEBI:36206	NA	NA	NA
3286	CHEBI:36210	NA	NA	NA
3287	CHEBI:36211	NA	NA	NA
3288	CHEBI:36212	NA	NA	NA
3289	CHEBI:36213	NA	NA	NA
3290	CHEBI:36214	NA	NA	NA
3291	CHEBI:36215	NA	NA	NA
3292	CHEBI:36216	NA	NA	NA
3293	CHEBI:39567	NA	NA	NA
3294	CHEBI:43197	NA	NA	NA
3295	CHEBI:76937	NA	NA	NA
3296	CHEBI:78978	NA	NA	NA
3297	CHEBI:85510	NA	NA	NA
3298	C17501	NA	NA	NA
3299	HMDB0036578	Cyperotundone	HMDB0036578	1317
3300	C04690	NA	NA	NA
3301	HMDB0030417	Lycoperdic acid	HMDB0030417	8515
3302	CHEBI:16216	NA	NA	NA
3303	HMDB0000350	3-Hydroxysebacic acid	HMDB0000350	1243
3304	HMDB0000424	2-Hydroxydecanedioic acid	HMDB0000424	1284
3305	HMDB0002534	NA	NA	NA
3306	HMDB0029189	5-Hydroxysebacate	HMDB0029189	1317
3307	CHEBI:48500	NA	NA	NA
3308	CHEBI:89182	NA	NA	NA
3309	CHEBI:89312	NA	NA	NA
3310	C00371	NA	NA	NA
3311	C15545	NA	NA	NA
3312	HMDB0012204	Zeatin	HMDB0012204	4490
3313	CHEBI:15333	NA	NA	NA
3314	CHEBI:16522	NA	NA	NA
3315	CHEBI:46570	NA	NA	NA

3316	C11490	NA	NA	NA
3317	HMDB0041942	N-Acetyl-S-(N-methylcarbamoyl)cysteine	HMDB0041942	1082
3318	CHEBI:77702	NA	NA	NA
3319	C03750	NA	NA	NA
3320	C09963	NA	NA	NA
3321	HMDB0029467	Eugenitin	HMDB0029467	3083
3322	HMDB0029473	Isoeugenitin	HMDB0029473	1231
3323	HMDB0041442	Hispolone	HMDB0041442	1317
3324	CHEBI:15707	NA	NA	NA
3325	CHEBI:69473	NA	NA	NA
3326	CHEBI:86579	NA	NA	NA
3327	CHEBI:86584	NA	NA	NA
3328	HMDB0002135	S-(3-Oxo-3-carboxy-n-propyl)cysteine	HMDB0002135	5409
3329	HMDB0000560	Goshuyic acid	HMDB0000560	5312
3330	HMDB0030426	Linalyl isobutyrate	HMDB0030426	6532
3331	HMDB0030427	Linalyl butyrate	HMDB0030427	6232
3332	HMDB0031015	Ethyl (2E,6Z)-dodecadienoate	HMDB0031015	6438
3333	HMDB0032053	alpha-Terpineol butanoate	HMDB0032053	5784
3334	HMDB0032342	Isobornyl isobutyrate	HMDB0032342	1126
3335	HMDB0032524	Terpinyl isobutyrate	HMDB0032524	5222
3336	HMDB0036424	Allyl undecylenate	HMDB0036424	6141
3337	HMDB0037814	2-Propenyl cyclohexanepentanoate	HMDB0037814	6140
3338	HMDB0038246	Bornyl butyrate	HMDB0038246	9789
3339	HMDB0038259	Neryl butyrate	HMDB0038259	5352
3340	HMDB0038260	Geranyl 2-methylpropanoate	HMDB0038260	5365
3341	HMDB0039129	NA	NA	NA
3342	CHEBI:70719	NA	NA	NA
3343	CHEBI:72000	NA	NA	NA
3344	C08322	NA	NA	NA
3345	HMDB0000499	5-Tetradecenoic acid	HMDB0000499	5282
3346	HMDB0000521	5Z-Tetradecenoic acid	HMDB0000521	5312
3347	HMDB0002000	Myristoleic acid	HMDB0002000	5281
3348	HMDB0005051	Tsuzuic acid	HMDB0005051	5312
3349	HMDB0010732	trans-Tetra-dec-2-enoic acid	HMDB0010732	5282
3350	HMDB0030921	(R)-14-Methylxacyclotetradecan-2-one	HMDB0030921	5434
3351	HMDB0031029	Ethyl (E)-2-dodecenoate	HMDB0031029	1128
3352	HMDB0031073	12-Methyl-13-tridecanolide	HMDB0031073	5346
3353	HMDB0032152	Acetaldehyde di-cis-3-hexenyl acetal	HMDB0032152	5367
3354	HMDB0032321	2-Hexenyl octanoate	HMDB0032321	5365
3355	HMDB0034561	Houttuynin	HMDB0034561	1444
3356	HMDB0037188	Rhodinyl butyrate	HMDB0037188	6109
3357	HMDB0037189	Rhodinyl isobutyrate	HMDB0037189	6108
3358	HMDB0037227	Citronellyl butyrate	HMDB0037227	8835
3359	HMDB0037228	Citronellyl isobutyrate	HMDB0037228	6098
3360	HMDB0037369	Butyl 2-decenoate	HMDB0037369	5463
3361	HMDB0037633	xi-Tetrahydro-3-nonyl-2H-pyran-2-one	HMDB0037633	6845
3362	HMDB0038056	delta-Tetradecalactone	HMDB0038056	5202
3363	HMDB0040228	1,1-Diethoxy-3,7-dimethyl-2,6-octadiene	HMDB0040228	5772
3364	HMDB0062243	7Z-tetradecenoic acid	HMDB0062243	5312
3365	HMDB0062248	9E-tetradecenoic acid	HMDB0062248	5312
3366	HMDB0094671	Heptyl cyclohexane carboxylic acid	HMDB0094671	2297
3367	CHEBI:131381	NA	NA	NA
3368	CHEBI:27781	NA	NA	NA
3369	CHEBI:37271	NA	NA	NA
3370	CHEBI:37273	NA	NA	NA
3371	CHEBI:37274	NA	NA	NA
3372	CHEBI:38331	NA	NA	NA
3373	CHEBI:53206	NA	NA	NA
3374	CHEBI:61366	NA	NA	NA
3375	CHEBI:61367	NA	NA	NA
3376	CHEBI:70716	NA	NA	NA
3377	CHEBI:87147	NA	NA	NA
3378	CHEBI:87152	NA	NA	NA
3379	CHEBI:87291	NA	NA	NA
3380	C16308	NA	NA	NA
3381	HMDB0000933	Traumatic acid	HMDB0000933	5283
3382	HMDB0030994	5-Heptyltetrahydro-2-oxo-3-furancarboxylic acid	HMDB0030994	1837
3383	CHEBI:18472	NA	NA	NA
3384	CHEBI:38152	NA	NA	NA
3385	CHEBI:545687	NA	NA	NA
3386	CHEBI:66035	NA	NA	NA
3387	CHEBI:76273	NA	NA	NA
3388	HMDB0032367	NA	NA	NA
3389	HMDB0035881	11-Hydroxy-9-tridecenoic acid	HMDB0035881	5318
3390	HMDB0036139	Menthone 1,2-glyceryl ketal	HMDB0036139	1621
3391	HMDB0037212	Menthyl lactate	HMDB0037212	6215
3392	HMDB0040004	Menthone 1,3-glyceryl ketal	HMDB0040004	1067
3393	CHEBI:78979	NA	NA	NA
3394	CHEBI:79165	NA	NA	NA
3395	C06424	NA	NA	NA
3396	C13798	NA	NA	NA
3397	HMDB0000806	Myristic acid	HMDB0000806	1100
3398	HMDB0002221	2,6,10-Trimethylundecanoic acid	HMDB0002221	3047
3399	HMDB0031072	12-Methyltridecanoic acid	HMDB0031072	5202
3400	HMDB0032318	Hexanal octane-1,3-diol acetal	HMDB0032318	5269
3401	HMDB0032548	Undecanal propyleneglycol acetal	HMDB0032548	2291
3402	HMDB0033788	Ethyl dodecanoate	HMDB0033788	7800



3403	HMDB0034461	Heptyl heptanoate	HMDB0034461	6935
3404	HMDB0036216	Hexyl octanoate	HMDB0036216	1422
3405	HMDB0037312	Decyl butanoate	HMDB0037312	2293
3406	HMDB0037495	3-Methylbutyl nonanoate	HMDB0037495	5226
3407	HMDB0038034	Nonyl isovalerate	HMDB0038034	5463
3408	HMDB0038969	Dodecyl acetate	HMDB0038969	8205
3409	HMDB0059865	Isobutyl decanoate	HMDB0059865	1217
3410	HMDB0061781	10-Methyltridecanoic acid	HMDB0061781	2225
3411	CHEBI:23580	NA	NA	NA
3412	CHEBI:28875	NA	NA	NA
3413	CHEBI:43722	NA	NA	NA
3414	CHEBI:542954	NA	NA	NA
3415	CHEBI:87427	NA	NA	NA
3416	CHEBI:87490	NA	NA	NA
3417	CHEBI:87570	NA	NA	NA
3418	CHEBI:90062	NA	NA	NA
3419	HMDB0002335	Aspartyl-L-proline	HMDB0002335	1706
3420	HMDB0028761	Aspartyl-Proline	HMDB0028761	1464
3421	HMDB0029013	Prolyl-Aspartate	HMDB0029013	3838
3422	HMDB0029756	(1R,2S,3R)-2-Acetyl-4(5)-(1,2,3,4-tetrahydroxybutyl)imidazole	HMDB0029756	1806
3423	HMDB0031701	1-(gamma-Glutamylamino)cyclopropanecarboxylic acid	HMDB0031701	1317
3424	HMDB0039110	(2S,3'S)-alpha-Amino-2-carboxy-5-oxo-1-pyrrolidinebutanoic acid	HMDB0039110	1410
3425	CHEBI:18317	NA	NA	NA
3426	CHEBI:41988	NA	NA	NA
3427	CHEBI:74756	NA	NA	NA
3428	HMDB0059911	Paracetamol sulfate	HMDB0059911	8393
3429	HMDB0059994	Benzeneacetamide-4-O-sulphate	HMDB0059994	1185
3430	CHEBI:32635	NA	NA	NA
3431	CHEBI:88751	NA	NA	NA
3432	HMDB0028744	Asparaginy-Valine	HMDB0028744	1821
3433	HMDB0029122	Valylasparagine	HMDB0029122	7020
3434	CHEBI:73313	NA	NA	NA
3435	CHEBI:73698	NA	NA	NA
3436	CHEBI:73825	NA	NA	NA
3437	C02293	NA	NA	NA
3438	C09627	NA	NA	NA
3439	C09678	NA	NA	NA
3440	C09681	NA	NA	NA
3441	C09700	NA	NA	NA
3442	C09733	NA	NA	NA
3443	C16502	NA	NA	NA
3444	C16946	NA	NA	NA
3445	C17493	NA	NA	NA
3446	C17604	NA	NA	NA
3447	HMDB0002352	Capsidiol	HMDB0002352	1619
3448	HMDB0030891	(2E,6E)-1-Hydroxy-2,6,10-farnesatrien-9-one	HMDB0030891	1016
3449	HMDB0030916	2-Hydroxyacorenone	HMDB0030916	8521
3450	HMDB0030920	Acorusnol	HMDB0030920	1317
3451	HMDB0031348	Epiacorone	HMDB0031348	9893
3452	HMDB0032048	2,6-Di-tert-butyl-4-hydroxymethylphenol	HMDB0032048	6929
3453	HMDB0032292	Geranyl tiglate	HMDB0032292	5367
3454	HMDB0032681	10alpha-4,5-Seco-11-eudesmene-4,5-dione	HMDB0032681	8520
3455	HMDB0033083	(4S)-Dihydrocurcumenone	HMDB0033083	7817
3456	HMDB0033104	Calamensesquiterpinenol	HMDB0033104	7525
3457	HMDB0034714	Curdione	HMDB0034714	5362
3458	HMDB0034722	3-Hydroxy-1,10-bisaboladien-9-one	HMDB0034722	1463
3459	HMDB0035032	Epilubimin	HMDB0035032	3504
3460	HMDB0035040	7-Hydroxycostol	HMDB0035040	1416
3461	HMDB0035127	(-)-Myrtenyl isovalerate	HMDB0035127	5319
3462	HMDB0035147	Rishitinone	HMDB0035147	7382
3463	HMDB0035301	4alpha,5alpha-Epoxy-11-eudesmen-3a-ol	HMDB0035301	1317
3464	HMDB0035648	Isolubimin	HMDB0035648	1423
3465	HMDB0035827	Aubergenone	HMDB0035827	1560
3466	HMDB0036446	beta-Kessyl ketone	HMDB0036446	1556
3467	HMDB0036549	Apotrichothecene	HMDB0036549	1317
3468	HMDB0036668	Humulene-8-hydroperoxide	HMDB0036668	1317
3469	HMDB0036680	Cyperolone	HMDB0036680	1230
3470	HMDB0036687	Tanavulgarol	HMDB0036687	1317
3471	HMDB0037393	(3xi,7(11)Z)-7(11)-Copaene-4,12-diol	HMDB0037393	1317
3472	HMDB0037906	Hernandulcin	HMDB0037906	3504
3473	HMDB0038027	beta-Ionyl acetate	HMDB0038027	5797
3474	HMDB0038122	Curcumol	HMDB0038122	2286
3475	HMDB0038144	Petasitolone	HMDB0038144	7507
3476	HMDB0038178	Davanone	HMDB0038178	5197
3477	HMDB0039525	Dihydro-alpha-santalal acid	HMDB0039525	2158
3478	HMDB0039688	Tuberone	HMDB0039688	1317
3479	HMDB0040712	Humulene diepoxide A	HMDB0040712	1012
3480	CHEBI:17269	NA	NA	NA
3481	CHEBI:27774	NA	NA	NA
3482	CHEBI:28283	NA	NA	NA
3483	CHEBI:36969	NA	NA	NA
3484	CHEBI:545749	NA	NA	NA
3485	CHEBI:65844	NA	NA	NA
3486	CHEBI:65845	NA	NA	NA
3487	CHEBI:66472	NA	NA	NA
3488	CHEBI:66473	NA	NA	NA
3489	CHEBI:66474	NA	NA	NA

3490	CHEBI:84162	NA	NA	NA
3491	HMDB0013067	Salsoline-1-carboxylate	HMDB0013067	6999
3492	HMDB0032775	3-Hydroxy-carbofuran	HMDB0032775	2797
3493	HMDB0062175	N-Lactoylphenylalanine	HMDB0062175	1107
3494	HMDB0139939	NA	NA	NA
3495	HMDB0038256	Geranyl acetoacetate	HMDB0038256	5461
3496	HMDB0112083	3,4-Dimethyl-5-pentyl-2-furanpropanoic acid	HMDB0112083	2342
3497	CHEBI:85255	NA	NA	NA
3498	C09632	NA	NA	NA
3499	C09652	NA	NA	NA
3500	C09653	NA	NA	NA
3501	C09722	NA	NA	NA
3502	C16773	NA	NA	NA
3503	C16774	NA	NA	NA
3504	C16920	NA	NA	NA
3505	C17427	NA	NA	NA
3506	HMDB0029350	Geranyl 3-methylbutanoate	HMDB0029350	6422
3507	HMDB0030428	Linalyl isovalerate	HMDB0030428	2401
3508	HMDB0031383	(3S,4S,6R,7S)-1,10-Bisaboladiene-3,4-diol	HMDB0031383	1463
3509	HMDB0031384	beta-Kessyl alcohol	HMDB0031384	1317
3510	HMDB0032054	alpha-Terpinyl pentanoate	HMDB0032054	8574
3511	HMDB0032209	Citronellyl trans-2-methyl-2-butenate	HMDB0032209	6386
3512	HMDB0032291	Geranyl 2-methylbutyrate	HMDB0032291	6437
3513	HMDB0032343	Isobornyl 2-methylbutyrate	HMDB0032343	2208
3514	HMDB0033228	Guaidiol	HMDB0033228	5750
3515	HMDB0034673	Calamendiol	HMDB0034673	1230
3516	HMDB0035287	Daucol	HMDB0035287	3454
3517	HMDB0035887	Germacrene	HMDB0035887	9047
3518	HMDB0036032	3beta-7-Drimene-3,11-diol	HMDB0036032	1443
3519	HMDB0036730	Tricyclohumuladiol	HMDB0036730	7320
3520	HMDB0036880	1,6,9-Farnesatriene-3,11-diol	HMDB0036880	1317
3521	HMDB0037195	2-Propenyl cyclohexanehexanoate	HMDB0037195	6140
3522	HMDB0037279	2,10-Bisaboladiene-1,4-diol	HMDB0037279	1317
3523	HMDB0037284	5(1->10)-Abeo-1,12-patchouladiol	HMDB0037284	
3524	HMDB0038136	Curcumadiol	HMDB0038136	5316
3525	HMDB0038138	alpha-Bisabolol oxide C	HMDB0038138	8586
3526	HMDB0038196	alpha-Bisabolol oxide A	HMDB0038196	9080
3527	HMDB0038197	alpha-Bisabolol oxide B	HMDB0038197	1173
3528	HMDB0038247	Bornyl valerate	HMDB0038247	1108
3529	HMDB0038248	Bornyl isovalerate	HMDB0038248	2362
3530	HMDB0038250	Isobornyl isovalerate	HMDB0038250	3669
3531	HMDB0039130	Methyl (Z,Z)-5,8-tetradecadienoate	HMDB0039130	1281
3532	HMDB0039745	(2E,6E,9xi)-Farnesol	HMDB0039745	1016
3533	HMDB0040273	Terpenyl isovalerate	HMDB0040273	5859
3534	HMDB0040281	Geranyl valerate	HMDB0040281	6436
3535	HMDB0041589	alpha-Kessyl alcohol	HMDB0041589	3187
3536	CHEBI:65546	NA	NA	NA
3537	CHEBI:65776	NA	NA	NA
3538	CHEBI:66432	NA	NA	NA
3539	CHEBI:83951	NA	NA	NA
3540	C00491	NA	NA	NA
3541	C01420	NA	NA	NA
3542	HMDB0000192	L-Cystine	HMDB0000192	6767
3543	CHEBI:16283	NA	NA	NA
3544	CHEBI:17376	NA	NA	NA
3545	CHEBI:35491	NA	NA	NA
3546	CHEBI:35492	NA	NA	NA
3547	CHEBI:35494	NA	NA	NA
3548	HMDB0030254	3-(3,4,5-Trimethoxyphenyl)propanoic acid	HMDB0030254	6486
3549	HMDB0038627	Ethyl 3,4,5-trimethoxybenzoate	HMDB0038627	2311
3550	HMDB0041756	Isopropyl 3-(3,4-dihydroxyphenyl)-2-hydroxypropanoate	HMDB0041756	4423
3551	HMDB0061112	3-Carboxy-4-methyl-5-propyl-2-furanpropionic acid	HMDB0061112	1239
3552	HMDB0062776	NA	NA	NA
3553	HMDB0125802	NA	NA	NA
3554	HMDB0125804	NA	NA	NA
3555	HMDB0127748	NA	NA	NA
3556	HMDB0127826	NA	NA	NA
3557	HMDB0128672	NA	NA	NA
3558	HMDB0128705	NA	NA	NA
3559	HMDB0128721	NA	NA	NA
3560	HMDB0142074	NA	NA	NA
3561	CHEBI:41254	NA	NA	NA
3562	CHEBI:583580	NA	NA	NA
3563	CHEBI:87585	NA	NA	NA
3564	C17676	NA	NA	NA
3565	HMDB0029765	9-Pentadecenoic acid	HMDB0029765	6365
3566	HMDB0032347	Isobutyl 10-undecenoate	HMDB0032347	7945
3567	HMDB0034455	Exaltolide	HMDB0034455	2354
3568	HMDB0036426	Butyl undecylenate	HMDB0036426	6102
3569	HMDB0037190	Rhodinyl isovalerate	HMDB0037190	1620
3570	HMDB0037211	Menthyl isovalerate	HMDB0037211	1193
3571	HMDB0037229	Citronellyl pentanoate	HMDB0037229	6141
3572	HMDB0038954	Citronellyl isovalerate	HMDB0038954	1114
3573	HMDB0039715	Auberganol	HMDB0039715	8515
3574	HMDB0040997	15,5-Farnesanolide	HMDB0040997	1317
3575	CHEBI:75087	NA	NA	NA
3576	CHEBI:75089	NA	NA	NA

3577	CHEBI:75090	NA	NA	NA
3578	CHEBI:78992	NA	NA	NA
3579	CHEBI:79000	NA	NA	NA
3580	CHEBI:87148	NA	NA	NA
3581	CHEBI:87151	NA	NA	NA
3582	CHEBI:87377	NA	NA	NA
3583	HMDB0006512	3-Mercaptolactate-cysteine disulfide	HMDB0006512	1935
3584	HMDB0010730	3-Oxotetradecanoic acid	HMDB0010730	4540
3585	HMDB0030982	6-Ketomyristic acid	HMDB0030982	4540
3586	HMDB0032370	L-Menthyl (R,S)-3-hydroxybutyrate	HMDB0032370	1022
3587	CHEBI:37270	NA	NA	NA
3588	CHEBI:78982	NA	NA	NA
3589	CHEBI:79167	NA	NA	NA
3590	HMDB0013286	N-Undecanoylglycine	HMDB0013286	4540
3591	CHEBI:74438	NA	NA	NA
3592	HMDB0124975	NA	NA	NA
3593	HMDB0125166	NA	NA	NA
3594	HMDB0127985	NA	NA	NA
3595	HMDB0128093	NA	NA	NA
3596	HMDB0134054	NA	NA	NA
3597	C00299	NA	NA	NA
3598	C02067	NA	NA	NA
3599	C16745	NA	NA	NA
3600	HMDB0000296	Uridine	HMDB0000296	6025
3601	HMDB0000767	Pseudouridine	HMDB0000767	1504
3602	HMDB0006075	NA	NA	NA
3603	CHEBI:16704	NA	NA	NA
3604	CHEBI:17802	NA	NA	NA
3605	HMDB0032472	Polyethylene, oxidized	HMDB0032472	2484
3606	CHEBI:59873	NA	NA	NA
3607	CHEBI:59875	NA	NA	NA
3608	HMDB0028866	Hydroxypropyl-Isoleucine	HMDB0028866	6115
3609	HMDB0028867	Hydroxypropyl-Leucine	HMDB0028867	2177
3610	HMDB0028908	Isoleucylhydroxyproline	HMDB0028908	6115
3611	HMDB0028930	Leucylhydroxy proline	HMDB0028930	2084
3612	C13790	NA	NA	NA
3613	HMDB0002261	2-Hydroxymyristic acid	HMDB0002261	1563
3614	HMDB0010731	(R)-3-Hydroxy-tetradecanoic acid	HMDB0010731	5288
3615	HMDB0032417	3-(L-Menthoxo)-2-methylpropane-1,2-diol	HMDB0032417	1673
3616	HMDB0059850	Ethyl 3-hydroxydodecanoate	HMDB0059850	5758
3617	HMDB0061656	3-Hydroxytetradecanoic acid	HMDB0061656	5312
3618	HMDB0094672	NA	NA	NA
3619	CHEBI:37374	NA	NA	NA
3620	CHEBI:42539	NA	NA	NA
3621	CHEBI:59270	NA	NA	NA
3622	CHEBI:77168	NA	NA	NA
3623	CHEBI:78989	NA	NA	NA
3624	CHEBI:84197	NA	NA	NA
3625	CHEBI:85148	NA	NA	NA
3626	CHEBI:85934	NA	NA	NA
3627	CHEBI:85937	NA	NA	NA
3628	C02567	NA	NA	NA
3629	HMDB0001186	N1-Acetylspermine	HMDB0001186	916
3630	CHEBI:17312	NA	NA	NA
3631	HMDB0060861	OR-1896	HMDB0060861	9816
3632	CHEBI:83513	NA	NA	NA
3633	C03137	NA	NA	NA
3634	C07829	NA	NA	NA
3635	HMDB0013713	N-Acetyltryptophan	HMDB0013713	7006
3636	HMDB0014987	Methylphenobarbital	HMDB0014987	8271
3637	HMDB0030269	Nigellidine	HMDB0030269	1140
3638	HMDB0060810	cyclic 6-Hydroxymelatonin	HMDB0060810	1317
3639	CHEBI:16734	NA	NA	NA
3640	CHEBI:6758	NA	NA	NA
3641	CHEBI:69226	NA	NA	NA
3642	CHEBI:70976	NA	NA	NA
3643	CHEBI:71672	NA	NA	NA
3644	CHEBI:74640	NA	NA	NA
3645	HMDB0000413	3-Hydroxydodecanedioic acid	HMDB0000413	1666
3646	HMDB0031696	Dibutyl malate	HMDB0031696	9538
3647	CHEBI:78812	NA	NA	NA
3648	HMDB0028829	Glutamylthreonine	HMDB0028829	6998
3649	HMDB0029060	Threonylglutamic acid	HMDB0029060	7020
3650	HMDB0029159	gamma-Glutamylthreonine	HMDB0029159	5386
3651	CHEBI:133747	NA	NA	NA
3652	CHEBI:73510	NA	NA	NA
3653	CHEBI:74857	NA	NA	NA
3654	CHEBI:82968	NA	NA	NA
3655	C09808	NA	NA	NA
3656	HMDB0031876	Prenyl glucoside	HMDB0031876	1423
3657	HMDB0033064	(E)-2-Methyl-2-buten-1-ol O-beta-D-Glucopyranoside	HMDB0033064	1317
3658	CHEBI:79018	NA	NA	NA
3659	CHEBI:79133	NA	NA	NA
3660	C02771	NA	NA	NA
3661	C07609	NA	NA	NA
3662	C09301	NA	NA	NA
3663	C09345	NA	NA	NA

3664	C09378	NA	NA	NA
3665	C09386	NA	NA	NA
3666	C09440	NA	NA	NA
3667	C09488	NA	NA	NA
3668	C09507	NA	NA	NA
3669	C09534	NA	NA	NA
3670	C09537	NA	NA	NA
3671	C09544	NA	NA	NA
3672	C09556	NA	NA	NA
3673	C09562	NA	NA	NA
3674	C09626	NA	NA	NA
3675	C09660	NA	NA	NA
3676	C09687	NA	NA	NA
3677	C13455	NA	NA	NA
3678	C17887	NA	NA	NA
3679	C20400	NA	NA	NA
3680	HMDB0030757	(S)-Pterosin A	HMDB0030757	5320
3681	HMDB0030888	Illudin C2	HMDB0030888	8511
3682	HMDB0030910	2alpha-Hydroxyalantolactone	HMDB0030910	4038
3683	HMDB0031378	4-Epiisoinuviscolide	HMDB0031378	1231
3684	HMDB0031386	(1(10)E,4beta,5alpha,8beta)-4,5-Epoxy-1(10),11(13)-germacradien-12,8-olide	HMDB0031386	1381
3685	HMDB0031387	(1beta,4E,8beta,10alpha)-1,10-Epoxy-4,11(13)-germacradien-12,8-olide	HMDB0031387	1317
3686	HMDB0031970	1beta-Hydroxyalantolactone	HMDB0031970	7811
3687	HMDB0032649	4,5-Epoxy-11(13)-guaien-12,8-olide	HMDB0032649	1431
3688	HMDB0033707	Heliannuol E	HMDB0033707	7279
3689	HMDB0034123	Eugenyl isovalerate	HMDB0034123	3085
3690	HMDB0035131	Heliannuol C	HMDB0035131	1317
3691	HMDB0035132	Heliannuol B	HMDB0035132	7421
3692	HMDB0035223	(S)-Pterosin D	HMDB0035223	5320
3693	HMDB0035503	Pseudoisoeugenol 2-methylbutanoate	HMDB0035503	1405
3694	HMDB0035708	8-Epiisovangustin	HMDB0035708	1317
3695	HMDB0035903	Enokipodin A	HMDB0035903	2157
3696	HMDB0036005	Istanbulin B	HMDB0036005	1317
3697	HMDB0036040	Marasmen-3-one	HMDB0036040	1443
3698	HMDB0036641	Artabsin	HMDB0036641	5088
3699	HMDB0036770	Desacetyl Laurenobiolide	HMDB0036770	1317
3700	HMDB0036772	Glechomafuran	HMDB0036772	1010
3701	HMDB0037022	Cichoralexin	HMDB0037022	5315
3702	HMDB0037557	1alpha-1-Hydroxy-2,4(18),11(13)-eudesmatrien-12-oic acid	HMDB0037557	1486
3703	HMDB0037800	Annuolide B	HMDB0037800	1317
3704	HMDB0038326	Annuolide E	HMDB0038326	1317
3705	HMDB0038794	2,12-Epoxy-7(14)-illudadiene-3,8-diol	HMDB0038794	1317
3706	HMDB0039859	Glandulone C	HMDB0039859	5317
3707	HMDB0134144	NA	NA	NA
3708	HMDB0134145	NA	NA	NA
3709	HMDB0134146	NA	NA	NA
3710	HMDB0134147	NA	NA	NA
3711	HMDB0134148	NA	NA	NA
3712	HMDB0134149	NA	NA	NA
3713	HMDB0134150	NA	NA	NA
3714	CHEBI:16850	NA	NA	NA
3715	CHEBI:18844	NA	NA	NA
3716	CHEBI:22144	NA	NA	NA
3717	CHEBI:2848	NA	NA	NA
3718	CHEBI:2853	NA	NA	NA
3719	CHEBI:31157	NA	NA	NA
3720	CHEBI:3856	NA	NA	NA
3721	CHEBI:49187	NA	NA	NA
3722	CHEBI:540787	NA	NA	NA
3723	CHEBI:55349	NA	NA	NA
3724	CHEBI:65856	NA	NA	NA
3725	CHEBI:66608	NA	NA	NA
3726	CHEBI:69338	NA	NA	NA
3727	CHEBI:69344	NA	NA	NA
3728	CHEBI:69345	NA	NA	NA
3729	CHEBI:69347	NA	NA	NA
3730	CHEBI:69349	NA	NA	NA
3731	CHEBI:69351	NA	NA	NA
3732	CHEBI:70797	NA	NA	NA
3733	CHEBI:73226	NA	NA	NA
3734	CHEBI:76204	NA	NA	NA
3735	CHEBI:7939	NA	NA	NA
3736	CHEBI:9023	NA	NA	NA
3737	CHEBI:91130	NA	NA	NA
3738	C19453	NA	NA	NA
3739	HMDB0030227	5-Methoxy canthin-6-one	HMDB0030227	2592
3740	HMDB0041064	2-Methoxy canthin-6-one	HMDB0041064	3085
3741	CHEBI:53218	NA	NA	NA
3742	CHEBI:544162	NA	NA	NA
3743	CHEBI:65813	NA	NA	NA
3744	CHEBI:66699	NA	NA	NA
3745	CHEBI:66700	NA	NA	NA
3746	CHEBI:78677	NA	NA	NA
3747	C07020	NA	NA	NA
3748	C09295	NA	NA	NA
3749	C09689	NA	NA	NA
3750	C09711	NA	NA	NA

3751	C09748	NA	NA	NA
3752	C13453	NA	NA	NA
3753	C13456	NA	NA	NA
3754	C14716	NA	NA	NA
3755	C20403	NA	NA	NA
3756	C20405	NA	NA	NA
3757	HMDB0015371	Gemfibrozil	HMDB0015371	3463
3758	HMDB0030917	1-Hydroxyacorenone	HMDB0030917	1317
3759	HMDB0031901	Blennin A	HMDB0031901	1410
3760	HMDB0034721	Procureumadiol	HMDB0034721	1463
3761	HMDB0035117	(3beta,6beta)-Furanoeremophilane-3,6-diol	HMDB0035117	1230
3762	HMDB0035137	Heliannuol D	HMDB0035137	1142
3763	HMDB0035148	(6beta,8alpha)-6-Hydroxy-7(11)-eremophilen-12,8-olide	HMDB0035148	1486
3764	HMDB0035358	Ketosantallic acid	HMDB0035358	1385
3765	HMDB0035760	3-Hydroxytrichothecene	HMDB0035760	1385
3766	HMDB0035798	Piperdial	HMDB0035798	3508
3767	HMDB0036036	3beta-Dihydroxymarasmene	HMDB0036036	1067
3768	HMDB0036037	13-Hydroxymarasmene	HMDB0036037	1443
3769	HMDB0036550	3-Ketopotrichothecene	HMDB0036550	1440
3770	HMDB0036563	Valerenolic acid	HMDB0036563	6435
3771	HMDB0036664	Ketopelenolide a	HMDB0036664	1230
3772	HMDB0037064	FS4 toxin	HMDB0037064	1440
3773	HMDB0037529	Lactaronecatorin A	HMDB0037529	1001
3774	HMDB0037559	Cadabicolone	HMDB0037559	3252
3775	HMDB0039156	3beta-Hydroxycinnamolide	HMDB0039156	1443
3776	HMDB0039635	Abciscic alcohol	HMDB0039635	1362
3777	HMDB0039644	Heliannuol A	HMDB0039644	1524
3778	HMDB0040754	(3beta,8beta)-3-Hydroxy-7(11)-eremophilen-12,8-olide	HMDB0040754	7318
3779	HMDB0061839	Ethylhexyl salicylate	HMDB0061839	8364
3780	CHEBI:2805	NA	NA	NA
3781	CHEBI:32304	NA	NA	NA
3782	CHEBI:5296	NA	NA	NA
3783	CHEBI:65873	NA	NA	NA
3784	CHEBI:68385	NA	NA	NA
3785	CHEBI:68665	NA	NA	NA
3786	CHEBI:69354	NA	NA	NA
3787	CHEBI:70796	NA	NA	NA
3788	CHEBI:91126	NA	NA	NA
3789	C16795	NA	NA	NA
3790	HMDB0000477	7Z,10Z-Hexadecadienoic acid	HMDB0000477	1393
3791	HMDB0029351	Geranyl hexanoate	HMDB0029351	1257
3792	HMDB0030429	Linalyl hexanoate	HMDB0030429	5645
3793	HMDB0031086	(Z)-7-Hexadecen-1,16-olide	HMDB0031086	5365
3794	HMDB0032340	Isoambrettolide	HMDB0032340	5355
3795	HMDB0037805	D6-Ambrettolide	HMDB0037805	5869
3796	HMDB0038255	Geranyl 2-ethylbutyrate	HMDB0038255	9247
3797	HMDB0039131	Ethyl (Z,Z)-5,8-tetradecadienoate	HMDB0039131	1317
3798	CHEBI:61671	NA	NA	NA
3799	CHEBI:61675	NA	NA	NA
3800	CHEBI:77522	NA	NA	NA
3801	CHEBI:86142	NA	NA	NA
3802	CHEBI:86147	NA	NA	NA
3803	C17815	NA	NA	NA
3804	HMDB0013813	13-Heptadecyn-1-ol	HMDB0013813	5574
3805	HMDB0041335	8-Heptadecenal	HMDB0041335	1454
3806	C16582	NA	NA	NA
3807	C16584	NA	NA	NA
3808	HMDB0029445	L-Agaridoxin	HMDB0029445	1317
3809	HMDB0060669	p-Hydroxyfelbamate	HMDB0060669	9921
3810	HMDB0060670	2-Hydroxyfelbamate	HMDB0060670	1040
3811	CHEBI:80584	NA	NA	NA
3812	C17603	NA	NA	NA
3813	C17606	NA	NA	NA
3814	C17608	NA	NA	NA
3815	C17610	NA	NA	NA
3816	C18538	NA	NA	NA
3817	HMDB0029604	Lubiminol	HMDB0029604	7442
3818	HMDB0035780	8-Hydroxy-4(6)-lactarene-5,14-diol	HMDB0035780	1410
3819	HMDB0036053	(3beta,9beta)-7-Drimene-3,11,12-triol	HMDB0036053	1443
3820	HMDB0036866	7-Drimene-11,12,14-triol	HMDB0036866	1443
3821	HMDB0037197	Kessyl glycol	HMDB0037197	1230
3822	HMDB0040276	5-Acetoxydihydroheaspirane	HMDB0040276	9383
3823	CHEBI:67346	NA	NA	NA
3824	C08362	NA	NA	NA
3825	HMDB0002186	Hypogeic acid	HMDB0002186	5318
3826	HMDB0003229	Palmitoleic acid	HMDB0003229	4456
3827	HMDB0010735	Trans-Hexa-dec-2-enoic acid	HMDB0010735	5282
3828	HMDB0012328	Palmitelaidic acid	HMDB0012328	5282
3829	HMDB0031053	(E)-6-Hexadecenoic acid	HMDB0031053	5282
3830	HMDB0031145	5-Dodecylidihydro-2(3H)-furanone	HMDB0031145	9774
3831	HMDB0031711	15-Hexadecanolide	HMDB0031711	5433
3832	HMDB0032638	(Z)-5-Hexadecenoic acid	HMDB0032638	1310
3833	HMDB0033791	(E)-3-Hexadecenoic acid	HMDB0033791	5355
3834	HMDB0035877	(Z)-13-Hexadecenoic acid	HMDB0035877	5312
3835	HMDB0037647	(E)-11-Hexadecenoic acid	HMDB0037647	5312
3836	HMDB0038958	Citronellyl hexanoate	HMDB0038958	1144
3837	HMDB0041422	(Z)-14-Methyl-6-pentadecenoic acid	HMDB0041422	8750

3838	HMDB0060082	NA	NA	NA
3839	CHEBI:28716	NA	NA	NA
3840	CHEBI:35464	NA	NA	NA
3841	CHEBI:35465	NA	NA	NA
3842	CHEBI:37252	NA	NA	NA
3843	CHEBI:59265	NA	NA	NA
3844	CHEBI:72004	NA	NA	NA
3845	CHEBI:76244	NA	NA	NA
3846	CHEBI:86140	NA	NA	NA
3847	CHEBI:87146	NA	NA	NA
3848	HMDB0031772	1-Met hoxy-1- (2,4,5-trimethoxy phenyl)-2-propanol	HMDB0031772	1317
3849	HMDB0040352	2-[4- (3-Hydroxypropyl)-2-methoxyphenoxy]-1,3-propanediol	HMDB0040352	1026
3850	HMDB0030993	5-Nonyltetrahydro-2-oxo-3-furancarboxylic acid	HMDB0030993	1317
3851	HMDB0036143	Monomenthyl succinate	HMDB0036143	1019
3852	HMDB0062363	NA	NA	NA
3853	HMDB0062364	NA	NA	NA
3854	CHEBI:76281	NA	NA	NA
3855	HMDB0013134	Fumarycarnitine	HMDB0013134	5348
3856	HMDB0032769	Osmaronin	HMDB0032769	1455
3857	CHEBI:66305	NA	NA	NA
3858	CHEBI:85093	NA	NA	NA
3859	CHEBI:87264	NA	NA	NA
3860	HMDB0062550	NA	NA	NA
3861	CHEBI:82944	NA	NA	NA
3862	HMDB0061150	Hydroxyl frovatriptan	HMDB0061150	1317
3863	CHEBI:43007	NA	NA	NA
3864	HMDB0000559	3-Met hoxy-4- hydroxyphenylethyleneglycol sulfate	HMDB0000559	4183
3865	HMDB0001985	NA	NA	NA
3866	HMDB0003332	3-Met hoxy-4- Hydroxyphenylglycol sulfate	HMDB0003332	3035
3867	CHEBI:1091015	NA	NA	NA
3868	C09231	NA	NA	NA
3869	C20280	NA	NA	NA
3870	C20281	NA	NA	NA
3871	HMDB0030327	Perlolyrine	HMDB0030327	1601
3872	CHEBI:610215	NA	NA	NA
3873	C16344	NA	NA	NA
3874	HMDB0035910	Cedryl acetate	HMDB0035910	2401
3875	HMDB0036153	Shyobunyl acetate	HMDB0036153	1317
3876	HMDB0037218	Guaial acetate	HMDB0037218	6107
3877	HMDB0037224	alpha-Caryophyllene alcohol acetate	HMDB0037224	1317
3878	HMDB0037273	beta-Caryophyllene alcohol acetate	HMDB0037273	6212
3879	HMDB0039630	Nerolidyl acetate	HMDB0039630	5363
3880	HMDB0240268	NA	NA	NA
3881	CHEBI:602138	NA	NA	NA
3882	CHEBI:66440	NA	NA	NA
3883	CHEBI:76235	NA	NA	NA
3884	C16625	NA	NA	NA
3885	HMDB0060663	Isoniazid alpha-ketoglutaric acid	HMDB0060663	9576
3886	C00236	NA	NA	NA
3887	C01159	NA	NA	NA
3888	C03339	NA	NA	NA
3889	HMDB0001270	Glyceric acid 1,3-biphosphate	HMDB0001270	4391
3890	HMDB0001294	2,3-Diphosphoglyceric acid	HMDB0001294	1860
3891	HMDB0062758	NA	NA	NA
3892	CHEBI:16001	NA	NA	NA
3893	CHEBI:17720	NA	NA	NA
3894	CHEBI:28907	NA	NA	NA
3895	CHEBI:57604	NA	NA	NA
3896	CHEBI:89363	NA	NA	NA
3897	HMDB0013852	Sulfamethoxazole N4-hydroxylamine	HMDB0013852	1148
3898	HMDB0060529	5-Hydroxysulfamethoxazole	HMDB0060529	1035
3899	HMDB0060985	NA	NA	NA
3900	CHEBI:53016	NA	NA	NA
3901	C18218	NA	NA	NA
3902	HMDB0006294	16-Hydroxyhexadecanoic acid	HMDB0006294	1046
3903	HMDB0010734	(R)-3-Hydroxy-hexadecanoic acid	HMDB0010734	1556
3904	HMDB0031057	2-Hydroxyhexadecanoic acid	HMDB0031057	1257
3905	HMDB0061658	3-Hydroxyhexadecanoic acid	HMDB0061658	1098
3906	HMDB0062548	NA	NA	NA
3907	HMDB0112184	5-Hydroxyhexadecanoic acid	HMDB0112184	5312
3908	HMDB0112185	7-Hydroxyhexadecanoic acid	HMDB0112185	1556
3909	HMDB0112186	8-Hydroxyhexadecanoic acid	HMDB0112186	1556
3910	HMDB0112187	9-Hydroxyhexadecanoic acid	HMDB0112187	1556
3911	HMDB0112188	10-Hydroxyhexadecanoic acid	HMDB0112188	1556
3912	HMDB0112189	11-Hydroxyhexadecanoic acid	HMDB0112189	3013
3913	HMDB0112190	12-Hydroxyhexadecanoic acid	HMDB0112190	1556
3914	HMDB0112191	13-Hydroxyhexadecanoic acid	HMDB0112191	1556
3915	HMDB0112192	6-Hydroxyhexadecanoic acid	HMDB0112192	1233
3916	CHEBI:37248	NA	NA	NA
3917	CHEBI:37250	NA	NA	NA
3918	CHEBI:38247	NA	NA	NA
3919	CHEBI:55328	NA	NA	NA
3920	CHEBI:65101	NA	NA	NA
3921	CHEBI:75785	NA	NA	NA
3922	CHEBI:75972	NA	NA	NA
3923	CHEBI:75977	NA	NA	NA
3924	CHEBI:78998	NA	NA	NA

3925	CHEBI:83935	NA	NA	NA
3926	CHEBI:83937	NA	NA	NA
3927	HMDB0000394	3-Hydroxytetradecanedioic acid	HMDB0000394	2084
3928	C04700	NA	NA	NA
3929	HMDB0003869	epsilon-(gamma-Glutamyl)lysine	HMDB0003869	7015
3930	HMDB0004207	Glutamyllysine	HMDB0004207	7015
3931	HMDB0028824	NA	NA	NA
3932	HMDB0028950	Lysylglutamic acid	HMDB0028950	7010
3933	HMDB0029154	gamma-Glutamyllysine	HMDB0029154	6525
3934	CHEBI:73521	NA	NA	NA
3935	CHEBI:74557	NA	NA	NA
3936	CHEBI:88494	NA	NA	NA
3937	C09346	NA	NA	NA
3938	C09480	NA	NA	NA
3939	C09707	NA	NA	NA
3940	C15514	NA	NA	NA
3941	HMDB0035620	Artabsinolide A	HMDB0035620	7403
3942	HMDB0036051	Dihydromarasmone	HMDB0036051	1443
3943	HMDB0036094	Nigelliacid	HMDB0036094	1317
3944	HMDB0036095	13-Hydroxyabscisic acid	HMDB0036095	1317
3945	HMDB0036695	Crispolide	HMDB0036695	1317
3946	HMDB0038545	(1beta,4alpha,5alpha,6beta,8alpha,10b)-1,10:4,5-Diepoxy-6-hydroxy-7(11)-germacren-12,8-olide	HMDB0038545	7388
3947	HMDB0041003	Vulgarolide	HMDB0041003	7810
3948	HMDB0041144	8-Deoxy-11,13-dihydroxy grosheimin	HMDB0041144	5260
3949	HMDB0133288	NA	NA	NA
3950	CHEBI:20764	NA	NA	NA
3951	CHEBI:20805	NA	NA	NA
3952	CHEBI:28205	NA	NA	NA
3953	CHEBI:68202	NA	NA	NA
3954	CHEBI:73231	NA	NA	NA
3955	CHEBI:85162	NA	NA	NA
3956	HMDB0014830	Phentolamine	HMDB0014830	5775
3957	HMDB0060955	mirtazapine-N-oxide	HMDB0060955	4678
3958	HMDB0060957	8-hydroxymirtazapine	HMDB0060957	1150
3959	CHEBI:8081	NA	NA	NA
3960	HMDB0029282	Avenanthramide 1p	HMDB0029282	6443
3961	HMDB0038943	(E)-Avenanthramide D	HMDB0038943	1560
3962	C00387	NA	NA	NA
3963	C08432	NA	NA	NA
3964	HMDB0000133	Guanosine	HMDB0000133	6802
3965	HMDB0003333	8-Hydroxy-deoxy guanosine	HMDB0003333	7331
3966	CHEBI:16750	NA	NA	NA
3967	CHEBI:35485	NA	NA	NA
3968	CHEBI:40304	NA	NA	NA
3969	CHEBI:73141	NA	NA	NA
3970	HMDB0060593	Alpha-dihydroartemisinin	HMDB0060593	4564
3971	HMDB0061088	Dihydroartemisinin (DHA)	HMDB0061088	7131
3972	CHEBI:207229	NA	NA	NA
3973	C14987	NA	NA	NA
3974	C19615	NA	NA	NA
3975	HMDB0000672	Hexadecanedioic acid	HMDB0000672	1045
3976	HMDB0041287	16-Hydroxy-10-oxohexadecanoic acid	HMDB0041287	8583
3977	HMDB0059777	2,2,4-Trimethyl-1,3-pentadienol diisobutyrate	HMDB0059777	2328
3978	CHEBI:73722	NA	NA	NA
3979	CHEBI:84228	NA	NA	NA
3980	C03935	NA	NA	NA
3981	C05141	NA	NA	NA
3982	C05301	NA	NA	NA
3983	C14209	NA	NA	NA
3984	C15385	NA	NA	NA
3985	C17561	NA	NA	NA
3986	HMDB0000153	Estriol	HMDB0000153	5756
3987	HMDB0000338	2-Hydroxyestradiol	HMDB0000338	2473
3988	HMDB0000347	16b-Hydroxyestradiol	HMDB0000347	6892
3989	HMDB0000356	17-Epiestradiol	HMDB0000356	2567
3990	HMDB0000431	16,17-Epiestradiol	HMDB0000431	2125
3991	HMDB0003962	NA	NA	NA
3992	HMDB0005896	4-Hydroxyestradiol	HMDB0005896	5282
3993	HMDB0040864	O-Geranylvanillin	HMDB0040864	6444
3994	HMDB0060353	2-Polyprenyl-3-methyl-6-methoxy-1,4-benzoquinone	HMDB0060353	1090
3995	HMDB0060999	4-hydroxyestradiol	HMDB0060999	1743
3996	HMDB0062741	7alpha-hydroxyestradiol	HMDB0062741	2596
3997	CHEBI:1150237	NA	NA	NA
3998	CHEBI:16784	NA	NA	NA
3999	CHEBI:27974	NA	NA	NA
4000	CHEBI:28744	NA	NA	NA
4001	CHEBI:38236	NA	NA	NA
4002	CHEBI:62845	NA	NA	NA
4003	CHEBI:62847	NA	NA	NA
4004	CHEBI:62848	NA	NA	NA
4005	CHEBI:87593	NA	NA	NA
4006	CHEBI:87598	NA	NA	NA
4007	CHEBI:87620	NA	NA	NA
4008	C09674	NA	NA	NA
4009	HMDB0038120	Ovalicin	HMDB0038120	2849
4010	HMDB0039376	Methyl dihydrophaseate	HMDB0039376	1317
4011	HMDB0041551	3,8-Dihydroxy-6-methoxy-7(11)-eremophilin-12,8-olide	HMDB0041551	8526

4012	CHEBI:48530	NA	NA	NA
4013	C03033	NA	NA	NA
4014	HMDB0010323	Phenethylamine glucuronide	HMDB0010323	1911
4015	CHEBI:61628	NA	NA	NA
4016	CHEBI:61632	NA	NA	NA
4017	C02075	NA	NA	NA
4018	C06087	NA	NA	NA
4019	C06428	NA	NA	NA
4020	C07198	NA	NA	NA
4021	C09118	NA	NA	NA
4022	C09148	NA	NA	NA
4023	C09159	NA	NA	NA
4024	C11874	NA	NA	NA
4025	C11888	NA	NA	NA
4026	C11889	NA	NA	NA
4027	C12077	NA	NA	NA
4028	C12083	NA	NA	NA
4029	C14255	NA	NA	NA
4030	C14490	NA	NA	NA
4031	C14588	NA	NA	NA
4032	C14890	NA	NA	NA
4033	C15003	NA	NA	NA
4034	C15008	NA	NA	NA
4035	C15017	NA	NA	NA
4036	C15036	NA	NA	NA
4037	C15070	NA	NA	NA
4038	C15184	NA	NA	NA
4039	C15188	NA	NA	NA
4040	C15259	NA	NA	NA
4041	C15318	NA	NA	NA
4042	C15412	NA	NA	NA
4043	C15460	NA	NA	NA
4044	C20149	NA	NA	NA
4045	C20208	NA	NA	NA
4046	HMDB0001999	Eicosapentaenoic acid	HMDB0001999	4462
4047	HMDB0003598	Retinyl ester	HMDB0003598	5460
4048	HMDB0015655	Methyltestosterone	HMDB0015655	6010
4049	HMDB0035692	8,15-Isopimaradiene-18-oic acid	HMDB0035692	1562
4050	HMDB0036703	Siderone	HMDB0036703	1468
4051	HMDB0036709	Yucalexin B14	HMDB0036709	1419
4052	HMDB0036775	Yucalexin A16	HMDB0036775	1419
4053	HMDB0036805	8(17),12-Labdadiene-15,16-dial	HMDB0036805	9904
4054	HMDB0036811	Isopimaric acid	HMDB0036811	4420
4055	HMDB0036826	Cascarillone	HMDB0036826	1562
4056	HMDB0038172	8,13-Abietadiene-18-oic acid	HMDB0038172	1604
4057	HMDB0038687	(ent-15beta,16beta)-15,16-Epoxy-3-kauranone	HMDB0038687	1317
4058	HMDB0039486	ent-8(17),13(16),14-Labdatriene-18-oic acid	HMDB0039486	7278
4059	HMDB0041928	Methenolone	HMDB0041928	3037
4060	CHEBI:15417	NA	NA	NA
4061	CHEBI:27436	NA	NA	NA
4062	CHEBI:28364	NA	NA	NA
4063	CHEBI:28987	NA	NA	NA
4064	CHEBI:29457	NA	NA	NA
4065	CHEBI:34849	NA	NA	NA
4066	CHEBI:545914	NA	NA	NA
4067	CHEBI:6039	NA	NA	NA
4068	CHEBI:63731	NA	NA	NA
4069	CHEBI:65960	NA	NA	NA
4070	CHEBI:66459	NA	NA	NA
4071	CHEBI:66549	NA	NA	NA
4072	CHEBI:70577	NA	NA	NA
4073	CHEBI:72658	NA	NA	NA
4074	CHEBI:78258	NA	NA	NA
4075	CHEBI:79761	NA	NA	NA
4076	C00219	NA	NA	NA
4077	C09057	NA	NA	NA
4078	C09124	NA	NA	NA
4079	C11897	NA	NA	NA
4080	C14493	NA	NA	NA
4081	C14605	NA	NA	NA
4082	C14956	NA	NA	NA
4083	C15176	NA	NA	NA
4084	C15252	NA	NA	NA
4085	C15367	NA	NA	NA
4086	C17920	NA	NA	NA
4087	C20329	NA	NA	NA
4088	HMDB0001043	Arachidonic acid	HMDB0001043	4448
4089	HMDB0002177	Cis-8,11,14,17-Eicosatetraenoic acid	HMDB0002177	1172
4090	HMDB0006036	Mesterolone	HMDB0006036	1502
4091	HMDB0014996	Drostanolone	HMDB0014996	6011
4092	HMDB0036702	Sideridiol	HMDB0036702	1231
4093	HMDB0036721	ent-17-Hydroxy-16beta-kauran-19-al	HMDB0036721	3481
4094	HMDB0036754	Yucalexin P21	HMDB0036754	1419
4095	HMDB0036829	Copalic acid	HMDB0036829	1317
4096	HMDB0036830	Junicedral	HMDB0036830	1317
4097	HMDB0037824	7,13-Eperudien-15-oic acid	HMDB0037824	1317
4098	HMDB0039687	Oryzaalexin S	HMDB0039687	1317



4099	HMDB0039702	Oryzaalexin E	HMDB0039702	8628
4100	HMDB0060102	NA	NA	NA
4101	CHEBI:15843	NA	NA	NA
4102	CHEBI:30041	NA	NA	NA
4103	CHEBI:34838	NA	NA	NA
4104	CHEBI:36033	NA	NA	NA
4105	CHEBI:36035	NA	NA	NA
4106	CHEBI:36038	NA	NA	NA
4107	CHEBI:36039	NA	NA	NA
4108	CHEBI:36040	NA	NA	NA
4109	CHEBI:36042	NA	NA	NA
4110	CHEBI:36045	NA	NA	NA
4111	CHEBI:36232	NA	NA	NA
4112	CHEBI:36302	NA	NA	NA
4113	CHEBI:36306	NA	NA	NA
4114	CHEBI:529213	NA	NA	NA
4115	CHEBI:63668	NA	NA	NA
4116	CHEBI:64014	NA	NA	NA
4117	CHEBI:71488	NA	NA	NA
4118	CHEBI:78256	NA	NA	NA
4119	CHEBI:78259	NA	NA	NA
4120	CHEBI:79754	NA	NA	NA
4121	CHEBI:82835	NA	NA	NA
4122	CHEBI:84856	NA	NA	NA
4123	CHEBI:84971	NA	NA	NA
4124	C04785	NA	NA	NA
4125	C07357	NA	NA	NA
4126	C15753	NA	NA	NA
4127	C16321	NA	NA	NA
4128	C16341	NA	NA	NA
4129	C19936	NA	NA	NA
4130	C20704	NA	NA	NA
4131	HMDB0013623	12(13)Ep-9-KODE	HMDB0013623	5283
4132	HMDB0033505	(9Z,11R,12S,13S,15Z)-12,13-Epoxy-11-hydroxy-9,15-octadecadienoic acid	HMDB0033505	1317
4133	HMDB0035337	Sterebin A	HMDB0035337	1317
4134	HMDB0038484	Auxin b	HMDB0038484	1037
4135	CHEBI:48905	NA	NA	NA
4136	CHEBI:60961	NA	NA	NA
4137	CHEBI:63237	NA	NA	NA
4138	CHEBI:63238	NA	NA	NA
4139	CHEBI:75615	NA	NA	NA
4140	CHEBI:76236	NA	NA	NA
4141	CHEBI:78908	NA	NA	NA
4142	CHEBI:84180	NA	NA	NA
4143	CHEBI:85474	NA	NA	NA
4144	CHEBI:89606	NA	NA	NA
4145	C09322	NA	NA	NA
4146	C09398	NA	NA	NA
4147	C10629	NA	NA	NA
4148	HMDB0030217	Launobine	HMDB0030217	2489
4149	HMDB0033361	Norisodomeesticine	HMDB0033361	6940
4150	HMDB0033362	(S)-Nandigerine	HMDB0033362	4226
4151	HMDB0034489	(+)-Norushinsunine N-oxide	HMDB0034489	1319
4152	HMDB0036369	Annocherine B	HMDB0036369	7838
4153	HMDB0134801	NA	NA	NA
4154	HMDB0134802	NA	NA	NA
4155	HMDB0134803	NA	NA	NA
4156	HMDB0134804	NA	NA	NA
4157	HMDB0134805	NA	NA	NA
4158	HMDB0134806	NA	NA	NA
4159	HMDB0134807	NA	NA	NA
4160	HMDB0134808	NA	NA	NA
4161	CHEBI:2435	NA	NA	NA
4162	CHEBI:2444	NA	NA	NA
4163	CHEBI:55530	NA	NA	NA
4164	C04717	NA	NA	NA
4165	C07338	NA	NA	NA
4166	C07354	NA	NA	NA
4167	C14827	NA	NA	NA
4168	C14831	NA	NA	NA
4169	C14832	NA	NA	NA
4170	C14834	NA	NA	NA
4171	C14836	NA	NA	NA
4172	C19618	NA	NA	NA
4173	C19937	NA	NA	NA
4174	C20186	NA	NA	NA
4175	C20703	NA	NA	NA
4176	HMDB0003871	13-L-Hydroperoxylinoleic acid	HMDB0003871	5280
4177	HMDB0004706	8(R)-Hydroperoxylinoleic acid	HMDB0004706	6438
4178	HMDB0006940	9(S)-HPODE	HMDB0006940	6439
4179	HMDB0010201	12,13-DiHODE	HMDB0010201	1606
4180	HMDB0010208	15,16-DiHODE	HMDB0010208	1606
4181	HMDB0010221	9,10-DiHODE	HMDB0010221	1606
4182	HMDB0040900	(±)-(E)-13-Hydroxy-10-oxo-11-octadecenoic acid	HMDB0040900	5283
4183	HMDB0062281	11-HpODE	HMDB0062281	5281
4184	HMDB0062434	(10E,12Z)-(9S)-9-Hydroperoxyoctadeca-10,12-dienoic acid	HMDB0062434	9548
4185	HMDB0062637	13-HPODE(1-)	HMDB0062637	1426

4186	CHEBI:15655	NA	NA	NA
4187	CHEBI:15657	NA	NA	NA
4188	CHEBI:15658	NA	NA	NA
4189	CHEBI:34485	NA	NA	NA
4190	CHEBI:34498	NA	NA	NA
4191	CHEBI:50097	NA	NA	NA
4192	CHEBI:63216	NA	NA	NA
4193	CHEBI:63331	NA	NA	NA
4194	CHEBI:64006	NA	NA	NA
4195	CHEBI:64008	NA	NA	NA
4196	CHEBI:75833	NA	NA	NA
4197	CHEBI:88440	NA	NA	NA
4198	CHEBI:88461	NA	NA	NA
4199	CHEBI:88465	NA	NA	NA
4200	CHEBI:90823	NA	NA	NA
4201	CHEBI:91272	NA	NA	NA
4202	C05252	NA	NA	NA
4203	HMDB0012143	2-Amino-4-oxo-4- $\alpha$ -hydroxy-6-(erythro-1',2',3'-trihydroxypropyl)-5,6,7,8-tetrahydroxypterin	HMDB0012143	4405
4204	C18679	NA	NA	NA
4205	HMDB0013880	S-6-Hydroxywarfarin	HMDB0013880	1342
4206	HMDB0013881	S-4'-Hydroxywarfarin	HMDB0013881	6935
4207	HMDB0013882	R-4'-Hydroxywarfarin	HMDB0013882	6936
4208	HMDB0013883	R-6-Hydroxywarfarin	HMDB0013883	1342
4209	HMDB0013884	R-10-Hydroxywarfarin	HMDB0013884	
4210	HMDB0013885	R-8-Hydroxywarfarin	HMDB0013885	1342
4211	HMDB0013886	R-7-Hydroxywarfarin	HMDB0013886	1342
4212	HMDB0041296	Moracin K	HMDB0041296	1187
4213	HMDB0041297	Moracin L	HMDB0041297	1900
4214	HMDB0140986	NA	NA	NA
4215	HMDB0140987	NA	NA	NA
4216	HMDB0140988	NA	NA	NA
4217	HMDB0140989	NA	NA	NA
4218	HMDB0140990	NA	NA	NA
4219	HMDB0140991	NA	NA	NA
4220	HMDB0140992	NA	NA	NA
4221	HMDB0140993	NA	NA	NA
4222	HMDB0140995	NA	NA	NA
4223	HMDB0142561	NA	NA	NA
4224	HMDB0142603	NA	NA	NA
4225	CHEBI:67399	NA	NA	NA
4226	C09560	NA	NA	NA
4227	HMDB0033504	AF Toxin II	HMDB0033504	1317
4228	HMDB0034576	3-Acetoxyscirpene-4,15-diol	HMDB0034576	5352
4229	HMDB0035357	Blumealactone C	HMDB0035357	1402
4230	HMDB0035847	4-Acetoxyscirpene-3,15-diol	HMDB0035847	4025
4231	HMDB0035848	Monoacetoxyscirpenol	HMDB0035848	9825
4232	CHEBI:9499	NA	NA	NA
4233	C05174	NA	NA	NA
4234	C09333	NA	NA	NA
4235	C09334	NA	NA	NA
4236	C09367	NA	NA	NA
4237	C09389	NA	NA	NA
4238	C19980	NA	NA	NA
4239	HMDB0030245	Nornantenine	HMDB0030245	3084
4240	HMDB0032143	Palaudine	HMDB0032143	1677
4241	HMDB0033354	Cassythicine	HMDB0033354	4440
4242	HMDB0033360	Isodomesticine	HMDB0033360	6952
4243	HMDB0036987	Romucosine A	HMDB0036987	1317
4244	HMDB0038145	Junosine	HMDB0038145	1528
4245	CHEBI:16233	NA	NA	NA
4246	CHEBI:3211	NA	NA	NA
4247	CHEBI:804420	NA	NA	NA
4248	C04415	NA	NA	NA
4249	C05158	NA	NA	NA
4250	C05839	NA	NA	NA
4251	C06739	NA	NA	NA
4252	C07605	NA	NA	NA
4253	C16827	NA	NA	NA
4254	HMDB0033581	Melilotoside	HMDB0033581	5280
4255	HMDB0036735	Bilobalide A	HMDB0036735	1187
4256	HMDB0036936	1-O-p-Coumaroyl-beta-D-glucose	HMDB0036936	1415
4257	HMDB0039167	NA	NA	NA
4258	HMDB0039169	NA	NA	NA
4259	HMDB0039509	trans-p-Coumaric acid 4-glucoside	HMDB0039509	1378
4260	HMDB0060077	cis-Melilotoside	HMDB0060077	5316
4261	HMDB0125172	NA	NA	NA
4262	HMDB0127979	NA	NA	NA
4263	HMDB0128020	NA	NA	NA
4264	HMDB0134046	NA	NA	NA
4265	HMDB0134047	NA	NA	NA
4266	HMDB0135256	NA	NA	NA
4267	HMDB0135294	NA	NA	NA
4268	HMDB0135296	NA	NA	NA
4269	HMDB0135298	NA	NA	NA
4270	HMDB0135300	NA	NA	NA
4271	HMDB0135302	NA	NA	NA
4272	HMDB0135305	NA	NA	NA

4273	HMDB0135308	NA	NA	NA
4274	HMDB0135655	NA	NA	NA
4275	HMDB0141878	NA	NA	NA
4276	CHEBI:16099	NA	NA	NA
4277	CHEBI:17335	NA	NA	NA
4278	CHEBI:17531	NA	NA	NA
4279	CHEBI:3103	NA	NA	NA
4280	CHEBI:62251	NA	NA	NA
4281	CHEBI:62281	NA	NA	NA
4282	CHEBI:71498	NA	NA	NA
4283	CHEBI:76089	NA	NA	NA
4284	CHEBI:76092	NA	NA	NA
4285	CHEBI:76093	NA	NA	NA
4286	CHEBI:76094	NA	NA	NA
4287	CHEBI:83032	NA	NA	NA
4288	C17474	NA	NA	NA
4289	C18842	NA	NA	NA
4290	C18843	NA	NA	NA
4291	HMDB0030605	1,5-Dihydroxy-3-methoxy-2-prenylxanthone	HMDB0030605	1044
4292	HMDB0030606	1,7-Dihydroxy-3-methoxy-2-prenylxanthone	HMDB0030606	5092
4293	HMDB0034015	1,6-Dihydroxy-3-methoxy-2-prenylxanthone	HMDB0034015	1416
4294	HMDB0034279	Egonol	HMDB0034279	4851
4295	HMDB0040313	Moracin O	HMDB0040313	1453
4296	HMDB0040315	Moracin P	HMDB0040315	1453
4297	HMDB0040930	1,5-Bis(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-1,4-pentadien-3-one	HMDB0040930	1317
4298	HMDB0041299	omega-Hydroxymoracin N	HMDB0041299	1317
4299	HMDB0141058	NA	NA	NA
4300	HMDB0141068	NA	NA	NA
4301	CHEBI:545146	NA	NA	NA
4302	CHEBI:69558	NA	NA	NA
4303	CHEBI:790787	NA	NA	NA
4304	CHEBI:81116	NA	NA	NA
4305	CHEBI:86599	NA	NA	NA
4306	C02106	NA	NA	NA
4307	C05179	NA	NA	NA
4308	C07252	NA	NA	NA
4309	C09365	NA	NA	NA
4310	C09366	NA	NA	NA
4311	C09400	NA	NA	NA
4312	C09410	NA	NA	NA
4313	C09541	NA	NA	NA
4314	C11778	NA	NA	NA
4315	C11781	NA	NA	NA
4316	C12326	NA	NA	NA
4317	C17591	NA	NA	NA
4318	HMDB0015314	Naloxone	HMDB0015314	5284
4319	HMDB0030220	Laurotetanine	HMDB0030220	2674
4320	HMDB0030249	Norisocorydine	HMDB0030249	5320
4321	HMDB0030286	Coreximine	HMDB0030286	6012
4322	HMDB0031921	(R)-Norisocorydine	HMDB0031921	2359
4323	HMDB0033363	Norcorydine	HMDB0033363	7817
4324	HMDB0039085	(S)-Boldine	HMDB0039085	2485
4325	HMDB0041812	6-Acetylmorphine	HMDB0041812	5203
4326	CHEBI:17129	NA	NA	NA
4327	CHEBI:17225	NA	NA	NA
4328	CHEBI:7459	NA	NA	NA
4329	CHEBI:87776	NA	NA	NA
4330	CHEBI:95169	NA	NA	NA
4331	HMDB0032383	N1-(2-Methoxy-4-methylbenzyl)-n2-(2-(pyridin-2-yl)ethyl)oxalamide	HMDB0032383	1122
4332	HMDB0035218	Cinereain	HMDB0035218	5134
4333	C02982	NA	NA	NA
4334	HMDB0032477	Polyoxyethylene 40 monostearate	HMDB0032477	2476
4335	HMDB0061659	2(R)-hydroxyicosanoic acid	HMDB0061659	5225
4336	HMDB0061664	12-hydroxyicosanoic acid	HMDB0061664	1150
4337	HMDB0061665	15-hydroxyicosanoic acid	HMDB0061665	1153
4338	HMDB0061666	2-hydroxyphytanic acid	HMDB0061666	1890
4339	HMDB0062566	3-hydroxyicosanoic Acid	HMDB0062566	5282
4340	CHEBI:18164	NA	NA	NA
4341	CHEBI:37258	NA	NA	NA
4342	CHEBI:52347	NA	NA	NA
4343	CHEBI:76992	NA	NA	NA
4344	CHEBI:79015	NA	NA	NA
4345	CHEBI:79190	NA	NA	NA
4346	CHEBI:84925	NA	NA	NA
4347	C08687	NA	NA	NA
4348	C12580	NA	NA	NA
4349	C18769	NA	NA	NA
4350	HMDB0015240	Trilostane	HMDB0015240	6565
4351	HMDB0033448	Retrofractamide C	HMDB0033448	2525
4352	HMDB0038646	(8E)-Piperamide-C9:1	HMDB0038646	1317
4353	HMDB0039808	Pipertipine	HMDB0039808	1111
4354	HMDB0061042	N-desethyloxybutynin	HMDB0061042	1335
4355	CHEBI:32260	NA	NA	NA
4356	CHEBI:64080	NA	NA	NA
4357	CHEBI:69685	NA	NA	NA
4358	C04655	NA	NA	NA
4359	HMDB0029784	Unshuocide A	HMDB0029784	1317

4360	HMDB0033019	7-Hydroxyterpineol 8-glucoside	HMDB0033019	8519
4361	HMDB0033110	(1S,2S,4R)-1,8-Epoxy-p-menthan-2-ol glucoside	HMDB0033110	7381
4362	HMDB0033215	1,8-Epoxy-p-menthan-4-ol glucoside	HMDB0033215	8526
4363	HMDB0033220	(1R,2R,4S,6R)-2,6-Fenchenediol 2-O-b-D-glucoside	HMDB0033220	8526
4364	HMDB0033221	(1R,2S,4R,5S)-2,5-Fenchenediol 2-O-b-D-glucoside	HMDB0033221	8523
4365	HMDB0033644	(1S,2S,4S,5S)-2,4-Thujanediol 4-O-beta-D-Glucopyranoside	HMDB0033644	8523
4366	HMDB0034772	(1R,3S,4S)-1,8-Epoxy-p-menthan-3-ol glucoside	HMDB0034772	7381
4367	HMDB0035025	6Z-8-Hydroxygeraniol 8-O-glucoside	HMDB0035025	1317
4368	HMDB0035634	Betulalbuside A	HMDB0035634	1448
4369	HMDB0038747	(2E,4E,7R)-2,7-Dimethyl-2,4-octadiene-1,8-diol 8-O-b-D-glucopyranoside	HMDB0038747	1317
4370	HMDB0038980	(4R,6S)-p-Menth-1-ene-4,6-diol 4-glucoside	HMDB0038980	7307
4371	HMDB0038981	(S)-p-Menth-1-ene-4,7-diol 4-glucoside	HMDB0038981	7640
4372	HMDB0039055	(1S,2R,4R)-p-Menth-8-ene-2,10-diol 2-glucoside	HMDB0039055	8537
4373	HMDB0060012	Neomenthol-glucuronide	HMDB0060012	1838
4374	CHEBI:15608	NA	NA	NA
4375	CHEBI:89610	NA	NA	NA
4376	C19621	NA	NA	NA
4377	HMDB0030935	9,10,13-Trihydroxystearic acid	HMDB0030935	4535
4378	HMDB0034295	Floionolic acid	HMDB0034295	5282
4379	C02165	NA	NA	NA
4380	C06088	NA	NA	NA
4381	C09205	NA	NA	NA
4382	C14772	NA	NA	NA
4383	C14773	NA	NA	NA
4384	C14774	NA	NA	NA
4385	C14775	NA	NA	NA
4386	HMDB0002265	14,15-DiHETrE	HMDB0002265	5283
4387	HMDB0002311	8,9-DiHETrE	HMDB0002311	5283
4388	HMDB0002314	11,12-DiHETrE	HMDB0002314	5283
4389	HMDB0002330	NA	NA	NA
4390	HMDB0002342	NA	NA	NA
4391	HMDB0002343	5,6-DHET	HMDB0002343	5283
4392	HMDB0002351	NA	NA	NA
4393	HMDB0002995	12-Keto-tetrahydro-leukotriene B4	HMDB0002995	5283
4394	HMDB0004675	NA	NA	NA
4395	HMDB0004676	NA	NA	NA
4396	HMDB0011139	NA	NA	NA
4397	HMDB0012504	10,11-dihydro-leukotriene B4	HMDB0012504	5348
4398	HMDB0012838	6,7-dihydro-12-epi-LTB4	HMDB0012838	5348
4399	HMDB0035379	Sterebin E	HMDB0035379	1317
4400	HMDB0060106	15-Hydroperoxyeicosa-8Z,11Z,13E-trienoate	HMDB0060106	1317
4401	CHEBI:15647	NA	NA	NA
4402	CHEBI:2766	NA	NA	NA
4403	CHEBI:63966	NA	NA	NA
4404	CHEBI:63969	NA	NA	NA
4405	CHEBI:63970	NA	NA	NA
4406	CHEBI:63974	NA	NA	NA
4407	CHEBI:65463	NA	NA	NA
4408	CHEBI:65789	NA	NA	NA
4409	CHEBI:78859	NA	NA	NA
4410	CHEBI:78860	NA	NA	NA
4411	CHEBI:84174	NA	NA	NA
4412	CHEBI:85477	NA	NA	NA
4413	C08568	NA	NA	NA
4414	HMDB0029840	Vulgaxanthin I	HMDB0029840	2252
4415	C07628	NA	NA	NA
4416	C15186	NA	NA	NA
4417	HMDB0033786	Plastoquinone 3	HMDB0033786	1317
4418	HMDB0039762	1,1'-[1,11-Undecanediy]bis(oxy)]bisbenzene	HMDB0039762	7134
4419	C00089	NA	NA	NA
4420	C00185	NA	NA	NA
4421	C00208	NA	NA	NA
4422	C00243	NA	NA	NA
4423	C00252	NA	NA	NA
4424	C00760	NA	NA	NA
4425	C00897	NA	NA	NA
4426	C01083	NA	NA	NA
4427	C01235	NA	NA	NA
4428	C01518	NA	NA	NA
4429	C01711	NA	NA	NA
4430	C01725	NA	NA	NA
4431	C01728	NA	NA	NA
4432	C01742	NA	NA	NA
4433	C01970	NA	NA	NA
4434	C01971	NA	NA	NA
4435	C02048	NA	NA	NA
4436	C02964	NA	NA	NA
4437	C03323	NA	NA	NA
4438	C03857	NA	NA	NA
4439	C04147	NA	NA	NA
4440	C04219	NA	NA	NA
4441	C05400	NA	NA	NA
4442	C05402	NA	NA	NA
4443	C06421	NA	NA	NA
4444	C06422	NA	NA	NA
4445	C07064	NA	NA	NA
4446	C08240	NA	NA	NA

4447	C08250	NA	NA	NA
4448	C15548	NA	NA	NA
4449	C18068	NA	NA	NA
4450	C19632	NA	NA	NA
4451	C19633	NA	NA	NA
4452	C19634	NA	NA	NA
4453	C19636	NA	NA	NA
4454	C19773	NA	NA	NA
4455	C20236	NA	NA	NA
4456	HMDB0000048	Melibiose	HMDB0000048	6602
4457	HMDB0000055	Cellobiose	HMDB0000055	1071
4458	HMDB0000163	D-Maltose	HMDB0000163	1099
4459	HMDB0000186	Alpha-Lactose	HMDB0000186	8457
4460	HMDB0000258	Sucrose	HMDB0000258	5988
4461	HMDB0000740	Lactulose	HMDB0000740	1133
4462	HMDB0000975	Trehalose	HMDB0000975	7427
4463	HMDB0002923	Isomaltose	HMDB0002923	1035
4464	HMDB0005761	NA	NA	NA
4465	HMDB0005826	Galactinol	HMDB0005826	3818
4466	HMDB0006603	3-b-Galactopyranosyl glucose	HMDB0006603	5347
4467	HMDB0006792	Epimelibiose	HMDB0006792	1172
4468	HMDB0011740	Turanose	HMDB0011740	5460
4469	HMDB0011742	Kojibiose	HMDB0011742	1649
4470	HMDB0014719	NA	NA	NA
4471	HMDB0029880	Neotrehalose	HMDB0029880	1087
4472	HMDB0029882	Sakebiose	HMDB0029882	9705
4473	HMDB0029898	Inulobiose	HMDB0029898	4395
4474	HMDB0029902	Galabiose	HMDB0029902	5288
4475	HMDB0029919	Maltulose	HMDB0029919	2231
4476	HMDB0029933	Mannobiose	HMDB0029933	4481
4477	HMDB0033368	DEAE-cellulose	HMDB0033368	1621
4478	HMDB0037138	Maltodextrin	HMDB0037138	4393
4479	HMDB0038489	Allolactose	HMDB0038489	6737
4480	HMDB0039237	Glucinol	HMDB0039237	
4481	HMDB0039727	NA	NA	NA
4482	HMDB0039876	Fagopyritol A1	HMDB0039876	1071
4483	HMDB0041627	beta-Lactose	HMDB0041627	6134
4484	HMDB0060068	Glucose-1,3-mannose oligosaccharide	HMDB0060068	4402
4485	HMDB0125600	NA	NA	NA
4486	HMDB0133305	NA	NA	NA
4487	CHEBI:1230	NA	NA	NA
4488	CHEBI:16432	NA	NA	NA
4489	CHEBI:16551	NA	NA	NA
4490	CHEBI:16751	NA	NA	NA
4491	CHEBI:17057	NA	NA	NA
4492	CHEBI:17306	NA	NA	NA
4493	CHEBI:17505	NA	NA	NA
4494	CHEBI:17716	NA	NA	NA
4495	CHEBI:17992	NA	NA	NA
4496	CHEBI:18147	NA	NA	NA
4497	CHEBI:18167	NA	NA	NA
4498	CHEBI:18394	NA	NA	NA
4499	CHEBI:18411	NA	NA	NA
4500	CHEBI:25164	NA	NA	NA
4501	CHEBI:27082	NA	NA	NA
4502	CHEBI:27554	NA	NA	NA
4503	CHEBI:28053	NA	NA	NA
4504	CHEBI:28066	NA	NA	NA
4505	CHEBI:28085	NA	NA	NA
4506	CHEBI:28189	NA	NA	NA
4507	CHEBI:28676	NA	NA	NA
4508	CHEBI:32528	NA	NA	NA
4509	CHEBI:33020	NA	NA	NA
4510	CHEBI:36217	NA	NA	NA
4511	CHEBI:36218	NA	NA	NA
4512	CHEBI:36219	NA	NA	NA
4513	CHEBI:36224	NA	NA	NA
4514	CHEBI:36226	NA	NA	NA
4515	CHEBI:36227	NA	NA	NA
4516	CHEBI:36229	NA	NA	NA
4517	CHEBI:36230	NA	NA	NA
4518	CHEBI:36231	NA	NA	NA
4519	CHEBI:39244	NA	NA	NA
4520	CHEBI:39245	NA	NA	NA
4521	CHEBI:41034	NA	NA	NA
4522	CHEBI:4174	NA	NA	NA
4523	CHEBI:43620	NA	NA	NA
4524	CHEBI:47931	NA	NA	NA
4525	CHEBI:47933	NA	NA	NA
4526	CHEBI:47934	NA	NA	NA
4527	CHEBI:47935	NA	NA	NA
4528	CHEBI:47936	NA	NA	NA
4529	CHEBI:47937	NA	NA	NA
4530	CHEBI:47938	NA	NA	NA
4531	CHEBI:47939	NA	NA	NA
4532	CHEBI:47998	NA	NA	NA
4533	CHEBI:47999	NA	NA	NA

4534	CHEBI:4808	NA	NA	NA
4535	CHEBI:51833	NA	NA	NA
4536	CHEBI:52996	NA	NA	NA
4537	CHEBI:52997	NA	NA	NA
4538	CHEBI:53445	NA	NA	NA
4539	CHEBI:53451	NA	NA	NA
4540	CHEBI:53651	NA	NA	NA
4541	CHEBI:546808	NA	NA	NA
4542	CHEBI:59094	NA	NA	NA
4543	CHEBI:59314	NA	NA	NA
4544	CHEBI:59430	NA	NA	NA
4545	CHEBI:59432	NA	NA	NA
4546	CHEBI:59563	NA	NA	NA
4547	CHEBI:59578	NA	NA	NA
4548	CHEBI:59584	NA	NA	NA
4549	CHEBI:60179	NA	NA	NA
4550	CHEBI:60180	NA	NA	NA
4551	CHEBI:60477	NA	NA	NA
4552	CHEBI:60876	NA	NA	NA
4553	CHEBI:61110	NA	NA	NA
4554	CHEBI:61609	NA	NA	NA
4555	CHEBI:61625	NA	NA	NA
4556	CHEBI:61663	NA	NA	NA
4557	CHEBI:61742	NA	NA	NA
4558	CHEBI:61743	NA	NA	NA
4559	CHEBI:61770	NA	NA	NA
4560	CHEBI:61772	NA	NA	NA
4561	CHEBI:61827	NA	NA	NA
4562	CHEBI:62037	NA	NA	NA
4563	CHEBI:62103	NA	NA	NA
4564	CHEBI:62330	NA	NA	NA
4565	CHEBI:62350	NA	NA	NA
4566	CHEBI:62353	NA	NA	NA
4567	CHEBI:62354	NA	NA	NA
4568	CHEBI:62355	NA	NA	NA
4569	CHEBI:62356	NA	NA	NA
4570	CHEBI:62357	NA	NA	NA
4571	CHEBI:6359	NA	NA	NA
4572	CHEBI:64168	NA	NA	NA
4573	CHEBI:64351	NA	NA	NA
4574	CHEBI:64527	NA	NA	NA
4575	CHEBI:68541	NA	NA	NA
4576	CHEBI:71422	NA	NA	NA
4577	CHEBI:71552	NA	NA	NA
4578	CHEBI:7570	NA	NA	NA
4579	CHEBI:77436	NA	NA	NA
4580	CHEBI:79284	NA	NA	NA
4581	CHEBI:79285	NA	NA	NA
4582	CHEBI:79286	NA	NA	NA
4583	CHEBI:87201	NA	NA	NA
4584	C00761	NA	NA	NA
4585	HMDB0013682	Coniferin	HMDB0013682	5280
4586	HMDB0030107	3-Hydroxy-3-(3,4-dihydroxy-4-methylpentanoyl)-5-(3-methylbutyl)-1,2,4-cyclopentanetrione	HMDB0030107	
4587	HMDB0032767	Sphalleroside A	HMDB0032767	1317
4588	HMDB0036585	NA	NA	NA
4589	HMDB0037552	4-Hydroxy-3-(2-hydroxyethyl)acetophenone 4-glucoside	HMDB0037552	7381
4590	HMDB0039334	Citrusin D	HMDB0039334	1317
4591	HMDB0040663	Veranisatin A	HMDB0040663	1278
4592	HMDB0041273	Myzodendrone	HMDB0041273	2237
4593	HMDB0135749	NA	NA	NA
4594	CHEBI:16220	NA	NA	NA
4595	HMDB0002277	2,3-Dinor-6-keto-prostaglandin F1 a	HMDB0002277	5347
4596	HMDB0002904	2,3-Dinor-TXB2	HMDB0002904	5283
4597	HMDB0038940	(-)-11-Hydroxy-9,15,16-trioxooctadecanoic acid	HMDB0038940	1317
4598	HMDB0061154	Monic acid	HMDB0061154	1317
4599	HMDB0062618	2,3-dinor-6-oxoprostaglandin F1alpha	HMDB0062618	5283
4600	CHEBI:73944	NA	NA	NA
4601	CHEBI:89991	NA	NA	NA
4602	HMDB0031923	10,20-Dihydroxyeicosanoic acid	HMDB0031923	1425
4603	HMDB0072846	NA	NA	NA
4604	HMDB0072848	NA	NA	NA
4605	HMDB0072851	NA	NA	NA
4606	HMDB0072852	NA	NA	NA
4607	HMDB0072856	NA	NA	NA
4608	HMDB0072875	NA	NA	NA
4609	CHEBI:48925	NA	NA	NA
4610	CHEBI:48936	NA	NA	NA
4611	CHEBI:79252	NA	NA	NA
4612	CHEBI:79292	NA	NA	NA
4613	C01699	NA	NA	NA
4614	C09059	NA	NA	NA
4615	C09062	NA	NA	NA
4616	C09104	NA	NA	NA
4617	C09174	NA	NA	NA
4618	C09190	NA	NA	NA
4619	C09385	NA	NA	NA
4620	C09512	NA	NA	NA

4621	C09547	NA	NA	NA
4622	C11855	NA	NA	NA
4623	C11856	NA	NA	NA
4624	C11869	NA	NA	NA
4625	HMDB0003559	Gibberellin A3	HMDB0003559	6466
4626	HMDB0031365	Gibberellin A94	HMDB0031365	8508
4627	HMDB0033290	Junosmarin	HMDB0033290	1405
4628	HMDB0035609	Gibberellin A68	HMDB0035609	1460
4629	HMDB0036423	Cynaropicrin	HMDB0036423	1811
4630	HMDB0036677	Strigol	HMDB0036677	6391
4631	HMDB0036779	Diosbulbin E	HMDB0036779	6120
4632	HMDB0036782	Diosbulbin G	HMDB0036782	3292
4633	HMDB0036891	Gibberellin A22	HMDB0036891	1016
4634	HMDB0036892	Gibberellin A80	HMDB0036892	1016
4635	HMDB0038314	Gibberellin A126	HMDB0038314	1011
4636	HMDB0040309	8-Hydroxy-3',4',5',7-tetramethoxyflavan	HMDB0040309	7507
4637	HMDB0040310	5'-Hydroxy-3',4',7,8-tetramethoxyflavan	HMDB0040310	7507
4638	HMDB0040648	Gibberellin A92	HMDB0040648	1016
4639	HMDB0041372	Alectrol	HMDB0041372	1317
4640	CHEBI:28833	NA	NA	NA
4641	CHEBI:29602	NA	NA	NA
4642	CHEBI:70194	NA	NA	NA
4643	CHEBI:70197	NA	NA	NA
4644	CHEBI:70198	NA	NA	NA
4645	CHEBI:9290	NA	NA	NA
4646	HMDB0033222	(1R,3S,4S,6R)-6,9-Dihydroxyfenchone 6-O-b-D-glucoside	HMDB0033222	8516
4647	HMDB0033223	(1S,3R,4R)-8,10-Dihydroxyfenchone 10-O-b-D-glucoside	HMDB0033223	8524
4648	HMDB0035822	Glucosyl 6-hydroxy-2,6-dimethyl-2E,7-octadienoate	HMDB0035822	1317
4649	HMDB0038149	Nepetaside	HMDB0038149	1402
4650	C00020	NA	NA	NA
4651	C00362	NA	NA	NA
4652	C00946	NA	NA	NA
4653	C01367	NA	NA	NA
4654	C04378	NA	NA	NA
4655	C19970	NA	NA	NA
4656	HMDB0000045	Adenosine monophosphate	HMDB0000045	6083
4657	HMDB0001044	2'-Deoxyguanosine 5'-monophosphate	HMDB0001044	6505
4658	HMDB0003540	3'-AMP	HMDB0003540	4121
4659	HMDB0006550	NA	NA	NA
4660	HMDB0011617	Adenosine 2'-phosphate	HMDB0011617	5348
4661	HMDB0059594	2-hydroxy-dAMP	HMDB0059594	6323
4662	CHEBI:16027	NA	NA	NA
4663	CHEBI:16192	NA	NA	NA
4664	CHEBI:2285	NA	NA	NA
4665	CHEBI:28223	NA	NA	NA
4666	CHEBI:28931	NA	NA	NA
4667	CHEBI:41945	NA	NA	NA
4668	CHEBI:55553	NA	NA	NA
4669	CHEBI:63211	NA	NA	NA
4670	CHEBI:70964	NA	NA	NA
4671	CHEBI:71403	NA	NA	NA
4672	C10145	NA	NA	NA
4673	C11720	NA	NA	NA
4674	HMDB0041886	Enalaprilat	HMDB0041886	6917
4675	CHEBI:4786	NA	NA	NA
4676	C13828	NA	NA	NA
4677	HMDB0013625	Dihomo-gamma-linolenoyl ethanolamide	HMDB0013625	5282
4678	CHEBI:34488	NA	NA	NA
4679	HMDB0060933	Propofol glucuronide	HMDB0060933	7175
4680	C00639	NA	NA	NA
4681	C02314	NA	NA	NA
4682	C04741	NA	NA	NA
4683	C04843	NA	NA	NA
4684	C05959	NA	NA	NA
4685	C06438	NA	NA	NA
4686	C12786	NA	NA	NA
4687	C13809	NA	NA	NA
4688	C14782	NA	NA	NA
4689	C14809	NA	NA	NA
4690	C14811	NA	NA	NA
4691	C14814	NA	NA	NA
4692	HMDB0001139	Prostaglandin F2a	HMDB0001139	5283
4693	HMDB0001442	Prostaglandin E1	HMDB0001442	5280
4694	HMDB0001483	Prostaglandin F2b	HMDB0001483	5280
4695	HMDB0001965	Troxilin B3	HMDB0001965	5283
4696	HMDB0001977	Trioxilin A3	HMDB0001977	5283
4697	HMDB0002115	8-isoprostaglandin PGF2b	HMDB0002115	5283
4698	HMDB0004684	11,12,15-THETA	HMDB0004684	1195
4699	HMDB0004685	13,14-Dihydro-15-keto PGF2a	HMDB0004685	5283
4700	HMDB0004686	8-Isoprostaglandin E1	HMDB0004686	5283
4701	HMDB0004694	11,14,15-THETA	HMDB0004694	1195
4702	HMDB0005083	8-Isoprostaglandin F2a	HMDB0005083	5282
4703	HMDB0005102	Prostaglandin D1	HMDB0005102	5280
4704	HMDB0006562	8-iso-13,14-dihydro-15-keto-PGF2a	HMDB0006562	5283
4705	HMDB0010170	11,12,15-TriHETRE	HMDB0010170	5348
4706	HMDB0010199	11b-PGF2a	HMDB0010199	5280
4707	HMDB0011137	11-Epi-PGF2a	HMDB0011137	5348

4708	HMDB0012563	13,14-Dihydro- lipoxin A4	HMDB0012563	5348
4709	HMDB0013041	Prostaglandin H1	HMDB0013041	5092
4710	HMDB0035380	Sterebin G	HMDB0035380	1399
4711	HMDB0060045	15-keto-PGF1alpha	HMDB0060045	5283
4712	HMDB0060107	(5Z,9E,12S,14Z)-8,11,12-Trihydroxyicosa-5,9,14-trienoate	HMDB0060107	1317
4713	HMDB0062278	11,12,15-trihydroxyeicosatrienoic acid	HMDB0062278	6439
4714	CHEBI:15544	NA	NA	NA
4715	CHEBI:15553	NA	NA	NA
4716	CHEBI:15630	NA	NA	NA
4717	CHEBI:27595	NA	NA	NA
4718	CHEBI:27696	NA	NA	NA
4719	CHEBI:28922	NA	NA	NA
4720	CHEBI:34128	NA	NA	NA
4721	CHEBI:34131	NA	NA	NA
4722	CHEBI:34505	NA	NA	NA
4723	CHEBI:35032	NA	NA	NA
4724	CHEBI:36203	NA	NA	NA
4725	CHEBI:63976	NA	NA	NA
4726	CHEBI:72593	NA	NA	NA
4727	CHEBI:79199	NA	NA	NA
4728	CHEBI:91133	NA	NA	NA
4729	C12280	NA	NA	NA
4730	HMDB0011538	NA	NA	NA
4731	HMDB0011568	NA	NA	NA
4732	CHEBI:75457	NA	NA	NA
4733	CHEBI:75561	NA	NA	NA
4734	CHEBI:75563	NA	NA	NA
4735	CHEBI:75565	NA	NA	NA
4736	CHEBI:75568	NA	NA	NA
4737	CHEBI:87257	NA	NA	NA
4738	HMDB0001160	Tricosanoic acid	HMDB0001160	1708
4739	HMDB0035638	6-Hydroxy-8-tricosanone	HMDB0035638	1317
4740	HMDB0035642	8-Hydroxy-6-tricosanone	HMDB0035642	1317
4741	HMDB0035649	4-Hydroxy-6-tricosanone	HMDB0035649	1317
4742	HMDB0035650	6-Hydroxy-4-tricosanone	HMDB0035650	1317
4743	CHEBI:42394	NA	NA	NA
4744	CHEBI:84878	NA	NA	NA
4745	C06475	NA	NA	NA
4746	HMDB0002685	Prostaglandin F1a	HMDB0002685	5280
4747	HMDB0002689	13,14-Dihydro PGE1	HMDB0002689	1612
4748	HMDB0004239	13,14-Dihydro PGF2a	HMDB0004239	6439
4749	CHEBI:1000694	NA	NA	NA
4750	CHEBI:28852	NA	NA	NA
4751	C10784	NA	NA	NA
4752	C14974	NA	NA	NA
4753	C15009	NA	NA	NA
4754	HMDB0033443	Sorgoleone 358	HMDB0033443	1442
4755	HMDB0035856	11,12-Dimethoxy-8,11,13-abietatrien-20,7-olide	HMDB0035856	3086
4756	HMDB0040619	Piperoic acid	HMDB0040619	1384
4757	CHEBI:3359	NA	NA	NA
4758	CHEBI:50156	NA	NA	NA
4759	CHEBI:61117	NA	NA	NA
4760	CHEBI:66336	NA	NA	NA
4761	CHEBI:66427	NA	NA	NA
4762	CHEBI:66428	NA	NA	NA
4763	CHEBI:67078	NA	NA	NA
4764	CHEBI:70565	NA	NA	NA
4765	CHEBI:83796	NA	NA	NA
4766	CHEBI:85912	NA	NA	NA
4767	HMDB0014010	5-Hydroxyomeprazole	HMDB0014010	1195
4768	HMDB0014012	Omeprazole sulfone	HMDB0014012	1455
4769	HMDB0014013	3-Hydroxyomeprazole	HMDB0014013	7158
4770	HMDB0061091	NA	NA	NA
4771	CHEBI:388428	NA	NA	NA
4772	CHEBI:52060	NA	NA	NA
4773	CHEBI:63840	NA	NA	NA
4774	HMDB0029297	Avenanthramide A2	HMDB0029297	1317
4775	CHEBI:32649	NA	NA	NA
4776	HMDB0060982	hydroxytorsemide	HMDB0060982	1447
4777	HMDB0038471	Luteolin 4'-sulfate	HMDB0038471	4425
4778	HMDB0038472	Luteolin 7-sulfate	HMDB0038472	1401
4779	HMDB0125276	NA	NA	NA
4780	HMDB0126629	NA	NA	NA
4781	HMDB0129994	NA	NA	NA
4782	HMDB0133349	NA	NA	NA
4783	HMDB0133359	NA	NA	NA
4784	HMDB0133369	NA	NA	NA
4785	HMDB0140563	NA	NA	NA
4786	HMDB0012492	1-(1,2,3,4,5-Pentahydroxypent-1-yl)-1,2,3,4-tetrahydro-beta-carboline-3-carboxylate	HMDB0012492	2112
4787	HMDB0029992	NA	NA	NA
4788	HMDB0033108	Semilepidinoside B	HMDB0033108	1317
4789	CHEBI:63747	NA	NA	NA
4790	CHEBI:76121	NA	NA	NA
4791	C08323	NA	NA	NA
4792	C15398	NA	NA	NA
4793	HMDB0002368	Nervonic acid	HMDB0002368	5281
4794	HMDB0029799	(E)-2-Tetracosenoic acid	HMDB0029799	6440



4795	HMDB0035559	10,12-Tetracosanedione	HMDB0035559	1317
4796	HMDB0035560	7,9-Tetracosanedione	HMDB0035560	8611
4797	HMDB0035561	6,8-Tetracosanedione	HMDB0035561	1317
4798	HMDB0035562	5,7-Tetracosanedione	HMDB0035562	1317
4799	HMDB0035563	4,6-Tetracosanedione	HMDB0035563	1317
4800	CHEBI:44247	NA	NA	NA
4801	CHEBI:84888	NA	NA	NA
4802	CHEBI:84891	NA	NA	NA
4803	C04555	NA	NA	NA
4804	HMDB0001032	Dehydroepiandrosterone sulfate	HMDB0001032	1259
4805	HMDB0002833	Testosterone sulfate	HMDB0002833	1192
4806	HMDB0013230	Epitestosterone sulfate	HMDB0013230	5348
4807	CHEBI:16814	NA	NA	NA
4808	CHEBI:84094	NA	NA	NA
4809	C10887	NA	NA	NA
4810	C20452	NA	NA	NA
4811	HMDB0031941	8'-Episesaminone	HMDB0031941	5346
4812	HMDB0034119	Sesamolin	HMDB0034119	5855
4813	HMDB0035527	Glycyrrhizaflavonol A	HMDB0035527	5317
4814	HMDB0036555	Glycyrrhizaisoflavone A	HMDB0036555	1054
4815	HMDB0038398	Gancaonin P	HMDB0038398	5481
4816	HMDB0038900	2,3-Dehydrokievitol	HMDB0038900	4425
4817	HMDB0038932	Justisolin	HMDB0038932	9799
4818	HMDB0039731	Neouralenol	HMDB0039731	5320
4819	HMDB0039732	Uralenol	HMDB0039732	5315
4820	HMDB0132502	NA	NA	NA
4821	HMDB0132503	NA	NA	NA
4822	HMDB0137144	NA	NA	NA
4823	CHEBI:65611	NA	NA	NA
4824	CHEBI:67538	NA	NA	NA
4825	CHEBI:70489	NA	NA	NA
4826	CHEBI:71356	NA	NA	NA
4827	HMDB0002759	Androsterone sulfate	HMDB0002759	1596
4828	HMDB0006278	5a-Dihydrotestosterone sulfate	HMDB0006278	1866
4829	HMDB0013232	Etiocolanolone sulfate	HMDB0013232	5348
4830	HMDB0062657	Epiandrosterone sulfate	HMDB0062657	9929
4831	CHEBI:83037	NA	NA	NA
4832	CHEBI:83040	NA	NA	NA
4833	C14240	NA	NA	NA
4834	C19625	NA	NA	NA
4835	HMDB0040270	Diethylhexyl adipate	HMDB0040270	7641
4836	HMDB0041619	Dioctyl hexanedioate	HMDB0041619	3127
4837	CHEBI:34675	NA	NA	NA
4838	CHEBI:76319	NA	NA	NA
4839	C09894	NA	NA	NA
4840	C10879	NA	NA	NA
4841	C10892	NA	NA	NA
4842	C20205	NA	NA	NA
4843	HMDB0030781	Isomammein	HMDB0030781	5748
4844	HMDB0030782	Mammea B/AB	HMDB0030782	7143
4845	HMDB0030783	Mammea B/BA	HMDB0030783	5489
4846	HMDB0038742	Armillasin	HMDB0038742	1317
4847	HMDB0039060	(S)-Neomammein	HMDB0039060	1033
4848	HMDB0041330	Tanabalin	HMDB0041330	3688
4849	CHEBI:1177617	NA	NA	NA
4850	CHEBI:1177619	NA	NA	NA
4851	CHEBI:27474	NA	NA	NA
4852	CHEBI:65955	NA	NA	NA
4853	HMDB0012243	Kinetin-7-N-glucoside	HMDB0012243	1174
4854	HMDB0012244	Kinetin-9-N-glucoside	HMDB0012244	1154
4855	CHEBI:72620	NA	NA	NA
4856	C09477	NA	NA	NA
4857	HMDB0029304	3,4-DHPEA-EA	HMDB0029304	5684
4858	HMDB0035037	Gibberellin A32	HMDB0035037	1095
4859	HMDB0039137	2-(3,4-Dihydroxyphenylethyl)-6-epi-elenaiate	HMDB0039137	1868
4860	CHEBI:83275	NA	NA	NA
4861	C15291	NA	NA	NA
4862	C17012	NA	NA	NA
4863	HMDB0000418	18-Hydroxycortisol	HMDB0000418	4426
4864	HMDB0030045	Isohumulinone A	HMDB0030045	1317
4865	HMDB0030105	Humulinone	HMDB0030105	
4866	HMDB0032770	Eremopetasitenin C1	HMDB0032770	1317
4867	HMDB0032773	Eremopetasitenin D1	HMDB0032773	1317
4868	HMDB0036889	11-Dihydro-12-norneoquassin	HMDB0036889	1317
4869	HMDB0040702	Sugetriol triacetate	HMDB0040702	1317
4870	HMDB0061033	6-beta-hydrocortisol	HMDB0061033	1009
4871	CHEBI:89455	NA	NA	NA
4872	HMDB0036893	Gibberellin A75	HMDB0036893	1458
4873	HMDB0037056	8-Oxodiacetoxyscirpenol	HMDB0037056	1317
4874	HMDB0038328	(S)-Bitalin A 12-glucoside	HMDB0038328	8539
4875	HMDB0038450	Gibberellin A86	HMDB0038450	1016
4876	HMDB0040899	Methyl helianthenoate A glucoside	HMDB0040899	1317
4877	C08756	NA	NA	NA
4878	C17643	NA	NA	NA
4879	HMDB0030760	Pteroside B	HMDB0030760	7398
4880	HMDB0035166	Cinnassiol C	HMDB0035166	1484
4881	HMDB0035840	Deacetylisovaltrate	HMDB0035840	1317

4882	HMDB0041228	6b-Angeloyl-3b,8b,9b-trihydroxy-7(11)-eremophilen-12,8-olide	HMDB0041228	1317
4883	HMDB0126521	NA	NA	NA
4884	CHEBI:66622	NA	NA	NA
4885	CHEBI:66623	NA	NA	NA
4886	HMDB0010343	Ibuprofen glucuronide	HMDB0010343	9227
4887	HMDB0035201	4,8-Diacetyl-T2-tetrol	HMDB0035201	1002
4888	HMDB0038916	7alpha,8alpha-Dihydroxycalonectrin	HMDB0038916	5574
4889	HMDB0039811	Cyclocalopin B	HMDB0039811	7311
4890	HMDB0060919	NA	NA	NA
4891	HMDB0132958	NA	NA	NA
4892	HMDB0140970	NA	NA	NA
4893	CHEBI:68930	NA	NA	NA
4894	CHEBI:88735	NA	NA	NA
4895	HMDB0002361	Pentacosanoic acid	HMDB0002361	1046
4896	HMDB0035629	6-Hydroxy-8-pentacosanone	HMDB0035629	1317
4897	HMDB0035630	4-Hydroxy-6-pentacosanone	HMDB0035630	1317
4898	HMDB0035632	6-Hydroxy-4-pentacosanone	HMDB0035632	1317
4899	HMDB0036843	Lepidiumsesterterpenol	HMDB0036843	1064
4900	CHEBI:39420	NA	NA	NA
4901	CHEBI:84062	NA	NA	NA
4902	CHEBI:84882	NA	NA	NA
4903	C10552	NA	NA	NA
4904	HMDB0029541	(+)-Zeylenol	HMDB0029541	1428
4905	HMDB0030621	Oxyisocyclointegrin	HMDB0030621	4425
4906	HMDB0034914	Dulxanthone F	HMDB0034914	1050
4907	HMDB0035479	Isolicopyranocoumarin	HMDB0035479	1081
4908	HMDB0036281	Licofuranocoumarin	HMDB0036281	5319
4909	HMDB0038396	Gancaonin D	HMDB0038396	5317
4910	HMDB0038874	Licopyranocoumarin	HMDB0038874	1228
4911	HMDB0038950	5-Methoxyhinokinin	HMDB0038950	1401
4912	HMDB0039617	Piperenol B	HMDB0039617	1489
4913	HMDB0039634	Piperenol A	HMDB0039634	1489
4914	HMDB0040134	Calebin A	HMDB0040134	6374
4915	HMDB0040813	3'-O-Methylgancaonin P	HMDB0040813	5317
4916	HMDB0040837	3-O-Methyluralenol	HMDB0040837	5315
4917	HMDB0040934	Uralene	HMDB0040934	1924
4918	HMDB0125986	NA	NA	NA
4919	HMDB0125988	NA	NA	NA
4920	HMDB0125989	NA	NA	NA
4921	HMDB0125990	NA	NA	NA
4922	HMDB0125991	NA	NA	NA
4923	HMDB0139010	NA	NA	NA
4924	CHEBI:1729	NA	NA	NA
4925	CHEBI:55487	NA	NA	NA
4926	CHEBI:66152	NA	NA	NA
4927	HMDB0000386	NA	NA	NA
4928	HMDB0062544	16alpha-Hydroxy DHEA 3-sulfate	HMDB0062544	2084
4929	HMDB0062611	NA	NA	NA
4930	CHEBI:87538	NA	NA	NA
4931	CHEBI:87774	NA	NA	NA
4932	HMDB0012643	20-Trihydroxy-leukotriene-B4	HMDB0012643	5348
4933	HMDB0036010	Cinnzeylanol	HMDB0036010	7506
4934	CHEBI:73974	NA	NA	NA
4935	CHEBI:79128	NA	NA	NA
4936	C03240	NA	NA	NA
4937	HMDB0031125	Glycerol trihexanoate	HMDB0031125	1213
4938	HMDB0036015	Mangalkanyl glucoside	HMDB0036015	1317
4939	HMDB0038018	Cryptomeridiol 11-rhamnoside	HMDB0038018	7307
4940	CHEBI:16089	NA	NA	NA
4941	CHEBI:77386	NA	NA	NA
4942	CHEBI:78963	NA	NA	NA
4943	CHEBI:79147	NA	NA	NA
4944	HMDB0012109	5,6-Dihydroxyprostaglandin F1a	HMDB0012109	6435
4945	C08764	NA	NA	NA
4946	C09799	NA	NA	NA
4947	HMDB0035045	Gibberellin A39	HMDB0035045	2155
4948	HMDB0035046	Gibberellin A43	HMDB0035046	2524
4949	CHEBI:24241	NA	NA	NA
4950	CHEBI:66161	NA	NA	NA
4951	CHEBI:66164	NA	NA	NA
4952	HMDB0031945	Niaziminin	HMDB0031945	1002
4953	HMDB0015686	Pipazetate	HMDB0015686	2242
4954	HMDB0032156	alpha-Acetolactate decarboxylase (enzyme preparation from bacillus subtilis recombinant)	HMDB0032156	1151
4955	C04007	NA	NA	NA
4956	C09262	NA	NA	NA
4957	C10112	NA	NA	NA
4958	C14943	NA	NA	NA
4959	C14944	NA	NA	NA
4960	HMDB0029308	Hexamethylquercetagenin	HMDB0029308	3863
4961	HMDB0029540	Nobiletin	HMDB0029540	7234
4962	HMDB0035415	3,3',4',5,6,8-Hexamethoxyflavone	HMDB0035415	1298
4963	HMDB0037755	3,3',4',5,7,8-Hexamethoxyflavone	HMDB0037755	1460
4964	HMDB0039379	Chrysaloins	HMDB0039379	1558
4965	HMDB0129093	NA	NA	NA
4966	HMDB0129094	NA	NA	NA
4967	HMDB0130342	NA	NA	NA
4968	HMDB0130343	NA	NA	NA

4969	HMDB0135217	NA	NA	NA
4970	HMDB0135219	NA	NA	NA
4971	HMDB0135221	NA	NA	NA
4972	HMDB0135223	NA	NA	NA
4973	HMDB0135225	NA	NA	NA
4974	HMDB0135227	NA	NA	NA
4975	HMDB0135228	NA	NA	NA
4976	HMDB0135545	NA	NA	NA
4977	HMDB0135547	NA	NA	NA
4978	HMDB0135549	NA	NA	NA
4979	HMDB0135551	NA	NA	NA
4980	CHEBI:221290	NA	NA	NA
4981	CHEBI:27590	NA	NA	NA
4982	CHEBI:479527	NA	NA	NA
4983	CHEBI:65979	NA	NA	NA
4984	CHEBI:7602	NA	NA	NA
4985	CHEBI:79467	NA	NA	NA
4986	CHEBI:79468	NA	NA	NA
4987	HMDB0029458	Oryzarol	HMDB0029458	5811
4988	CHEBI:68040	NA	NA	NA
4989	C00695	NA	NA	NA
4990	C01558	NA	NA	NA
4991	C04661	NA	NA	NA
4992	C17644	NA	NA	NA
4993	C17647	NA	NA	NA
4994	C17649	NA	NA	NA
4995	C17650	NA	NA	NA
4996	C17654	NA	NA	NA
4997	C17657	NA	NA	NA
4998	C17667	NA	NA	NA
4999	C17668	NA	NA	NA
5000	C17726	NA	NA	NA
5001	C17727	NA	NA	NA
5002	C17737	NA	NA	NA
5003	HMDB0000312	3alpha,7alpha,12beta-Trihydroxy-5beta-cholanoic acid	HMDB0000312	5283
5004	HMDB0000320	3a,4b,7a-Trihydroxy-5b-cholanoic acid	HMDB0000320	5347
5005	HMDB0000326	1b,3a,12a-Trihydroxy-5b-cholanoic acid	HMDB0000326	5347
5006	HMDB0000330	3a,4b,12a-Trihydroxy-5b-cholanoic acid	HMDB0000330	3080
5007	HMDB0000364	3a,6a,7b-Trihydroxy-5b-cholanoic acid	HMDB0000364	5283
5008	HMDB0000371	1,3,12-Trihydroxy-24-oic acid	HMDB0000371	2084
5009	HMDB0000376	3b,7a,12a-Trihydroxy-5a-Cholanoic acid	HMDB0000376	5283
5010	HMDB0000390	3a,7b,12b-Trihydroxy-5b-cholanoic acid	HMDB0000390	5283
5011	HMDB0000395	3b,7b,12a-Trihydroxy-5b-cholanoic acid	HMDB0000395	5283
5012	HMDB0000404	2b,3a,7a-Trihydroxy-5b-cholanoic acid	HMDB0000404	5283
5013	HMDB0000414	1b,3a,7a-Trihydroxy-5b-cholanoic acid	HMDB0000414	5283
5014	HMDB0000415	3a,6b,7b-Trihydroxy-5b-cholanoic acid	HMDB0000415	5283
5015	HMDB0000419	3b,7a,12a-Trihydroxy-5b-cholanoic acid	HMDB0000419	5283
5016	HMDB0000427	3b,7b,12a-Trihydroxy-5a-Cholanoic acid	HMDB0000427	5283
5017	HMDB0000432	3a,7b,12a-Trihydroxy-5a-Cholanoic acid	HMDB0000432	129
5018	HMDB0000505	Allocholic acid	HMDB0000505	1606
5019	HMDB0000506	alpha-Muricholic acid	HMDB0000506	5283
5020	HMDB0000527	6a,12a-Dihydroxylithocholic acid	HMDB0000527	2283
5021	HMDB0000619	Cholic acid	HMDB0000619	2214
5022	HMDB0000760	Hyochoic acid	HMDB0000760	1317
5023	HMDB0000865	Muricholic acid	HMDB0000865	1194
5024	HMDB0000917	Ursocholic acid	HMDB0000917	1223
5025	HMDB00006053	NA	NA	NA
5026	CHEBI:16359	NA	NA	NA
5027	CHEBI:36240	NA	NA	NA
5028	CHEBI:803879	NA	NA	NA
5029	CHEBI:81298	NA	NA	NA
5030	CHEBI:85490	NA	NA	NA
5031	CHEBI:88105	NA	NA	NA
5032	CHEBI:89219	NA	NA	NA
5033	C14924	NA	NA	NA
5034	HMDB0030157	Austalide K	HMDB0030157	1394
5035	HMDB0011552	NA	NA	NA
5036	HMDB0011582	NA	NA	NA
5037	C10658	NA	NA	NA
5038	C12512	NA	NA	NA
5039	C15382	NA	NA	NA
5040	C15440	NA	NA	NA
5041	HMDB0014838	Eplerenone	HMDB0014838	4438
5042	HMDB0030404	Armillaripin	HMDB0030404	2112
5043	HMDB0037039	4-O-Methylmelleolide	HMDB0037039	7817
5044	HMDB0039380	Armillarin	HMDB0039380	5346
5045	HMDB0041407	Clausarinol	HMDB0041407	1529
5046	CHEBI:31547	NA	NA	NA
5047	CHEBI:6645	NA	NA	NA
5048	HMDB0011551	NA	NA	NA
5049	HMDB0011581	NA	NA	NA
5050	HMDB0032296	Glyceryl behenate	HMDB0032296	5362
5051	HMDB0072850	NA	NA	NA
5052	HMDB0010331	Palmitoyl glucuronide	HMDB0010331	1612
5053	CHEBI:79234	NA	NA	NA
5054	CHEBI:79264	NA	NA	NA
5055	HMDB0060786	6-Hydroxymelatonin glucuronide	HMDB0060786	1317

5056	HMDB0013043	Prostaglandin PGE2 1-glyceryl ester	HMDB0013043	5219
5057	HMDB0013044	NA	NA	NA
5058	HMDB0013045	Prostaglandin PGE2 glyceryl ester	HMDB0013045	5348
5059	HMDB0013653	Prostaglandin D2-1-glyceryl ester	HMDB0013653	5348
5060	HMDB0062663	Prostaglandin H2 2-glyceryl Ester	HMDB0062663	2477
5061	CHEBI:85166	NA	NA	NA
5062	CHEBI:85232	NA	NA	NA
5063	CHEBI:90230	NA	NA	NA
5064	C00008	NA	NA	NA
5065	C00054	NA	NA	NA
5066	C00361	NA	NA	NA
5067	C03850	NA	NA	NA
5068	HMDB0000061	Adenosine 3',5'-diphosphate	HMDB0000061	1592
5069	HMDB0000960	dGDP	HMDB0000960	4392
5070	HMDB0001341	ADP	HMDB0001341	6022
5071	HMDB0001468	NA	NA	NA
5072	CHEBI:16761	NA	NA	NA
5073	CHEBI:17985	NA	NA	NA
5074	CHEBI:28862	NA	NA	NA
5075	CHEBI:70963	NA	NA	NA
5076	CHEBI:71397	NA	NA	NA
5077	C04715	NA	NA	NA
5078	C08891	NA	NA	NA
5079	C08902	NA	NA	NA
5080	C08909	NA	NA	NA
5081	C16498	NA	NA	NA
5082	C17337	NA	NA	NA
5083	C17891	NA	NA	NA
5084	HMDB0011590	NA	NA	NA
5085	HMDB0012458	7alpha-Hydroxy-3-oxo-4-cholestenoate	HMDB0012458	3081
5086	HMDB0030066	Australigenin	HMDB0030066	1317
5087	HMDB0034403	Barogenin	HMDB0034403	1016
5088	HMDB0036249	Schidigeragenin C	HMDB0036249	8525
5089	HMDB0060127	25-Hydroxyvitamin D3-26,23-lactol	HMDB0060127	1317
5090	HMDB0060128	24-Oxo-1alpha,25-dihydroxyvitamin D3	HMDB0060128	7394
5091	HMDB0062430	NA	NA	NA
5092	HMDB0062613	(25R)-3beta-hydroxycholest-5-en-7-one-26-oate	HMDB0062613	7646
5093	CHEBI:15574	NA	NA	NA
5094	CHEBI:47812	NA	NA	NA
5095	CHEBI:68041	NA	NA	NA
5096	CHEBI:71824	NA	NA	NA
5097	CHEBI:83036	NA	NA	NA
5098	CHEBI:87678	NA	NA	NA
5099	CHEBI:87783	NA	NA	NA
5100	CHEBI:90861	NA	NA	NA
5101	CHEBI:90980	NA	NA	NA
5102	C12137	NA	NA	NA
5103	HMDB0029248	Luteolinidin 3-O-glucoside	HMDB0029248	2160
5104	HMDB0033682	Pelargonidin 3-galactoside	HMDB0033682	1230
5105	HMDB0037975	Cyanidin 3-rhamnoside	HMDB0037975	7281
5106	HMDB0038089	Peonidin 3-arabinoside	HMDB0038089	1317
5107	HMDB0038094	Petunidin 3-arabinoside	HMDB0038094	1317
5108	HMDB0041170	Pelargonidin 5-galactoside	HMDB0041170	1317
5109	HMDB0041750	Isopeonidin 3-arabinoside	HMDB0041750	7174
5110	HMDB0041755	Isopeonidin 3-xyloside	HMDB0041755	1317
5111	HMDB0041767	Peonidin 3-xyloside	HMDB0041767	1317
5112	HMDB0127920	NA	NA	NA
5113	CHEBI:31967	NA	NA	NA
5114	CHEBI:77978	NA	NA	NA
5115	C03630	NA	NA	NA
5116	HMDB0007852	NA	NA	NA
5117	HMDB0007856	NA	NA	NA
5118	CHEBI:36475	NA	NA	NA
5119	CHEBI:36476	NA	NA	NA
5120	CHEBI:62834	NA	NA	NA
5121	CHEBI:74330	NA	NA	NA
5122	CHEBI:74544	NA	NA	NA
5123	CHEBI:77593	NA	NA	NA
5124	CHEBI:78279	NA	NA	NA
5125	CHEBI:83203	NA	NA	NA
5126	C12342	NA	NA	NA
5127	C13782	NA	NA	NA
5128	HMDB0030323	Paxilline	HMDB0030323	1050
5129	HMDB0040979	14alpha-Hydroxy-4beta-deoxypaxilline	HMDB0040979	1317
5130	HMDB0012607	18-Carboxy-dinor-LTE4	HMDB0012607	5348
5131	CHEBI:74017	NA	NA	NA
5132	C16931	NA	NA	NA
5133	HMDB0031958	3-O-Acetylepisamarcandin	HMDB0031958	3095
5134	HMDB0039064	Pectachol	HMDB0039064	7817
5135	CHEBI:72441	NA	NA	NA
5136	C00570	NA	NA	NA
5137	HMDB0001564	CDP-ethanolamine	HMDB0001564	1237
5138	CHEBI:16732	NA	NA	NA
5139	C04722	NA	NA	NA
5140	HMDB0000601	Coprocholic acid	HMDB0000601	1225
5141	HMDB0003873	NA	NA	NA
5142	HMDB0060137	3alpha,7alpha,12alpha,25-Tetrahydroxy-5beta-cholestane-24-one	HMDB0060137	1317

5143	HMDB0062206	3alpha,7alpha,12alpha,24(S)-tetrahydroxy-5beta-cholestan-27-al	HMDB0062206	5692
5144	HMDB0062207	3alpha,7alpha,12alpha-trihydroxy-5beta-cholestanate	HMDB0062207	6232
5145	CHEBI:18402	NA	NA	NA
5146	CHEBI:48043	NA	NA	NA
5147	CHEBI:48044	NA	NA	NA
5148	CHEBI:48735	NA	NA	NA
5149	CHEBI:48736	NA	NA	NA
5150	CHEBI:63849	NA	NA	NA
5151	CHEBI:85674	NA	NA	NA
5152	HMDB0062445	NA	NA	NA
5153	HMDB0030020	Withanolide B	HMDB0030020	5282
5154	HMDB0030035	Euglobal IVa	HMDB0030035	8794
5155	HMDB0030037	Euglobal VII	HMDB0030037	1317
5156	HMDB0030038	Euglobal V	HMDB0030038	5317
5157	HMDB0030166	Euglobal III	HMDB0030166	5488
5158	HMDB0038705	Macrocarpal C	HMDB0038705	1009
5159	CHEBI:67291	NA	NA	NA
5160	C00440	NA	NA	NA
5161	HMDB0001396	5-Methyltetrahydrofolic acid	HMDB0001396	4392
5162	CHEBI:15641	NA	NA	NA
5163	HMDB0029349	Neryl rhamnosyl-glucoside	HMDB0029349	1317
5164	HMDB0030422	xi-Linalool 3-[rhamnosyl-(1->6)-glucoside]	HMDB0030422	1562
5165	C03794	NA	NA	NA
5166	HMDB0000536	Adenylsuccinic acid	HMDB0000536	4471
5167	HMDB0001332	NA	NA	NA
5168	HMDB0011633	NA	NA	NA
5169	HMDB0059653	NA	NA	NA
5170	CHEBI:15919	NA	NA	NA
5171	C01921	NA	NA	NA
5172	HMDB0000138	Glycocholic acid	HMDB0000138	1014
5173	HMDB0000331	3a,7b,12a-Trihydroxyoxocholeanyl-Glycine	HMDB0000331	4426
5174	HMDB0032596	NA	NA	NA
5175	CHEBI:17687	NA	NA	NA
5176	CHEBI:29746	NA	NA	NA
5177	C18043	NA	NA	NA
5178	HMDB0000653	Cholesterol sulfate	HMDB0000653	6507
5179	CHEBI:41321	NA	NA	NA
5180	HMDB0035971	(17alpha,23S)-17,23-Epoxy-29-hydroxy-27-norlanosta-1,8-diene-3,15,24-trione	HMDB0035971	7279
5181	CHEBI:66503	NA	NA	NA
5182	CHEBI:67569	NA	NA	NA
5183	CHEBI:67583	NA	NA	NA
5184	HMDB0060640	Lamivudine-triphosphate	HMDB0060640	7560
5185	C04230	NA	NA	NA
5186	HMDB0010381	NA	NA	NA
5187	HMDB0011129	NA	NA	NA
5188	HMDB0011130	NA	NA	NA
5189	CHEBI:133144	NA	NA	NA
5190	CHEBI:580912	NA	NA	NA
5191	CHEBI:64576	NA	NA	NA
5192	CHEBI:72736	NA	NA	NA
5193	CHEBI:75036	NA	NA	NA
5194	CHEBI:78387	NA	NA	NA
5195	CHEBI:79280	NA	NA	NA
5196	CHEBI:83047	NA	NA	NA
5197	CHEBI:85668	NA	NA	NA
5198	HMDB0038732	alpha-Ionol O-[arabinosyl-(1->6)-glucoside]	HMDB0038732	1317
5199	C04251	NA	NA	NA
5200	C19867	NA	NA	NA
5201	HMDB0034434	Austalide F	HMDB0034434	5750
5202	HMDB0035073	Deacetylnomilinic acid	HMDB0035073	1385
5203	HMDB0039120	alpha-Crocin glucosyl ester	HMDB0039120	1317
5204	HMDB0060122	4-Oxo-9-cis-retinoyl-beta-glucuronide	HMDB0060122	1317
5205	HMDB0061687	Estradiol acetate glucuronide	HMDB0061687	1317
5206	HMDB0061689	4-Ketoretinoic acid glucuronide	HMDB0061689	1317
5207	CHEBI:15787	NA	NA	NA
5208	CHEBI:62765	NA	NA	NA
5209	CHEBI:65669	NA	NA	NA
5210	CHEBI:84107	NA	NA	NA
5211	C09070	NA	NA	NA
5212	HMDB0060123	rac-5,6-Epoxy-retinoyl-beta-D-glucuronide	HMDB0060123	1317
5213	HMDB0061688	4-Hydroxyretinoic acid glucuronide	HMDB0061688	1317
5214	CHEBI:3443	NA	NA	NA
5215	CHEBI:67462	NA	NA	NA
5216	CHEBI:84091	NA	NA	NA
5217	CHEBI:84092	NA	NA	NA
5218	HMDB0010382	NA	NA	NA
5219	HMDB0240262	NA	NA	NA
5220	CHEBI:64563	NA	NA	NA
5221	CHEBI:72998	NA	NA	NA
5222	CHEBI:76078	NA	NA	NA
5223	CHEBI:78101	NA	NA	NA
5224	CHEBI:90165	NA	NA	NA
5225	CHEBI:91297	NA	NA	NA
5226	HMDB0072193	NA	NA	NA
5227	HMDB0072251	NA	NA	NA
5228	C05463	NA	NA	NA
5229	C05465	NA	NA	NA

5230	C16868	NA	NA	NA
5231	HMDB0000874	Tauroursodeoxycholic acid	HMDB0000874	1244
5232	HMDB0000896	Taurodeoxycholic acid	HMDB0000896	2733
5233	HMDB0000951	Taurochenodesoxycholic acid	HMDB0000951	3873
5234	HMDB0004011	NA	NA	NA
5235	CHEBI:16525	NA	NA	NA
5236	CHEBI:9410	NA	NA	NA
5237	HMDB0011483	NA	NA	NA
5238	HMDB0011513	NA	NA	NA
5239	HMDB0011482	NA	NA	NA
5240	HMDB0011512	NA	NA	NA
5241	CHEBI:73854	NA	NA	NA
5242	HMDB0011481	NA	NA	NA
5243	HMDB0011511	NA	NA	NA
5244	HMDB0012108	NA	NA	NA
5245	CHEBI:72737	NA	NA	NA
5246	CHEBI:74340	NA	NA	NA
5247	CHEBI:85669	NA	NA	NA
5248	C05122	NA	NA	NA
5249	C15516	NA	NA	NA
5250	HMDB0000036	Taurocholic acid	HMDB0000036	6675
5251	HMDB0000889	Tauroursocholic acid	HMDB0000889	2125
5252	HMDB0000922	Taurallocholic acid	HMDB0000922	1235
5253	HMDB0000932	Tauro-b-muricholic acid	HMDB0000932	1684
5254	HMDB0011637	Taurohyocholate	HMDB0011637	1317
5255	CHEBI:28865	NA	NA	NA
5256	CHEBI:52022	NA	NA	NA
5257	HMDB0030005	Austalide A	HMDB0030005	5250
5258	HMDB0031935	Blumenol C O-[rhamnosyl-(1->6)-glucoside]	HMDB0031935	8518
5259	C15559	NA	NA	NA
5260	HMDB0002409	N-[(3a,5b,7b)-7-hydroxy-24-oxo-3-(sulfooxy)cholan-24-yl]-Glycine	HMDB0002409	3034
5261	HMDB0002496	N-[(3a,5b,7a)-3-hydroxy-24-oxo-7-(sulfooxy)cholan-24-yl]-Glycine	HMDB0002496	259
5262	HMDB0002497	Glycochenodeoxycholate-3-sulfate	HMDB0002497	2112
5263	CHEBI:52031	NA	NA	NA
5264	CHEBI:72733	NA	NA	NA
5265	CHEBI:89129	NA	NA	NA
5266	HMDB0034679	Cinn cassiol D2 glucoside	HMDB0034679	1317
5267	HMDB0010320	Cortolone-3-glucuronide	HMDB0010320	5348
5268	CHEBI:88773	NA	NA	NA
5269	HMDB0060622	Endoxifen O-glucuronide	HMDB0060622	1317
5270	C05554	NA	NA	NA
5271	HMDB0004051	Aerobactin	HMDB0004051	1237
5272	CHEBI:18157	NA	NA	NA
5273	HMDB0002430	(3a,5b,7a)-23-Carboxy-7-hydroxy-24-norcholan-3-yl-b-D-Glucopyranosiduronic acid	HMDB0002430	2125
5274	HMDB0002596	Deoxycholic acid 3-glucuronide	HMDB0002596	5347
5275	HMDB0005774	Endomorphin-2	HMDB0005774	5311
5276	CHEBI:297398	NA	NA	NA
5277	C08886	NA	NA	NA
5278	C17074	NA	NA	NA
5279	HMDB0030046	Asparagoside A	HMDB0030046	1592
5280	CHEBI:15579	NA	NA	NA
5281	HMDB0002469	NA	NA	NA
5282	HMDB0002486	Taurochenodeoxycholate-3-sulfate	HMDB0002486	4426
5283	HMDB0002498	Taurochenodeoxycholate-7-sulfate	HMDB0002498	2084
5284	HMDB0116642	NA	NA	NA
5285	HMDB0116655	NA	NA	NA
5286	HMDB0116661	NA	NA	NA
5287	HMDB0116678	NA	NA	NA
5288	HMDB0033573	(3b,20R,22R)-3,20,27-Trihydroxy-1-oxowitha-5,24-dienolide 3-glucoside	HMDB0033573	1317
5289	CHEBI:69113	NA	NA	NA
5290	CHEBI:69874	NA	NA	NA
5291	HMDB0007872	NA	NA	NA
5292	HMDB0007873	NA	NA	NA
5293	HMDB0007904	NA	NA	NA
5294	HMDB0007969	NA	NA	NA
5295	HMDB0008001	NA	NA	NA
5296	HMDB0008032	NA	NA	NA
5297	HMDB0008064	NA	NA	NA
5298	HMDB0008097	NA	NA	NA
5299	HMDB0008900	NA	NA	NA
5300	HMDB0009252	NA	NA	NA
5301	HMDB0010569	NA	NA	NA
5302	HMDB0112958	NA	NA	NA
5303	HMDB0112960	NA	NA	NA
5304	HMDB0112961	NA	NA	NA
5305	HMDB0112962	NA	NA	NA
5306	HMDB0113088	NA	NA	NA
5307	HMDB0113113	NA	NA	NA
5308	HMDB0113140	NA	NA	NA
5309	HMDB0113280	NA	NA	NA
5310	HMDB0113308	NA	NA	NA
5311	HMDB0113854	NA	NA	NA
5312	HMDB0113855	NA	NA	NA
5313	HMDB0114013	NA	NA	NA
5314	HMDB0114040	NA	NA	NA
5315	CHEBI:66849	NA	NA	NA
5316	CHEBI:73793	NA	NA	NA

5317	CHEBI:74000	NA	NA	NA
5318	CHEBI:84808	NA	NA	NA
5319	CHEBI:86092	NA	NA	NA
5320	CHEBI:88907	NA	NA	NA
5321	CHEBI:89667	NA	NA	NA
5322	CHEBI:89680	NA	NA	NA
5323	CHEBI:89731	NA	NA	NA
5324	HMDB0033621	Araliacerebroside	HMDB0033621	1317
5325	HMDB0116650	NA	NA	NA
5326	HMDB0116658	NA	NA	NA
5327	HMDB0116669	NA	NA	NA
5328	HMDB0116686	NA	NA	NA
5329	HMDB0116652	NA	NA	NA
5330	HMDB0116688	NA	NA	NA
5331	C11231	NA	NA	NA
5332	HMDB0015378	Docetaxel	HMDB0015378	1481
5333	HMDB0042023	NA	NA	NA
5334	CHEBI:4672	NA	NA	NA
5335	HMDB0033427	Betavulgaroside VII	HMDB0033427	8521
5336	HMDB0061582	NA	NA	NA
5337	HMDB0034624	Vinaginsenoside R1	HMDB0034624	7493
5338	HMDB0037126	Pisumoside A	HMDB0037126	2083
5339	HMDB0053222	NA	NA	NA
5340	HMDB0053261	NA	NA	NA
5341	HMDB0054286	NA	NA	NA
5342	HMDB0054336	NA	NA	NA
5343	HMDB0055336	NA	NA	NA
5344	HMDB0055354	NA	NA	NA
5345	HMDB0055476	NA	NA	NA
5346	HMDB0055512	NA	NA	NA
5347	HMDB0055532	NA	NA	NA
5348	HMDB0055660	NA	NA	NA
5349	HMDB0055752	NA	NA	NA
5350	HMDB0055780	NA	NA	NA
5351	C06714	NA	NA	NA
5352	HMDB0012155	3-Hydroxypimelyl-CoA	HMDB0012155	4411
5353	CHEBI:15485	NA	NA	NA
5354	HMDB0040493	Vinaginsenoside R3	HMDB0040493	7493
5355	C00422	NA	NA	NA
5356	HMDB0005420	NA	NA	NA
5357	HMDB0044415	NA	NA	NA
5358	HMDB0044436	NA	NA	NA
5359	HMDB0044631	NA	NA	NA
5360	HMDB0045011	NA	NA	NA
5361	HMDB0045016	NA	NA	NA
5362	HMDB0045152	NA	NA	NA
5363	HMDB0045173	NA	NA	NA
5364	HMDB0045178	NA	NA	NA
5365	HMDB0045199	NA	NA	NA
5366	HMDB0045251	NA	NA	NA
5367	HMDB0045257	NA	NA	NA
5368	HMDB0045271	NA	NA	NA
5369	HMDB0045277	NA	NA	NA
5370	HMDB0045361	NA	NA	NA
5371	HMDB0045406	NA	NA	NA
5372	HMDB0045412	NA	NA	NA
5373	HMDB0045438	NA	NA	NA
5374	HMDB0045811	NA	NA	NA
5375	HMDB0045891	NA	NA	NA
5376	HMDB0045911	NA	NA	NA
5377	HMDB0045916	NA	NA	NA
5378	HMDB0045967	NA	NA	NA
5379	HMDB0045992	NA	NA	NA
5380	HMDB0046043	NA	NA	NA
5381	HMDB0046061	NA	NA	NA
5382	HMDB0046068	NA	NA	NA
5383	HMDB0046093	NA	NA	NA
5384	HMDB0046098	NA	NA	NA
5385	HMDB0046118	NA	NA	NA
5386	HMDB0046142	NA	NA	NA
5387	HMDB0046148	NA	NA	NA
5388	HMDB0046161	NA	NA	NA
5389	HMDB0046167	NA	NA	NA
5390	HMDB0046191	NA	NA	NA
5391	HMDB0046198	NA	NA	NA
5392	HMDB0046216	NA	NA	NA
5393	HMDB0046677	NA	NA	NA
5394	HMDB0046750	NA	NA	NA
5395	HMDB0046852	NA	NA	NA
5396	HMDB0046870	NA	NA	NA
5397	HMDB0046876	NA	NA	NA
5398	HMDB0046900	NA	NA	NA
5399	HMDB0046917	NA	NA	NA
5400	HMDB0046924	NA	NA	NA
5401	HMDB0047599	NA	NA	NA
5402	HMDB0048067	NA	NA	NA
5403	HMDB0048375	NA	NA	NA

5404	HMDB0048719	NA	NA	NA
5405	HMDB0048867	NA	NA	NA
5406	HMDB0048872	NA	NA	NA
5407	HMDB0048909	NA	NA	NA
5408	HMDB0049019	NA	NA	NA
5409	HMDB0049034	NA	NA	NA
5410	HMDB0049322	NA	NA	NA
5411	HMDB0049336	NA	NA	NA
5412	HMDB0049442	NA	NA	NA
5413	HMDB0049447	NA	NA	NA
5414	HMDB0049462	NA	NA	NA
5415	HMDB0049509	NA	NA	NA
5416	HMDB0049516	NA	NA	NA
5417	HMDB0049522	NA	NA	NA
5418	HMDB0049542	NA	NA	NA
5419	HMDB0049629	NA	NA	NA
5420	HMDB0049647	NA	NA	NA
5421	HMDB0049662	NA	NA	NA
5422	HMDB0049939	NA	NA	NA
5423	HMDB0049952	NA	NA	NA
5424	HMDB0050053	NA	NA	NA
5425	HMDB0050058	NA	NA	NA
5426	HMDB0050072	NA	NA	NA
5427	HMDB0050117	NA	NA	NA
5428	HMDB0050123	NA	NA	NA
5429	HMDB0050129	NA	NA	NA
5430	HMDB0050148	NA	NA	NA
5431	HMDB0050231	NA	NA	NA
5432	HMDB0050248	NA	NA	NA
5433	HMDB0050262	NA	NA	NA
5434	HMDB0050488	NA	NA	NA
5435	HMDB0050507	NA	NA	NA
5436	HMDB0050536	NA	NA	NA
5437	HMDB0050542	NA	NA	NA
5438	HMDB0050596	NA	NA	NA
5439	HMDB0050601	NA	NA	NA
5440	HMDB0050614	NA	NA	NA
5441	HMDB0050638	NA	NA	NA
5442	HMDB0050650	NA	NA	NA
5443	HMDB0050656	NA	NA	NA
5444	HMDB0050662	NA	NA	NA
5445	HMDB0050668	NA	NA	NA
5446	HMDB0050704	NA	NA	NA
5447	HMDB0050711	NA	NA	NA
5448	HMDB0050722	NA	NA	NA
5449	HMDB0050747	NA	NA	NA
5450	HMDB0050776	NA	NA	NA
5451	HMDB0050782	NA	NA	NA
5452	HMDB0050800	NA	NA	NA
5453	HMDB0050817	NA	NA	NA
5454	HMDB0050933	NA	NA	NA
5455	HMDB0050938	NA	NA	NA
5456	HMDB0050955	NA	NA	NA
5457	HMDB0051040	NA	NA	NA
5458	HMDB0051058	NA	NA	NA
5459	HMDB0051074	NA	NA	NA
5460	HMDB0051080	NA	NA	NA
5461	HMDB0051090	NA	NA	NA
5462	HMDB0051115	NA	NA	NA
5463	HMDB0051165	NA	NA	NA
5464	HMDB0051175	NA	NA	NA
5465	HMDB0051181	NA	NA	NA
5466	HMDB0051198	NA	NA	NA
5467	HMDB0051233	NA	NA	NA
5468	HMDB0051240	NA	NA	NA
5469	HMDB0051291	NA	NA	NA
5470	HMDB0051302	NA	NA	NA
5471	HMDB0051559	NA	NA	NA
5472	HMDB0051623	NA	NA	NA
5473	HMDB0051676	NA	NA	NA
5474	HMDB0051686	NA	NA	NA
5475	HMDB0051692	NA	NA	NA
5476	HMDB0051725	NA	NA	NA
5477	HMDB0051734	NA	NA	NA
5478	HMDB0051741	NA	NA	NA
5479	HMDB0051805	NA	NA	NA
5480	HMDB0051811	NA	NA	NA
5481	HMDB0051821	NA	NA	NA
5482	HMDB0051836	NA	NA	NA
5483	HMDB0051843	NA	NA	NA
5484	HMDB0051852	NA	NA	NA
5485	HMDB0052043	NA	NA	NA
5486	HMDB0052183	NA	NA	NA
5487	HMDB0052295	NA	NA	NA
5488	HMDB0052303	NA	NA	NA
5489	HMDB0052310	NA	NA	NA
5490	HMDB0052469	NA	NA	NA



5491	HMDB0052568	NA	NA	NA
5492	HMDB0052573	NA	NA	NA
5493	HMDB0052602	NA	NA	NA
5494	HMDB0052657	NA	NA	NA
5495	HMDB0052686	NA	NA	NA
5496	HMDB0052700	NA	NA	NA
5497	HMDB0052706	NA	NA	NA
5498	HMDB0052713	NA	NA	NA
5499	HMDB0052776	NA	NA	NA
5500	HMDB0052907	NA	NA	NA
5501	HMDB0052912	NA	NA	NA
5502	HMDB0052925	NA	NA	NA
5503	HMDB0053004	NA	NA	NA
5504	HMDB0053017	NA	NA	NA
5505	HMDB0053030	NA	NA	NA
5506	HMDB0053036	NA	NA	NA
5507	HMDB0053049	NA	NA	NA
5508	HMDB0053101	NA	NA	NA
5509	HMDB0053127	NA	NA	NA
5510	HMDB0053314	NA	NA	NA
5511	HMDB0053386	NA	NA	NA
5512	HMDB0053391	NA	NA	NA
5513	HMDB0053399	NA	NA	NA
5514	HMDB0053404	NA	NA	NA
5515	HMDB0053416	NA	NA	NA
5516	HMDB0053421	NA	NA	NA
5517	HMDB0053463	NA	NA	NA
5518	HMDB0053487	NA	NA	NA
5519	HMDB0053493	NA	NA	NA
5520	HMDB0053499	NA	NA	NA
5521	HMDB0053511	NA	NA	NA
5522	HMDB0053531	NA	NA	NA
5523	HMDB0053579	NA	NA	NA
5524	HMDB0053589	NA	NA	NA
5525	HMDB0053693	NA	NA	NA
5526	HMDB0053698	NA	NA	NA
5527	HMDB0053709	NA	NA	NA
5528	HMDB0053764	NA	NA	NA
5529	HMDB0053776	NA	NA	NA
5530	HMDB0053786	NA	NA	NA
5531	HMDB0053792	NA	NA	NA
5532	HMDB0053815	NA	NA	NA
5533	HMDB0053847	NA	NA	NA
5534	HMDB0053857	NA	NA	NA
5535	HMDB0053898	NA	NA	NA
5536	HMDB0053931	NA	NA	NA
5537	HMDB0054047	NA	NA	NA
5538	HMDB0054056	NA	NA	NA
5539	HMDB0054062	NA	NA	NA
5540	HMDB0054072	NA	NA	NA
5541	HMDB0054159	NA	NA	NA
5542	HMDB0054178	NA	NA	NA
5543	HMDB0054369	NA	NA	NA
5544	HMDB0054423	NA	NA	NA
5545	HMDB0054428	NA	NA	NA
5546	HMDB0054437	NA	NA	NA
5547	HMDB0054447	NA	NA	NA
5548	HMDB0054464	NA	NA	NA
5549	HMDB0054496	NA	NA	NA
5550	HMDB0054515	NA	NA	NA
5551	HMDB0054524	NA	NA	NA
5552	HMDB0054658	NA	NA	NA
5553	HMDB0054671	NA	NA	NA
5554	HMDB0054679	NA	NA	NA
5555	HMDB0054741	NA	NA	NA
5556	HMDB0054942	NA	NA	NA
5557	HMDB0055180	NA	NA	NA
5558	HMDB0055186	NA	NA	NA
5559	HMDB0055241	NA	NA	NA
5560	HMDB0055247	NA	NA	NA
5561	HMDB0055388	NA	NA	NA
5562	HMDB0055393	NA	NA	NA
5563	HMDB0055556	NA	NA	NA
5564	HMDB0030415	Quercetin 3-(6"-feruloylglucosyl)-(1->2)-galactosyl-(1->2)-glucoside	HMDB0030415	1317
5565	HMDB0031585	Patuletin 3-(2"-apiosyl-[2"-feruloylgentiobioside])	HMDB0031585	1017
5566	HMDB0040842	Quercetin 3-(2-feruloylsophoroside) 7-glucoside	HMDB0040842	4425
5567	HMDB0034946	Rebaudioside E	HMDB0034946	1563
5568	HMDB0034950	Rebaudioside A	HMDB0034950	6918
5569	C00626	NA	NA	NA
5570	HMDB0009933	NA	NA	NA
5571	HMDB0009969	NA	NA	NA
5572	HMDB0009977	NA	NA	NA
5573	HMDB0009988	NA	NA	NA
5574	HMDB0009997	NA	NA	NA
5575	HMDB0009999	NA	NA	NA
5576	HMDB0010000	NA	NA	NA
5577	HMDB0010002	NA	NA	NA

5578	HMDB0010023	NA	NA	NA
5579	HMDB0012472	(3E,5Z,8Z)-Tetradecatrienoyl-CoA	HMDB0012472	7604
5580	CHEBI:57322	NA	NA	NA
5581	CHEBI:57323	NA	NA	NA
5582	CHEBI:61405	NA	NA	NA
5583	CHEBI:61968	NA	NA	NA
5584	CHEBI:65060	NA	NA	NA
5585	CHEBI:84650	NA	NA	NA
5586	CHEBI:87710	NA	NA	NA
5587	HMDB0010544	NA	NA	NA
5588	HMDB0045287	NA	NA	NA
5589	HMDB0045422	NA	NA	NA
5590	HMDB0045443	NA	NA	NA
5591	HMDB0045448	NA	NA	NA
5592	HMDB0046177	NA	NA	NA
5593	HMDB0046227	NA	NA	NA
5594	HMDB0049532	NA	NA	NA
5595	HMDB0049547	NA	NA	NA
5596	HMDB0049552	NA	NA	NA
5597	HMDB0049652	NA	NA	NA
5598	HMDB0049657	NA	NA	NA
5599	HMDB0049672	NA	NA	NA
5600	HMDB0050139	NA	NA	NA
5601	HMDB0050153	NA	NA	NA
5602	HMDB0050158	NA	NA	NA
5603	HMDB0050253	NA	NA	NA
5604	HMDB0050258	NA	NA	NA
5605	HMDB0050272	NA	NA	NA
5606	HMDB0050678	NA	NA	NA
5607	HMDB0050733	NA	NA	NA
5608	HMDB0050792	NA	NA	NA
5609	HMDB0050805	NA	NA	NA
5610	HMDB0050810	NA	NA	NA
5611	HMDB0050828	NA	NA	NA
5612	HMDB0050840	NA	NA	NA
5613	HMDB0050846	NA	NA	NA
5614	HMDB0051095	NA	NA	NA
5615	HMDB0051100	NA	NA	NA
5616	HMDB0051191	NA	NA	NA
5617	HMDB0051203	NA	NA	NA
5618	HMDB0051208	NA	NA	NA
5619	HMDB0051220	NA	NA	NA
5620	HMDB0051254	NA	NA	NA
5621	HMDB0051260	NA	NA	NA
5622	HMDB0051265	NA	NA	NA
5623	HMDB0051271	NA	NA	NA
5624	HMDB0051328	NA	NA	NA
5625	HMDB0051355	NA	NA	NA
5626	HMDB0051361	NA	NA	NA
5627	HMDB0051378	NA	NA	NA
5628	HMDB0051831	NA	NA	NA
5629	HMDB0051863	NA	NA	NA
5630	HMDB0051895	NA	NA	NA
5631	HMDB0052718	NA	NA	NA
5632	HMDB0052723	NA	NA	NA
5633	HMDB0052732	NA	NA	NA
5634	HMDB0052807	NA	NA	NA
5635	HMDB0053137	NA	NA	NA
5636	HMDB0053144	NA	NA	NA
5637	HMDB0053241	NA	NA	NA
5638	HMDB0053431	NA	NA	NA
5639	HMDB0053509	NA	NA	NA
5640	HMDB0053516	NA	NA	NA
5641	HMDB0053521	NA	NA	NA
5642	HMDB0053546	NA	NA	NA
5643	HMDB0053552	NA	NA	NA
5644	HMDB0053558	NA	NA	NA
5645	HMDB0053594	NA	NA	NA
5646	HMDB0053599	NA	NA	NA
5647	HMDB0053606	NA	NA	NA
5648	HMDB0053617	NA	NA	NA
5649	HMDB0053623	NA	NA	NA
5650	HMDB0053629	NA	NA	NA
5651	HMDB0053801	NA	NA	NA
5652	HMDB0053806	NA	NA	NA
5653	HMDB0053867	NA	NA	NA
5654	HMDB0053873	NA	NA	NA
5655	HMDB0053878	NA	NA	NA
5656	HMDB0053884	NA	NA	NA
5657	HMDB0053906	NA	NA	NA
5658	HMDB0053912	NA	NA	NA
5659	HMDB0053917	NA	NA	NA
5660	HMDB0053956	NA	NA	NA
5661	HMDB0053977	NA	NA	NA
5662	HMDB0054142	NA	NA	NA
5663	HMDB0054146	NA	NA	NA
5664	HMDB0054202	NA	NA	NA

5665	HMDB0054207	NA	NA	NA
5666	HMDB0054212	NA	NA	NA
5667	HMDB0054239	NA	NA	NA
5668	HMDB0054299	NA	NA	NA
5669	HMDB0054509	NA	NA	NA
5670	HMDB0054537	NA	NA	NA
5671	HMDB0054565	NA	NA	NA
5672	HMDB0054579	NA	NA	NA
5673	HMDB0054583	NA	NA	NA
5674	HMDB0054588	NA	NA	NA
5675	HMDB0054597	NA	NA	NA
5676	HMDB0054606	NA	NA	NA
5677	HMDB0054615	NA	NA	NA
5678	HMDB0054624	NA	NA	NA
5679	HMDB0054728	NA	NA	NA
5680	HMDB0054737	NA	NA	NA
5681	HMDB0054752	NA	NA	NA
5682	HMDB0054776	NA	NA	NA
5683	HMDB0054784	NA	NA	NA
5684	HMDB0054798	NA	NA	NA
5685	HMDB0054806	NA	NA	NA
5686	HMDB0054831	NA	NA	NA
5687	HMDB0054847	NA	NA	NA
5688	HMDB0054939	NA	NA	NA
5689	HMDB0054981	NA	NA	NA
5690	HMDB0054986	NA	NA	NA
5691	HMDB0054989	NA	NA	NA
5692	HMDB0054994	NA	NA	NA
5693	HMDB0055001	NA	NA	NA
5694	HMDB0055048	NA	NA	NA
5695	HMDB0055071	NA	NA	NA
5696	HMDB0055293	NA	NA	NA
5697	HMDB0055439	NA	NA	NA
5698	HMDB0055480	NA	NA	NA
5699	HMDB0055594	NA	NA	NA
5700	HMDB0055623	NA	NA	NA
5701	HMDB0055637	NA	NA	NA
5702	HMDB0055703	NA	NA	NA
5703	HMDB0055730	NA	NA	NA
5704	HMDB0055737	NA	NA	NA
5705	HMDB0055814	NA	NA	NA
5706	HMDB0055831	NA	NA	NA
5707	HMDB0046430	NA	NA	NA
5708	HMDB0046982	NA	NA	NA
5709	HMDB0047148	NA	NA	NA

## 4 Pathway Analysis

In this step, users are asked to select a pathway library, as well as specify the algorithms for pathway enrichment analysis and pathway topology analysis.

### 4.1 Pathway Library

There are 15 pathway libraries currently supported, with a total of 1173 pathways :

- Homo sapiens (human) [80]
- Mus musculus (mouse) [82]
- Rattus norvegicus (rat) [81]
- Bos taurus (cow) [81]
- Danio rerio (zebrafish) [81]
- Drosophila melanogaster (fruit fly) [79]
- Caenorhabditis elegans (nematode) [78]
- Saccharomyces cerevisiae (yeast) [65]
- Oryza sativa japonica (Japanese rice) [83]
- Arabidopsis thaliana (thale cress) [87]
- Escherichia coli K-12 MG1655 [87]
- Bacillus subtilis [80]
- Pseudomonas putida KT2440 [89]
- Staphylococcus aureus N315 (MRSA/VSSA)[73]
- Thermotoga maritima [57]

Your selected pathway library code is **hsa** (KEGG organisms abbreviation).

### 4.2 Over Representation Analysis

Over-representation analysis tests if a particular group of compounds is represented more than expected by chance within the user uploaded compound list. In the context of pathway analysis, we are testing if compounds involved in a particular pathway are enriched compared to random hits. MetPA offers two of the most commonly used methods for over-representation analysis:

- Fishers'Exact test
- Hypergeometric Test

*Please note, MetPA uses one-tailed Fisher's exact test which will give essentially the same result as the result calculated by the hypergeometric test.*

The selected over-representation analysis method is 'Hypergeometric test'.

### 4.3 Pathway Topology Analysis

The structure of biological pathways represent our knowledge about the complex relationships among molecules within a cell or a living organism. However, most pathway analysis algorithms fail to take structural information into consideration when estimating which pathways are significantly changed under conditions of study. It is well-known that changes in more important positions of a network will trigger a more severe impact on the pathway than changes occurred in marginal or relatively isolated positions.

The pathway topology analysis uses two well-established node centrality measures to estimate node importance - **degree centrality** and **betweenness centrality**. Degree centrality is defined as the number of links occurred upon a node. For a directed graph there are two types of degree: in-degree for links come from other nodes, and out-degree for links initiated from the current node. Metabolic networks are directed graph. Here we only consider the out-degree for node importance measure. It is assumed that nodes upstream will have regulatory roles for the downstream nodes, not vice versa. The betweenness centrality measures the number of shortest paths going through the node. Since the metabolic network is directed, we use the relative betweenness centrality for a metabolite as the importance measure. The degree centrality measure focuses more on local connectivities, while the betweenness centrality measure focuses more on global network topology. For more detailed discussions on various graph-based methods for analyzing biological networks, please refer to the article by Tero Aittokallio, T. et al. <sup>1</sup>

*Please note, for comparison among different pathways, the node importance values calculated from centrality measures are further normalized by the sum of the importance of the pathway. Therefore, the total/maximum importance of each pathway is 1; the importance measure of each metabolite node is actually the percentage w.r.t the total pathway importance, and the pathway impact value is the cumulative percentage from the matched metabolite nodes.*

Your selected node importance measure for topological analysis is ‘relative betweenness centrality’.

## 5 Pathway Analysis Result

The results from pathway analysis are presented graphically as well as in a detailed table.

A Google-map style interactive visualization system was implemented to facilitate data exploration. The graphical output contains three levels of view: **metabolome view**, **pathway view**, and **compound view**. Only the metabolome view is shown below. Pathway views and compound views are generated dynamically based on your interactions with the visualization system. They are available in your downloaded files.

---

<sup>1</sup>Tero Aittokallio and Benno Schwikowski. *Graph-based methods for analyzing networks in cell biology*, Briefings in Bioinformatics 2006 7(3):243-255

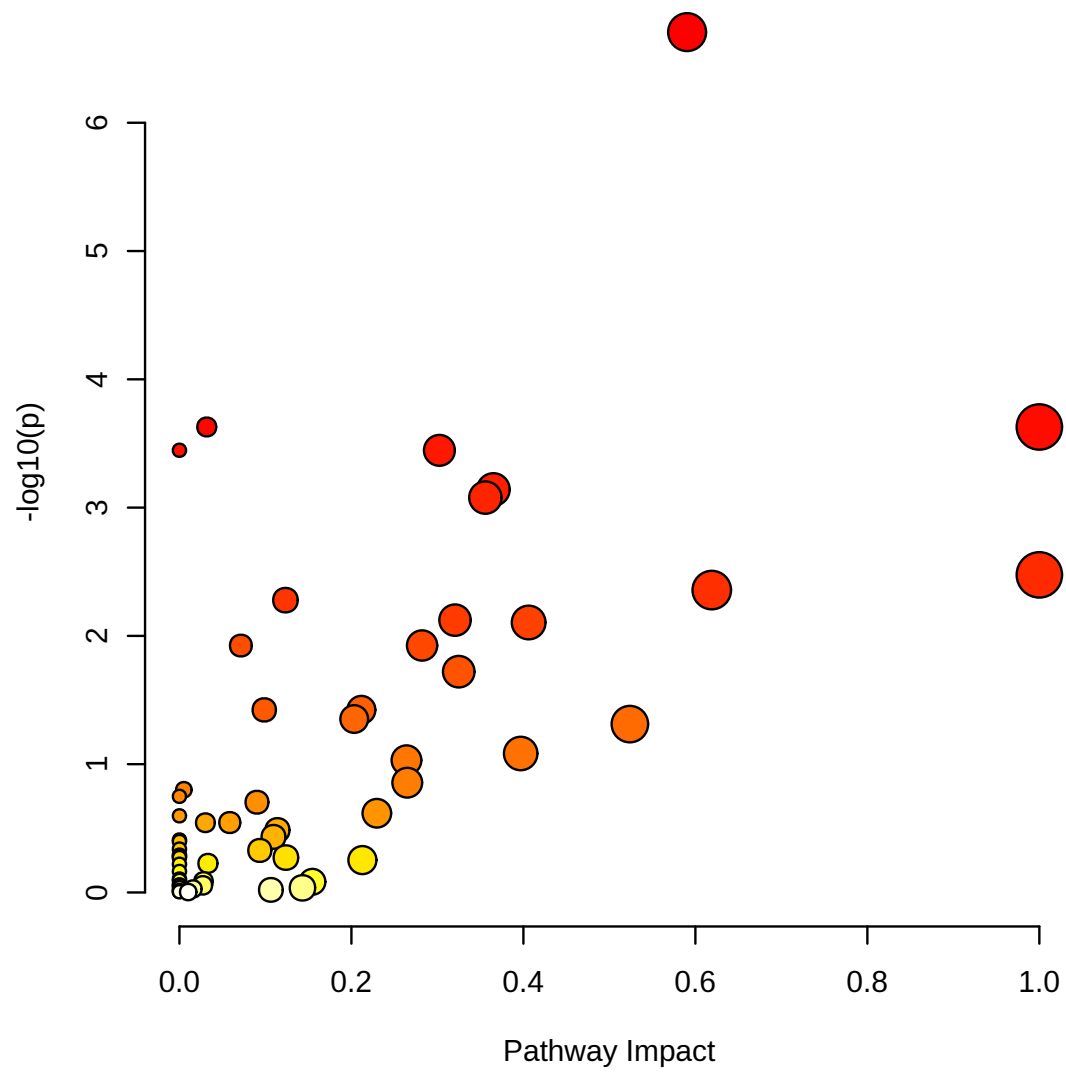


Figure 1: Summary of Pathway Analysis

The table below shows the detailed results from the pathway analysis. Since we are testing many pathways at the same time, the statistical p values from enrichment analysis are further adjusted for multiple testings. In particular, the **Total** is the total number of compounds in the pathway; the **Hits** is the actually matched number from the user uploaded data; the **Raw p** is the original p value calculated from the enrichment analysis; the **Holm p** is the p value adjusted by Holm-Bonferroni method; the **FDR p** is the p value adjusted using False Discovery Rate; the **Impact** is the pathway impact value calculated from pathway topology analysis.

Table 2: Result from Pathway Analysis

	Total	Expected	Hits	Raw p	-log10(p)	Holm adjust	FDR	Impact
Pentose and glucuronate interconversions	19	1.85	11	1.97E-07	6.71E+00	1.57E-05	1.57E-05	0.59
Butanoate metabolism	15	1.46	7	2.35E-04	3.63E+00	1.86E-02	5.73E-03	0.03
D-Amino acid metabolism	15	1.46	7	2.35E-04	3.63E+00	1.86E-02	5.73E-03	1.00
Valine, leucine and isoleucine biosynthesis	8	0.78	5	3.57E-04	3.45E+00	2.75E-02	5.73E-03	0.00
Arginine and proline metabolism	36	3.50	11	3.58E-04	3.45E+00	2.75E-02	5.73E-03	0.30
Glycine, serine and threonine metabolism	33	3.21	10	7.23E-04	3.14E+00	5.42E-02	9.55E-03	0.37
Alanine, aspartate and glutamate metabolism	28	2.72	9	8.35E-04	3.08E+00	6.18E-02	9.55E-03	0.36
Phenylalanine, tyrosine and tryptophan biosynthesis	4	0.39	3	3.34E-03	2.48E+00	2.44E-01	3.34E-02	1.00
Phenylalanine metabolism	8	0.78	4	4.39E-03	2.36E+00	3.16E-01	3.91E-02	0.62
Starch and sucrose metabolism	18	1.75	6	5.26E-03	2.28E+00	3.74E-01	4.21E-02	0.12
Arachidonic acid metabolism	44	4.27	10	7.54E-03	2.12E+00	5.28E-01	5.24E-02	0.32
Arginine biosynthesis	14	1.36	5	7.86E-03	2.10E+00	5.42E-01	5.24E-02	0.41
Galactose metabolism	27	2.62	7	1.19E-02	1.93E+00	8.08E-01	6.80E-02	0.28
Valine, leucine and isoleucine degradation	40	3.89	9	1.19E-02	1.92E+00	8.08E-01	6.80E-02	0.07
Pyruvate metabolism	23	2.23	6	1.90E-02	1.72E+00	1.00E+00	1.01E-01	0.32
Pantothenate and CoA biosynthesis	20	1.94	5	3.77E-02	1.42E+00	1.00E+00	1.78E-01	0.10
Citrate cycle (TCA cycle)	20	1.94	5	3.77E-02	1.42E+00	1.00E+00	1.78E-01	0.21
Tyrosine metabolism	42	4.08	8	4.45E-02	1.35E+00	1.00E+00	1.98E-01	0.20
Ascorbate and aldarate metabolism	9	0.87	3	4.87E-02	1.31E+00	1.00E+00	2.05E-01	0.52
Glyoxylate and dicarboxylate metabolism	32	3.11	6	8.26E-02	1.08E+00	1.00E+00	3.30E-01	0.40
Cysteine and methionine metabolism	33	3.21	6	9.32E-02	1.03E+00	1.00E+00	3.55E-01	0.26
beta-Alanine metabolism	21	2.04	4	1.39E-01	8.56E-01	1.00E+00	5.07E-01	0.26
Propanoate metabolism	22	2.14	4	1.58E-01	8.01E-01	1.00E+00	5.50E-01	0.01
Taurine and hypotaurine metabolism	8	0.78	2	1.78E-01	7.49E-01	1.00E+00	5.94E-01	0.00
Histidine metabolism	16	1.55	3	1.98E-01	7.04E-01	1.00E+00	6.33E-01	0.09
Glycolysis / Gluconeogenesis	26	2.53	4	2.41E-01	6.17E-01	1.00E+00	7.42E-01	0.23
Caffeine metabolism	10	0.97	2	2.53E-01	5.97E-01	1.00E+00	7.49E-01	0.00
Primary bile acid biosynthesis	46	4.47	6	2.85E-01	5.45E-01	1.00E+00	7.89E-01	0.06
Glutathione metabolism	28	2.72	4	2.86E-01	5.44E-01	1.00E+00	7.89E-01	0.03
Pyrimidine metabolism	39	3.79	5	3.27E-01	4.86E-01	1.00E+00	8.71E-01	0.11
Purine metabolism	70	6.80	8	3.69E-01	4.33E-01	1.00E+00	9.52E-01	0.11
Pentose phosphate pathway	23	2.23	3	3.90E-01	4.09E-01	1.00E+00	9.71E-01	0.00
Linoleic acid metabolism	5	0.49	1	4.00E-01	3.97E-01	1.00E+00	9.71E-01	0.00
Nitrogen metabolism	6	0.58	1	4.59E-01	3.38E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Glycerolipid metabolism	16	1.55	2	4.70E-01	3.28E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.09
Thiamine metabolism	7	0.68	1	5.12E-01	2.91E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Lipoic acid metabolism	28	2.72	3	5.22E-01	2.83E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Ubiquinone and other terpenoid-quinone biosynthesis	18	1.75	2	5.35E-01	2.72E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Terpenoid backbone biosynthesis	18	1.75	2	5.35E-01	2.72E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.12
Sulfur metabolism	8	0.78	1	5.59E-01	2.52E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.21
Fructose and mannose metabolism	20	1.94	2	5.93E-01	2.27E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.03
One carbon pool by folate	9	0.87	1	6.02E-01	2.20E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Fatty acid biosynthesis	47	4.57	4	6.86E-01	1.64E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Nicotinate and nicotinamide metabolism	15	1.46	1	7.86E-01	1.05E-01	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Inositol phosphate metabolism	30	2.91	2	8.06E-01	9.38E-02	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Porphyrin metabolism	31	3.01	2	8.20E-01	8.60E-02	1.00E+00	1.00E+00	0.03
Retinol metabolism	17	1.65	1	8.26E-01	8.32E-02	1.00E+00	1.00E+00	0.15
Ether lipid metabolism	20	1.94	1	8.72E-01	5.94E-02	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Biosynthesis of unsaturated fatty acids	36	3.50	2	8.80E-01	5.56E-02	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Glycerophospholipid metabolism	36	3.50	2	8.80E-01	5.56E-02	1.00E+00	1.00E+00	0.03
Drug metabolism - cytochrome P450	55	5.34	3	9.16E-01	3.79E-02	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Tryptophan metabolism	41	3.98	2	9.21E-01	3.59E-02	1.00E+00	1.00E+00	0.14
Steroid hormone biosynthesis	87	8.45	5	9.39E-01	2.75E-02	1.00E+00	1.00E+00	0.02
Lysine degradation	30	2.91	1	9.55E-01	2.01E-02	1.00E+00	1.00E+00	0.11
Sphingolipid metabolism	32	3.11	1	9.63E-01	1.62E-02	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Drug metabolism - other enzymes	39	3.79	1	9.82E-01	7.73E-03	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Amino sugar and nucleotide sugar metabolism	42	4.08	1	9.87E-01	5.63E-03	1.00E+00	1.00E+00	0.00
Metabolism of xenobiotics by cytochrome P450	68	6.61	2	9.93E-01	3.09E-03	1.00E+00	1.00E+00	0.01

## 6 Appendix: R Command History

```
[1] "mSet<-InitDataObjects(\"conc\", \"pathora\", FALSE)"
[2] "compd.vec<-c(\"C06145\", \"C14275\", \"HMDB0006853\", \"HMDB0006945\", \"HMDB0013785\", \"CHEBI:2818)"
[3] "mSet<-Setup.MapData(mSet, compd.vec);"
[4] "mSet<-CrossReferencing(mSet, \"hmdb\");"
[5] "mSet<-CreateMappingResultTable(mSet)"
[6] "mSet<-SetKEGG.PathLib(mSet, \"hsa\", \"current\")"
[7] "mSet<-SetMetabolomeFilter(mSet, F);"
[8] "mSet<-CalculateOraScore(mSet, \"rbc\", \"hyperg\")"
[9] "mSet<-PlotPathSummary(mSet, F, \"path_view_0_\", \"png\", 72, width=NA, NA, NA )"
[10] "mSet<-SaveTransformedData(mSet)"
[11] "mSet<-PreparePDFReport(mSet, \"guest11392853573243576150\")\n"
```

---

The report was generated on Tue Apr 16 11:16:59 2024 with R version 4.3.2 (2023-10-31), OS system: Linux, version: -Ubuntu SMP Tue Mar 5 20:16:58 UTC 2024 .