

Metabolomic Data Analysis with MetaboAnalyst 5.0

Name: guest14784990859344962455

May 24, 2021

1 Background

MSEA or Metabolite Set Enrichment Analysis is a way to identify biologically meaningful patterns that are significantly enriched in quantitative metabolomic data. In conventional approaches, metabolites are evaluated individually for their significance under conditions of study. Those compounds that have passed certain significance level are then combined to see if any meaningful patterns can be discerned. In contrast, MSEA directly investigates if a set of functionally related metabolites without the need to preselect compounds based on some arbitrary cut-off threshold. It has the potential to identify subtle but consistent changes among a group of related compounds, which may go undetected with the conventional approaches.

Essentially, MSEA is a metabolomic version of the popular GSEA (Gene Set Enrichment Analysis) software with its own collection of metabolite set libraries as well as an implementation of user-friendly web-interfaces. GSEA is widely used in genomics data analysis and has proven to be a powerful alternative to conventional approaches. For more information, please refer to the original paper by Subramanian A, and a nice review paper by Nam D, Kim SY.^{1, 2}

2 MSEA Overview

Metabolite set enrichment analysis consists of four steps - data input, data processing, data analysis, and results download. Different analysis procedures are performed based on different input types. In addition, users can also browse and search the metabolite set libraries as well as upload their self-defined metabolite sets for enrichment analysis. Users can also perform metabolite name mapping between a variety of compound names, synonyms, and major database identifiers.

3 Data Input

There are three enrichment analysis algorithms offered by MSEA. Accordingly, three different types of data inputs are required by these three approaches:

- A list of important compound names - entered as a one column data (*Over Representation Analysis (ORA)*);
- A single measured biofluid (urine, blood, CSF) sample- entered as tab separated two-column data with the first column for compound name, and the second for concentration values (*Single Sample Profiling (SSP)*);

¹Subramanian A. *Gene set enrichment analysis: A knowledge-based approach for interpreting genome-wide expression profiles.*, Proc Natl Acad Sci USA. 2005 102(43): 15545-50

²Nam D, Kim SY. *Gene-set approach for expression pattern analysis*, Briefings in Bioinformatics. 2008 9(3): 189-197.

- A compound concentration table - entered as a comma separated (.csv) file with the each sample per row and each metabolite concentration per column. The first column is sample names and the second column for sample phenotype labels (*Quantitative Enrichment Analysis (QEA)*)

You selected Over Representation Analysis (ORA) which requires a list of compound names as input.

4 Data Process

The first step is to standardize the compound labels. It is an essential step since the compound labels will be subsequently compared with compounds contained in the metabolite set library. MSEA has a built-in tool to convert between compound common names, synonyms, identifiers used in HMDB ID, PubChem, ChEBI, BiGG, METLIN, KEGG, or Reactome. **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	PubChem	KEGG	SMILES
1	HMDB0000123	Glycine	HMDB0000123	750	C00037	C(C(=O)O)N
2	HMDB0014691	Acetohydroxamic Acid	HMDB0014691	1990	C06808	CC(=O)NO
3	HMDB0031239	Ethyl nitrite	HMDB0031239	8026		CCON=O
4	HMDB0161401	NA	NA	NA	NA	NA
5	HMDB0031404	Cyclohexylamine	HMDB0031404	7965	C00571	C1CCC(CC1)N
6	HMDB0032416	2-Methylpiperidine	HMDB0032416	7974		CC1CCCCN1
7	HMDB0031544	3-Methylcyclopentene	HMDB0031544	14263		CC1CCC=C1
8	HMDB0062716	NA	NA	NA	NA	NA
9	HMDB0033971	2-Diethylaminoethanol	HMDB0033971	7497		CCN(CC)CCO
10	HMDB0000630	Cytosine	HMDB0000630	597	C00380	C1=C(NC(=O)N)N
11	HMDB0031335	2-Chloro-1-propanol	HMDB0031335	6566		CC(CO)Cl
12	HMDB0172056	NA	NA	NA	NA	NA
13	HMDB0172059	NA	NA	NA	NA	NA
14	HMDB0172058	NA	NA	NA	NA	NA
15	HMDB0172057	NA	NA	NA	NA	NA
16	HMDB0159225	NA	NA	NA	NA	NA
17	HMDB0159223	NA	NA	NA	NA	NA
18	HMDB0159222	NA	NA	NA	NA	NA
19	HMDB0005785	Indole-3-carbinol	HMDB0005785	3712		C1=CC=C2C(=C1)C
20	HMDB0030204	1-(2-Furanylmethyl)-1H-pyrrole	HMDB0030204	15037		C1=CN(C=C1)C
21	HMDB0040009	NA	NA	NA	NA	NA
22	HMDB0040011	NA	NA	NA	NA	NA
23	HMDB0159224	NA	NA	NA	NA	NA
24	HMDB0011664	3-Methylene-indolenine	HMDB0011664	170404		C=C1C=NC2=C(C1)C
25	HMDB0033731	Quinoline	HMDB0033731	7047	C06413	C1=CC=C2C(=C1)C
26	HMDB0034244	Isoquinoline	HMDB0034244	8405	C06323	C1=CC=C2C(=C1)C
27	HMDB0166738	NA	NA	NA	NA	NA
28	HMDB0164724	NA	NA	NA	NA	NA
29	HMDB0165094	NA	NA	NA	NA	NA
30	HMDB0165096	NA	NA	NA	NA	NA
31	HMDB0165095	NA	NA	NA	NA	NA
32	HMDB0165097	NA	NA	NA	NA	NA
33	HMDB0166737	NA	NA	NA	NA	NA
34	HMDB0031484	2-Heptenoic acid	HMDB0031484	5282709		CCCC/C=C/C(=O)O
35	HMDB0038962	NA	NA	NA	NA	NA
36	HMDB0031500	Methyl 2E-hexenoate	HMDB0031500	5364409		CCC/C=C/C(=O)O
37	HMDB0166739	NA	NA	NA	NA	NA
38	HMDB0029314	Isopentenyl acetate	HMDB0029314	14489		CC(=CCOC(=O)C)C
39	HMDB0031477	3,4-Heptanedione	HMDB0031477	83671		CCCC(=O)C(=O)C
40	HMDB0031476	2,3-Heptanedione	HMDB0031476	60983		CCCCC(=O)C(=O)C
41	HMDB0031504	Methyl (Z)-3-hexenoate	HMDB0031504	5362819		CC/C=C\C(=O)O
42	HMDB0031603	Ethyl 4-pentenoate	HMDB0031603	74786		CCOC(=O)CCCC
43	HMDB0040214	NA	NA	NA	NA	NA
44	HMDB0031342	Cyclohexanecarboxylic acid	HMDB0031342	7413	C09822	C1CCC(CC1)C(=O)O
45	HMDB0038271	NA	NA	NA	NA	NA
46	HMDB0031174	4-Methyl-5-hexanolide	HMDB0031174	544628		CC1CCC(=O)OCC1
47	HMDB0031681	Dihydro-5-propyl-2(3H)-furanone	HMDB0031681	7742		CCCC1CCC(=O)O1
48	HMDB0033793	4-Heptenoic acid	HMDB0033793	5312595		CC/C=C\C(=O)O
49	HMDB0031593	5-Methyl-2,3-hexanedione	HMDB0031593	26204		CC(C)CC(=O)CC(=O)C
50	HMDB0039819	NA	NA	NA	NA	NA
51	HMDB0166736	NA	NA	NA	NA	NA
52	HMDB0173760	NA	NA	NA	NA	NA
53	HMDB0173761	NA	NA	NA	NA	NA
54	HMDB0173762	NA	NA	NA	NA	NA
55	HMDB0173763	NA	NA	NA	NA	NA
56	HMDB0180322	NA	NA	NA	NA	NA
57	HMDB0180323	NA	NA	NA	NA	NA
58	HMDB0029165	1,3-Diacetylpropane	HMDB0029165	100532		CC(=O)CCCC(=O)C
59	HMDB0031351	Cyclohexyl formate	HMDB0031351	20358		C1CCC(CC1)OC=O

60	HMDB0032460	4-Pentenyl acetate	HMDB0032460	74096		CC(=O)OCCCC
61	HMDB0032391	3-Methyl-3-butenyl acetate	HMDB0032391	78879		CC(=C)CCOC(=O)C
62	HMDB0030330	1-Methoxy-3-methylene-2-pentanone	HMDB0030330	13932051		CCC(=C)C(=O)C
63	HMDB0059876	NA	NA	NA	NA	NA
64	HMDB0040591	NA	NA	NA	NA	NA
65	HMDB0145113	NA	NA	NA	NA	NA
66	HMDB0145114	NA	NA	NA	NA	NA
67	HMDB0145115	NA	NA	NA	NA	NA
68	HMDB0145125	NA	NA	NA	NA	NA
69	HMDB0145116	NA	NA	NA	NA	NA
70	HMDB0094649	2-Amino-heptanoic acid	HMDB0094649	5312965		CCCCC[C@H](N)C(=O)O
71	HMDB0001161	4-Trimethylammonibutanoic acid	HMDB0001161	134	C01181	C[N+](C)(C)CC(=O)O
72	HMDB0006831	3-Dehydroxycarnitine	HMDB0006831	725	C05543	C[N+](C)(C)CC(=O)O
73	HMDB0000895	Acetylcholine	HMDB0000895	6060	C01996	CC(=O)OCC[N+](C)(C)C
74	HMDB0013811	1-Nitroheptane	HMDB0013811			CCCCCCC[N+](=O)[O-]
75	HMDB0041477	NA	NA	NA	NA	NA
76	HMDB0031660	Dibutyl sulfide	HMDB0031660	11002		CCCCSCCCC
77	HMDB0037878	NA	NA	NA	NA	NA
78	HMDB0037881	NA	NA	NA	NA	NA
79	HMDB0037880	NA	NA	NA	NA	NA
80	HMDB0037873	NA	NA	NA	NA	NA
81	HMDB0037879	NA	NA	NA	NA	NA
82	HMDB0037882	NA	NA	NA	NA	NA
83	HMDB0037857	NA	NA	NA	NA	NA
84	HMDB0037872	NA	NA	NA	NA	NA
85	HMDB0037862	NA	NA	NA	NA	NA
86	HMDB0037874	NA	NA	NA	NA	NA
87	HMDB0037876	NA	NA	NA	NA	NA
88	HMDB0037856	NA	NA	NA	NA	NA
89	HMDB0034580	psi-Pelletierine	HMDB0034580	11096	C10865	CN1C2CCCC1C2
90	HMDB0037875	NA	NA	NA	NA	NA
91	HMDB0163441	NA	NA	NA	NA	NA
92	HMDB0001325	N6,N6,N6-Trimethyl-L-lysine	HMDB0001325	440120	C03793	C[N+](C)(C)CC(=O)O
93	HMDB0031016	10-Undecen-1-ol	HMDB0031016	8185		C=CCCCCCCCCO
94	HMDB0032371	1-Menthyl methyl ether	HMDB0032371	102648		CC1CCC(C(C1))OC
95	HMDB0030943	6-Undecanone	HMDB0030943	13561		CCCCC(=O)CCCC
96	HMDB0032379	trans- and cis-1-Methoxy-1-decene	HMDB0032379	6365701		CCCCCCCCC/C=C\
97	HMDB0163244	NA	NA	NA	NA	NA
98	HMDB0030941	Undecanal	HMDB0030941	8186	NA	CCCCCCCCC=O
99	HMDB0031065	(Ás)-(E)-3-Methyl-4-decen-1-ol	HMDB0031065	6428572		CCCCC/C=C/C(O)C
100	HMDB0031064	(Z)-3-Methyl-3-decen-1-ol	HMDB0031064	129650698		CCCCC\C=C/C(O)C
101	HMDB0033713	2-Undecanone	HMDB0033713	8163	C01875	CCCCCCCCC=O
102	HMDB0034856	2-Undecen-1-ol	HMDB0034856	5365004		CCCCCCCCC/C=C\
103	HMDB0014631	Altretamine	HMDB0014631	2123		CN(C)C1=NC(=O)C
104	HMDB0041615	NA	NA	NA	NA	NA
105	HMDB0035753	(R)-(E)-4,7-Megastigmadien-9-one	HMDB0035753	5498521		CC1=CCCC([C@H]2C
106	HMDB0034959	Egulan I	HMDB0034959	521066		CC1CC=C2C(C(=O)C
107	HMDB0036818	NA	NA	NA	NA	NA
108	HMDB0036144	NA	NA	NA	NA	NA
109	HMDB0151804	NA	NA	NA	NA	NA
110	HMDB0034979	gamma-Ionone	HMDB0034979	5363741		CC(=O)/C=C/C(C)C
111	HMDB0029822	2,5-Diisopropyl-3-methylphenol	HMDB0029822	20447657		CC1=C(C(=CC(=C1
112	HMDB0029824	2,4-Diisopropyl-3-methylphenol	HMDB0029824	169279		CC1=C(C(=CC(=C1
113	HMDB0032541	4-(2,6,6-Trimethylcyclohex-1-enyl)but-2-en-4-one	HMDB0032541	5374527		C/C=C/C(=O)C
114	HMDB0029821	2,5-Diisopropyl-4-methylphenol	HMDB0029821	139921		CC1=CC(=C(C=C1
115	HMDB0036565	NA	NA	NA	NA	NA
116	HMDB0033545	(2E,4Z,7Z)-2,4,7-Tridecatrienal	HMDB0033545	6429289	NA	CCCCC/C=C\C/C=C\
117	HMDB0035682	delta-Damascone	HMDB0035682	5365916		C/C=C/C(=O)C
118	HMDB0034671	(E)-5,8-Megastigmadien-4-one	HMDB0034671	14109911		C/C=C\CC1=C(C(=O
119	HMDB0036027	alpha-Damascone	HMDB0036027	6436548		C/C=C\C(=O)C
120	HMDB0037139	NA	NA	NA	NA	NA
121	HMDB0032498	Pseudoionone	HMDB0032498	1757003		CC(=CCC/C(=O)C
122	HMDB0036022	Isopirene	HMDB0036022	116740		CC1CC=C(C2(C(=O)C
123	HMDB0031733	4-(4-Methyl-3-pentenyl)-3-cyclohexene-1-carboxaldehyde	HMDB0031733	93199		CC(=CCCC1=C(C(=O
124	HMDB0029823	2,4-Diisopropyl-5-methylphenol	HMDB0029823	527839		CC1=CC(=C(C=C1
125	HMDB0036684	NA	NA	NA	NA	NA
126	HMDB0029825	2,3-Diisopropyl-5-methylphenol	HMDB0029825	58446461	NA	CC1=CC(=C(C=C1
127	HMDB0059883	NA	NA	NA	NA	NA
128	HMDB0029820	2,6-Diisopropyl-3-methylphenol	HMDB0029820	119956	NA	CC1=C(C(=C(C=C1
129	HMDB0014018	4-Hydroxypropofol	HMDB0014018	3014064		CC(C)C1=CC(=O)C
130	HMDB0037389	NA	NA	NA	NA	NA
131	HMDB0038292	NA	NA	NA	NA	NA
132	HMDB0040439	NA	NA	NA	NA	NA
133	HMDB0039685	NA	NA	NA	NA	NA
134	HMDB0041497	NA	NA	NA	NA	NA
135	HMDB0031840	(S,Z)-Lyratol acetate	HMDB0031840	6427141		CC(=C)C(C=C)C
136	HMDB0035801	(2S,4R)-p-Mentha-1(7),5-dien-2-ol acetate	HMDB0035801	101413668		CC(C)C1CC(OC(=O
137	HMDB0035375	Ethyl (2E,4E,7Z)-Decatrienoate	HMDB0035375	71587096		CCOC(=O)\C=C\
138	HMDB0035376	Ethyl (2E,4Z,7Z)-Decatrienoate	HMDB0035376	71587513		CCOC(=O)\C=C\
139	HMDB0132986	NA	NA	NA	NA	NA
140	HMDB0034450	Neocnidilide	HMDB0034450	5018391	C17002	CCCCC1C2CCC
141	HMDB0032567	Hexylresorcinol	HMDB0032567	3610		CCCCCCC1=C(C(=O
142	HMDB0035126	(Ás)-Myrtenyl acetate	HMDB0035126	61262		CC(=O)OCC1=CC
143	HMDB0041610	NA	NA	NA	NA	NA
144	HMDB0038046	NA	NA	NA	NA	NA
145	HMDB0037018	NA	NA	NA	NA	NA
146	HMDB0037231	NA	NA	NA	NA	NA

147	HMDB0035085	Vulgarole	HMDB0035085	101416067		CC(=O)OC1C(C
148	HMDB0041572	NA	NA	NA	NA	NA
149	HMDB0029388	Cucurbit acid	HMDB0029388	6123064	NA	CC/C=C/CC1C
150	HMDB0037326	NA	NA	NA	NA	NA
151	HMDB0033601	Dihydrojasmonic acid	HMDB0033601	107126		CCCCC1C(CC
152	HMDB0040195	NA	NA	NA	NA	NA
153	HMDB0035723	(1R,2S,3S,4R)-p-Menthane-2,3-diol	HMDB0035723	107175		CC1CCC(C(C1O
154	HMDB0034457	Propyl heptanoate	HMDB0034457	229377		CCCCCCC(=O)
155	HMDB0061987	NA	NA	NA	NA	NA
156	HMDB0062146	NA	NA	NA	NA	NA
157	HMDB0038038	NA	NA	NA	NA	NA
158	HMDB0036228	2-Methylpropyl hexanoate	HMDB0036228	7775		CCCCC(=O)O
159	HMDB0040167	NA	NA	NA	NA	NA
160	HMDB0036136	NA	NA	NA	NA	NA
161	HMDB0187563	NA	NA	NA	NA	NA
162	HMDB0037387	NA	NA	NA	NA	NA
163	HMDB0000511	Capric acid	HMDB0000511	2969	C01571	CCCCCCCCC
164	HMDB0031264	Methyl nonanoate	HMDB0031264	15606		CCCCCCCC(=
165	HMDB0094654	1-Methylethyl heptanoic acid	HMDB0094654	520710		CCCCCCC(=O)
166	HMDB0171179	NA	NA	NA	NA	NA
167	HMDB0171178	NA	NA	NA	NA	NA
168	HMDB0171177	NA	NA	NA	NA	NA
169	HMDB0171176	NA	NA	NA	NA	NA
170	HMDB0179213	NA	NA	NA	NA	NA
171	HMDB0179212	NA	NA	NA	NA	NA
172	HMDB0179927	NA	NA	NA	NA	NA
173	HMDB0180500	NA	NA	NA	NA	NA
174	HMDB0180498	NA	NA	NA	NA	NA
175	HMDB0180499	NA	NA	NA	NA	NA
176	HMDB0180497	NA	NA	NA	NA	NA
177	HMDB0180502	NA	NA	NA	NA	NA
178	HMDB0180501	NA	NA	NA	NA	NA
179	HMDB0180503	NA	NA	NA	NA	NA
180	HMDB0180504	NA	NA	NA	NA	NA
181	HMDB0171175	NA	NA	NA	NA	NA
182	HMDB0061805	NA	NA	NA	NA	NA
183	HMDB0180097	NA	NA	NA	NA	NA
184	HMDB0032302	Heptanal propyleneglycol acetal	HMDB0032302	20357		CCCCCCC1OC
185	HMDB0032155	Acetaldehyde 1,3-octanediol acetal	HMDB0032155	11105826		CCCCC1CCOC
186	HMDB0032264	Ethyl 2-ethylhexanoate	HMDB0032264	102916		CCCC(C(C)C
187	HMDB0032315	Hexanal butane-2,3-diol acetal	HMDB0032315	11084346		CCCCC1OC(C
188	HMDB0032045	Pentyl 3-methylbutanoate	HMDB0032045	95978		CCCCCOC(=O
189	HMDB0041216	NA	NA	NA	NA	NA
190	HMDB0034849	4-Methylnonanoic acid	HMDB0034849	62003		CCCCC(C)CC
191	HMDB0037849	Hexyl 2-methylpropanoate	HMDB0037849	3685	C00395	CCCCCOC(=O
192	HMDB0040157	NA	NA	NA	NA	NA
193	HMDB0033620	Hexyl butyrate	HMDB0033620	17525		CCCCCOC(=O
194	HMDB0035595	trans-p-Menthane-1,8-diol	HMDB0035595	6651		CC1(CCC(C(C1
195	HMDB0029760	1,1-Diethoxy-2-hexene	HMDB0029760	5365137		CCC/C=C/C(O
196	HMDB0032070	Isooctyl acetate	HMDB0032070	50006		CC(C)CCCC(C
197	HMDB0040211	NA	NA	NA	NA	NA
198	HMDB0040529	NA	NA	NA	NA	NA
199	HMDB0038783	NA	NA	NA	NA	NA
200	HMDB0036145	NA	NA	NA	NA	NA
201	HMDB0039218	NA	NA	NA	NA	NA
202	HMDB0038602	Octyl acetate	HMDB0038602	8164		CCCCCCCCOC
203	HMDB0030029	Isopentyl isopentanoate	HMDB0030029	12613	C12289	CC(C)CCOC(=
204	HMDB0031739	7-Hydroxy-3,7-dimethyloctanal	HMDB0031739	7888		CC(CCCC(C)(C
205	HMDB0035360	N-Methyl-1-deoxynojirimycin	HMDB0035360	4381		CN1CC(C(C(C1
206	HMDB0014362	Bethanidine	HMDB0014362	2368		CNC(=NC)NCC
207	HMDB0035593	Rishitin	HMDB0035593	534260	C09715	CC1C(C(CC2=C
208	HMDB0037605	NA	NA	NA	NA	NA
209	HMDB0036790	NA	NA	NA	NA	NA
210	HMDB0036791	NA	NA	NA	NA	NA
211	HMDB0037820	NA	NA	NA	NA	NA
212	HMDB0040178	NA	NA	NA	NA	NA
213	HMDB0160293	NA	NA	NA	NA	NA
214	HMDB0160295	NA	NA	NA	NA	NA
215	HMDB0160291	NA	NA	NA	NA	NA
216	HMDB0160290	NA	NA	NA	NA	NA
217	HMDB0160289	NA	NA	NA	NA	NA
218	HMDB0160292	NA	NA	NA	NA	NA
219	HMDB0160296	NA	NA	NA	NA	NA
220	HMDB0160294	NA	NA	NA	NA	NA
221	HMDB0160298	NA	NA	NA	NA	NA
222	HMDB0160297	NA	NA	NA	NA	NA
223	HMDB0032369	L-Menthyl acetoacetate	HMDB0032369	43045		C[C@H]1CC[C@
224	HMDB0033619	Hexyl hexanoate	HMDB0033619	22873		CCCCCOC(=O
225	HMDB0059868	NA	NA	NA	NA	NA
226	HMDB0032440	Nonanal propyleneglycol acetal	HMDB0032440	95572		CCCCCCCCC1O
227	HMDB0061988	NA	NA	NA	NA	NA
228	HMDB0035410	(R)-Dihydrocitronellol acetate	HMDB0035410	30249		CC(C)CCCC(C
229	HMDB0000638	Dodecanoic acid	HMDB0000638	3893	C02679	CCCCCCCCC
230	HMDB0040166	NA	NA	NA	NA	NA
231	HMDB0030998	Ethyl decanoate	HMDB0030998	8048		CCCCCCCCC
232	HMDB0034137	Octyl 2-methylpropanoate	HMDB0034137	61024		CCCCCCCCOC
233	HMDB0036225	NA	NA	NA	NA	NA

234	HMDB0034136	Octyl butanoate	HMDB0034136	61030		CCCCCCCCOC
235	HMDB0034128	Isopropyl nonanoate	HMDB0034128	119911		CCCCCCCCC(=
236	HMDB0032310	2-Heptyl butyrate	HMDB0032310	89307		CCCCC(CC)O
237	HMDB0168119	NA	NA	NA	NA	NA
238	HMDB0168120	NA	NA	NA	NA	NA
239	HMDB0168121	NA	NA	NA	NA	NA
240	HMDB0015050	Phenformin	HMDB0015050	8249	C07673	C1=CC=C(C=C
241	HMDB0004231	Pantothenol	HMDB0004231	4678	C05944	CC(C)(CO)C(C
242	HMDB0061683	NA	NA	NA	NA	NA
243	HMDB0031813	N-Carbamoyl-2-amino-2-(4-hydroxyphenyl)acetic acid	HMDB0031813	578941		C1=CC(=CC=C
244	HMDB0000014	Deoxycytidine	HMDB0000014	13711	C00881	C1[C@@H]([C@H
245	HMDB0028732	Asparaginy-Hydroxyproline	HMDB0028732	61157688		NC(CC(N)=O)C
246	HMDB0028858	Hydroxypropyl-Asparagine	HMDB0028858	61158096		NC(=O)CC(NC
247	HMDB0040046	NA	NA	NA	NA	NA
248	HMDB0161863	NA	NA	NA	NA	NA
249	HMDB0161860	NA	NA	NA	NA	NA
250	HMDB0041444	NA	NA	NA	NA	NA
251	HMDB0033452	Koenoline	HMDB0033452	375152		COC1=C2C(=C
252	HMDB0161862	NA	NA	NA	NA	NA
253	HMDB0161861	NA	NA	NA	NA	NA
254	HMDB0161859	NA	NA	NA	NA	NA
255	HMDB0161858	NA	NA	NA	NA	NA
256	HMDB0161857	NA	NA	NA	NA	NA
257	HMDB0060478	gamma-Glutamyl-beta-cyanoalanine	HMDB0060478	53297342	C05711	N[C@@H](CCC(
258	HMDB0000089	Cytidine	HMDB0000089	6253	C00475	C1=CN(C(=O)N
259	HMDB0015122	Cytarabine	HMDB0015122	6253	C02961	C1=CN(C(=O)N
260	HMDB0155273	NA	NA	NA	NA	NA
261	HMDB0001904	3-Nitrotyrosine	HMDB0001904	65124		C1=CC(=C(C=C
262	HMDB0028751	Aspartyl- Glutamine	HMDB0028751	471584		NC(CC(O)=O)C
263	HMDB0028793	Glutaminylaspartic acid	HMDB0028793	87275314		C(CC(=O)N)[C@
264	HMDB0029144	gamma-Glutamylasparagine	HMDB0029144	131801686		N[C@@H](CCC(
265	HMDB0028814	Glutamylasparagine	HMDB0028814	13655621		C(CC(=O)O)[C@
266	HMDB0028730	Asparaginy-H-Glutamate	HMDB0028730	7019991		NC(CC(N)=O)C
267	HMDB0028767	Aspartyl-Gamma-glutamate	HMDB0028767	131750735		NC(CCC(=O)N
268	HMDB0033701	Hydrocotarnine	HMDB0033701	3646	C13534	CN1CCC2=CC3
269	HMDB0031770	Carbofuran	HMDB0031770	2566	C14291	CC1(CC2=C(O1
270	HMDB0014798	Metaxalone	HMDB0014798	15459	C07934	CC1=CC(=CC(
271	HMDB0139892	NA	NA	NA	NA	NA
272	HMDB0138550	NA	NA	NA	NA	NA
273	HMDB0033925	Oroselone	HMDB0033925	74477		CC(=C)C1=CC
274	HMDB0032998	2-Methoxyxanthone	HMDB0032998	71034		COC1=CC2=C(C
275	HMDB0161779	NA	NA	NA	NA	NA
276	HMDB0161778	NA	NA	NA	NA	NA
277	HMDB0161783	NA	NA	NA	NA	NA
278	HMDB0161782	NA	NA	NA	NA	NA
279	HMDB0161780	NA	NA	NA	NA	NA
280	HMDB0162111	NA	NA	NA	NA	NA
281	HMDB0162103	NA	NA	NA	NA	NA
282	HMDB0162104	NA	NA	NA	NA	NA
283	HMDB0162105	NA	NA	NA	NA	NA
284	HMDB0162108	NA	NA	NA	NA	NA
285	HMDB0162109	NA	NA	NA	NA	NA
286	HMDB0162106	NA	NA	NA	NA	NA
287	HMDB0162107	NA	NA	NA	NA	NA
288	HMDB0162110	NA	NA	NA	NA	NA
289	HMDB0162112	NA	NA	NA	NA	NA
290	HMDB0161832	NA	NA	NA	NA	NA
291	HMDB0161833	NA	NA	NA	NA	NA
292	HMDB0161834	NA	NA	NA	NA	NA
293	HMDB0149051	NA	NA	NA	NA	NA
294	HMDB0149050	NA	NA	NA	NA	NA
295	HMDB0149006	NA	NA	NA	NA	NA
296	HMDB0148541	NA	NA	NA	NA	NA
297	HMDB0148540	NA	NA	NA	NA	NA
298	HMDB0148786	NA	NA	NA	NA	NA
299	HMDB0148785	NA	NA	NA	NA	NA
300	HMDB0148998	NA	NA	NA	NA	NA
301	HMDB0149048	NA	NA	NA	NA	NA
302	HMDB0147226	NA	NA	NA	NA	NA
303	HMDB0148542	NA	NA	NA	NA	NA
304	HMDB0128505	NA	NA	NA	NA	NA
305	HMDB0148539	NA	NA	NA	NA	NA
306	HMDB0145646	NA	NA	NA	NA	NA
307	HMDB0145647	NA	NA	NA	NA	NA
308	HMDB0145645	NA	NA	NA	NA	NA
309	HMDB0135172	NA	NA	NA	NA	NA
310	HMDB0149007	NA	NA	NA	NA	NA
311	HMDB0128506	NA	NA	NA	NA	NA
312	HMDB0128503	NA	NA	NA	NA	NA
313	HMDB0128504	NA	NA	NA	NA	NA
314	HMDB0040876	NA	NA	NA	NA	NA
315	HMDB0030946	(2E,11Z)-Wyerone acid	HMDB0030946	131751103		CC\C=C/C#CC
316	HMDB0041016	NA	NA	NA	NA	NA
317	HMDB0030595	Suberenone	HMDB0030595	5321539		CC(=O)/C=C/O
318	HMDB0033735	Graveolone	HMDB0033735	177751		CC1(CC(=O)C2
319	HMDB0039430	NA	NA	NA	NA	NA
320	HMDB0004215	3,3',4'5'-Tetrahydroxystilbene	HMDB0004215	667639	C05901	C1=CC(=C(C=C

321	HMDB0170845	NA	NA	NA	NA	NA
322	HMDB0164057	NA	NA	NA	NA	NA
323	HMDB0135900	NA	NA	NA	NA	NA
324	HMDB0135902	NA	NA	NA	NA	NA
325	HMDB0135904	NA	NA	NA	NA	NA
326	HMDB0164055	NA	NA	NA	NA	NA
327	HMDB0164056	NA	NA	NA	NA	NA
328	HMDB0164058	NA	NA	NA	NA	NA
329	HMDB0170846	NA	NA	NA	NA	NA
330	HMDB0170974	NA	NA	NA	NA	NA
331	HMDB0170976	NA	NA	NA	NA	NA
332	HMDB0170979	NA	NA	NA	NA	NA
333	HMDB0170978	NA	NA	NA	NA	NA
334	HMDB0131284	NA	NA	NA	NA	NA
335	HMDB0131285	NA	NA	NA	NA	NA
336	HMDB0127824	NA	NA	NA	NA	NA
337	HMDB0131281	NA	NA	NA	NA	NA
338	HMDB0131283	NA	NA	NA	NA	NA
339	HMDB0170977	NA	NA	NA	NA	NA
340	HMDB0031668	Dihydrodeoxy-8-epiaustdiol	HMDB0031668	76551322		CC1=CC2=C(C(=O)C=C2)C(=O)C1
341	HMDB0034056	5-(3,4-Methylenedioxyphenyl)pentanoic acid	HMDB0034056	5321853		C1OC2=C(O1)C=CC2
342	HMDB0037681	NA	NA	NA	NA	NA
343	HMDB0029470	Isodillapiole	HMDB0029470	11435991		C/C=C/C1=CC=CC=C1
344	HMDB0041379	NA	NA	NA	NA	NA
345	HMDB0135906	NA	NA	NA	NA	NA
346	HMDB0038563	NA	NA	NA	NA	NA
347	HMDB0037130	NA	NA	NA	NA	NA
348	HMDB0094660	Diethyl phthalic acid	HMDB0094660	6781	C14175	CCOC(=O)C1=CC=CC=C1
349	HMDB0033776	Apiole	HMDB0033776	10659	C10429	COC1=C2C(=C(C=C2)C(=O)C1)C
350	HMDB0029226	5'-(3'-Methoxy-4'-hydroxyphenyl)-gamma-valerolactone	HMDB0029226	3028410		COC1=C(C(=O)OCC1)C
351	HMDB0135689	NA	NA	NA	NA	NA
352	HMDB0013247	Monobutylphthalate	HMDB0013247	8575		CCCCOC(=O)C1=CC=CC=C1
353	HMDB0030725	Dillapiol	HMDB0030725	10231	C10449	COC1=C(C(=O)OCC1)C
354	HMDB0002056	Monoisobutyl phthalic acid	HMDB0002056	92272		CC(C)COC(=O)C1=CC=CC=C1
355	HMDB0147179	NA	NA	NA	NA	NA
356	HMDB0140340	NA	NA	NA	NA	NA
357	HMDB0173973	NA	NA	NA	NA	NA
358	HMDB0173971	NA	NA	NA	NA	NA
359	HMDB0173972	NA	NA	NA	NA	NA
360	HMDB0173975	NA	NA	NA	NA	NA
361	HMDB0173976	NA	NA	NA	NA	NA
362	HMDB0177472	NA	NA	NA	NA	NA
363	HMDB0177470	NA	NA	NA	NA	NA
364	HMDB0173974	NA	NA	NA	NA	NA
365	HMDB0128944	NA	NA	NA	NA	NA
366	HMDB0131630	NA	NA	NA	NA	NA
367	HMDB0128958	NA	NA	NA	NA	NA
368	HMDB0039027	NA	NA	NA	NA	NA
369	HMDB0128963	NA	NA	NA	NA	NA
370	HMDB0138052	NA	NA	NA	NA	NA
371	HMDB0128962	NA	NA	NA	NA	NA
372	HMDB0030882	(S)-Rutaretin	HMDB0030882	11108126		CC(C)(C1CC2=CC=CC=C2C1)C
373	HMDB0128960	NA	NA	NA	NA	NA
374	HMDB0128961	NA	NA	NA	NA	NA
375	HMDB0032838	Dorsteniol	HMDB0032838	71438319		CC(O)(CO)C1=CC=CC=C1
376	HMDB0131653	NA	NA	NA	NA	NA
377	HMDB0147178	NA	NA	NA	NA	NA
378	HMDB0131691	NA	NA	NA	NA	NA
379	HMDB0131700	NA	NA	NA	NA	NA
380	HMDB0167944	NA	NA	NA	NA	NA
381	HMDB0163475	NA	NA	NA	NA	NA
382	HMDB0171044	NA	NA	NA	NA	NA
383	HMDB0167134	NA	NA	NA	NA	NA
384	HMDB0028752	Aspartyl-Glutamate	HMDB0028752	4130574		NC(CC(O)=O)C(=O)O
385	HMDB0029145	NA	NA	NA	NA	NA
386	HMDB0030419	gamma-Glutamylaspartic acid	HMDB0030419	5122061		C(CC(=O)NC(=O)O)C(=O)O
387	HMDB0062501	NA	NA	NA	NA	NA
388	HMDB0028815	Glutamylaspartic acid	HMDB0028815	99716		C(CC(=O)O)[C@@H](O)C(=O)O
389	HMDB0030413	NA	NA	NA	NA	NA
390	HMDB0011164	L-beta-aspartyl-L-glutamic acid	HMDB0011164	25207301		C(CC(=O)O)C(=O)O
391	HMDB0000767	Pseudouridine	HMDB0000767	15047	C02067	C1=C(C(=O)NC(=O)N1)C
392	HMDB0000296	Uridine	HMDB0000296	6029	C00299	C1=CN(C(=O)N)C(=O)N1
393	HMDB0156330	NA	NA	NA	NA	NA
394	HMDB0126635	NA	NA	NA	NA	NA
395	HMDB0130466	NA	NA	NA	NA	NA
396	HMDB0130477	NA	NA	NA	NA	NA
397	HMDB0006794	5-(2'-Carboxyethyl)-4,6-Dihydroxypicolinate	HMDB0006794	0	C05655	OC(=O)CCC1=CC(=O)C(O)=CC1
398	HMDB0157260	NA	NA	NA	NA	NA
399	HMDB0157259	NA	NA	NA	NA	NA
400	HMDB0125157	NA	NA	NA	NA	NA
401	HMDB0166885	NA	NA	NA	NA	NA
402	HMDB0155302	NA	NA	NA	NA	NA
403	HMDB0180914	NA	NA	NA	NA	NA
404	HMDB0177249	NA	NA	NA	NA	NA
405	HMDB0163614	NA	NA	NA	NA	NA
406	HMDB0186509	NA	NA	NA	NA	NA
407	HMDB0184957	NA	NA	NA	NA	NA

408	HMDB0184936	NA	NA	NA	NA	NA
409	HMDB0062677	NA	NA	NA	NA	NA
410	HMDB0004590	19-Nor-5-androstenediol	HMDB0004590	9900246		C[C@]12CC[C@]
411	HMDB0032464	Phenethyl decanoate	HMDB0032464	112733		CCCCCCCCC
412	HMDB0002697	19-Norandrosterone	HMDB0002697	128251		C[C@]12CC[C@]
413	HMDB0032672	4,8,12,15-Octadecatetraenoic acid	HMDB0032672	131751278		CC\C=C/C\C=C
414	HMDB0005886	19-Noretiocholanolone	HMDB0005886	9548753		C[C@]12CC[C@]
415	HMDB0034382	(E,E)-11,13-Octadecadien-9-ynoic acid	HMDB0034382	131751554		CCCC\C=C\C=C
416	HMDB0006547	Stearidonic acid	HMDB0006547	5312508	C16300	CC/C=C\C/C=C
417	HMDB0186501	NA	NA	NA	NA	NA
418	HMDB0186507	NA	NA	NA	NA	NA
419	HMDB0186508	NA	NA	NA	NA	NA
420	HMDB0062288	NA	NA	NA	NA	NA
421	HMDB0186510	NA	NA	NA	NA	NA
422	HMDB0186500	NA	NA	NA	NA	NA
423	HMDB0186506	NA	NA	NA	NA	NA
424	HMDB0186505	NA	NA	NA	NA	NA
425	HMDB0186504	NA	NA	NA	NA	NA
426	HMDB0186502	NA	NA	NA	NA	NA
427	HMDB0186497	NA	NA	NA	NA	NA
428	HMDB0186499	NA	NA	NA	NA	NA
429	HMDB0186498	NA	NA	NA	NA	NA
430	HMDB0112093	NA	NA	NA	NA	NA
431	HMDB0112099	NA	NA	NA	NA	NA
432	HMDB0112102	NA	NA	NA	NA	NA
433	HMDB0112103	NA	NA	NA	NA	NA
434	HMDB0186503	NA	NA	NA	NA	NA
435	HMDB0034586	(9Z,12Z,14E)-16-Hydroxy-9,12,14-octadecatrienoic acid	HMDB0034586	13917179		CCC(/C=C/C=C
436	HMDB0031088	12,13-Epoxy-9,15-octadecadienoic acid	HMDB0031088	131751130		CC\C=C/C/CC1O
437	HMDB0029969	Squamosanal A	HMDB0029969	85308895		CC1OC(=O)C(O
438	HMDB0031103	2-Hydroxylinolenic acid	HMDB0031103	131751135		CC\C=C/C\C=C
439	HMDB0036832	NA	NA	NA	NA	NA
440	HMDB0030950	15,16-Epoxy-9,12-octadecadienoic acid	HMDB0030950	131751107		CCC1OC1C\C=C
441	HMDB0029786	10-Oxo-11-octadecen-13-olide	HMDB0029786	9882599		CCCCCCC1/C=C
442	HMDB0011108	17-Hydroxylinolenic acid	HMDB0011108	10708957	C16346	CC(/C=C\C/C/C
443	HMDB0010224	9-HOTE	HMDB0010224	53480359		CC/C=C\C/CC/C
444	HMDB0010220	9(10)-EpODE	HMDB0010220	16061060		CC/C=C\C/C=C
445	HMDB0010206	15(16)-EpODE	HMDB0010206	16061062		CCC1C(O1)C/C
446	HMDB0010200	A-12(13)-EpODE	HMDB0010200	16061061		CC/C=C\C/CC1C
447	HMDB0010203	13-HOTE	HMDB0010203	10469728		CC/C=C\C/CC(/
448	HMDB0004669	9-OxoODE	HMDB0004669	9839084	C14766	CCCCC/C=C\C
449	HMDB0004668	13-OxoODE	HMDB0004668	6446027	C14765	CCCCC(=O)/
450	HMDB0031934	(9S,10E,12Z,15Z)-9-Hydroxy-10,12,15-octadecatrienoic acid	HMDB0031934	13917187		CC/C=C/C/C=C
451	HMDB0030995	(2'E,4'Z,8E)-Colneleic acid	HMDB0030995	6441681	C19827	CCCCC/C=C\C
452	HMDB0061644	NA	NA	NA	NA	NA
453	HMDB0039603	NA	NA	NA	NA	NA
454	HMDB0061979	NA	NA	NA	NA	NA
455	HMDB0033791	(E)-3-Hexadecenoic acid	HMDB0033791	5355370		CCCCCCCCC
456	HMDB0038958	NA	NA	NA	NA	NA
457	HMDB0031711	15-Hexadecanolide	HMDB0031711	543385		CC1CCCCCCCC
458	HMDB0003229	Palmitoleic acid	HMDB0003229	5312427	C08362	CCCCC/C=C\C
459	HMDB0010735	Trans-Hexa-dec-2-enoic acid	HMDB0010735	5282743		CCCCCCCCC
460	HMDB0037647	NA	NA	NA	NA	NA
461	HMDB0041422	NA	NA	NA	NA	NA
462	HMDB0032638	(Z)-5-Hexadecenoic acid	HMDB0032638	13105359		CCCCCCCCC
463	HMDB0031053	(E)-6-Hexadecenoic acid	HMDB0031053	5282744		CCCCCCCCC/O
464	HMDB0035877	(Z)-13-Hexadecenoic acid	HMDB0035877	5312416		CC/C=C\C/CCCC
465	HMDB0031145	5-Dodecyldihydro-2(3H)-furanone	HMDB0031145	97747		CCCCCCCCC
466	HMDB0002186	Hypogeic acid	HMDB0002186	5318393		CCCCCCCCC/C
467	HMDB0171478	NA	NA	NA	NA	NA
468	HMDB0171479	NA	NA	NA	NA	NA
469	HMDB0171477	NA	NA	NA	NA	NA
470	HMDB0012328	Palmitelaidic acid	HMDB0012328	5282745		CCCCC/C=C/C
471	HMDB0171476	NA	NA	NA	NA	NA
472	HMDB0000756	L-Hexanoylcarnitine	HMDB0000756	3246938		CCCCC(=O)O
473	HMDB0000705	Hexanoylcarnitine	HMDB0000705	6426853		CCCCC(=O)O
474	HMDB0014413	Ropinirole	HMDB0014413	5095	C07564	CCCN(CCC)CC
475	HMDB0015070	Oxymetazoline	HMDB0015070	4636	C07363	CC1=CC(=C(C
476	HMDB0061189	NA	NA	NA	NA	NA
477	HMDB0062555	hydroxyisovaleroyl carnitine	HMDB0062555	57357187		CC(C)CC(=O)O
478	HMDB0240421	NA	NA	NA	NA	NA
479	HMDB0040904	NA	NA	NA	NA	NA
480	HMDB0168550	NA	NA	NA	NA	NA
481	HMDB0168551	NA	NA	NA	NA	NA
482	HMDB0168552	NA	NA	NA	NA	NA
483	HMDB0168553	NA	NA	NA	NA	NA
484	HMDB0168554	NA	NA	NA	NA	NA
485	HMDB0168549	NA	NA	NA	NA	NA
486	HMDB0137260	NA	NA	NA	NA	NA
487	HMDB0137271	NA	NA	NA	NA	NA
488	HMDB0030974	8-Acetoxy-4-acoren-3-one	HMDB0030974	85288994		CC(C)C1C(CC(
489	HMDB0031928	Panaxyltriol	HMDB0031928	93484	C16792	CCCCCCCCC(C
490	HMDB0030801	1-(4-Hydroxy-3-methoxyphenyl)-3-decanone	HMDB0030801	94378	C10482	CCCCCCCC(=C
491	HMDB0039251	NA	NA	NA	NA	NA
492	HMDB0134775	NA	NA	NA	NA	NA
493	HMDB0038798	NA	NA	NA	NA	NA
494	HMDB0035075	Tanacetol B	HMDB0035075	131751660		CC(=O)O\C1=

495	HMDB0060952	NA	NA	NA	NA
496	HMDB0014521	Palonosetron	HMDB0014521	148211	C1C[C@H]2CN(C
497	HMDB0030283	Hydrocinchonine	HMDB0030283	101711	CCC1CN2CCCC1
498	HMDB0175409	NA	NA	NA	NA
499	HMDB0175412	NA	NA	NA	NA
500	HMDB0175413	NA	NA	NA	NA
501	HMDB0175414	NA	NA	NA	NA
502	HMDB0175415	NA	NA	NA	NA
503	HMDB0175408	NA	NA	NA	NA
504	HMDB0175410	NA	NA	NA	NA
505	HMDB0175411	NA	NA	NA	NA
506	HMDB0160594	NA	NA	NA	NA
507	HMDB0173892	NA	NA	NA	NA
508	HMDB0175402	NA	NA	NA	NA
509	HMDB0175403	NA	NA	NA	NA
510	HMDB0175404	NA	NA	NA	NA
511	HMDB0175405	NA	NA	NA	NA
512	HMDB0175406	NA	NA	NA	NA
513	HMDB0175407	NA	NA	NA	NA
514	HMDB0030964	Linolenelaidic acid	HMDB0030964	5282822	CC/C=C/C/C=C=
515	HMDB0001388	Alpha-Linolenic acid	HMDB0001388	5280934	CC/C=C\C/C=C=
516	HMDB0003073	Gamma-Linolenic acid	HMDB0003073	5280933	CCCCC/C=C\C\
517	HMDB0030962	Calendic acid	HMDB0030962	5282818	CCCCC/C=C\C\
518	HMDB0030963	Punicic acid	HMDB0030963	12309425	CCCC/C=C/C=C=
519	HMDB0160589	NA	NA	NA	NA
520	HMDB0160588	NA	NA	NA	NA
521	HMDB0112194	NA	NA	NA	NA
522	HMDB0062652	NA	NA	NA	NA
523	HMDB0173890	NA	NA	NA	NA
524	HMDB0160590	NA	NA	NA	NA
525	HMDB0160592	NA	NA	NA	NA
526	HMDB0160591	NA	NA	NA	NA
527	HMDB0160593	NA	NA	NA	NA
528	HMDB0160595	NA	NA	NA	NA
529	HMDB0173886	NA	NA	NA	NA
530	HMDB0173885	NA	NA	NA	NA
531	HMDB0173887	NA	NA	NA	NA
532	HMDB0173889	NA	NA	NA	NA
533	HMDB0173891	NA	NA	NA	NA
534	HMDB0173888	NA	NA	NA	NA
535	HMDB0173893	NA	NA	NA	NA
536	HMDB0004667	13S-hydroxyoctadecadienoic acid	HMDB0004667	6443013	C14762 CCCCC[C@@H]
537	HMDB0061708	NA	NA	NA	NA
538	HMDB0029796	(Z)-13-Oxo-9-octadecenoic acid	HMDB0029796	44612156	CCCCCC(=O)C
539	HMDB0029998	12-Hydroxy-8,10-octadecadienoic acid	HMDB0029998	131750940	CCCCCCC(O)\C
540	HMDB0029978	Avenoleic acid	HMDB0029978	75536015	CCCC(O)C\C=
541	HMDB0010223	9-HODE	HMDB0010223	5282945	CCCCC/C=C/C\
542	HMDB0004701	9,10-Epoxyoctadecenoic acid	HMDB0004701	6246154	CCCCC/C=C\C\
543	HMDB0004702	12,13-EpOME	HMDB0004702	5356421	C14826 CCCCCC1C(O1
544	HMDB0004670	Alpha-dimorphcolic acid	HMDB0004670	5312830	C14767 CCCCC/C=C\C\
545	HMDB0000220	Palmitic acid	HMDB0000220	985	C00249 CCCCCCCCCC
546	HMDB0060083	NA	NA	NA	NA
547	HMDB0061373	NA	NA	NA	NA
548	HMDB0032324	Hexyl decanoate	HMDB0032324	82635	CCCCCCCCCCCC
549	HMDB0032249	Dodecyl butyrate	HMDB0032249	245572	CCCCCCCCCCCC
550	HMDB0033166	Octyl octanoate	HMDB0033166	61294	CCCCCCCCCO
551	HMDB0032065	Butyl dodecanoate	HMDB0032065	61015	CCCCCCCCCO
552	HMDB0036210	NA	NA	NA	NA
553	HMDB0034153	Ethyl tetradecanoate	HMDB0034153	31283	CCCCCCCCCCCC
554	HMDB0031068	Isopalmitic acid	HMDB0031068	36247	CC(C)CCCCC
555	HMDB0002396	Trimethyltridecanoic acid	HMDB0002396	151503	CC(C)CCCC(C)
556	HMDB0039096	NA	NA	NA	NA
557	HMDB0173636	NA	NA	NA	NA
558	HMDB0041314	NA	NA	NA	NA
559	HMDB0130350	NA	NA	NA	NA
560	HMDB0130347	NA	NA	NA	NA
561	HMDB0175079	NA	NA	NA	NA
562	HMDB0178312	NA	NA	NA	NA
563	HMDB0141160	NA	NA	NA	NA
564	HMDB0141105	NA	NA	NA	NA
565	HMDB0141099	NA	NA	NA	NA
566	HMDB0141080	NA	NA	NA	NA
567	HMDB0141122	NA	NA	NA	NA
568	HMDB0141079	NA	NA	NA	NA
569	HMDB0141126	NA	NA	NA	NA
570	HMDB0141149	NA	NA	NA	NA
571	HMDB0141119	NA	NA	NA	NA
572	HMDB0040889	NA	NA	NA	NA
573	HMDB0129039	NA	NA	NA	NA
574	HMDB0138953	NA	NA	NA	NA
575	HMDB0141045	NA	NA	NA	NA
576	HMDB0138954	NA	NA	NA	NA
577	HMDB0138952	NA	NA	NA	NA
578	HMDB0138951	NA	NA	NA	NA
579	HMDB0138956	NA	NA	NA	NA
580	HMDB0140994	NA	NA	NA	NA
581	HMDB0138959	NA	NA	NA	NA

582	HMDB0138955	NA	NA	NA	NA	NA
583	HMDB0138957	NA	NA	NA	NA	NA
584	HMDB0138958	NA	NA	NA	NA	NA
585	HMDB0141056	NA	NA	NA	NA	NA
586	HMDB0141150	NA	NA	NA	NA	NA
587	HMDB0141152	NA	NA	NA	NA	NA
588	HMDB0141153	NA	NA	NA	NA	NA
589	HMDB0141164	NA	NA	NA	NA	NA
590	HMDB0146848	NA	NA	NA	NA	NA
591	HMDB0146849	NA	NA	NA	NA	NA
592	HMDB0141181	NA	NA	NA	NA	NA
593	HMDB0141151	NA	NA	NA	NA	NA
594	HMDB0141180	NA	NA	NA	NA	NA
595	HMDB0141162	NA	NA	NA	NA	NA
596	HMDB0141161	NA	NA	NA	NA	NA
597	HMDB0141169	NA	NA	NA	NA	NA
598	HMDB0141163	NA	NA	NA	NA	NA
599	HMDB0141145	NA	NA	NA	NA	NA
600	HMDB0141146	NA	NA	NA	NA	NA
601	HMDB0141057	NA	NA	NA	NA	NA
602	HMDB0141101	NA	NA	NA	NA	NA
603	HMDB0141102	NA	NA	NA	NA	NA
604	HMDB0141100	NA	NA	NA	NA	NA
605	HMDB0141103	NA	NA	NA	NA	NA
606	HMDB0141106	NA	NA	NA	NA	NA
607	HMDB0141107	NA	NA	NA	NA	NA
608	HMDB0141120	NA	NA	NA	NA	NA
609	HMDB0141121	NA	NA	NA	NA	NA
610	HMDB0141130	NA	NA	NA	NA	NA
611	HMDB0141129	NA	NA	NA	NA	NA
612	HMDB0141128	NA	NA	NA	NA	NA
613	HMDB0141127	NA	NA	NA	NA	NA
614	HMDB0141139	NA	NA	NA	NA	NA
615	HMDB0141140	NA	NA	NA	NA	NA
616	HMDB0141170	NA	NA	NA	NA	NA
617	HMDB0036635	NA	NA	NA	NA	NA
618	HMDB0041298	NA	NA	NA	NA	NA
619	HMDB0033310	Moracin C	HMDB0033310	155248		CC(=CCC1=C(C
620	HMDB0031744	Artocarbene	HMDB0031744	131751188		CC1(C)OC2=CC
621	HMDB0141044	NA	NA	NA	NA	NA
622	HMDB0138682	NA	NA	NA	NA	NA
623	HMDB0011741	gamma-Glutamyltyrosine	HMDB0011741	94340		C1=CC(=CC=C
624	HMDB0029161	NA	NA	NA	NA	NA
625	HMDB0029104	Tyrosyl-Glutamate	HMDB0029104	7009628		NC(CC1=CC=C
626	HMDB0028831	Glutamyltyrosine	HMDB0028831	515717		C1=CC(=CC=C
627	HMDB0062553	NA	NA	NA	NA	NA
628	HMDB0041309	NA	NA	NA	NA	NA
629	HMDB0000839	Pentaporphyrin I	HMDB0000839		C09541	N1C2=CC=C1\
630	HMDB0029428	Hypoglycin B	HMDB0029428	108105	C08280	C=C1CC1CC(C
631	HMDB0061318	NA	NA	NA	NA	NA
632	HMDB0015102	Desloratadine	HMDB0015102	124087		C1CC2=C(C(C
633	HMDB0170226	NA	NA	NA	NA	NA
634	HMDB0170229	NA	NA	NA	NA	NA
635	HMDB0170227	NA	NA	NA	NA	NA
636	HMDB0170230	NA	NA	NA	NA	NA
637	HMDB0170228	NA	NA	NA	NA	NA
638	HMDB0004704	9,10-DHOME	HMDB0004704	9966640	C14828	CCCCC/C=C\O
639	HMDB0061650	9,10-Epoxystearic acid	HMDB0061650	15868	C19620	CCCCCCCCC1O
640	HMDB0004705	12,13-DHOME	HMDB0004705	10236635	C14829	CCCCCC(C(C/O
641	HMDB0041220	NA	NA	NA	NA	NA
642	HMDB0031679	(9xi,10xi,12xi)-9,10-Dihydroxy-12-octadecenoic acid	HMDB0031679	9966640	C14828	CCCCC/C=C/O
643	HMDB0000782	Octadecanedioic acid	HMDB0000782	70095		C(CCCCCCCCC
644	HMDB0038580	NA	NA	NA	NA	NA
645	HMDB0033631	Lactapiperanol D	HMDB0033631	85179199		COC1OCC2(O)
646	HMDB0180021	NA	NA	NA	NA	NA
647	HMDB0180098	NA	NA	NA	NA	NA
648	HMDB0180100	NA	NA	NA	NA	NA
649	HMDB0180099	NA	NA	NA	NA	NA
650	HMDB0180102	NA	NA	NA	NA	NA
651	HMDB0034780	Capsiate	HMDB0034780	9839519	C20203	CC(C)/C=C/CO
652	HMDB0180103	NA	NA	NA	NA	NA
653	HMDB0184951	NA	NA	NA	NA	NA
654	HMDB0184949	NA	NA	NA	NA	NA
655	HMDB0184953	NA	NA	NA	NA	NA
656	HMDB0012799	5'-Carboxy-gamma-chromanol	HMDB0012799	53481525		CC1=C(C=C2C
657	HMDB0184954	NA	NA	NA	NA	NA
658	HMDB0184950	NA	NA	NA	NA	NA
659	HMDB0061677	NA	NA	NA	NA	NA
660	HMDB0000552	3-Methylglutaryl carnitine	HMDB0000552	128145		CC(CC(=O)[O-]
661	HMDB0039044	NA	NA	NA	NA	NA
662	HMDB0131544	NA	NA	NA	NA	NA
663	HMDB0153683	NA	NA	NA	NA	NA
664	HMDB0134716	NA	NA	NA	NA	NA
665	HMDB0131577	NA	NA	NA	NA	NA
666	HMDB0140842	NA	NA	NA	NA	NA
667	HMDB0039858	NA	NA	NA	NA	NA
668	HMDB0150310	NA	NA	NA	NA	NA

669	HMDB0150311	NA	NA	NA	NA
670	HMDB0030019	4'-Methoxymucidin	HMDB0030019	131750944	CO\C=C(\C(\C(=O)O)O)O
671	HMDB0125543	NA	NA	NA	NA
672	HMDB0125544	NA	NA	NA	NA
673	HMDB0125545	NA	NA	NA	NA
674	HMDB0125547	NA	NA	NA	NA
675	HMDB0125546	NA	NA	NA	NA
676	HMDB0125548	NA	NA	NA	NA
677	HMDB0129031	NA	NA	NA	NA
678	HMDB0129032	NA	NA	NA	NA
679	HMDB0141104	NA	NA	NA	NA
680	HMDB0141131	NA	NA	NA	NA
681	HMDB0141141	NA	NA	NA	NA
682	HMDB0141165	NA	NA	NA	NA
683	HMDB0141171	NA	NA	NA	NA
684	HMDB0129034	NA	NA	NA	NA
685	HMDB0149106	NA	NA	NA	NA
686	HMDB0140204	NA	NA	NA	NA
687	HMDB0140116	NA	NA	NA	NA
688	HMDB0129033	NA	NA	NA	NA
689	HMDB0129035	NA	NA	NA	NA
690	HMDB0129037	NA	NA	NA	NA
691	HMDB0129036	NA	NA	NA	NA
692	HMDB0129038	NA	NA	NA	NA
693	HMDB0140114	NA	NA	NA	NA
694	HMDB0140118	NA	NA	NA	NA
695	HMDB0140117	NA	NA	NA	NA
696	HMDB0140115	NA	NA	NA	NA
697	HMDB0146850	NA	NA	NA	NA
698	HMDB0040670	NA	NA	NA	NA
699	HMDB0176556	NA	NA	NA	NA
700	HMDB0156547	NA	NA	NA	NA
701	HMDB0062742	NA	NA	NA	NA
702	HMDB0156543	NA	NA	NA	NA
703	HMDB0156541	NA	NA	NA	NA
704	HMDB0156542	NA	NA	NA	NA
705	HMDB0156546	NA	NA	NA	NA
706	HMDB0156545	NA	NA	NA	NA
707	HMDB0156544	NA	NA	NA	NA
708	HMDB0041454	NA	NA	NA	NA
709	HMDB0159759	NA	NA	NA	NA
710	HMDB0159760	NA	NA	NA	NA
711	HMDB0159748	NA	NA	NA	NA
712	HMDB0159167	NA	NA	NA	NA
713	HMDB0158772	NA	NA	NA	NA
714	HMDB0158273	NA	NA	NA	NA
715	HMDB0158256	NA	NA	NA	NA
716	HMDB0158257	NA	NA	NA	NA
717	HMDB0158253	NA	NA	NA	NA
718	HMDB0158255	NA	NA	NA	NA
719	HMDB0158252	NA	NA	NA	NA
720	HMDB0160999	NA	NA	NA	NA
721	HMDB0184494	NA	NA	NA	NA
722	HMDB0184495	NA	NA	NA	NA
723	HMDB0062796	NA	NA	NA	NA
724	HMDB0000503	7a-Hydroxy-3-oxo-5b-cholanoic acid	HMDB0000503	53477698	C[C@H](CCC(=O)O)C(=O)O
725	HMDB0184499	NA	NA	NA	NA
726	HMDB0184498	NA	NA	NA	NA
727	HMDB0184496	NA	NA	NA	NA
728	HMDB0184497	NA	NA	NA	NA
729	HMDB0158254	NA	NA	NA	NA
730	HMDB0158250	NA	NA	NA	NA
731	HMDB0012866	9'-Carboxy-alpha-chromanol	HMDB0012866	53481534	CC1=C(C(=C2C=CC(=O)O2)O)C(=O)O
732	HMDB0156548	NA	NA	NA	NA
733	HMDB0158251	NA	NA	NA	NA
734	HMDB0157686	NA	NA	NA	NA
735	HMDB0157455	NA	NA	NA	NA
736	HMDB0000328	12-Ketodeoxycholic acid	HMDB0000328	3080612	C[C@H](CCC(=O)O)C(=O)O
737	HMDB0000460	7-Hydroxy-3-oxocholanoic acid	HMDB0000460	53477692	C[C@H](CCC(=O)O)C(=O)O
738	HMDB0000467	Nutriacholic acid	HMDB0000467	53477693	C[C@@H](CCC(=O)O)C(=O)O
739	HMDB0157446	NA	NA	NA	NA
740	HMDB0156539	NA	NA	NA	NA
741	HMDB0013627	Cervonoyl ethanolamide	HMDB0013627	53245830	CC/C=C\C/C(=O)N
742	HMDB0041301	NA	NA	NA	NA
743	HMDB0014629	Nabilone	HMDB0014629	5284592	CCCCC(C)(C)C(=O)O
744	HMDB0159326	NA	NA	NA	NA
745	HMDB0158258	NA	NA	NA	NA
746	HMDB0185128	NA	NA	NA	NA
747	HMDB0185129	NA	NA	NA	NA
748	HMDB0185127	NA	NA	NA	NA
749	HMDB0185126	NA	NA	NA	NA
750	HMDB0185125	NA	NA	NA	NA
751	HMDB0185131	NA	NA	NA	NA
752	HMDB0031126	3,4-Dimethyl-5-pentyl-2-furanundecanoic acid	HMDB0031126	13963867	CCCCC1=C(C(=O)O)C=C(C)C
753	HMDB0185124	NA	NA	NA	NA
754	HMDB0185123	NA	NA	NA	NA
755	HMDB0112078	NA	NA	NA	NA

756	HMDB0185122	NA	NA	NA	NA
757	HMDB0185118	NA	NA	NA	NA
758	HMDB0185121	NA	NA	NA	NA
759	HMDB0185120	NA	NA	NA	NA
760	HMDB0185119	NA	NA	NA	NA
761	HMDB0000222	L-Palmitoylcarnitine	HMDB0000222	11953816	C02990
762	HMDB0011574	MG(20:2(11Z,14Z)/0:0/0:0)	HMDB0011574	53480983	CCCCCCCCC
763	HMDB0011544	MG(0:0/20:2(11Z,14Z)/0:0)	HMDB0011544	53480964	CCCCC/C=C\O
764	HMDB0036865	NA	NA	NA	CCCCC/C=C\O
765	HMDB0035959	Persenone B	HMDB0035959	131751886	CCCCCCCCC
766	HMDB0040994	NA	NA	NA	NA
767	HMDB0157453	NA	NA	NA	NA
768	HMDB0158269	NA	NA	NA	NA
769	HMDB0157452	NA	NA	NA	NA
770	HMDB0157449	NA	NA	NA	NA
771	HMDB0157450	NA	NA	NA	NA
772	HMDB0158766	NA	NA	NA	NA
773	HMDB0157447	NA	NA	NA	NA
774	HMDB0157451	NA	NA	NA	NA
775	HMDB0158764	NA	NA	NA	NA
776	HMDB0158272	NA	NA	NA	NA
777	HMDB0157454	NA	NA	NA	NA
778	HMDB0157681	NA	NA	NA	NA
779	HMDB0158265	NA	NA	NA	NA
780	HMDB0158264	NA	NA	NA	NA
781	HMDB0158268	NA	NA	NA	NA
782	HMDB0158267	NA	NA	NA	NA
783	HMDB0158266	NA	NA	NA	NA
784	HMDB0158262	NA	NA	NA	NA
785	HMDB0158261	NA	NA	NA	NA
786	HMDB0158263	NA	NA	NA	NA
787	HMDB0158260	NA	NA	NA	NA
788	HMDB0158270	NA	NA	NA	NA
789	HMDB0158259	NA	NA	NA	NA
790	HMDB0157683	NA	NA	NA	NA
791	HMDB0157685	NA	NA	NA	NA
792	HMDB0157684	NA	NA	NA	NA
793	HMDB0157680	NA	NA	NA	NA
794	HMDB0157682	NA	NA	NA	NA
795	HMDB0158271	NA	NA	NA	NA
796	HMDB0158765	NA	NA	NA	NA
797	HMDB0158767	NA	NA	NA	NA
798	HMDB0184514	NA	NA	NA	NA
799	HMDB0184512	NA	NA	NA	NA
800	HMDB0184511	NA	NA	NA	NA
801	HMDB0184510	NA	NA	NA	NA
802	HMDB0184509	NA	NA	NA	NA
803	HMDB0184414	NA	NA	NA	NA
804	HMDB0184360	NA	NA	NA	NA
805	HMDB0184357	NA	NA	NA	NA
806	HMDB0184356	NA	NA	NA	NA
807	HMDB0184515	NA	NA	NA	NA
808	HMDB0184513	NA	NA	NA	NA
809	HMDB0184518	NA	NA	NA	NA
810	HMDB0000506	Alpha-Muricholic acid	HMDB0000506	96023991	C17647
811	HMDB0000505	Allocholic acid	HMDB0000505	53477699	C17737
812	HMDB0184519	NA	NA	NA	C[C@H](CCC(=
813	HMDB0184520	NA	NA	NA	C[C@H](CCC(=
814	HMDB0184517	NA	NA	NA	NA
815	HMDB0184516	NA	NA	NA	NA
816	HMDB0184355	NA	NA	NA	NA
817	HMDB0184317	NA	NA	NA	NA
818	HMDB0159754	NA	NA	NA	NA
819	HMDB0159753	NA	NA	NA	NA
820	HMDB0161001	NA	NA	NA	NA
821	HMDB0159756	NA	NA	NA	NA
822	HMDB0159750	NA	NA	NA	NA
823	HMDB0159751	NA	NA	NA	NA
824	HMDB0159752	NA	NA	NA	NA
825	HMDB0158771	NA	NA	NA	NA
826	HMDB0158769	NA	NA	NA	NA
827	HMDB0158768	NA	NA	NA	NA
828	HMDB0159755	NA	NA	NA	NA
829	HMDB0159757	NA	NA	NA	NA
830	HMDB0184316	NA	NA	NA	NA
831	HMDB0184318	NA	NA	NA	NA
832	HMDB0184314	NA	NA	NA	NA
833	HMDB0184313	NA	NA	NA	NA
834	HMDB0184315	NA	NA	NA	NA
835	HMDB0161002	NA	NA	NA	NA
836	HMDB0161003	NA	NA	NA	NA
837	HMDB0161000	NA	NA	NA	NA
838	HMDB0159761	NA	NA	NA	NA
839	HMDB0159758	NA	NA	NA	NA
840	HMDB0158770	NA	NA	NA	NA
841	HMDB0000619	Cholic acid	HMDB0000619	221493	C00695
842	HMDB0000414	1b,3a,7a-Trihydroxy-5b-cholanoic acid	HMDB0000414	5283846	C[C@H](CCC(=

843	HMDB0000404	2b,3a,7a-Trihydroxy-5b-cholanoic acid	HMDB0000404	5283847			C[C@H](CCC(=
844	HMDB0000395	3b,7b,12a-Trihydroxy-5b-cholanoic acid	HMDB0000395	5283873			C[C@H](CCC(=
845	HMDB0000390	3a,7b,12b-Trihydroxy-5b-cholanoic acid	HMDB0000390	5283872			C[C@H](CCC(=
846	HMDB0000376	3b,7a,12a-Trihydroxy-5a-Cholanoic acid	HMDB0000376	5283875			C[C@H](CCC(=
847	HMDB0000371	1,3,12-Trihydroxycholelan-24-oic acid	HMDB0000371	20849394			C[C@H](CCC(=
848	HMDB0000364	3a,6a,7b-Trihydroxy-5b-cholanoic acid	HMDB0000364	5283851	C17727		C[C@H](CCC(=
849	HMDB0000330	3a,4b,12a-Trihydroxy-5b-cholanoic acid	HMDB0000330	53477684			C[C@H](CCC(=
850	HMDB0000326	1b,3a,12a-Trihydroxy-5b-cholanoic acid	HMDB0000326	53477683			C[C@H](CCC(=
851	HMDB0000415	3a,6b,7b-Trihydroxy-5b-cholanoic acid	HMDB0000415	5283853	C17726		C[C@H](CCC(=
852	HMDB0000419	3b,7a,12a-Trihydroxy-5b-cholanoic acid	HMDB0000419	5283870			C[C@H](CCC(=
853	HMDB0000427	3b,7b,12a-Trihydroxy-5a-Cholanoic acid	HMDB0000427	5283879			C[C@H](CCC(=
854	HMDB0000917	Ursolic acid	HMDB0000917	122340	C17644		C[C@H](CCC(=
855	HMDB0000865	Muricholic acid	HMDB0000865	92805			C[C@H](CCC(=
856	HMDB0000760	Hyochoic acid	HMDB0000760	131750324			[H][C@@]12CCC
857	HMDB0000527	6a,12a-Dihydroxylithocholic acid	HMDB0000527	22833529			C[C@H](CCC(=
858	HMDB0000432	3a,7b,12a-Trihydroxy-5a-Cholanoic acid	HMDB0000432	5283877	C02373		C[C@H](CCC(=
859	HMDB0000320	3a,4b,7a-Trihydroxy-5b-cholanoic acid	HMDB0000320	53477681			C[C@H](CCC(=
860	HMDB0157448	NA	NA	NA	NA	NA	NA
861	HMDB0000312	3a,7a,12b-Trihydroxy-5b-cholanoic acid	HMDB0000312	5283869	C04661		C[C@H](CCC(=
862	HMDB0040993	NA	NA	NA	NA	NA	NA
863	HMDB0041990	NA	NA	NA	NA	NA	NA
864	HMDB0160543	NA	NA	NA	NA	NA	NA
865	HMDB0160539	NA	NA	NA	NA	NA	NA
866	HMDB0160541	NA	NA	NA	NA	NA	NA
867	HMDB0160540	NA	NA	NA	NA	NA	NA
868	HMDB0160542	NA	NA	NA	NA	NA	NA
869	HMDB0160544	NA	NA	NA	NA	NA	NA
870	HMDB0160545	NA	NA	NA	NA	NA	NA
871	HMDB0160516	NA	NA	NA	NA	NA	NA
872	HMDB0160517	NA	NA	NA	NA	NA	NA
873	HMDB0160518	NA	NA	NA	NA	NA	NA
874	HMDB0160515	NA	NA	NA	NA	NA	NA
875	HMDB0160519	NA	NA	NA	NA	NA	NA
876	HMDB0160522	NA	NA	NA	NA	NA	NA
877	HMDB0160521	NA	NA	NA	NA	NA	NA
878	HMDB0160520	NA	NA	NA	NA	NA	NA
879	HMDB0160523	NA	NA	NA	NA	NA	NA
880	HMDB0160526	NA	NA	NA	NA	NA	NA
881	HMDB0160524	NA	NA	NA	NA	NA	NA
882	HMDB0160525	NA	NA	NA	NA	NA	NA
883	HMDB0160528	NA	NA	NA	NA	NA	NA
884	HMDB0160529	NA	NA	NA	NA	NA	NA
885	HMDB0160527	NA	NA	NA	NA	NA	NA
886	HMDB0160530	NA	NA	NA	NA	NA	NA
887	HMDB0172528	NA	NA	NA	NA	NA	NA
888	HMDB0170464	NA	NA	NA	NA	NA	NA
889	HMDB0059931	NA	NA	NA	NA	NA	NA
890	HMDB0040118	NA	NA	NA	NA	NA	NA
891	HMDB0039897	NA	NA	NA	NA	NA	NA
892	HMDB0172989	NA	NA	NA	NA	NA	NA
893	HMDB0172985	NA	NA	NA	NA	NA	NA
894	HMDB0172986	NA	NA	NA	NA	NA	NA
895	HMDB0172988	NA	NA	NA	NA	NA	NA
896	HMDB0173230	NA	NA	NA	NA	NA	NA
897	HMDB0173229	NA	NA	NA	NA	NA	NA
898	HMDB0165966	NA	NA	NA	NA	NA	NA
899	HMDB0164809	NA	NA	NA	NA	NA	NA
900	HMDB0034433	Riboflavin 2',3',4',5'-tetrabutanoate	HMDB0034433	5065			CCCC(=O)OCC
901	HMDB0157944	NA	NA	NA	NA	NA	NA
902	HMDB0157945	NA	NA	NA	NA	NA	NA
903	HMDB0157949	NA	NA	NA	NA	NA	NA
904	HMDB0157950	NA	NA	NA	NA	NA	NA
905	HMDB0157951	NA	NA	NA	NA	NA	NA
906	HMDB0157955	NA	NA	NA	NA	NA	NA
907	HMDB0157956	NA	NA	NA	NA	NA	NA
908	HMDB0157943	NA	NA	NA	NA	NA	NA
909	HMDB0157938	NA	NA	NA	NA	NA	NA
910	HMDB0157939	NA	NA	NA	NA	NA	NA
911	HMDB0157937	NA	NA	NA	NA	NA	NA
912	HMDB0157933	NA	NA	NA	NA	NA	NA
913	HMDB0157932	NA	NA	NA	NA	NA	NA
914	HMDB0157931	NA	NA	NA	NA	NA	NA
915	HMDB0157898	NA	NA	NA	NA	NA	NA
916	HMDB0157896	NA	NA	NA	NA	NA	NA
917	HMDB0157957	NA	NA	NA	NA	NA	NA
918	HMDB0158932	NA	NA	NA	NA	NA	NA
919	HMDB0158968	NA	NA	NA	NA	NA	NA
920	HMDB0158964	NA	NA	NA	NA	NA	NA
921	HMDB0158963	NA	NA	NA	NA	NA	NA
922	HMDB0158958	NA	NA	NA	NA	NA	NA
923	HMDB0158959	NA	NA	NA	NA	NA	NA
924	HMDB0158953	NA	NA	NA	NA	NA	NA
925	HMDB0158954	NA	NA	NA	NA	NA	NA
926	HMDB0158949	NA	NA	NA	NA	NA	NA
927	HMDB0158948	NA	NA	NA	NA	NA	NA
928	HMDB0158944	NA	NA	NA	NA	NA	NA
929	HMDB0158943	NA	NA	NA	NA	NA	NA

930	HMDB0158937	NA	NA	NA	NA
931	HMDB0158938	NA	NA	NA	NA
932	HMDB0158939	NA	NA	NA	NA
933	HMDB0158933	NA	NA	NA	NA
934	HMDB0158969	NA	NA	NA	NA
935	HMDB0157897	NA	NA	NA	NA
936	HMDB0157050	NA	NA	NA	NA
937	HMDB0157221	NA	NA	NA	NA
938	HMDB0157842	NA	NA	NA	NA
939	HMDB0157841	NA	NA	NA	NA
940	HMDB0157843	NA	NA	NA	NA
941	HMDB0157847	NA	NA	NA	NA
942	HMDB0157846	NA	NA	NA	NA
943	HMDB0157851	NA	NA	NA	NA
944	HMDB0157848	NA	NA	NA	NA
945	HMDB0157853	NA	NA	NA	NA
946	HMDB0157215	NA	NA	NA	NA
947	HMDB0157218	NA	NA	NA	NA
948	HMDB0157212	NA	NA	NA	NA
949	HMDB0157051	NA	NA	NA	NA
950	HMDB0157054	NA	NA	NA	NA
951	HMDB0157057	NA	NA	NA	NA
952	HMDB0157060	NA	NA	NA	NA
953	HMDB0157066	NA	NA	NA	NA
954	HMDB0157063	NA	NA	NA	NA
955	HMDB0157206	NA	NA	NA	NA
956	HMDB0157205	NA	NA	NA	NA
957	HMDB0157209	NA	NA	NA	NA
958	HMDB0157852	NA	NA	NA	NA
959	HMDB0157856	NA	NA	NA	NA
960	HMDB0157857	NA	NA	NA	NA
961	HMDB0157876	NA	NA	NA	NA
962	HMDB0157881	NA	NA	NA	NA
963	HMDB0157882	NA	NA	NA	NA
964	HMDB0157883	NA	NA	NA	NA
965	HMDB0157886	NA	NA	NA	NA
966	HMDB0157887	NA	NA	NA	NA
967	HMDB0157888	NA	NA	NA	NA
968	HMDB0157891	NA	NA	NA	NA
969	HMDB0157892	NA	NA	NA	NA
970	HMDB0157893	NA	NA	NA	NA
971	HMDB0157878	NA	NA	NA	NA
972	HMDB0157877	NA	NA	NA	NA
973	HMDB0157858	NA	NA	NA	NA
974	HMDB0157861	NA	NA	NA	NA
975	HMDB0157862	NA	NA	NA	NA
976	HMDB0157863	NA	NA	NA	NA
977	HMDB0157866	NA	NA	NA	NA
978	HMDB0157867	NA	NA	NA	NA
979	HMDB0157868	NA	NA	NA	NA
980	HMDB0157871	NA	NA	NA	NA
981	HMDB0157873	NA	NA	NA	NA
982	HMDB0157872	NA	NA	NA	NA
983	HMDB0165986	NA	NA	NA	NA
984	HMDB0165987	NA	NA	NA	NA
985	HMDB0166012	NA	NA	NA	NA
986	HMDB0166013	NA	NA	NA	NA
987	HMDB0166011	NA	NA	NA	NA
988	HMDB0166007	NA	NA	NA	NA
989	HMDB0170721	NA	NA	NA	NA
990	HMDB0166009	NA	NA	NA	NA
991	HMDB0166010	NA	NA	NA	NA
992	HMDB0166004	NA	NA	NA	NA
993	HMDB0166005	NA	NA	NA	NA
994	HMDB0166003	NA	NA	NA	NA
995	HMDB0166006	NA	NA	NA	NA
996	HMDB0167988	NA	NA	NA	NA
997	HMDB0167989	NA	NA	NA	NA
998	HMDB0168064	NA	NA	NA	NA
999	HMDB0170719	NA	NA	NA	NA
1000	HMDB0170718	NA	NA	NA	NA
1001	HMDB0168079	NA	NA	NA	NA
1002	HMDB0168080	NA	NA	NA	NA
1003	HMDB0168077	NA	NA	NA	NA
1004	HMDB0168076	NA	NA	NA	NA
1005	HMDB0168068	NA	NA	NA	NA
1006	HMDB0168067	NA	NA	NA	NA
1007	HMDB0168065	NA	NA	NA	NA
1008	HMDB0166001	NA	NA	NA	NA
1009	HMDB0166002	NA	NA	NA	NA
1010	HMDB0170734	NA	NA	NA	NA
1011	HMDB0165975	NA	NA	NA	NA
1012	HMDB0165973	NA	NA	NA	NA
1013	HMDB0165879	NA	NA	NA	NA
1014	HMDB0165880	NA	NA	NA	NA
1015	HMDB0170735	NA	NA	NA	NA
1016	HMDB0170737	NA	NA	NA	NA

1017	HMDB0166008	NA	NA	NA	NA	NA
1018	HMDB0165977	NA	NA	NA	NA	NA
1019	HMDB0165978	NA	NA	NA	NA	NA
1020	HMDB0165999	NA	NA	NA	NA	NA
1021	HMDB0165985	NA	NA	NA	NA	NA
1022	HMDB0165984	NA	NA	NA	NA	NA
1023	HMDB0165976	NA	NA	NA	NA	NA
1024	HMDB0165983	NA	NA	NA	NA	NA
1025	HMDB0165980	NA	NA	NA	NA	NA
1026	HMDB0165981	NA	NA	NA	NA	NA
1027	HMDB0165982	NA	NA	NA	NA	NA
1028	HMDB0165979	NA	NA	NA	NA	NA
1029	HMDB0166014	NA	NA	NA	NA	NA
1030	HMDB0165988	NA	NA	NA	NA	NA
1031	HMDB0143644	NA	NA	NA	NA	NA
1032	HMDB0173692	NA	NA	NA	NA	NA
1033	HMDB0173693	NA	NA	NA	NA	NA
1034	HMDB0041431	NA	NA	NA	NA	NA
1035	HMDB0014454	Vindesine	HMDB0014454	40839		CC[C@@]1(C[C@H]2CC[C@@H]3C[C@H](C[C@@H]2O)C[C@H](C[C@@H]3)O)C
1036	HMDB0116519	NA	NA	NA	NA	NA
1037	HMDB0116569	NA	NA	NA	NA	NA
1038	HMDB0116555	NA	NA	NA	NA	NA
1039	HMDB0116549	NA	NA	NA	NA	NA
1040	HMDB0116538	NA	NA	NA	NA	NA
1041	HMDB0116512	NA	NA	NA	NA	NA
1042	HMDB0176104	NA	NA	NA	NA	NA
1043	HMDB0173004	NA	NA	NA	NA	NA
1044	HMDB0176105	NA	NA	NA	NA	NA

The second step is to check concentration values. For SSP analysis, the concentration must be measured in *umol* for blood and CSF samples. The urinary concentrations must be first converted to *umol/mmol_creatinine* in order to compare with reported concentrations in literature. No missing or negative values are allowed in SSP analysis. The concentration data for QEA analysis is more flexible. Users can upload either the original concentration data or normalized data. Missing or negative values are allowed (coded as *NA*) for QEA.

5 Selection of Metabolite Set Library

Before proceeding to enrichment analysis, a metabolite set library has to be chosen. There are seven built-in libraries offered by MSEA:

- Metabolic pathway associated metabolite sets (*currently contains 99 entries*);
- Disease associated metabolite sets (reported in blood) (*currently contains 344 entries*);
- Disease associated metabolite sets (reported in urine) (*currently contains 384 entries*);
- Disease associated metabolite sets (reported in CSF) (*currently contains 166 entries*);
- Metabolite sets associated with SNPs (*currently contains 4598 entries*);
- Predicted metabolite sets based on computational enzyme knockout model (*currently contains 912 entries*);
- Metabolite sets based on locations (*currently contains 73 entries*);
- Drug pathway associated metabolite sets (*currently contains 461 entries*);

In addition, MSEA also allows user-defined metabolite sets to be uploaded to perform enrichment analysis on arbitrary groups of compounds which researchers want to test. The metabolite set library is simply a two-column comma separated text file with the first column for metabolite set names and the second column for its compound names (**must use HMDB compound name**) separated by "; ". Please note, the built-in libraries are mainly from human studies. The functional grouping of metabolites may not be valid. Therefore, for data from subjects other than human being, users are suggested to upload their self-defined metabolite set libraries for enrichment analysis.

6 Enrichment Analysis

Over Representation Analysis (ORA) is performed when a list of compound names is provided. The list of compound list can be obtained through conventional feature selection methods, or from a clustering algorithm, or from the compounds with abnormal concentrations detected in SSP, to investigate if some biologically meaningful patterns can be identified.

ORA was implemented using the *hypergeometric test* to evaluate whether a particular metabolite set is represented more than expected by chance within the given compound list. One-tailed p values are provided after adjusting for multiple testing. **Figure 2** below summarizes the result.

Metabolite Sets Enrichment Overview

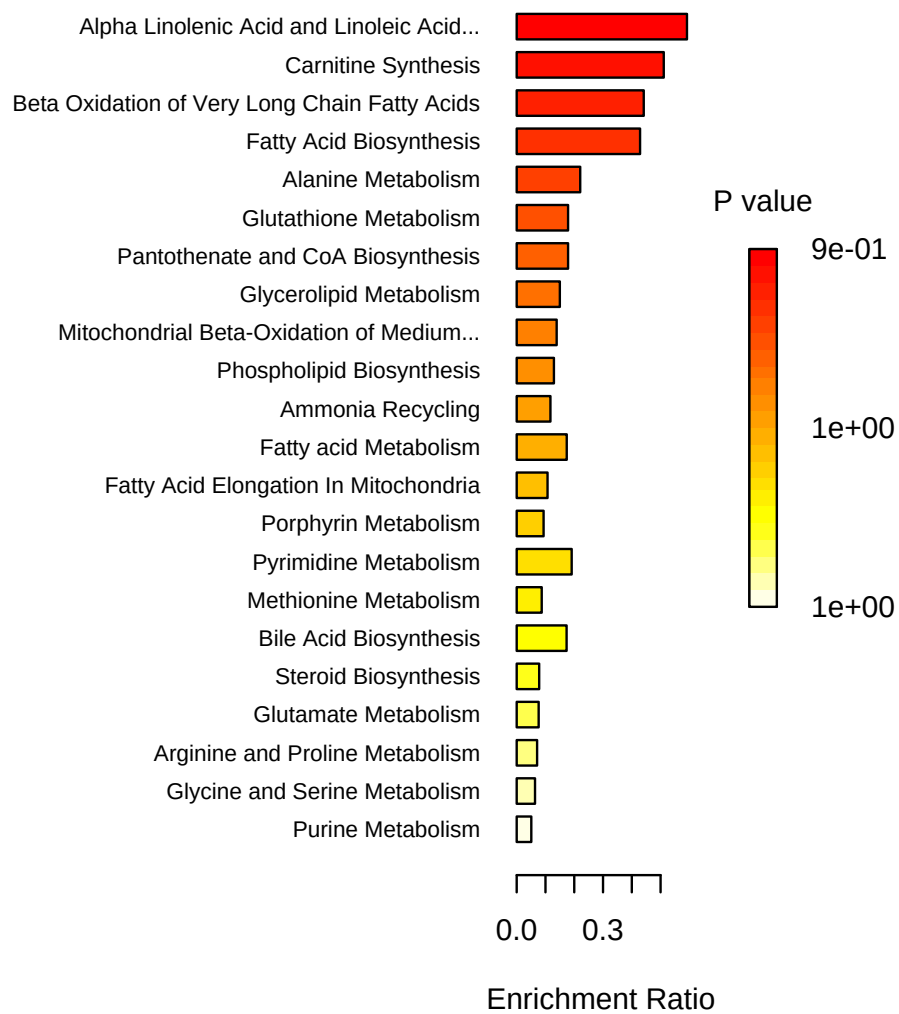


Figure 1: Summary Plot for Over Representation Analysis (ORA)

Table 2: Result from Over Representation Analysis

	total	expected	hits	Raw p	Holm p	FDR
Alpha Linolenic Acid and Linoleic Acid Metabolism	19	5.07	3	9.18E-01	1.00E+00	1.00E+00
Carnitine Synthesis	22	5.87	3	9.59E-01	1.00E+00	1.00E+00
Beta Oxidation of Very Long Chain Fatty Acids	17	4.53	2	9.64E-01	1.00E+00	1.00E+00
Fatty Acid Biosynthesis	35	9.33	4	9.93E-01	1.00E+00	1.00E+00
Alanine Metabolism	17	4.53	1	9.95E-01	1.00E+00	1.00E+00
Glutathione Metabolism	21	5.60	1	9.99E-01	1.00E+00	1.00E+00
Pantothenate and CoA Biosynthesis	21	5.60	1	9.99E-01	1.00E+00	1.00E+00
Glycerolipid Metabolism	25	6.67	1	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
Mitochondrial Beta-Oxidation of Medium Chain Saturated Fatty Acids	27	7.20	1	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
Phospholipid Biosynthesis	29	7.73	1	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
Ammonia Recycling	32	8.53	1	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
Fatty acid Metabolism	43	11.50	2	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
Fatty Acid Elongation In Mitochondria	35	9.33	1	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
Porphyrin Metabolism	40	10.70	1	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
Pyrimidine Metabolism	59	15.70	3	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
Methionine Metabolism	43	11.50	1	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
Bile Acid Biosynthesis	65	17.30	3	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
Steroid Biosynthesis	48	12.80	1	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
Glutamate Metabolism	49	13.10	1	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
Arginine and Proline Metabolism	53	14.10	1	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
Glycine and Serine Metabolism	59	15.70	1	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00
Purine Metabolism	74	19.70	1	1.00E+00	1.00E+00	1.00E+00

7 Appendix: R Command History

```
[1] "mSet<-InitDataObjects(\"conc\", \"pathora\", FALSE)"
[2] "cmpd.vec<-c(\"HMDB0000123\", \"HMDB0014691\", \"HMDB0031239\", \"HMDB0161401\", \"HMDB0031404\", \"I
[3] "mSet<-Setup.MapData(mSet, cmpd.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)"
[10] "mSet<-SaveTransformedData(mSet)"
[11] "UpdateDataObjects(\"conc\", \"msetora\", FALSE)"
[12] "mSet<-SetMetabolomeFilter(mSet, F);"
[13] "mSet<-SetCurrentMsetLib(mSet, \"smpdb_pathway\", 2);"
[14] "mSet<-CalculateHyperScore(mSet)"
[15] "mSet<-PlotORA(mSet, \"ora_0_\", \"net\", \"png\", 72, width=NA)"
[16] "mSet<-PlotEnrichDotPlot(mSet, \"ora\", \"ora_dot_0_\", \"png\", 72, width=NA)"
[17] "mSet<-CalculateHyperScore(mSet)"
[18] "mSet<-PlotORA(mSet, \"ora_1_\", \"net\", \"png\", 72, width=NA)"
[19] "mSet<-PlotEnrichDotPlot(mSet, \"ora\", \"ora_dot_1_\", \"png\", 72, width=NA)"
[20] "mSet<-SaveTransformedData(mSet)"
[21] "mSet<-PreparePDFReport(mSet, \"guest14784990859344962455\")\n"
```

The report was generated on Mon May 24 15:26:39 2021 with R version 4.0.2 (2020-06-22).